

CB₂H₃

IV-1206

1930

ω (CH₃Cl; CH₃Br; CH₃J; CH₃CN)

Herzberg G., Scheibe G.

Z. physik. Chem., Abt. B, 7, 390-
406 (1930)

"The absorption spectra of
methyl halides in ...

CB₂H₃

C. A., 1930, 3710

1441-10

E-clay

(CH_3J , CH_3Br , $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}$, 1930
 $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$)

Iredale T., Mills A.G.

Nature 1930, 126, 604,

"Energies of the C-J and C-Br bonds"

C.A., 1931, 24⁹

Ka.

$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$

IV-1041

1934

✓ (CH_3F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3J)

Adel A., Barker E.F.

J.Chem.Physics 1934, 2, 627-9
"Two infra-red and Raman spectra ...

CB_2H_3

C.A., 1934, 7160⁹

10

CH_3Br (J)

750-10

1934

Jewett T.N.

Phys. Rev. 45, 616 (1934)

"The ionization potentials of ...

CBrH_3

C.A., 1934, 1009⁸

Circ. 500

M, 10

1220-17

CH_3Cl , CH_3Br (J)

1935

Price W.C.

Phys. Rev. 1935, 47, 510

"Far ultraviolet-absorption spectra
and ionization ...

CBeH_3

C.A., 1935, 3234

10

IV-1231

1935

CH_3Cl ; CH_3Br ; CH_3J (✓)

Verleger H.

Z. Physik 1935, 98, 342-52

"The rotation vibration spectrum
of the methyl halides in ...

CB_2H_3

C.A., 1936, 1658⁶

10

IV-1452

1936

CH_3J , CH_3Br , CH_3Cl (J)

Price W.C.

J.Chem.Physics 1936, 4, 539-47
"The far ultraviolet absorption
spectra and ionization potentials ...

C.A., 1936, 7033⁵

CB_2H_3

10

1350 - IV

CBr_4 , CHBr_3 , CH_2Br_2 , CH_3Br

1937

(Zc-B; LBrCBr)

Levy H.A., Brockway L.O.

J. Am. Chem. Soc. 1937, 59, 1662-5

"The molecular structure of ...

C.A., 1937, 8377⁵

CBr_3H

10

IV - 1057 1937

CH_3F , CH_3Cl , CH_3J , CH_3Br

(τ_c -расчет)

Sutherland G.B.B.M.

Nature 1937, 140, 239-40

"Carbon-halogen distance in the
methyl halides"

C.B.H.

● C.A., 1937, 7719⁵

IV-1056

CH_3F , CF_4 ($\tau_{\text{c-f}}$); CH_3Cl ($\tau_{\text{c-cl}}$) 1938

CH_3Br ($\tau_{\text{c-br}}$); CH_3I ($\tau_{\text{c-i}}$)

Sutherland G.B.E.M.

Trans. Faraday Soc. 1938, 34,
325-35

"Interatomic distances in some

...

C.A., 1933, 2796⁷

HD

CB_2H_3

CH₃ Br

[BP - 6500a - IV]

1940

(V.
u.u.)

Dennison D.M.,
Reviews of Modern Phys.,
12, N3, 175-214.

8520-IV

1942

PCl_3 , CH_3Cl , CH_2Br , CH_3OH , CH_2Cl_2 ,

CH_2Br_2 , CHCl_3 , CCl_4 (ν . ; ω)

Nielsen J.R., Ward M.F.

J.Chem.Phys. 1942, 10, 31-7.

"Raman spectra of ..."

C.A., 1942, 1847³

10

CBr_2H_3

ω (CH₃F, CH₃Cl, CH₃Br)

IV-1054 1945

Stepanov B.J.

Acta Physicochim. U.R.S.S. 1945, 20,
174-88

J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.)
15, 43-56

"Calculation of the frequencies of
...

C.A., 1946, 15⁴

10

CBrH₃

1192-12

1946

L2 (CH_3Cl , CH_3Br)

Bak E.

J.Chem.Phys. 1946, 14, 698

"Geometry of the molecules of

...

CBrH_3

C.A., 1947, 15091

10

$\tau_{C-Cl}; \tau_{C-Br}$ 1193-IV
 ~~$\tau_{C-Cl}; \tau_{C-Br}$~~ ; $LH-C-Cl, LH-C-Br,$
 (CH_3Cl, CH_3Br)

1947

H

Bak B.

Kgl. Danske Videnskab. Selskab,
Mat-fys. Medd. 1947, 24, 3-7

"Geometry of the molecules methyl

...

$C_1B_2H_3$

C.A., 1948, 4821a

10

СВЭ МЗ

Desins Y. C.

1948

Y. Ch. Phys. 16, 214

Сино́е постоянное ряда
галогемированных металлов

Вейс II, 164.

IV-1204

1948

2, L (CH_3Cl , CH_3Br , CH_3J)

Gordy W., Simmons J.W., Smith A.G.
Phys.Rev.1948, 74, 243-9

"Microwave determination of the
molecular structures and ...

CB_2H_3

C.A., 1948, 8654^a

10

V-1226

CH₃Cl, CH₃Br, CH₃I, BrCN, JCN (Bo, Dy, Dyk) ¹⁹⁵⁰

Simmons J.W., Anderson W.E.

Phys.Rev., 1950, 80, 338-42

Microwave determination of the
centrifugal ...

C.A., 1951, 4511

CBzH₃

to

1358-IV

1950

CH_3Br (dcm, dcm, LHCHL)

Simmons J.W., Swan W.O.

Phys. Rev., 1950, 80, 289-90

Structure of methyl bromide from micro-
wave spectra

to



 C.A., 1951, 451h

1950

9269 - IV

Do (CH_3F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3I , C_2H_6 , C_2 ,
 C_2H_4 , C_2H_2)

Wicke E.

Z. Elektrochem., 1950, 54, 27-33
Theoretical and ...

J, M

CH_3Br^+

(J)

692-3365-1

Marrison F. D.

1951

"J. Chem. Phys."

1951, 19, N 10, 1305-08

1360-17

CH_3Br , CH_2ClBr , CH_2Br_2 , CHCl_2Br , 1951

CHBr_3 , CF_3Br , CCl_3Br , CBr_4 (D)

Szwarc M., Schon A.H.

J. Chem. Phys., 1951, 19, 656-7

Effect of halogenation on the

...

CBr_2H_3

C.A., 1951, 7858f

K₁.

44-1212

1952

CH_3Cl , SiH_3Cl , GeH_3Cl , CH_3Br ,

SiH_3Br , GeH_3Br (*conjugates*)

Mays J.M., Dailey B.P.

J.Chem.Phys., 1952, 20, 1695-1702

Microwave spectra and structures
of ...

C.A., 1953, 4148f

CBrH_3

1214-IV

1951

CH_3Cl , CH_3Br , CH_3J ($\checkmark_i$)

Mathis R.

J. phys. radium, 1951, 12, 550-3

Absorption of the methyl halides
in the ...

CB_2H_3

C.A., 1951, 9370c

10

648-1D

1951

CH₃Br (D)

1,4b

Szwarc M.

Proc. Roy. Soc. (London) 1951, A207,
5-13.

"Experimental methods for
measurement of bond dissociation
energies and

C.A., 1952, 5377f

M

teens g. v. ✓ φ

IV-1437

1952

CH_3J , CH_3Br , CH_3Cl (V_1)

Grenier-Besson M.L., Mathis-Noël R.

J. phys. radium, 1952, 13, 172

Absorption spectra of gaseous
methyl halides to 1.6μ .

C.A., 1953, 404a

CBr_2H_3

to

11-1217

CH_3Cl , CH_3Br , CH_3I (мол. спектры 1952)

Miller S.L., Aamodt L.C.,
Dousmanis G., Townes C.H.,
Kraitchman J.

J.Chem.Phys., 1952, 20,
1112-16

Structure of the methyl halides

C.A., 1953, 4745g

CB_2H_3

10

CH_3Br (vi)

696-IV

1952

Welsh H.L., Crawford H.P., Thomas T.R.,
Love G.R.

Can. J. Phys., 1952, 30, 577-96

Raman spectroscopy of

C_2H_2

C.A., 1953, 2602b

10

1355-IV

1953

 CH_3Br (Vi, A, B)1356-IV

Rauk D.H., Rix H.D., Wiggins T.A.

J. Opt. Soc. Amer., 1953, 43, 157-62.Some bands of methyl bromide in the near
infrared under high resolution

10

C.A., 1953, 5253f

CH_3Br
 CH_3Cl
Do
1

IV-1243

H. Gudbier

1954

Z. Naturforsch 9a, 54, 348-350

Массенспектр. исследование
 CH_2Br_2 , CH_2Cl_2 , CH_3Br и CH_3Cl .

Вычислены кривые ионизации
ионизации или диссоциации
для CH_2Br_2 и CH_2Cl_2 из
которых найдены значения

гидролиз CH₃-Br = 3,0 эв

CH₃-Cl = 3,9 эв.

CHBr₃

G. Kerzman

S. Ch. Ph. 22, 2093

1954

Брауна. Косродневил
Бромформ-а.

1209-10

$\text{CH}_3\text{Cl}^{35}$ ($B_v=0, B_{v_3}=1, B_{v_6}=1, \alpha_6^B \alpha_3^B$) 1954

$\text{CH}_3\text{Cl}^{37}$ ($B_v=0, B_{v_3}=1, B_{v_6}=1, \alpha_6^B \alpha_3^B$);

$\text{CH}_3\text{Br}^{79}$ ($B_v=0, B_{v_3}=1, B_{v_6}=1, \alpha_3^B$);

$\text{CH}_3\text{Br}^{81}$ ($B_v=0, B_{v_3}=1, B_{v_6}=1, \alpha_3^B$)

Kraitchman J., Dailey B.P.

J.Chem.Phys., 1954, 22, N 9, 1477-1481 (Ann.)

Variation in the quadrupole coupling constant with vibrational state in the

...

PX., 1955, 54438 10.

$\text{C}^D\text{Br}_2\text{H}_3$

BP-IV-549

CH_3Br (D_e)

1954

Lossing F.P., Ingold K.U.,
Henderson I.H.S.

J.Chem.Phys., 1954, 22, N 9,
1489-1492 (*ann.*)

Free radicals by mass spectrometry.
VI. The bond dissociation energies of
some methyl, allyl, and benzyl
compounds by electron impact

PX., 1955, 31003

M, 10

1446-1D
 CH_3J , CH_3Br , CH_3Cl , CH_3F (J, D) 1954

McDowell C.A.

Ind.chim.belge, 1954, 19, N 7,
713-718 (англ.)

Ионизация и диссоциация
молекул при электронном ударе

РХ., 1957, N 7,
21956

CBrH_3

14-1059

$\text{CH}_3\text{F}, \text{CH}_3\text{Cl}, \text{CH}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{J}$ (B_0, D) 1954

Thomas W.J. Orville, Cox J.T.,
Gordy W.

J.Chem.Phys., 1954, 22, N 10, 1718-
1722 (ann.)

Millimeter wave spectra and ...

PX., 1956, 49881

CBeH_3

10

548 - IV

1955

CH_3^+ (A.P.)

CH_3F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3I (I, D)

HF (I)

Dibeler V.H., Reese R.M.,
J. Res. Nat. Bur. Standards, 1955, 54, N 3,
127-134 (англ.)

Некоторые положительные и отрицательные
ионы в масс-спектрах моногалодометанов.

РЖХ, 1957, № 9,
29556

10

весь гр. к.

Bp-IV-1361

1955

CH₃Br, CD₃Br (Vi, ϕ^* , Cp, S, Be)

Weissman H.B., Bernstein R.B.,
Rosser S.E., Meister A.G.,
Cleveland F.F.

J.Chem.Phys., 1955, 23, N 3,
544-551 (ann.)

Substituted methanes. XXIII. Infrared
spectral data, ...

PX., 1955, N 20,
45288

10

CD₃H₃

СНЗ Вч

1955

Мабонинский А.Е.
Успехи химии 1955, 24, 730

Радиоспектроскопия и строение
молекул (обзор, около 30 ссылок)
химические данные для
уровня связи и систематические
расстояния

см С.О.

CH₃Br(J)

2-598

1957

Frost D.C., McDowell G.A.

Proc. Roy. Soc., 1957, A241,

N 1225, 194-207 (ann.)

Studies of the ionization of molecules by electron impact. II. Excited states of the molecular ions of methane and the methyl halides

PX., 1958, N 4, 10289

10 - 1208

1957

CH_3Cl , CH_3Br , CH_3J , CD_3Cl , CD_3Br ,

CD_3J (VI, *unobtainable*)

Kink W.T., Mills I.H., Crawford B.

J. Chem. Phys., 1957, 27, N 2,

455-457 (mm.)

Normal coordinates in the methyl

...

PX., 1958, N6, 16789

CBzH_3

HD

1248 - IV

CH₃Cl, CH₃Br, CH₃J, CH₃F, CD₃F (B, D)¹⁹⁵⁷

Palik E.D., Rao K.N.

J.Chem.Phys., 1957, 26, N 6,
1401-1404 (annu.)

Pure rotational absorption spectra
of the methyl ...

PX., 1958, N 5,
13538

CB₂H₃

323-IV

$\text{CO}, \text{O}_2, \text{NO}, \text{Cl}_2, \text{Br}_2, \text{I}_2, \text{HCl}, \text{HBr}, \text{HI}, \text{H}_2\text{O},$ 1957

$\text{H}_2\text{S}, \text{CO}_2, \text{SO}_2, \text{CS}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{NO}_2, \text{O}_3, \text{NH}_3, \text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_6,$

$\text{CH}_3\text{Cl}, \text{CH}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{I}, \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}, \text{C}_2\text{H}_5\text{Br}, \text{C}_2\text{H}_5\text{I}, \text{CH}_2\text{Cl}_2,$

$\text{CHCl}_3, \text{CCl}_4, \text{C}_2\text{H}_4, \text{C}_2\text{Cl}_3\text{H}, \text{C}_2\text{H}_2, \text{CH}_3\text{OH}, \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{IX})$

Watanabe K.,

J. Chem. Phys., 1957, 26, N 3, 542-547 (англ.)

Потенциалы ионизации некоторых молекул.

РЖХ, 1957, № 24,

76390

Белл гр. н.

$\text{Cl}_2, \text{Br}_2, \text{I}_2, \text{HCl}, \text{HBr}, \text{HI},$ (Z, $\frac{1232-14}{D}$)

I957

$\text{CH}_3\text{Cl}, \text{CH}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{I}, \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl},$

$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}, \text{C}_2\text{H}_5\text{I}, \text{CF}_4, \text{CClF}_3, \text{CCl}_2\text{F}_2,$

$\text{CCl}_3\text{F}, \text{CF}_4, \text{C}_2\text{F}_6$

Воробьев А.А., Калганов А.Ф.

Ж.физ.химии, 1957, 31, № 7, 1455-1458
(рез.англ.)

Энергетические соотношения при пробое
газов.

РЖХим., 1958, № 9, 28081

$\text{C}_2\text{H}_2\text{N}_3$

"0"

CH₃Br

1958

Costain C. C.

"J. Chem. Phys."

1958, 29, (4), 869-

Unpub. acc. enroute...

dam m/c 1521

5149 - 12

1958

CH_3CN , CH_3F , CH_3Cl_3 , CH_3Br , CH_3J (vi)

Josien M.L., Fuson N., Deschamps J.
Forel M.T.

Cr. Acad. Sci., 1958, 246, N 13, 1992-94

Attribution des bandes ...

J

C/Br/H_3

1045-IV
CH₃X (X=F, Cl, Br, J, CH) ($\sqrt{}$) 1959

CH₃OOCR (R=CH₃, CF₃, CCl₃, CBr₃)

Deschamps J., Forel M.T., Fuson N.,
Josien M.-L.,

Bull.Soc.Chim.France, 1959, N 1,
88-93

Изучение колебаний группы CH₃.
I. Галоидные

РХ., 1959, N 21,
73888

CBr₃H₃

10

CH₃Br (D)

IV-660

1959

Reed R.J., Snedden W.

Trans. Faraday Soc., 1959, 55, II 6,
876-879

Исследования методом ...

РХ., 1960, II 1, 120

М

995-IV

1960

$J(\text{CF}_3\text{F}, \text{CH}_3\text{Br}, \text{CF}_3\text{Br}, \text{CH}_3\text{Cl}, \text{CF}_3\text{Cl},$

$\text{H}_2\text{CO}, \text{H}_2\text{CClBr}, \text{H}_2\text{CBrBr}, \text{H}_2\text{CClCl},$

Trans $-\text{HBrCClBr}, \text{Br}_2\text{CClBr}, \text{H}_2\text{CClCl}, \text{Cl}_2\text{CClCl},$

$\text{Cl}_2\text{CCCl}_2, \text{H}_2\text{CCF}_2, \text{F}_2\text{CCl}_2, \text{F}_2\text{CCF}_2)$

Bristol R. Harris P.V., Price W.C.
Proc. Roy. Soc., 1960, A258,

и 1295, 459-469 (англ.)

Влияние фтора на электронные спектры

РХ., 1961, 11567

М.Ю

СВЗ/13

IV-105g

1960

CH_3X (СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ)

$\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$

Overend J., Scherer J.R.

J. Chem. Phys., 1960, 33, N 2,
446-452 (АНГЛ.)

ПРИМЕНИМОСТЬ СИЛОВЫХ ПОСТОЯННЫХ

...

РХ., 1961, 17685

C_2H_5

Ю

1201-10

1961

$\gamma_i(\text{CH}_3\text{X},$

$\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{C}=\text{N})$

Chaventon J.

C.r.Acad.sci., 1961, 253, N 12,
1251-1253 ($\phi p a m u.$)

Spectres d'absorption infrarouge à
haute résolution, vers 1,65 ...

PX., 1962, 16686

$\text{C}_6\text{H}_5\text{H}_3$

10

1968

CH_3Br

To M. Huang P.-K.C.,
Kosower & M.

Trans. Far. Soc., 57, 1662

Electronic absorption spectra
of iodo- and bromomethanes

(see G₄)

CH₃Br Книга Shimanouchi 1961
лет у Гурвега

Shimanouchi T, Suzuki J.

Син. посб. J. Mol. Spectrosc, 1961

6 (3), 277-300.

● (см CH₃Cl.)

CH_3Cl

CH_3Br

CH_3I

и.к.

спектр

Вф-7141-IV

1962

7 Д244. ИК-спектры и молекулярная структура галометиллов. Andersen F. Allan. Infrared spectra and molecular structures of the methyl halides. «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 2». Oxford—London—New York—Paris, Pergamon Press, 1962, 739—744. Discuss., 744 (англ.)

Измерены ИК-спектры CH_3Cl , CH_3Br и CH_3I в области 400—3000 см^{-1} . Получены все основные парал. и перпендикулярные полосы. Разрешены перпендикулярные полосы и одна из парал. полос ($\nu_3^{\text{CH}_3\text{Cl}}$). Из анализа тонкой структуры найдены вращательные постоянные, частоты центров полос, постоянные корiolисова взаимодействия. Путем комбинации моментов инерции I_a , полученных из ИК-спектров, с моментами инерции I_b , полученными из микроволн. измерений, рассчитана молекулярная структура. Результаты сравнены с данными других авторов. Приведена дискуссия.

ф. 1963. 7

CH₃Br

1962

6 Д216. ИК-спектры галоидных метилов. II. Спектры бромистого метила вблизи 4450 см^{-1} . Brown R. G., Edward T. H. Infrared spectra of the methyl halides. II. Methyl bromide near 4450 cm^{-1} . «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 5, 1029—1034 (англ.)

Исследован ИК-спектр CH₃Br, полученный в области $4350—4550 \text{ см}^{-1}$ при разрешении до $0,07 \text{ см}^{-1}$. Три перпендикулярные перекрывающиеся полосы со значениями ν_0 , равными $4352,58 \text{ см}^{-1}$, $4446,03 \text{ см}^{-1}$ и $4482,39 \text{ см}^{-1}$, отнесены, соответственно, к колебаниям $\nu_2 + \nu_4$, $\nu_4 + \nu_5$ и $\nu_1 + \nu_3 + \nu_6$. Для полос $\nu_2 + \nu_4$ и $\nu_1 + \nu_3 + \nu_6$ выполнен анализ вращательной структуры по отдельным линиям P и R-ветвей различных подполос и получены значения вращательных постоянных B'' , B' и D_k . Анализ относительно слабой $\nu_4 + \nu_5$ -полосы основан на непосредственных измерениях частот резких Q-ветвей. Исходя из имеющихся в литературе значений постоянной A'' , определены значения постоянных A' для всех исследованных полос. Для вырожденных колебаний ν_4 , ν_5 и ν_6 получены значения постоянных колебательных моментов кол-ва движения (ξ_i). Ч. I см. РЖФиз, 1958, № 12, 28730.

К. Василевский

ф. 1963. 61

11 - 4441
11 - 1353

1962

CH₃Br

13 Б155. Инфракрасные спектры метилгалогенидов. II. Спектр метилбромида в области 4450 см⁻¹. Brown R. G., Edwards T. H. Infrared spectra of the methyl halides. II. Methyl bromide near 4450 cm⁻¹. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 5, 1029—1034 (англ.)

Показано, что три перекрывающиеся перпендикулярные полосы CH₃Br обусловлены колебаниями $\nu_2 + \nu_4$, $\nu_4 + \nu_5$ и $\nu_1 + \nu_3 + \nu_6$, расположенными соответственно при 4352,58, 4446,03 и 4482,39 см⁻¹. Проведен анализ Q-ветви первой полосы и P- и R-ветвей остальных двух полос. Сообщение I см. РЖХим, 1958, № 19, 63466.

Резюме авторов

Ч.К.

Синтез
11-4401
11-1353

ж. 1964. 13

2087-IV

1962

 $C_2H_2, CH_3F, CH_3Cl, CH_3Br, CH_3I, CH_3OH,$
 $CH_3SH, CH_3SiH_3, CH_3GeH_3, C_2H_4AD, C_2H_4O,$
 $C_2H_4S, CH_3NH_2, CH_3Li (A), C_2H_6 (AD)$

Bykov G.W.

J. Prakt. Chem., 1962, 16, N 1-283-112

Die Bindung ...

 CB_2H_3

J.M

CH_3Cl

CH_3Br

CH_3I

T. Morino, I. Nakamura

1962

Proc. Int. Conf. Symp. Mol. Struct.
Spectry, Tokyo (C206), 1962.

The Determination of the force
field of methyl halides by means
of the Coriolis coupling constants.
(see CH_3Cl)

W-8463

CD₃Br

BOP-8503-IV

1962

CH₃Br.

/ Rotational distortion constants for bromotrideriomethane. K. V. Narasimham (Illinois Inst. of Technol., Chicago). *Spectroscopia Mol.* 11, No. 127, 62-3(1962)(in Interlingua). By using the equations and structural parameters of Dowling, *et al.* (CA 52, 6930d), and the *F* matrix elements of Weissman, *et al.* (CA 49, 10743d) the calcd. values of the rotational distortion consts. for CD₃Br were $D_J = 5.61$ kc./sec., $D_{JK} = 30.45$ kc./sec., and $D_K = 576.45$ kc./sec. Forrest F. Cleveland

C.A. 1963.58.3

20176

CHBr_3

1962
Robinson C.C., Tare S.A., Thompson
H.W.

ИК спектры

Proc. Roy. Soc., 1962, A269,
N 1339, 492.

Интенсивности колебатель-
ных полос CH в газифор-
мах и газодомешенне-
сах.

(см. CHCl_3)

ф. 1963. 4Д

M 1305 - IV

1963

CH_3F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3I (M.A. ... hor.)

Aldous J., Mills I.M.

Spectrochim. acta, 1963, 19, N 9, 1567-1584

The calculations of force constants
and normal coordinates. III Constrained
force fields for the methyl halides

J

F

PF., 1966, 7D142

Есрб ОРАТН.

7811 - IV

1963

CH₃Br, CH₃Cl, CH₃I, CH₃CN, CH₃CCl₃

(mol.konst.)

Glass W.K., Pullin A.D.E.

Trans.Faraday Soc., 1963, 52,

N 1, 25-42

Overtone and ...

Cl₃CH₃

CH₃Br

(Ji, wi

4 9687

1963

Jakob J., Symvoulidon H.

C.r.Acad.sci., 1963, 257, N 3,
639-641. ()

Etude par spectroscopie ...

P ., 1964, 2D201

ЕСТЬ ОРИГИН.

CH_3Br

Kagarise R. &

1963

Spectrochim. Acta, 19(12), 1979

Vapor-liquid frequency shifts
in some substituted methanes.

($\text{Cm. CH}_3\text{Cl}$) III

1963

CHBr₃CDBr₃H.K. Chapp
Panda

Vibrational spectra of bromoform and deuterated bromoform in the liquid and crystalline states. L. I. Maklakov and V. N. Nikitin, *Optika i Spektroskopiya* 15(6), 822-4(1963). A comparison was made of the infrared and Raman spectra of CHBr₃, CDBr₃, and the mixts. of the 2 as measured at 18° and from -50 to -100°.

A. P. Kotloby

C.A. 1964. 60.7
75896c

[X]

IV-9753

1963

CH_3F ; CH_3Cl ; CH_3Br ; CH_3J ;

(WeXe)

Mazumder M., Piotrowski E.A.,
Cleveland F.F.

Sympos. Molec. Struct. and Spectroscop.
Columbus, 1963", Columbus, Ohio,
s.a. 58

Anharmonicity constants for the ...

PX, 1965, 175117

J

T

hem & 5-12-63

1395-286-V

1964

CH₃Br

Brown R C, Edwards T.H

CH₃I

J. Chem. Phys, 1964, 40(9),

2440-1

мол.

посл.

поправка к статье:

и.к. спектр метилгалогенидов

II и III. (J. Chem. Phys, 1962, 37,
1029 и 1035)

IV-9688

1964

CH_3F ; CH_3Cl ; CH_3Br ; CH_3J ;

$\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$; $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$; $\text{C}_2\text{H}_2\text{Br}_2$; $\text{C}_2\text{H}_2\text{J}_2$ (✓)

Jacob J., Symvoulidou H.

J.Chim.Phys., 1964, 61(6), 836-42

The vibration bands ...

J

CH_3Br

Tsuda S., et al. 1964

Do

J. Chem. Phys., 1964,
41, ~ 3, 689.

● $(\text{Ces. CH}_3)_{\text{III}}$

CH₃F

CH₃Cl

CF₃H (ν_i)

CH₃Br

IV - M-228

1965

Galasso V., De Alti G., Costa G.,

Spectrochim. Acta, 1965, 21(4), 669-76
Normal coordinat treatment ...

J

CA., 1965, 62, N 11,
12460b

CH_3Br

Lindfors K. R.,
Cornwell C. D.

1965

J. Chem. Phys., 1965, 42, N 1,
149-155.

Метод измерения дипольных
моментов молекул по спек-
тральным спектрам, не-
посредственной зависимости

Амплитуды сигнала
от величины слабого
модулирующего поля.

(см. ОСС)

CH₃Br

BØ-M/552-IV | 1965

(u.n.)

Moreno K,
Nakamura J,
Yomamoto S.

Bull. Chem. Soc. Japan,
1965, 38, N3, 459-68

1965

M 325 - IV

Симметричные
молекулы. (CH_3Cl , CH_3Br , CH_3J , CD_3Cl , CD_3Br ,
 CD_3J)

Morino Y., Nakamura J.

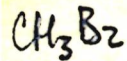
Bull. Chem. Soc. Japan, 1965, 38, N 3, 443-459

Vibration-rotation spectra, the coriolis coupling constants and the intramolecular force field of symmetric top molecules.

I The E-type fundamental bands of methyl and methyl- d_3 halides

PX., 1966, 75142

J



R. H. Schwendeman and J. D. 1965
Kelly.

J. Chem. Phys., 42(3), 1132-4.

Carbon-halogen distances in
deuterated methyl chloride
and methyl bromide.

(for CH_3Cl)

IV-M-695

1965

$\text{CH}_3(\text{I}); \text{A.P.}(\text{CH}_3^+; \text{H}^+; \text{F}^+; \text{Cl}^+;$
 $\text{Br}^+; \text{J}^+;) \text{Do}(\text{CH}_3\text{-Cl}; \text{CH}_3\text{-Br}; \text{CH}_3\text{-I};$
 $\text{CH}_3\text{-F})$

Tsuda S., Melton C.E., Hamill W.H.
J.Chem.Phys., 1965, 41, N3, 689-695

Ionization-efficiency curves for ...

J
PX, 1965, 12575

CH3Br

м.и.

Br-11-12/01

в. 1967. 22

) 8 Д151. Определение A_0 для аксиально-симметричных молекул. Ч. II. CH3Br. Barnett Thomas L., Edwards T. H. Determination of A_0 for axially symmetric molecules. Part II. CH3Br. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 4, 352—358 (англ.)

Одновременным анализом вращательно-колебательных полос ν_4 и $2\nu_4$ с применением метода наименьших квадратов (ч. I см. реф. 8Д150) получено значение $A_0 = 5,129 \pm 0,0009 \text{ см}^{-1}$ для CH3Br. Для сравнения эта же величина определена последовательным анализом этих полос: $A_0 = 5,13 \pm 0,010 \text{ см}^{-1}$. Полосы ν_4 и $2\nu_4$ были получены с помощью высокоразрешающего вакуумного спектрометра с монохроматором Литтрова—Пфунда. Подробно описывается определение частот. Расчет методом

1966

Br-11322-11/

наименьших квадратов был выполнен на ЭВМ. Приводятся значения ряда других молекулярных параметров, имеющих отношение к проведенным анализам. Полученное значение A_0 совместно со значением B_0 , полученным из микроволн. спектра для нескольких изотопозамещенных молекул, использовано для более точного определения структурных параметров CH_3Br . Эти параметры приведены в таблице вместе со значениями, определенными различными методами другими авторами.

В. А. Морозов

CH_3Br

Вср - М1322 - IV

1 Б215. Определение A_0 для аксиально симметричных молекул. Часть II. CH_3Br . Barnett Thomas L., Edwards T. H. Determination of A_0 for axially symmetric molecules. Part II. CH_3Br . «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 4, 352—358 (англ.)

При одновременном анализе вращательно-колебательных полос ν_4 и $2\nu_4$ с применением метода наименьших квадратов (часть I см. РЖХим, 1967, 18Б64) получено значение $A_0 = 5,129 \pm 0,0009 \text{ см}^{-1}$ для CH_3Br . Для сравнения эта же величина определена последовательным анализом этих полос: $A_0 = 5,13 \pm 0,010 \text{ см}^{-1}$. Приводятся значения ряда других молекулярных параметров, имеющих отношение к проведенным анализам. Полученное значение A_0 совместно со значением B_0 , полученным

х. 1968.1

1966
Вср. - IV - 12181

из микроволнового спектра для нескольких изотопзамещенных молекул, использовано для более точного определения структурных параметров CBr_3Br . Параметры молекулы CH_3Br , находящиеся в лучшем соответствии со спектральными измерениями, составляют: $r(\text{C}-\text{Br}) = 1,9389 \text{ \AA}$, $r(\text{C}-\text{H}) = 1,096 \text{ \AA}$, $\alpha(\text{Br}-\text{C}-\text{H}) = 107^\circ 56'$, $\alpha(\text{H}-\text{C}-\text{H}) = 110^\circ 58'$. В. А. Морозов

CH₃ Br

CH₃Br

Bp - 11070-IV

1966

Vibration-rotation bands of methyl bromide. E. W. Jones, R. J. L. Popplewell, and H. W. Thompson (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Spectrochim. Acta* 22(4), 647-57(1966)(Eng). Vibration-rotation bands of MeBr were remeasured with high resolving power. In 5 parallel bands, the *P-R* "lines" were resolved, and in some cases isotopic splitting was observed. All 3 fundamental degenerate vibration bands and several combinations were analyzed. In 2 cases, $^P P_K(J)$ and $^R R_K(J)$ lines in subbands were measured. Mol. consts. and Coriolis coupling coeffs. were derived, and $A_0 = 5.134 \text{ cm.}^{-1}$. The results were correlated with previous data on this mol. RCSQ

15183a

СН₃Br

1966

1 3 Д272. Колебательно-вращательные полосы метилбромид. Jones E. W., Popplewell R. J. L., Thompson H. W. Vibration-rotation bands of methyl bromide. «Spectrochim. acta». 1966, 22, № 4, 647—657 (англ.)

Исследованы колебательно-вращательные полосы метилбромид с высоким разрешением. В пяти парал. полосах разрешены *P*—*R*-«линии». В некоторых случаях наблюдается изотопное расщепление. Проанализированы основные вырожденные колебательные полосы и несколько их комбинаций. Получены молекулярные постоянные и коэф. Корриолиса. Результаты сопоставлены с предварительными вычислениями для этой молекулы. Библ. 13. В. Данилов

В99-М1070-IV

ф. 1967. 3Д

1966

C₂D₃Br (vi)

IV M1033

CH₃Br

Jones E. W., Popplewell R. J. L.,
Thompson H. W.,
Spectrochim Acta, 1966,
22 (4), 639-46

10

B9-M 1191 - IV

1966

CH_3F , CD_3F , SiH_3F , SiD_3F (chiral form.)

$\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{J}, \quad \text{CH}_3\text{Cl}, \text{CD}_3\text{Cl}, \text{SiH}_3\text{Cl}, \text{SiD}_3\text{Cl},$
 $\text{CH}_3\text{Br}, \text{CD}_3\text{Br}, \text{SiH}_3\text{Br}, \text{SiH}_3\text{J}, \text{SiD}_3\text{J}, \text{SiD}_3\text{Br},$
 $\text{CH}_3\text{J}, \text{CD}_3\text{J}$

Pulay P., Torok F.

Acta Chim. Acad. Sci. Hung. 1966, 47(3),
273-9

Paratemer form of matrix F.II. Assignment
with the aid the parameter form (short
communication)

F

CA., 1966, 65, N 2, 1397g

CH₃Br

ВФ-М 2248-IV

1967

18 B230. Изучение параллельной компоненты полосы $2\nu_4$ метилбромида в области $1,6 \mu$. Bétrencourt Claudine, Joffrin Colette. Etude de la composante parallèle de la bande $2\nu_4$ du bromure de méthyle à $1,6 \mu$. «C. r. Acad. sci.», 1967, 264, № 8, B619—B621 (франц.)

Изучен спектр метилбромида с разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$ в области первого обертона колебания ν_4 . Центр полосы найден при $6064,11 \text{ см}^{-2}$. Определены значения вращательных постоянных параллельной составляющей полосы 2ν (в см^{-1}): $B' = 0,3187 \pm 0,0001$, $B'' = 0,3185 \pm 0,0001$ и $D_{jj} = (3 \pm 1) \cdot 10^{-7}$.

А. Белозеров

м.п.

VI-0898-сбп

х. 1967. 18

CH₃Br

ВФР-2248-IV

1987

8 Д289. Изучение параллельной компоненты полосы $2\nu_4$ бромметила в области $1,6 \mu$. Bétrencourt Claudine, Joffrin Colette. Étude de la composante parallèle de la bande $2\nu_4$ du bromure de méthyle à $1,6 \mu$. «С. г. Acad. sci.», 1967, 264, № 8, В619 — В621 (франц.)

Изучен с разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$ спектр бромметила (CH_3Br) в области первого обертона фундаментальной частоты ν_4 . Центр полосы найден при 6046 см^{-1} . Вычислены вращательные константы параллельной составляющей полосы $2\nu_4$. Библ. 5. А. Белозеров

ВФР-2248-IV

9. 1987. 82

CH₃ Br

1967

109906p Component parallel to the 2v₄ band of methyl bromide at 1.6 μ . Claudine Betrencourt and Colette Joffrin (Fac. Sci., Paris). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A,B* 264B(8), 619-21 (1967)(Fr). Precise assignment of the rotational quantum nos. to the max. absorptions and the rotational consts. have been obtained for MeBr by comparing a reconstructed spectrum with the exptl. one. K. D. Root

μ . Π .

11-2298-2421

C.A. 1967: 66: 24

81
79
CH₃Br

1967

6 Д474. Микроволновый спектр метилбромиды и метилбромиды- d_3 . Резонанс Кориолиса между состояниями ν_2 и ν_5 . Morino Yonezo, Hirose Chiaki. Microwave spectra of methyl bromide and methyl bromide- d_3 . Coriolis resonance between the ν_2 and ν_5 states. «J. Molec. Spectrosc.», 1967, 24, № 2, 204—224 (англ.)

Измерены микроволн. спектры молекул $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$, $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$, $\text{CD}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CD}_3^{81}\text{Br}$ в различных возбужденных состояниях. Постоянная колебательно-вращательного взаимодействия α_v^B и колебательные поправки постоянной квадрупольной связи получены для ν_2 , ν_3 , ν_5 , ν_6 и $2\nu_3$ колебательных уровней CH_3Br и для ν_2 , ν_3 , ν_5 , ν_6 , $2\nu_3$, $\nu_3 + \nu_6$ и $2\nu_6$ -состояний CD_3Br . Найдено, что дублет l -типа в первом возбужденном состоянии вырожденного колебания ν_5 несимметричен по отношению к центральной линии. Результаты объяснены резонансом Кориолиса между ν_2 - и ν_5 -состояниями. Г. К.

ф. 1968. 68

18

CH₃Br₂

1907

u. n.

7894g Microwave spectra of methyl bromide and methyl bromide-d₃. Coriolis resonance between the ν_2 and ν_3 states. Yonezo Morino and Chiaki Hirose (Univ. Tokyo). *J. Mol. Spectrosc.* 24(2), 204-24(1967)(Eng). Microwave spectra of Me⁷⁹Br, Me⁸¹Br, CD₃⁷⁹Br, and CD₃⁸¹Br in various excited vibrational states have been measured. The vibration-rotation interaction const., α_v^B and the vibrational change of the eQq coupling const. have been obtained for the ν_2 , ν_3 , ν_5 , ν_6 , and $2\nu_3$ vibrational states of MeBr and for the ν_2 , ν_3 , ν_5 , ν_6 , $2\nu_3$, $\nu_3 + \nu_6$, and $2\nu_6$ states of CD₃Br. The *l*-type doublet in the first excited state of the degenerate vibration ν_6 had unequal sepns. from the central line. The results are discussed in terms of the Coriolis resonance between the ν_2 and ν_3 states. 28 references. RCKP

f. l.

C. A. 1968. 68. 2



СМ₃ Вн

ВФ-8189-XIV

1968

1/6 Д416. Анализ колебательно-вращательной полосы метил-бромид в области 6000 см^{-1} . Azria Roger, Joffrin—Graffouillère Colette. Analyse d'une bande de vibration-rotation du bromure de méthyle vers 6000 см^{-1} . «C. r. Acad. sci.», 1968, 266, № 2, В 75—В 78 (франц.)

Измерена полоса ($\sim 6000 \text{ см}^{-1}$) $2\nu_4$ ($\nu_4=0$; $\nu_4=2\pm 2$) метил-бромид с помощью спектрометра высокого разрешения ($\approx 100\,000$ в рассматриваемой области). Уточнено положение центра полосы, а также величины вращательных постоянных, в частности, постоянной центрабежной дисторсии в возбужденном состоянии. Резюме

9. 1968. 62

CH₃Br
(meup)

B92 - 8189 - XIV 1968

64064k Analysis of a vibration-rotation band in methyl bromide around 6000 cm.⁻¹. Roger Azria and Colette Joffrin-Graffouillere (Fac. Sci. Paris, Orsay, France). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A, B* 266B(2), 75-8(1968)(Fr). The $2\nu_4$ ($\nu_4 = 0, \nu_4 = 2^{+2}$) band of MeBr was studied with an Ebert Fastie high resolu. spectrograph (approx. 100,000 in the range considered). This spectrum was that of a transition between the fundamental level and the degenerate component of the level $\nu_4 = 2$ of the vibration frequency ν_4 , with the classic aspect of a perpendicular band of C_{3v} mols. The center of the band was detd. precisely, as well as values of rotation consts., esp., consts. of centrifugal distortion in the excited state. The theoretical frequencies and corresponding intensities were recalcd. with a UNIVAC 1107 computer from published rotation consts. to facilitate the identification of the lines observed. GRJF

C.A. 1968. 68. 14

CH₃Br

спектр

2.1969.5

ЗФ - 8190 - XIV

1968

5 Б177. Интерпретация колебательно-вращательного спектра CH₃Br вблизи 6000 см⁻¹. Azria R., Joffrin C. Interpretation du spectre de vibration—rotation—rotation de CH₃Br vers 6000 cm⁻¹. «Phys. Letters», 1968, A 27, № 5, 299—300 (франц.; рез. англ.)

Исследована вращательная структура ИК-полос, соотв-щих переходам из основного колебательного состояния в состояния $\nu_1 + \nu_4^1$, $\nu_4^1 + 2\nu_5^0$ и $\nu_4^1 + 2\nu_5^2$ молекулы CH₃Br. Построен график зависимости частот линий Q-ветвей от квантового числа K. Отклонение этого графика от прямой линии при небольших значениях K объясняют резонансом Ферми, обусловленным ангармонич. членами $K_{155}g_1g_5^2$ и $K_{14455}g_1g_4^2g_5^2$ в потенциальной ф-ции. Обнаружено удвоение некоторых линий. Для постоянных корiolисового взаимодействия найдены значения $\xi_4 = 0,0595$ и $\xi_5 = -0,25$. М. Р. Алиев

CH₃Br

Bp - 8190-XIV

1968

UK-chemtr

91479b Interpretation of the vibration-rotation spectra of bromomethane near 6000 cm.⁻¹ Azria, R.; Joffrin, C. (Fac. Sci. Paris, Paris, Fr.). *Phys. Lett.*, A 1968, 27(5), 299-300 (Fr). The ir spectrum of MeBr was studied at 5850-6000 cm.⁻¹ The anomalies are interpreted as Fermi resonances between the principal band $\nu_1 + \nu_4$ and the perpendicular components of $\nu_4 + 2\nu_5$. GXJN

C.A. 1968. 69. 22

Вар - 8190 - XIV

1968

CH Br
3

2 Д354. Интерпретация колебательно-вращательно-го спектра CH_3Br в области 6000 см^{-1} . Azria R., Joffrin C. Interpretation du spectre de vibration-rotation-rotation de CH_3Br vers 6000 см^{-1} . «Phys. Letters», 1968, A 27, № 5, 299—300 (франц.; рез. англ.)

Получен спектр поглощения газообразного CH_3Br на приборе с разрешением около $100\,000$ в области $5850\text{—}6000 \text{ см}^{-1}$. Точность регистрации частот составляла $0,01 \text{ см}^{-1}$. В эту область попадают полосы составных колебаний $\nu_1 + \nu_4$ и $\nu_4 + 2\nu_5$. Наблюдаемые аномалии во вращательной структуре ветви $\nu_1 + \nu_4$ объяснены ферми-резонансом с дважды вырожденными составляющими колебания $\nu_4 + 2\nu_5$. Вычисленные с использованием полученных данных коэф. кориолисова взаимодействия согласуются с полученными в предыдущих исследованиях. Библ. 10. М. В. Тонков

09. 1969. 29

CH_3Br

сверхур KP

Holzer W.

1968

J. Mol. Spectrosc., 25(1),
123.

Intensity in the Raman
effect. II. Absolute in-
tensities and depola-
riza- tion ratios for
halogen-substituted

methanes in the
gaseous state.



CH_3Br

γ

клевые
позиции

1968

Krauss M.,
Walker J.A., Dikeler V.M.

J. Res. NBS, A72, N4, 281

(see. NBS) III

CH_3Br
 CD_3Br

амарн.
колеб.

1968
Reichman S., Overend J.

J. Chem. Phys., 48, N 7, 3095

Амарионность ко-
лебаний в метила-
номинах.

(см. CH_3F) III

C H₃ Br
C D₃ Br
3

частичный
исследования

1968

Szöke S.,
Jalvorszky G.

J. Mol. Struct.; 2, n2,
93.

(CH₃Cl) III

$\text{CH}_3\text{-Br}$

mercury
chrome

Williams J. M., et al. 1968

J. Chem. Phys.,
1968, 49, ~ 10, 4467.

$(\text{CH}_3^+)^{\cdot-}$

1969

CH₃Br

N.K. - chem

82624p Interpretation of the vibrational-rotational spectrum of methyl bromide near 6000 cm.⁻¹ Azria, Roger; Joffrin-Graffouillere, Colette (Lab. Infrarouge, Fac. Sci. Paris, Orsay, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A, B* 1969, 268B(1), 59-61 (Fr). The ir spectrum (5750-6000 cm.⁻¹) of MeBr was recorded with a high resolu. spectrometer. Frequencies were detd. with a precision of 0.01 cm.⁻¹ Results are interpreted in terms of Fermi and Coriolis interactions between vibrational-rotational levels.

FBJF

C.A. 1969. 40. 18

1969

CH₃Br(v_i) :

10 Д282. Интерпретация колебательно-вращательного спектра CH₃Br около 6000 см⁻¹. Azria Roger, Joffrin-Gratouillère Colette. Interprétation du spectre de vibrationrotation de CH₃Br vers 6000 cm⁻¹. «С. г. Acad. sci.», 1969, 268, № 1, В59—В61 (франц.)

Изучен колебательно-вращательный спектр бромистого метила в области 5750—6000 см⁻¹ со спектральным разрешением 0,06 см⁻¹. Точность определения частот составляет 0,01 см⁻¹. Наблюдаемые в спектре аномалии объяснены ферми-резонансом уровней (v₁+v₄), (v₄+2v₅) и перпендикулярной компонентой (v₁+2v₅). Выполнена интерпретация колебательно-вращательных линий полосы (v₁+2v₅), вычисленный по их частотам коэф. кориолисова взаимодействия совпадает с величиной 2ξ₅, что подтверждает предложенную интерпретацию. Рассмотрены порядки взаимодействия различных колебательно-вращательных уровней. Библ. 6. М. В. Тонков

фс. 1969.

10 А

1969

 CH_3Br

13 B278. Интерпретация колебательно-вращательного спектра CH_3Br в области 6000 см^{-1} . Arzia Roger, Joffrin-Graffouillère Colette. Interpretation du spectre de vibrationrotation de CH_3Br vers 6000 см^{-1} . «С. г. Acad. sci», 1969, 268, № 1, B59—B61 (франц.)

Кратко рассмотрены предв. результаты анализа аномалий в колебательно-вращательном спектре CH_3Br в интервале частот $5750\text{—}6000\text{ см}^{-1}$. Сложность наблюдаемой в этой области структуры объясняется резонансами Ферми между уровнями $(\nu_1 + \nu_4)$, $(\nu_4 + 2\nu_5)$ и перпендикулярной составляющей $(\nu_1 + 2\nu_5)$. Б. В. Рассадин.

X. 1969. 13

1969

CH₃Br

ИК. и МВ.

21 Б277. Двойное облучение инфракрасным и микро-
волновым излучениями. Lemaire Jean, Houriez
Jean, Bellet Jean, Thibault Jacques. Double
irradiation par rayonnements infrarouge et hertzien.
«С. г. Acad. sci.», 1969, 268, № 13, В922—В925 (франц.)

Исследовано двойное поглощение в CH₃Br (газ)
ИК-излучения (лазер на CO₂) и МВ-излучения. описа-
на схема установки. Наблюдалось 5 линий перехода
 $J=1 \rightarrow 2$ (50 МГц) и 9 линий перехода $J=2 \rightarrow 3$ (65 МГц).
Эта структура обусловлена квадрупольным взаимодей-
ствием и перекрыванием переходов для основного и воз-
бужденного колебательных состояний молекулы. Иссле-
дована зависимость положения максимума сигнала от
давления газа. А. Александров

2. 1969. 21

CH₃Br

1969

Lojko M. S.,
Beers I.

Sp. noem.

J. Res. Nat. Beers Stand.

A73, N 2, 233.

(Ces. H₂O) II

CH_3Br
 CD_3Br

Морозов В.П. и др. 1969

Сб. "Спектроскопия атомов
и молекул", Киев,
"Наук. думка", 1969, 336

См. пост.

(См. CH_3F) III

1969

СНЗВч

Морозов В.Т.
Коваленко Н.Ф.

2i

Ж. гос. химии,

1969, 43, № 10, 2432

(Сер. СНЗ Fi) III

1969

CH_3Br

Wait S.C. и др

ссыл. пост.

У. Молекуляр. Спектроскоп.,
1969, 29, 23, 494

[Ссыл. CH_3F] III

BP-308-XIV 1970

CH₃Br

Duncan Y. L.

J. Mol. Struct.,

M. N.

1970, 6, 6, 447

Vi

(Sol. CH₃Cl) III

CH₃Br

Вр - 119 - XIV 1970
Диксан Г.Г. и др

ссыл. пост.

Молее. Phys., 1970,

18, 23, 289.

(ссыл. CH₃Cl) III

CH₃ Br

XIV-1590

1970

20 Б117. Потенциалы ионизации алкилбромидов.
Hashmall Joseph A., Heilbronner Edgar.
n-Ionisationspotentiale von Alkylbromiden. «Angew.
Chem.», 1970, 82, № 8, 320—321 (нем.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии определены потенциалы ионизации $I(n_1)$ и $I(n_2)$ алкилбромидов RBr ($R = \text{CH}_3, \text{CH}_3\text{CH}_2, \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2, \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2, (\text{CH}_3)_2\text{CH}, (\text{CH}_3)_3\text{C}, (\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2, (\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2$) в процессах $\text{RBr} \rightarrow \text{RBr}^+ + e$. Обсуждены нек-рые закономерности в значениях потенциалов ионизации алкилбромидов, алканов, циклогексил- и циклопропилбромидов.

А. Александров

(7)

X. 1970. 20

+1

IX

1970

CH₃Br

9040c Applications of photoelectron spectroscopy. II. n-
 ionization potentials of alkyl bromides. Hashmall, Joseph A.;
 Heilbronner, Edgar (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, Basel,
 Switz.). *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 1970, 9(4), 305-6
 (Eng). Photoelectron spectra were recorded of RBr compds.
 (R = Me, Et, Pr, Bu, iso-Pr, sec-Bu, tert-Bu, Me₂CCH₂, and
 Me₂CHCH₂). Two sharp bands sepd. by 0.30 eV were obsd.
 in the region 9.95-10.85 eV (between the normal ionization
 potentials of C:C π -electrons and C-C or C-H σ -electrons), and
 are attributed to removal of 4 $p\pi$ lone-pair electrons from Br.
 The av. Br lone-pair ionization potential shifted by -0.2 eV
 per α -Me substituent and -0.09 eV per β -Me substituent (ex-
 cept for R = cyclopropyl). Study of the ionization of the 4
 $p\pi$ electrons of σ -bonded Br is a sensitive method of investigating
 inductive and (hyper)conjugative effects. FBJN

y

фотоспектр.
спектр

C. S. 1970. 13. 2

+1

CH₃Br
25

X

CH₃Br

CD₃Br

расчет
м.н.

Müller H. et al.

11870

J. Mol. Spectrosc.,
36 (3), 551.

(calc. CH₃F) III

CH_3Br

CH_3Br^+

photocyclization
mechanism

y

Ragle J. L. et al.

1970

J. Chem. Phys. 53 (1),
178.

(all CH_3Cl) III

CH₃Br

Vanderhart D. L. 1930
Flygare W. H.

monomer.
20000 crite

Molec. Phys., 18 (1), 77.

See also

(see. CH₃Cl) III

CH_3Br

D_0

X11X-238-1

Woolley A. M.
Child M. S.

1970

Molec. Phys., 19(5),
625.

($\text{C}_{60}\text{H}_{12}\text{O}$) III

CH₃Br.

ν_3

XIV-3381

1971

(145804y) ν_3 band of methyl bromide at high resolution. Anderson, Dennis R.; Overend, John (Sch. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(9), 2013-15 (Eng). The ν_3 parallel band in the ir spectrum of MeBr was measured and analyzed to test the operation of a 2.5-m vacuum grating spectrometer in the long-wavelength region. The band center (610 cm^{-1}) was between the 3rd and 4th orders of the grating employed. Resoln. was $\sim 0.03\text{ cm}^{-1}$ at 632 cm^{-1} . No K structure was obsd. in the P- and R-branch lines. Rotational consts. agree well, but not exactly, with literature microwave values. Vibrational origins were detd.: 611.008 and 609.909 cm^{-1} for Me⁷⁹Br and Me⁸¹Br, resp.

C.A. 1971

45.24

CH₃Br

XIV-3381

1971

✓ 2 Д530. Полоса ν_3 CH₃Br при высоком разрешении. Anderson Dennis R., Overend John. The ν_3 band of CH₃Br at high resolution. «Spectrochim. acta», 1971, A27, № 9, 2013—2015 (англ.)

Получен ИК-спектр поглощения газообразного CH₃Br в области полосы ν_3 с разрешением 0,03 см⁻¹ на спектрометре с фокусом 2,5 м, решеткой 30 штрих/мм с блеском 62,5° в третьем и четвертом порядках и приемником Ge—Si, охлаждаемым жидким гелием. Структура Q-ветвей не разрешена, структура ветвей P и R разрешена полностью. Для CH₃Br⁷⁹ и CH₃Br⁸¹ определены вращательные постоянные и с учетом микроволновых данных частоты колебательного перехода, равные 611,088 и 609,909 см⁻¹. М. В. Тонков.

М. В.

22

Ф. 1972. 22

1971.

 CH_3Br Cradock S.,
Essex E. A.гетероцикл
сукрир

Chem. Commun.,

1971, ~1, 54.

y

(Ces. CH₂F₂)_{III}

1981

CH₂ICH₃BrCH₃Cl

спирит.

исправ

НК-список

С.А. 1981. 75. 26

156643w Infrared spectrum of methyl-d₂ iodide and the ground state geometry of methyl iodide. Duncan, J. L.; Mal-linson, P. D. (Dep. Chem., Univ. Aberdeen, Aberdeen, Scot.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 39(3), 471-8 (Eng). The ir spectrum of CHD₂I was recorded at a resoln. of $\sim 0.2 \text{ cm}^{-1}$. Anal. in terms of the *Q* branches of 5 type *B* and type *C* fundamentals were performed, and the band centers of all other fundamentals accurately located. The averaged value of A_0 detd. is almost perfectly compatible with the recent exptl. value of A_0 for CH₃I. The ground state geometry, detd. from the rotational consts. of CH₃I, CD₃I, ¹³CH₃I, and CHD₂I is $r^0_{\text{CH}} = 1.088 \text{ \AA}$, $r^0_{\text{CD}} = 1.086 \text{ \AA}$, $r^0_{\text{CI}} = 2.1423 \text{ \AA}$, $\alpha^0_{\text{HCH}} = 111^\circ 31'$. Ground state geometries for CH₃Br and CH₃Cl are predicted.

1971

CH₃Br

Ramaswamy K.,
Devarajan V.

метод
расчета
вращат.
меропри

Indian J. Pure
and Appl. Phys.,
1971, 9, ~ 9, 400.

см CH₃CN + III
(Cell. CH₃Cl) IV

CH_3Br

XIV-2731 1971

Sullivan T.E., Frenkel L.

J. Mol. Spectrosc., 1971,
39, N2, 185-201.

vi

M.N.

● (cell CH_3F) III

1972

CH₃Br

Guelachvili, G.

"Nouv. Rev. Opt. Appl."
1972, 2(6), 317-36.

спектр
в вакууме
разрешения

(см. CH₄; III)

1972

CH₃Br

4 Д533. Уширение вращательной линии 0,0→1,0 CH₃⁸³Br за счет столкновений. II. Уширение при столкновениях с квадрупольными и неполярными молекулами. Pandey P. C., Srivastava S. L. Collision broadening of 0,0→1,0 rotational line of CH₃⁸¹Br. II. Broadened by quadrupolar and non polar molecules. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1972, 5, № 11, 2074—2084 (англ.)

уширение
вращ.
линии

С помощью спектрографа с двойной модуляцией измерена ширина вращательной линии JK 0,0→1,0 молекулы типа симметричного волчка CH₃⁸¹Br. Уширение вызвано давлением молекул N₂, H₂, CO₂, O₂, C₆H₆, CS₂ и CCl₄. Эксперим. данные находятся в удовлетвори-

лены интенсивности компонент дублета в разных растворителях. Несмотря на некоторые различия в R для разных растворителей, величина Δ сохраняется в пределах 28—30,5 см⁻¹. Вычисленные величины W ~ 15 см⁻¹, Δ₀ меняется от 0 до растворов в циклогексане и бромформе, до 4 см⁻¹ в тетрахлорэтилене и хлорформе. Библ. 12.

М. В. Тонков

Ф. 1973
н 4

CH₃Br

1972

52395w Analysis of ν_4 of methyl-d₃ bromide. Peterson, R. W.; Edwards, T. H. (Dep. Phys., Michigan State Univ., East Lansing, Mich.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(1), 137-42 (Eng). The ir spectrum of ν_4 of CD₃Br was obtained with a resolution limit of 0.05 cm⁻¹. This resolution is sufficient to resolve the P and R structure, but insufficient to resolve the isotope effect for the 2 isotopes ⁷⁹Br and ⁸¹Br. Combining the results of the anal. with ests. of A_0 and ζ_4^* given by Morino and Nakamura, one obtains $\nu_0 = 2296.46$ cm⁻¹ and $A_0 = 2.603$ cm⁻¹.

ν_4

C.A. 1972. 76. 10

CH₃Br

1942

(M.H.) 120171t Isotopic resolution in the pure rotational spectrum of methyl bromide. Pesenti, Jacques; Sergent-Rozey, Michele (Lab. Infrarouge, Univ. Paris VI, Orsay, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1972, 275(3), 145-7 (Fr). The ⁷⁹Br-⁸¹Br isotopic splitting was obsd. for bands at 18 cm⁻¹ in the pure rotational spectrum of MeBr obtained in the region, 17-43 cm⁻¹, with a high-resoln. Fourier transform spectrometer. Frequencies are given for the $J = 44-54$ bands of the isotopic species and are systematically lower than frequencies calcd. with the SYMTOP program developed by M. Morillon-Chapey and G. Graner (1969) for symmetric top mols.

C.A. 1942. 44. 18

CH₃Br

д. н.

(Vij).

1972

① 2 Д422. Изотопное удвоение во вращательном спектре бромистого метила. Pesenti Jacques, Sergeant-Rozey Michèle. Dédoublément isotopique dans le spectre de rotation pure du bromure de méthyle. «C. r. Acad. sci.», 1972, 275, № 3, B145—B147 (франц.)

Получен ИК-спектр поглощения (17—43 см⁻¹) газообразного CH₃Br при давл. 10—90 мм рт. ст. на фурье-спектрометре на базе интерферометра Майкельсона с разрешением 0,07 см⁻¹. Приведены характеристики установки и условия регистрации. Приведены полученные спектры и таблицы наблюдаемых и рассчитанных частот CH₃Br⁷⁹ и CH₃Br⁸¹ для J от 44 до 54. Во всех случаях наблюдается изотопное расщепление вращательных линий.

М. В. Тонков

Рис. 73-2

CH_3Br

1972

4 Б255. Изотопное расщепление во вращательном спектре чистого бромистого метила. Presenti Jacques, Sergeant-Rozey Michèle. Dédoublement isotopique dans le spectre de rotation pure du bromure de méthyle. «C. r. Acad. sci.», 1972, 275, № 3, B145—B147 (франц.)

Измерены спектры поглощения в длинноволновой ИК-области ($17\text{--}43\text{ см}^{-1}$) бромистого метила в газовой фазе при различных давлениях: ~~10, 20 и 90~~ мм. Спектры измерены с помощью спектрометра Фурье. Идентифицированы дублеты, компоненты к-рых отнесены к вращательным переходам в молекулах, содержащих различные изотопные формы брома: Br^{79} и Br^{81} . Величина расщепления в дублетах зависит от давления и достигает $0,1\text{ см}^{-1}$.

И. В. Кумпаненко.

х. 1973. №4.



40I23.7605

Ph, Ch, TE

 CH_3Br

30526 GR

1973

AY-3081

Bhattacharyya Pranab K., Dailey Benjamin
P. Anisotropies in carbon-13 chemical
shift tensor, H-C-H bond angles and the
signs of the coupling constants in $^{13}\text{CH}_3\text{I}$,

см. прод.

0027

OI4 OI6

ВИНИТИ

CH_3Br

1973

vi

Barnes Austin J. et al.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.,"

1973, Part 2, 69, 75, 738-749.

(cell. CH_3P ; III)

CH₃Br

1973

(vi)

166421y Infrared spectra of methyl bromide. $2\nu_2$ Band near 2600 cm⁻¹. Betrencourt-Stirnemann, C.; Morillon-Chapey, M. (Lab. Infra-Rouge, Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1973, 41(2), 171-86 (Eng). The rotational fine structure of $2\nu_2$ was studied under high resolu. (0.03 cm⁻¹) for Me⁷⁹Br and Me⁸¹Br. About 700 lines were assigned for each isotopic species. The band centers were found at 2596.871 and 2596.815 cm⁻¹, resp.

C. A. 1973. 78 N 26

1973

CH₃Br

11 Д644. ИК-спектры CH₃Br. Полоса $2\nu_2$ около 2600 см⁻¹. Betrensoult-Stigemann C., Morrillon-Chapey M. Infrared spectra of CH₃Br. The $2\nu_2$ band near 2600 см⁻¹. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 2, 171—186 (англ.)

v_i; j, k

Получены ИК-спектры поглощения газообразного CH₃Br при давл. 1—2 мм рт. ст. в слое 16 м с разрешением 0,03 см⁻¹ около 2600 см⁻¹ на спектрометре типа SISAM. Наблюдаемые линии отнесены к колебательно-вращательным переходам $2\nu_2$ молекул CH₃Br⁷⁹ и CH₃Br⁸¹. Зарегистрировано ~700 линий. Приведены таблицы их частот, отнесение и спектры. Определены колебательные частоты для обеих молекул, равные 2596,871 и 2596,815 см⁻¹, и с использованием микроволн. данных ряд вращательных постоянных в возбужденном колебательном состоянии $2\nu_2$. Отмечено, что величины постоянных α_2 для CH₃Br того же порядка, что и для CH₃Cl и CH₃I. Библ. 9. М. В. Тонков

X. 1973 N 11

CH_3Br

1973

24 Б328. Инфракрасные спектры CH_3Br . Полоса $2\nu_2$ при 2600 см^{-1} . Betgencourt-Stirnermann C., Morillon—Chapey M. Infrared spectra of CH_3Br . The $2\nu_2$ band near 2600 см^{-1} . «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 2, 171—186 (англ.)

(м.н.) С помощью спектрометра типа СИСАМ исследована с разрешением $0,03 \text{ см}^{-1}$ вращательная структура параллельной ИК-полосы поглощения $2\nu_2$ в области 2600 см^{-1} газообразного CH_3Br (I) ($p=1-2$ торр). Разрешены линии изотопич. структуры $\text{I}-\text{Br}^{79}$ и $\text{I}-\text{Br}^{81}$, причем для каждой из изотопных молекул I отнесено ~700 линий вращательной структуры. Из анализа вра-

ж. 1973 № 24

щательной структуры определены молекулярные посто-
 янные I: для I—Br⁷⁹ $\nu_0 = 2596,871 \pm 0,002$, $B' = 0,315193 \pm$
 $\pm 0,000004$, $B'' = 0,3191607$, $A' - A'' = 0,4325 \pm 0,00004$, $D_J' =$
 $= (2,76 \pm 0,02) \cdot 10^{-7}$, $D_J'' = 3,30 \cdot 10^{-7}$, $D_{JK}' = (18,76 \pm 0,09) \cdot$
 $\cdot 10^{-6}$, $D_{JK}'' = 4,28 \cdot 10^{-6}$, $D_K' - D_K'' = 0,03 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$; для
 I—Br⁸¹ $\nu_0 = 2596,815 \pm 0,002$, $B' = 0,313984 \pm 0,000005$, $B'' =$
 $= 0,3179472$, $A' - A'' = 0,04318 \pm 0,00004$, $D_J' = (2,63 \pm 0,02) \cdot$
 $\cdot 10^{-7}$, $D_J'' = 3,23 \cdot 10^{-7}$, $D_{JK}' = (18,50 \pm 0,09) \cdot 10^{-6}$, $D_{JK}'' =$
 $= 4,25 \cdot 10^{-6}$, $D_K' - D_K'' = 0,03 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. При определе-
 нии молекулярных постоянных I приняты МВ-значения
 величин B'' , D_{JK}'' и D_J'' . Определены также вращатель-
 ные постоянные для I—Br⁷⁹ $\alpha_2^A = (-21,62 \pm 0,02) \cdot 10^{-3}$,
 $\alpha_2^B = (1,984 \pm 0,002) \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ и I—Br⁸¹ $\alpha_2^A = (-21,59 \pm$
 $\pm 0,02) \cdot 10^{-3}$, $\alpha_2^B = (1,982 \pm 0,003) \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$.

А. П. Александров

30319.6116

Ch, Tx

$\text{CH}_3\text{-Br}$ (20)
29862

1973
1972

1340-3700-XIV

Ferguson K.C., Okafo E.N., Whittle E.

Bond dissociation energies from equilibrium studies. Part 4. The equilibrium

$\text{Br}_2 + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{HBr} + \text{CH}_3\text{Br}$. Determination of

$D(\text{CH}_3\text{-Br})$ and $\Delta H_f^\circ(\text{CH}_3\text{Br, g})$.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1973, Part 1,

69, N2, 295-301 (англ.) (ca CH_3Br) I

1973

CH₃Br

Hase H.L. Schwelg A.

Theor. Chim. Acta 1973

31(5), 215-20 (Eng)

CNDO 2 (complete neglect

of differential overlap)

method for third-row molecules.

ye, L, Y

(cur. GeH_x; III)

50331.4201

TC, Ch, Ph

66074

CH₃Br (см. нот)

1973

3154

Herranz J., Nieto J.L., Gómez A.

Force constants computation by the characteristic set method. "An. quim.

Real soc. esp. fís. y quim.", 1973,

69, N 9-10, 943-950 (см. CH₃F, III)

(англ., рез. исп.)

0336

306 308

1973

CH₃Br

12 Д395. Изучение методом молекулярного пучка реакций с участием многоатомных свободных радикалов. Угловые распределения. McFadden D. L., McCullough E. A., Jr, Kalos F., Ross J. Molecular beam study of polyatomic free radical reactions. Angular distributions. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 1, 121—130 (англ.)

угловые
распределения

С помощью квадрупольного масс-спектрометра исследованы реакции свободного радикала CH₃ с молекулами Cl₂, Br₂, J₂ и JCl и радикала C₂H₅ с молекулой Br₂. Радикалы R получались с помощью термич. диссоциации молекул R₂Cd и R₂Zn при t-ре 1500° K, а химич. реакция их с молекулами галлоидов осуществлялась при тепловой энергии в молекулярном пучке. Измерение углового распределения продуктов CH₃X (X=Cl, Br, J) и C₂H₅Br показало, что в реакциях преобладающим является рассеяние назад с сечениями, лежащими в пределах 0,5—

ф. 1973

N 12

5 А. Такой характер рассеяния аналогичен изученному ранее в реакциях этих радикалов с атомом дейтерия.
Б. Ф. Горднеев

73



CH_3Br

1973

ссыл.
по сс.

Semidt K.H., Müller A.,
J. Mol. Struct., 1973,
18, No1, 135-151.

● (ссыл. CH_3F ; III)

CH_3Br

Spence D; Schultz G. J.

1973

прилн.
электр.

J. Chem. Phys.

1973, 58, N 5, 1800-1803.

● (coll. SF_6 ; III)

30719.8191

TE, Ch, Ph

CH₃Br
(Y. Ae)

89480

1973
4-1026

Uehara Yoichi, Saito Naoshi, Yonezawa
Teijiro. Ionization potentials of triflu-
oromethyl and methyl halides by photo-
electron spectroscopy and calculations
by extended Hückel and CNDO/2 methods.

"Chem. Lett"

1973
СМ. ПОДЛ. № 5, 495-500

898 898

9 1 1

0918 БИК

ВИНИТИ

40626.4355

Ch, Ph, TC

CH₃B₂

75539 04

(Vi)

1974

*45523

Aubard Jean, Dumas Gérard G. Etude expérimentale des fréquences harmoniques de vibration dans les cristaux moléculaires: vibrateurs anharmoniques et potentiel intermoléculaire harmonique (bromure de méthyle). "C.r.Acad.sci.", 1974, B278, N 19, 853-855

(франц.)

116 117

ВИНИТИ

CH₃Br

(м.п.)

ХУ - 7956

9 Б229. Резонанс Кориолиса в параллельной полосе с перпендикулярной структурой $\nu_4 + \nu_6$ CH₃Br. Bensa-gi-Zizi Najate. Résonance de Coriolis dans la bande parallèle à structure perpendiculaire $\nu_4 + \nu_6$ de CH₃Br. «C. r. Acad. sci.», 1974, В279, № 16, 427—429 (франц.)

Рассмотрен локальный резонанс Кориолиса между полосами $\nu_4 + \nu_6$ и $\nu_3 + \nu_5 + 2\nu_6$ в молекулах CH₃Br⁷⁹ (I) и CH₃Br⁸¹ (II), на существование к-рого указано в лит-ре. Из анализа этого резонанса определены след. молек. постоянные: для I $E_2^0/hc = 4190,807 \pm 0,003$, $B' = 0,314137 \pm 4 \cdot 10^{-6}$ см⁻¹, коэф. в члене взаимодействия $r = 0,00453 \pm 1 \cdot 10^{-5}$ см⁻¹; для II $E_2^0/hc = 4189,512 \pm 0,002$, $r = 0,00463 \pm 3 \cdot 10^{-5}$ см⁻¹, D_1 (фиксировано для I и II) $= 3,3 \cdot 10^{-7}$ см⁻¹. Принято, что возмущающим уровнем, приводящим к резонансу Кориолиса с $\Delta K = 1$ является уровень $K = 7$ полосы $\nu_3 + \nu_5 + 2\nu_6$ с $l_5 = 1$, $l_6 = 0$. Из выражения $E_2^0/hc = \nu_0 + (A' - B')K^2 - 2A\zeta_{эф}K^2 - D_A'K^4$ определено положение центра возмущающей полосы $\nu_0 = 3937,68$ (I), 3936,34 см⁻¹ (II). А. П. Александров

х. 1975. №9

CH₃Br

м.п. 21

фр. 1974
N 12

1974

12 Д376. Исследование параллельной колебательно-вращательной полосы $\nu_4 + \nu_6$ CH₃Br с перпендикулярной структурой. Bensari-Zizi N., Alamichel C., Amiot C. Etude rovibrationnelle de la bande parallèle à structure perpendiculaire $\nu_4 + \nu_6$ de CH₃Br. «Mol. Phys.», 1974, 27, № 6, 1491—1501 (франц.; рез. англ.).

С помощью фурье-спектрометра получен ИК-спектр поглощения газообразного CH₃Br при давл. 0,4 мм рт. ст. в слое 36 м в области ~~полосы $\nu_4 + \nu_6$~~ с разрешением $5 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹. Определены частоты >1000 колебательно-вращательных линий с точностью $2 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹. Спектр связан с парал. полосой, отвечающей переходу с основного уровня на подуровень A_1 уровня $\nu_4=1$, $\nu_6=1$. При учете корислисова взаимодействия подуровни $l_4=\pm 1$ и $l_6=\pm 1$ расщепляются на величину $4A (\zeta_6 - \zeta_4)K$. Т. к. переходы на эти подуровни разрешены, в полосе $\nu_4 + \nu_6$ возникает дополнительная структура, аналогичная структуре перпендикулярных полос. Интенсивность линий связана с параметрами взаимодействующих уровней. По наблюдаемым спектрам определены молекулярные постоянные для CH₃⁷⁹Br и CH₃⁸¹Br в основном состоянии и возбужденном колебательном состоянии $\nu_6=1$. Библ. 18.

М. В. Тонков

отчисл 2389

Оттиск 2389

1974

 CH_3Br

4 Б282. Вращательно-колебательное исследование параллельной полосы с перпендикулярной структурой $\nu_4 + \nu_6$ CH_3Br . Bensari-Zizi N., Alamichel C., Amiot C. Etude rovibrationnelle de la bande parallèle à structure perpendiculaire $\nu_4 + \nu_6$ de CH_3Br . «Mol. Phys.», 1974, 27, № 6, 1491—1501 (франц.; рез. англ.)

Проведен анализ вращательной структуры полосы $\nu_4 + \nu_6$ CH_3Br (I) в области $\sim 3980\text{—}4024\text{ см}^{-1}$, зарегистрированной с помощью интерферометра с фурье-преобразованием (разрешение $0,005\text{ см}^{-1}$). Идентифицировано более тысячи линий для каждой изотопич. разновидности I. Объяснен колебательный l -резонанс, характерный для этого типа полосы. Стандартное отклонение между наблюдавшимися и вычисленными частотами составляет $0,0011\text{ см}^{-1}$.

Резюме

х. 1975. №4

CH₃Br

~~Ртутный~~ 2282
XIV-0234

1974

6 Д421. Анггармонический резонанс между уровнями $\nu_1(A_1)$ и $\nu_3+\nu_5+\nu_6(A_1+A_2)$ CH₃Br. Betren-court M., Morillon-Chapey M. Resonance an-harmonique entre $\nu_1(A_1)$ et $(\nu_3+\nu_5+\nu_6)(A_1+A_2)$ de CH₃Br. «J. phys.» (France), 1974, 35, № 11, Lettres, 213—215 (франц.; рез. англ.)

Изучен ИК-спектр поглощения (разрешение 0,005 см⁻¹) газообразного CH₃Br в области 2930—3010 см⁻¹ при давлении 0,4 мм рт. ст. в слое 8 м. Точность определения частот составляла 2·10⁻⁴ см⁻¹. Произведено отнесение 2600 линий (по 1300 для молекул CH₃⁷⁹Br и CH₃⁸¹Br) к колебательно-вращательным переходам полос ν_1 и $\nu_3+\nu_5+\nu_6$, между которыми обнаружен анггармонич. резонанс. Матричный элемент возмущения равен 4,08 см⁻¹. Определены невозмущенные колебательные частоты. Библ. 7. М. В. Тонков

Ф 1975 № 6

И.К.
Спектр
мол. физ.
Д.И.М.

11
2282
0.М.

Оттиск 2282 = ? 1974

CH_3Br

23 Б255. Инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы CH_3Br : полоса ν_4 вблизи 3100 cm^{-1} . Betgen-court-Stirnemann C., Gräner G., Guelachvili G. High resolution infrared spectrum of CH_3Br : the ν_4 band near 3100 cm^{-1} . «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 51, № 2, 216—237 (англ.)

С использованием фурье-спектрометра (разрешение $0,005 \text{ cm}^{-1}$) измерен ИК-спектр поглощения молекулы CH_3Br вблизи 3100 cm^{-1} . Выполнен анализ вращательной структуры полосы ν_4 ($3058, 5334 \text{ cm}^{-1}$) для молекул $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$. Расчет спектра выполнен с учетом кориолисового резонанса между ν_4 и $\nu_3 + \nu_5 + \nu_6$ ($2993, 131 \text{ cm}^{-1}$), возмущающего линии с $K\Delta K = 5$ и определены значения вращательных постоянных и постоянных центробежного искажения и кориолисова взаимодействия для обеих полос обеих молекул. М. Р. Алиев

Д. и. н.

х. 1974. № 23

61785-11X

41110.3789
Ch.TC.Ex-C

CH_3Br (сум. ное)
35223 (номер)
1974
2657

Bron Jan.

Partition function ratios of the methyl
halides differing only in isotopic
substitution.

"Can. J. Chem.", 1974, 52, N 17,
3078-3082
(англ., рез. франц.)

207 210

220

0228 ПИЖ ВИННИТИ

CH_3Br

Витис 2281
XIV-5860

1974

(м.п.)

23 Б271. К исследованию колебательно-вращательной полосы $2\nu_5(A_1)\text{CH}_3\text{Br}$ вблизи 2860 см^{-1} . Graner Georges. Contribution to the study of the $2\nu_5(A_1)$ rovibrational band of CH_3Br near 2860 см^{-1} . «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 51, № 2, 238—260 (англ.)

Получен ИК-спектр CH_3Br в области от 2800 до 4250 см^{-1} с абс. точностью определения волновых чисел $2 \cdot 10^{-3}\text{ см}^{-1}$. Идентифицировано 1600 линий для изотопов $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$. Результаты идентификации представлены в виде таблиц. При учете кориолисова взаимо-

действия $x-y$ -типа с $\nu_2 + \nu_5$ колебанием вычислены молек. постоянные для $2\nu_5(A_1)$ полосы. С. Н. Мурзин

х. 1974. № 23

CH₃ Br

1974
Ibata Spigern et al.

„Caizuri Buneschi, Mass
Spectrosc” 1974, 22, 14,
233-238 (amw)

спектр
строен.

(см CH₃NH₂; III)

CH₃ Br

1974

Moutirko A. M.C.
Ater J. H., Los J.

(A)

"Chem Phys" 1974, 5(1)
84-94 (Eng)

(all CH₃ J; III)

C.A. 1974. 81. N16.

XIV-5763

1974

CH₃Br

20 Б240. Исследование длинноволновых инфракрасных спектров молекул CH₃Br и CH₃Cl с использованием Фурье-спектрометра. Presenti Jacques, Sergent-Rozeu Michèle. Étude par transformation de Fourier de CH₃Br et CH₃Cl dans l'infrarouge très lointain. «Appl. Opt.», 1974, 13, № 5, 1158—1163 (франц., рез. англ.)

(М.И.)

Построен Фурье-спектрометр с разрешением 0,05 см⁻¹ для измерения длинноволновых ИК-спектров поглощения. Приведена принципиальная схема спектрометра и даны его рабочие характеристики. Коротко рассмотрен метод обработки Фурье-спектра. В области 10—40 см⁻¹ измерены вращательные спектры молекул CH₃Cl и CH₃Br в основном колебательном состоянии и определены значения вращательной и центробежных постоянных (все в см⁻¹): CH₃Cl³⁵B₀ 0,4434014, $D_{JK} \times 10^6$ 0,604, $D_{JK} \times 10^6$ 6,6; CH₃Cl³⁷B₀ 0,4365730, $D_{JK} \times 10^6$ 0,604, $D_{JK} \times 10^6$ 6,6; CH₃Br⁷⁹B₀ 0,31916075, $D_{JK} \times 10^6$ 0,3302, $D_{JK} \times 10^6$ 4,2796; CH₃Br⁸¹B₀ 0,31794724, $D_{JK} \times 10^6$ 0,3225, $D_{JK} \times 10^6$ 4,2496.

М. Р. Алнев

X. 1974. N20

①

☒

CH_3Br

XIV-5763

1974

10 A218. Исследование методом фурье-спектроско-
пии CH_3Br и CH_3Cl в далекой ИК-области. Presenti
Jacques, Sergeant-Rozey Michèle. Étude par

и.п.;
спектр.

(см. на обр. стороне)

Ф. 1974. N 10 А.



transformation de Fourier de CH_3Br et CH_3Cl dans l'infrarouge très lointain. «Appl. Opt.», 1974, 13, 1158—1163 (франц.; рез. англ.)

Создан лабор. макет фурье-спектрометра для далекой ИК-области ($10\text{--}250\text{ см}^{-1}$). Он представляет собой классич. интерферометр Майкельсона с подвижным зеркалом (максим. перемещение зеркала — 20 см). Перемещение зеркала контролируется методом муаровых полос. В качестве источника света используется ртутная лампа, в качестве приемника — приемник Голея, относит. отверстие спектрометра 1:2,5, светоделитель изготовлен из майларовой пленки. Возможности спектрометра продемонстрированы на примере исследования чисто вращательных спектров CH_3Cl и CH_3Br (давление — 6—15 мм рт. ст.) в области $10\text{--}40\text{ см}^{-1}$. Произведено отнесение линий к различным типам переходов. В случае CH_3Br хорошо наблюдается изотопич. расщепление с расстоянием между компонентами, принадлежащими различным изотопам, равным 14 см^{-1} . Экспериментально наблюдаемое разрешение близко к теоретическому. Библ. 16. А. В. Бобров

1974

CH_3Br

Previtali C.M., Scaiano L.C.

Rev. Latinoamer. Quim., 1974,
5(2), 6I-6.

2, 20, 11

(excl. CH_3F ; III)

41126.7912

Ph, Ch, TC

96201

02

1974

CH_3Br^+

*

4-7350

Vestal Marvin L., Funtrell Jean H.

Photodissociation of CH_3Cl^+ and CH_3Br^+
in a tandem quadrupole mass spectrometer.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 4,
559-561 (англ.)

0243 пик

226 226 - 235

ВИНИТИ

51003.3712
Ch, TC

режим 10392 (vi)
CHBr₃; CHBr₃

1975
3357

Ault Bruce S., Andrews Lester.
Proton radiolysis of CHCl₃ and CHBr₃ at
high dilution in argon during condensation
at 15°K. Infrared spectra of the CHX⁺₂,
CHX⁻₂, and CHX⁻₃ molecular ions.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 4, 1411-1413
(англ.)

8-32-77

436 437

ВИНИТИ

XIV - 6827

1975

CH_3Br (u.n.)

Betencourt M., Morillon-Chapey M.,

Amiot C., Quelackvili G.

J. Mol. Spectrosc., 1975, 57, N3, 402-15

RECEIVED
JAN 10 1976
10

CH_3Br

413 - 11202, XIV-^y000 1975

(ν_i)

84: 67245m identification and analysis of the parallel band ($\nu_2 + 2\nu_5$) of methyl bromide. Betrencourt-Stirnermann, C. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris VI, Orsay, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1975, 36(12), 1205-7 (Fr). The parallel band ($\nu_2 + 2\nu_5$) of MeBr has been identified on a Fourier transform spectrum (resoln. of the spectrometer: 0.005 cm^{-1}). The band centers for Me^{79}Br and Me^{81}Br are respectively 4162.675 and 4162.626 cm^{-1} . About 500 lines have been assigned for each isotopic species. An anharmonic resonance between ($\nu_2 + 2\nu_5$)(A_1) and ($3\nu_3 + \nu_5$ p ν_5)($A_1 + A_2$) has been characterized.

C. A. 1976. 84 XIV

CH_3Br

У-11202
XIV-7000

1975

U 11 B294. Анализ вращательной структуры параллельной компоненты полосы $\nu_2 + 2\nu_5$ молекулы CH_3Br . Betrencourt-Stirnemann C. Identification et analyse de la composante parallèle de $(\nu_2 + 2\nu_5)$ de CH_3Br . «J. phys.» (France), 1975, 36, № 12, 1205—1207 (франц.; рез. англ.)

(м.п.)

На фурье-спектрометре с разрешением $0,005 \text{ см}^{-1}$ измерен ИК-спектр поглощения молекулы CH_3Br в области $4130—4190 \text{ см}^{-1}$. Идентифицирована вращательная структура параллельной компоненты полосы $\nu_2 + 2\nu_5$ молекул $\text{CH}_3\text{Br}^{79,81}$ в их естественной конц-ии (по ≈ 500 линий для каждой молекулы). Определены значения частот центров полос и вращательных и центробежных постоянных возбужденного состояния. М. Р. Алиев

x 1976 N 11

ЖЗ - 10904

1975

CH₃Br

9 Б244. Исследование возмущений спектра высоко-го разрешения бромистого метила в области частот основной полосы ν_1 . Betrencourt Michel, Morillon-Chapey Mireille, Amiot Claude, Guelachvili Guy. Perturbations study of the high-resolution spectrum of methyl bromide in the range of the fundamental band ν_1 . «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 57, № 3, 402—415 (англ.)

(м.п.)

На фурье-спектрометре с разрешением $0,007 \text{ см}^{-1}$ измерен ИК-спектр поглощения молекулы CH₃Br в области $2930\text{—}3010 \text{ см}^{-1}$. Идентифицировано более 1300 вращательных линий полос $\nu_1(A_1)$ и $\nu_3 + \nu_5 + \nu_6(A_1)$ молекул CH₃Br^{79,81}. Анализ спектров выполнен с учетом эффектов колебательно-вращательного взаимодействия и ангармонизма вплоть до 3-го порядка, в том числе резонансов Ферми и Корнелиса 2-го порядка. Определены значения частот центров полос, вращательных и квартичных центробежных постоянных, α -постоянных колебательно-вращательного взаимодействия, x -постоянных ангармонистичности и резонансных параметров.

М. Р. Алиев

X1976 N9

CH_3Br

Хис-10904

1975

(м.п.; Ви)

4 Д406. Исследование возмущений в спектре высокого разрешения бромистого метила в области основной полосы ν_1 . Betrencourt Michel, Morillon-Chapey Mireille, Amiot Claude, Guelachvili Guy. Perturbations study of the high-resolution spectrum of methyl bromide in the range of the fundamental band ν_1 . «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 57, № 3, 402—415 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения газообразного бромистого метила при давл. 0,4 мм рт. ст. с разрешением $0,007 \text{ см}^{-1}$, ограниченным доплеровским уширением, в области $2930—3010 \text{ см}^{-1}$. Измерены частоты колебательно-вращательных линий полосы ν_1 с точностью $3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, для анализа использовано по 1300 линий молекул $\text{CH}_3\text{Br}^{79}$

ФР 1976 N4

и $\text{CH}_3\text{Br}^{81}$. Определены начала вращательных подполос, зависимость их частоты от числа K указывает на возмущение, особенно сильное для уровней $K \sim 5$. По изотопному эффекту возмущение связано с уровнем $\nu_3 + \nu_5 + \nu_6$. Рассмотрен гамильтониан и матричные элементы этого возмущения W_0 , W_{Kk} , W_{Jk} . Методом наименьших квадратов определены вращательные постоянные и константы корiolисова взаимодействия и величины W молекул $\text{CH}_3\text{Br}^{79}$ и $\text{CH}_3\text{Br}^{81}$ в возбужденных колебательных состояниях и вычислены постоянные колебательно-вращательного взаимодействия α^A и β^B для колебаний ν_1 и ν_5 , а также колебательные константы g_{56} и x_{56} . Библ. 30. М. В. Тонков

CH_3Br

CD_3Cl

И.И.

1975

3 Б252 Д. Исследование инфракрасных спектров поглощения тридейтерированного хлористого метила и бромистого метила. Betrencourt-Stirne mann Claudine. Contribution à l'étude du spectre d'absorption infrarouge du chlorure de methyle trideutere et du bromure de methyle. Thèse doct. sci. phys. Univ. Paris, 1975, 156 p., ill. (франц.)

Измерены ИК-спектры высокого разрешения газ CD_3Cl (I) и CH_3Br (II), изучена колебательно-вращательная структура полос ν_1 для I и $2\nu_2$, ν_4 , $\nu_4 + \nu_3 - \nu_3$ и $\nu_2 + 2\nu_5$ для II. Рассчитаны вращательные постоянные и коэф. ангармоничности.

Т. Б. Ченская

(+1) Δ

2, 1978, N3

CH_3Br

CD_3Cl

М.П.

(+1) ☒

ф. 1978,
N 1

1975

1 Д425 Д. Исследование ИК-спектра поглощения хлористого тридейтерометила и бромистого метила. Betrencourt-Stirnemann Claudine. Contribution à l'étude du spectre d'absorption infrarouge du chlorure de méthyle trideutere et du bromure de méthyle. Thèse doct. sci. phys. Univ. Paris, 1975. 156 p., ill. (франц.)

Получены спектры ИК-поглощения с высоким разрешением газообразного CD_3Cl и CH_3Br . Изучена колебательно-вращательная структура полосы $\nu_1\text{CD}_3\text{Cl}$ и полос $2\nu_2$, ν_4 , $\nu_4 + \nu_3 - \nu_3$ и $\nu_2 + 2\nu_5\text{CH}_3\text{Br}$. В теоретич. части рассмотрена симметрия молекул, вычислены энергии колебательно-вращательных уровней, определены правила отбора, рассмотрены типы полос, выведены комбинационные соотношения и определены возможные резонансы. По измеренным частотам найдены константы колебательно-вращательного взаимодействия α^A и α^B изученных молекул в различных колебательных состояниях и определено влияние резонансов на их величины. Определены колебательные частоты, параметры ангармоничности и константы l-удвоения.

М. Тонков

[CH₃Br]

* 4 - 8960

\$9.75

Bossa M., Maraschiri F.,
et al.

J. Chem. Soc. Dalton Trans.,
1975, N7, 596-98.

Semiempirical calculation
the electronic structure and
molecular energy levels of
complex compound.

№ 4 - 8337; XIV-65061975

CH_3Br

7 Д369. Спектр поглощения бромметанов в вакуумной УФ-области. Causley G. C., Russell B. R. Vacuum ultraviolet absorption spectra of the bromomethanes. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 3, 848—857 (англ.)

В вакуумной УФ-области (250—110 нм) изучены спектры поглощения паров CH_3Br , CH_2Br_2 , CHBr_3 и CBr_4 . Интерпретированы полосы, характеризующиеся молекулярными ридберговскими и внутривалентными переходами несвязывающих p -электронов. Рассмотрены также переходы $\sigma^* \leftarrow \sigma$ ($\text{C}-\text{Br}$). Исследована наблюдаемая колебательная структура ns - и np -ридберговских переходов в CH_3Br . Большинство ns -, np - и nd -ридберговских переходов в CH_2Br_2 , CHBr_3 и CBr_4 интерпретированы с использованием величины энергий термов в соотношении с потенциалами ионизации молекул. Библ. 32.

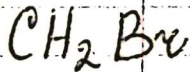
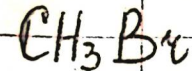
Т. Н. Т.

спектр
поглощения.

Ф 1975 N 7

(+3) IX

ХС-8337, XIV-6506 1975



(ϵ_i)

14 Б179. Спектры поглощения бромметанов в вакуумной ультрафиолетовой области. Causley G. C., Russell B. R. Vacuum ultraviolet absorption spectra of the bromomethanes. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 3, 848—857 (англ.)

Исследованы УФ-спектры (250—110 нм) паров CH_3Br , CH_2Br_2 , CHBr_3 и CBr_4 . Проведены отнесения большинства ридберговских серий $5s \leftarrow 4p$, $5p \leftarrow 4p$ и $4d \leftarrow 4p$ и выполнен их колебательный анализ, а также отнесены $\sigma^* \leftarrow n$ и $\sigma^* \leftarrow \sigma$ переходы связи C—Br. Рассчитаны энергетич. уровни молекул. Величины ридберговских np термов для исследованных соединений различаются мало, а величины pr термов для CH_2Br_2 и CHBr_3 выше, чем для CH_3Br и CBr_4 .

Ю. К.

(+1) ☒

Х. 1975. № 14

50331.7404
Ch, TC

CH_3Br 96615 (75)
 CBr_4 CHBr_3 (70)

1975

*4-8412

Chadwick D., Millen D.J. (79)

Molecular structure of methylene
bromide: comparison of structures
of halogenomethanes.

"J.Mol.Struct.", 1975, 25, N 1, 216-218

(англ.)

303 303

3 2 6

0334 ПИК

ВИНИТИ

50331.7406
Ch, DB, TC, Ex-C

95615
 CH_3Br (vi)

1975
3099

Cleaver K.D., Davies J.E.D., Wood W.J.
The raman spectra of the methyl halides
as guest molecules in -quinoi
clathrates: evidence for C-Br bond
compression.

"J.Mol.Struct.", 1975, 25, N 1, 222-224

(англ.)

0334 пик

303 303

3 2 6

ВИНИТИ

CH₃Br

X13-10087
XIV-6440

1975

(min)

87805b Determination of A_0 of bromomethane from its Raman spectrum. Edwards, T. H.; Brodersen, Svend (Dep. Chem., Univ. Aarhus, Aarhus, Den.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 56(3), 376-85 (Eng). A value of $A_0 = 5.1800 \pm 0.0010 \text{ cm}^{-1}$ for MeBr was detd. from an anal. of the ν_4 Raman band, based both on a direct fit of Q-branch frequencies and on ground state combination differences. The consts. ν_4 , $(A_0)_4$, η_{44} , and $A_e = 5.2442 \pm 0.0015 \text{ cm}^{-1}$ were also detd. The equil. distance of the H atoms from the figure axis was $0.32077 \pm 0.00005 \text{ \AA}$. All the fundamental Raman bands of MeBr were obsd., and exptl. results for the ν_1 , ν_2 , and ν_3 bands are included.

C. A. 1975, 83 N 10

CH3Br

XV-10087
XIV-6440

1975

(м.п.)

4 Б270. Определение вращательной постоянной A_0 молекулы CH3Br по спектру комбинационного рассеяния. Edwards T. H., Brodersen Svend. Determination of A_0 of CH3Br from its Raman spectrum. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 3, 376—385 (англ.)

С разрешением $0,1 \text{ см}^{-1}$ измерена вращательная структура полосы ν_4 спектра КР молекулы CH3Br. При анализе спектра использованы данные по ИК-спектру и определены значения вращательной постоянной $A_0 = 5,1800 \pm 0,0010 \text{ см}^{-1}$. Идентифицированы также Q-ветви полосы ν_5 .

М. Р. Алиев

X. 1976. N 4

CH₃Br

*3-10087

1975

2 Д468. Определение константы A_0 молекул CH₃Br по данным спектра комбинационного рассеяния. Edwards T. H., Brodersen Svend. Determination of A_0 of CH₃Br from its Raman spectrum. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 3, 376—385 (англ.)

Получены спектры комб. рас. газообразных молекул CH₃Br (I) при давлении газа 400 мм рт. ст. и возбуждении лазерными линиями 514,5 и 488,0 нм. Проведен анализ линии вырожденного колебания ν_4 путем подбора по методу наименьших квадратов частот Q-ветви и определены константы A_0 (5,180 см⁻¹), A_e (5,244 см⁻¹) η_{44} и $(A\xi)_4$. Вычисленное равновесное расстояние атомов H от оси молекулы составляет $0,32077 \pm 0,00005$ Å. Полученные результаты подтверждены анализом линии вырожденного колебания ν_5 и сравнением с данными ИК-спектра I. Погрешность вычисления констант в рамках предложенного метода составляет 0,02%. Библ. 21.

И. В. А.

min.

0649-11X

Р 1976 №2

CH₃Br

ЖУ - 9735

1975

3 Б322. Колебательно-вращательные полосы ν_2 и ν_5 метилбромид. Graner G., Blass W. E. The vibration-rotation bands ν_2 and ν_5 of methyl bromide. «J. phys.» (France), 1975, 36, № 9, 769—771 (англ., рез. франц.)

С учетом корiolисова резонанса между колебаниями ν_2 и ν_5 и l-резонанса в состоянии с $\nu_5=1$ выполнен теор. анализ вращательной структуры ИК-полос ν_2 ($1305,91 \text{ см}^{-1}$) и ν_5 ($1442,88 \text{ см}^{-1}$). Определены значения α -постоянных колебательно-вращательного взаимодействия, ζ -постоянных корiolисова взаимодействия и η_K -постоянной, характеризующей зависимость ζ_5^z от вращательного квантового числа K: $\alpha_2^A = -22,7 \cdot 10^{-3}$, $\alpha_5^A = 0,04881$, $\alpha_2^B = 102 \cdot 10^{-5}$, $\alpha_5^B = 8,6 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, $A\zeta_5^z = -1,2614 \text{ см}^{-1}$, $\zeta_{25}^x = 0,6165$, $\eta_K = -2,03 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

М. Р. Алиев

(м.п.)

X 1976 N 3

Ж 43 - 9735; XIV - 6403 1975

CH_3Br

(м.п. Д.)

1 Д445. Колебательно-вращательные полосы ν_2 и ν_5 бромистого металла. Graner G., Blass W. E. The vibration-rotation bands ν_2 and ν_5 of methyl bromide. «J. phys.» (France), 1975, 36, № 9, 769—771 (англ.; рез. франц.)

Выполнен анализ ИК-спектра поглощения CH_3Br ($1200\text{—}1500\text{ см}^{-1}$) с учетом $x\text{—}y$ кориолисова взаимодействия уровней $\nu_2=1$ и $\nu_5=1$ фундаментальных колебаний ν_2 и ν_5 . С использованием 110 переходов ν_2 и 236 переходов ν_5 на ЭВМ рассчитаны значения молекулярных постоянных CH_3Br . Центры полос найдены равными $\nu_2=1305,907$ и $\nu_5=1442,885\text{ см}^{-1}$ соответственно; величина параметра кориолисова взаимодействия составляет $\zeta_{25}^x=0,617$. Сделан вывод о недоказанности важности учета взаимодействия ν_2 и ν_5 в спектре CH_3Br , но вместе с тем о пользе такого учета для получения точных значений молекулярных констант. Библ. 17.

С. Ф. Б.

ф 1976 N 1

CH₃Br

X 2 - 9735

1975

XIV - 6403

(J_i)

123597w Vibration-rotation bands ν_2 and ν_3 of methyl bromide. Graner, G.; Blass, W. E. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris XI, Orsay, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1975, 36(9), 769-71 (Eng). The ir spectrum of MeBr was analyzed between 1200 and 1500 cm⁻¹ taking into account the x - y Coriolis resonance between the 2 fundamental levels $\nu_2 = 1$ and $\nu_3 = 1$. The band centers were found resp. at 1305.907 and 1442.885 cm⁻¹ and the 2.5x coupling term was 0.617.

C.A. 1975. 83 N 14

50514.7210
Ch, Ph, TC, DB

CH₃Br

40892

1975

X 4-8929

Hochmann P., Templet P.H., Wang H.-t.,
McGlynn S.P.

Molecular Rydberg transitions. I.

Low-energy Rydberg transitions

in methyl halides.

(on CH₃Br; III)

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 7, 2588-2595

(англ.)

0364 пик

337 342 956

ВИНИТИ

60102.3149

01921(7)

1975

Ф, Х, ТС, МГУ

CH₃-Br

(Ф0)

* 9-10856

Фотоионизационные процессы в метилгалогенидах
у порога. Иванов В.С., Вилесов Ф.И.
"Оптика и спектроскопия", 1975, 39, № 5
857-863

(сер. CH₃Cl, III)

5124-07 0522 пик

482 484

5 1 4

реф ВИНТИ

7669-11X

B₂CH₃

1975

Isotani S.

curr. nos.

J. Mol Struct 1975,
28(1) 61-76 (eng)

(all FCH₃; III)

$CBrH_3$

Isotani S.

1975

$CBrD_3$

An. Acad. Bras. Cienc.,

cul. noei.

1975, 47 (3-4), 381-6.

(cul. $C^F H_3$; III)

CH_3Br

CH_2Br_2

(Фс)

масс-
спектры

и удар

(+2)

X 1976 №6

оттиск 3503

1975

Д 6 Б957. Масс-спектрометрическое изучение разложения метилбромида при электронном ударе и гетерогенном пиролизе. Karosi O., Riedel M., Roberto Sánchez G. Mass-spectrometric study of electron-impact and heterogeneous pyrolytic decomposition of methyl bromide. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1975, 85, № 4, 361—382 (англ.; рез. рус.)

На масс-спектрометре с ионизацией электронным ударом изучены масс-спектры CH_3Br (I) при различных энергиях электронов, зарегистрированы кривые эффективности ионизации I с образованием различных осколочных ионов и измерены их потенциалы появления. По этим данным вычислены энергии активации E распада молек. ионов CH_3Br^+ на $\text{CH}_3^+ + \text{Br}$ и на $\text{CH}_2^+ + \text{HBr}$, оказавшиеся равными —1 и 8 ккал/моль соотв. Для распада молек. ионов изучавшегося ранее CH_2Br_2 получено $E = -10$ и 11 ккал/моль соотв. для

(+3) в т. к

процессов $\text{CH}_2\text{Br}_2^+ \rightarrow \text{CH}_2\text{Br}^+ + \text{Br}^+$ и $\rightarrow \text{CHBr}^+ + \text{HBr}^+$. Изучали также термич. разложение паров I при давл. 10^{-2} или 10^{-6} мм на W — нити при $T = 700 - 1900^\circ \text{K}$ в реакторах двух типов, находящихся в ионном источнике масс-спектрометра. На основании т-рных зависимостей интенсивностей различных масс-спектральных линий найдено, что пиролиз начинается при $\sim 700^\circ \text{K}$ с образованием HBr , Br и CH_2 как основных первичных продуктов. Энергии активации распада I на $\text{CH}_3 + \text{Br}$ и $\text{CH}_2 + \text{HBr}$ равны 15 ± 3 и 8 ± 2 ккал/моль соотв., что указывает на каталитич. механизм процесса. Вычислены энергии диссоциации связей (ккал/моль): $\text{CH}_3 - \text{Br}$ 74 ± 4 ; $\text{CH}_2\text{Br} - \text{H}$ 118 ± 5 ; $\text{CH}_2\text{Br} - \text{Br}$ 65 ± 4 ; $\text{CHBr}_2 - \text{H}$ 111 ± 5 . Эти величины с точностью 10% согласуются с вычисленными по лит. данным. В.Е. Скурят

CH_3Br

1975

Magyar J. A.,

(c.u.n). Diss. Abst. Int. B,
1975, 35(6), 4097

(c.u. CH_3F ; III)

* 4 - 8322

1975

CH₃Br

Manne R. Wittel R.
Monarty B. S.

грозозн. "Mil. Phys." 1975
сметр. 29 N2, 485-500

Смет-орбит. взвешиват.

50129.9050

96615

02

1975

Ph, Ch, TC

 BrCH_3

45-8046

Müller A., Rai S.N.

Pseudo-exact force constants from cori-
ols coupling constants. "J. Mol.
Struct.", 1975, 24, N 1, 59-71

(англ.)

0291 пик

(см. CH_3F ; III)

261 263 2 0 3.

ВИНИТИ

1975

CH₃Br

17 Б1250. Изучение методом совпадений фотоэлектронов и фотоионов потенциалов ионизации и появления осколочных ионов бром- и йодметанов. Tsai Bilin P., Baer Tomas, Werner Arthur S., Lin Stephen F. A photoelectron-photoion coincidence study of the ionization and fragment appearance potentials of bromo- and iodomethanes. «J. Phys. Chem.», 1975, 79, № 6, 570—574 (англ.)

На установке, сочетающей квадрупольный или времяпролетный масс-спектрометр с электронным анализатором методом совпадений фотоэлектронов с нулевой кинетич. энергией и фотоионов измерены Пт ионизации (ПИ) ряда галогенметанов и Пт появления (ПТП) осколочных ионов в интервале энергий фотонов $E=9-14$ эв. Такие спектры совпадений позволяют измерять ПТП более точно по сравнению с интегральными кривыми эффективности фотоионизации ввиду более резких порогов соотв-щих кривых и исключения эффектов конкурирующих процессов диссоциации, индуцированной столкновениями, и образования ионных пар. Отмечены нек-рые особенности ионизации галогенметанов. Несмотря на то, что их 1-й ПИ обусловлен удалением несвязывающего электрона, молек. ион в

(7)

(75)

X

X 1975 N 17

ряде случаев (CCl_4 , CF_4) оказывается нестабильным, что связывается со снижением прочностей связей $\text{C}-\text{X}$ и $\text{C}-\text{H}$ с ростом степени галогенирования. Эффект может объясняться стабильностью плоского галогенированного метильного иона, обладающего заполненной электронной оболочкой. Др. особенность фрагментации хлорметановых ионов, образуемых фотоионизацией при $E < 13,5$ эв, состоит в отсутствии процесса элиминирования атома H , хотя для CH_3Cl эта р-ция энергетически более выгодна по сравнению с отщеплением Cl . Отщепление H не наблюдается и для CH_3Br и CH_3J . Эффект не связан с активац. барьером, т. к. согласно лит. данным при электронном ударе отщепление H из CH_3Cl^+ начинается при термодинамич. ПТП этого процесса. Получены след. значения первых ПИ (эв): CH_3Br $10,54 \pm 0,01$; CH_2Br_2 $10,52 \pm 0,05$; CHBr_3 $10,48 \pm 0,02$; CH_3J $9,533 \pm 0,01$; CH_2J_2 $9,46 \pm 0,02$; CHJ_3 $9,25 \pm 0,02$. Измерен также ряд ПТП осколочных ионов.

В. Е. Скурат

XIV-6305

1975

CH₃Br

131750k Photoelectron-photoion coincidence study of the ionization and fragment appearance potentials of bromo- and iodomethanes. Tsal, Bilin P.; Baer, Tomas; Werner, Arthur S.; Lin, Stephen F. (William R. Kenan, Jr. Lab. Chem., Univ. North Carolina, Chapel Hill, N. C.). *J. Phys. Chem.* 1975, 79(6), 570-4 (Eng). The ionization and fragment appearance potentials of CH₃Br, CH₂Br₂, CHBr₃, CH₃I, CH₂I₂, and CHI₃ were derived from an anal. of zero kinetic energy photoelectron-photoion coincidence spectra in the energy range 9-14 eV. Such coincidence spectra yield more precise appearance potentials than integral photoionization scans because of the inherently sharper onsets and the discrimination against competing processes such as ion-pair formation and collisionally induced dissocn.

(A.P.)

C.A. 1975. 82.120

(+5)



50314.6702

Ex-C, TC, Ph, Ch

96615

 CH_3Br

1975

3212

Whitmer John C., Lewis Brian D. Potential energy distributions and normal coordinates of methyl, methyl- d_3 and partially deuterated methyl chloride, bromide and iodide. "J. Mol. Struct.", 1975, 24, N 2, 317-324

(англ.)

0324 ПИК

(англ. CH_3Cl ; III)

297 299

316

ВИНИТИ

70318.9190

Ex-C, Ch, TC

485480

CH₃Br

1976

ET. 4941

Böhlig Heinz. Harmonische Kraft-
felder mehratomiger Moleküle. "Z.
Chem.", 1976, 16, N 11, 430-435
(HEM.)

0833 011%

791 792 8 21

ВИНИТИ

CH₃Bz

1976

(comp to
y.p. ed.)

Causley G.C.,
Clark J.B., Russell B.R.

Chem. Phys. Lett. 1976,
38, N3, 602-606.

(see CH₃Cl) III

CH_3Br

XIV-448

1976

3 Б240. Измерение сверхтонкой структуры метил-
) бромида по поглощению в молекулярном пучке. De-
maison Jean, Boucher Daniel, Burie Jean,
' Dubrulle Alain. Measurement of methyl bromide
hyperfine structure with a beam—absorption spectro-
meter. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 1, 141—143
(англ.)

(м.к.)

На спектрометре, регистрирующем поглощение в мо-
лек. пучке, исследована сверхтонкая структура вра-
щательного перехода $I=3, K=0 \rightarrow I=4, K=0 \rightarrow \text{CH}_3\text{Br}$ в
основном состоянии. Определены параметры квадрупольного взаимодействия брома и вращательные посто-
янные $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$.

В. М. Ковба

X. 1977 №3

CH₃Br

XIV-7418

1976

12 Д381. Измерение сверхтонкой структуры метилбромид с помощью спектрометра с молекулярным пучком. Demaison Jean, Boucher Daniel, Burie Jean, Dubrulle Alain Measurement of methyl bromide hyperfine structure with a beam-absorption spectrometer. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 1, 141—143 (англ.)

Исследована сверхтонкая структура вращательных переходов $J=3, K=0 \rightarrow J=4, K=0$ молекул CH₃⁷⁹Br и CH₃⁸¹Br в основном колебательном состоянии. С помощью теории возмущений рассчитано квадрупольное взаимодействие ядер Br. Спин-вращательное взаимодействие Br привело к сдвигу энергетич. уровней и изменению в частоте перехода $J, K=0, F \rightarrow J+1, K=0, F+1$: $\Delta\nu = C_N(F-J)$, где C_N — постоянная ядерного квадрупольного взаимодействия.

(м.н.)

от 1976 N 12

CH_3Br

№ 3-16348

1976

U 10 Б209. Вращательный анализ перпендикулярной полосы ν_6 CH_3Br с использованием лазерных линий испускания в длинноволновой инфракрасной области. Deroche Jean-Claude, Betrencourt-Stirpennann Claudine. Rotational analysis of CH_3Br ν_6 perpendicular band through far infra-red laser lines. «Mol. Phys.», 1976, 32, № 4, 921—930 (англ.)

м.н. Д.
На основании анализа лит. данных выполнено отнесение 35 лазерных линий испускания в далекой ИК-области, возникающих при накачке CH_3Br лазером на CO_2 . Для этого рассчитан синтетич. спектр полосы ν_6 (без учета возмущений), и проведено его сравнение со спектром лазера на CO_2 . Таким способом выделены колебательно-вращательные уровни, на к-рых при на-

2, 1977, N 10

качке создавалась инверсная заселенность. При отнесении учитывалась возможность возбуждения составных ($\nu_3 + \nu_6$ и $2\nu_6$) уровней, а также изотопный состав CH_3Br . В результате для каждой лазерной линии в далекой ИК-области определено колебательное состояние, вращательное квантовое число, изотопный состав, линия CO_2 -лазера, частота соответствующего колебательно-вращательного перехода и его отнесение. С использованием сделанного отнесения рассчитаны вращательные постоянные уровни $\nu_6=1$ для молекул $\text{CH}_3\text{Br}^{79}$ и $\text{CH}_3\text{Br}^{81}$.

Л. В. Серебрянников

CH₃Br

ЖУ-76348

1976

5 Д388. Анализ вращательной структуры перпендикулярной полосы ν_6 CH₃Br по лазерным линиям в далекой ИК-области. Deroche Jean-Claude, Betgen-court-Stirnemann Claudine. Rotational analysis of CH₃Br ν_6 perpendicular band through far infra-red laser lines. «Mol. Phys.», 1976, 32, № 4, 921—930 (англ.)

(Di)

Проведена теоретич. обработка результатов работы (РЖФиз, 1976, 7Ж25), в которой наблюдались 35 лазерных переходов в далекой ИК-области (5—40 см⁻¹) при накачке CH₃Br излучением CO₂-лазера. По измеренным в этой работе частотам лазерных переходов CH₃Br, а также расстройкам между линиями поглощения CH₃Br и линиями излучения CO₂-лазера проведено отнесение линий поглощения к лазерным линиям CH₃Br. Это позволило рассчитать полные наборы параметров для полосы ν_6 CH₃⁷⁹Br и CH₃⁸¹Br. Частоты чисто-колебательных переходов равны соответственно 954,866 и 954,804 см⁻¹. Библ. 23. Ю. М. Л.

ф. 1977. N5

CH_3Bz

1976

Publisch A.K. et al.

Indiane J. Pure Appl. Phys.
1976. 14(5), 356-9.

(cell. work.)

(all CH_3F) III

CH_3Br

эммука 4396

1976

Duncan J. L.

Косен.
уемфод.

J. Mol. Spectrosc

расмрн. 1976, 60 N1-3,

(с.п.)

225-38

● (см. BF_3 ; III)

CH_3Br

(ν_6)

фр 1976 № 6

6 Д787. Межмодовое колебательное пересечение CH_3Br . Earl B. L., Ronn A. M. Intermode vibrational crossing in CH_3Br . «Chem. Phys.», 1976, 12, № 1, 113—121 (англ.)

С помощью ИК-флуоресцентной методики исследовано перераспределение энергии между норм. колебаниями в CH_3Br . Колебание ν_6 молекул CH_3Br импульсно возбуждалось CO_2 -лазером. Константы скорости активации всех остальных норм. колебаний и константы скорости дезактивации всех колебаний, за исключением ν_3 , определены по результатам временных измерений интенсивности соответствующих полос спектра ИК-флуоресценции. Колебания ν_1 , ν_4 , ν_2 , ν_5 заселяются в результате ~ 60 газокинетич. столкновений, а колебание ν_3 в результате ~ 170 столкновений. Константы скорости дезактивации всех колебаний приблизительно равны и соответствуют ~ 335 столкновениям. Обсуждены возможные механизмы процессов. Результаты сравнены с полученными для CH_3F и CH_3Cl . Рассмотрение процессов с точки зрения соответствующих теорий колебательной релаксации, хотя и не дает количеств. соответствия, позволяет качественно объяснить наблюдаемые явления. Библ. 17.

1976

60701.8376
Ch, Ph, TC, MGU

41125

1976

CH_3Br

ХЗ-13627

Felps S., Hochmann P., Brint P.,
McGlynn S.P.

Molecular Rydberg transitions. The lowest-energy Rydberg transitions of s-type in CH_3X and CD_3S , $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$, and I .

"J. Mol. Spectrosc.", 1976, 50, N 3, (см CH_3Cl , 10)
355-379 (англ.) 0654 ЛМК

625 632

6 4 6

ВИНИТИ

CH_3Br

1976

1 Д469. Изучение вращательной релаксации в CH_3Br методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса. Herlemont F., Thibault J., Lemaire J. Study of rotational relaxation in CH_3Br by infrared-microwave double resonance. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 3, 466—469 (англ.)

вращат
релаксация

С использованием CO_2 -лазера выполнен эксперимент по методу двойного ИК—МВ-резонанса в газе CH_3Br . По изменению интенсивности микроволн. линий поглощения возбужденного колебательного состояния ν_6 при лазерной накачке установлены правила отбора для столкновительных вращательных переходов в возбужденном колебательном состоянии. Показано, что для таких переходов выполняются правила отбора $\Delta J = \pm 1$ и $\Delta |K-l| = 3p$ ($p=0, 1, 2, \dots$).

М. Р. Алиев

Ф 1974 N1

CH_3Br

1976

J 2 Б254. Исследование вращательной релаксации в CH_3Br методом инфракрасного-микроволнового двойного резонанса. Herlemont F., Thibault J., Lemaire J. Study of rotational relaxation in CH_3Br by infrared—microwave double resonance. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 3, 466—469 (англ.)

исследов.
вращат.
релаксация

Методом ИК—МВ двойного резонанса исследована вращательная релаксация для K структуры $J=3-4$ переходов $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$ в возбужденных колебательных состояниях. Для наблюдения двойного резонанса использовано три совпадения между излучением CO_2 -лазера и линиями ИК-поглощения CH_3Br , а именно: $P(10)$, $R(14)$ и $P(38)$ полос CO_2 -лазера с ν_6 перпендикулярной полосой CH_3Br . МВ-частоту свипирова-

X 1977 N2

ли в интервале от 75,850 до 76,650 Ггц. Найдено изменение интенсивности многочисленных вращательных переходов при включении ИК-накачки. Выполнена идентификация переходов, на к-рых наблюден сигнал двойного резонанса. Правила отбора для вращательных переходов двойного резонанса: $\Delta K=0$, $\Delta l=0$, $\Delta J=\pm 1$ и $\Delta K=3p$, хорошо согласуются с правилами отбора для переходов, индуцированных соударениями. Используемый метод может быть применен при работе с субмиллиметровым лазером на CH_3Br для измерения отдельных ИК-линий поглощения, их идентификации и отнесения.

С. Н. Мурзин

CH₃Br

Ji

1 Б262. Измерение центра полосы перпендикулярно-
го колебания ν_6 бромистого метила. Herlemont
François, Lemaire Jean. Détermination du cent-
re de la bande perpendiculaire ν_6 du CH₃Br. «С. г. Acad.
sci.», 1976, 282, № 22, B511—B513 (франц.; рез. англ.)

На основании совпадения частоты линии испускания
 $P_{10}(\nu_3 - \nu_1) = 952,88085 \text{ см}^{-1}$ газ. лазера CO₂ и частоты
перехода $^R P_0(7)$ колебательно-вращательной перпенди-
кулярной полосы ν_6 CH₃Br⁸¹ и с использованием лит.
данных по МВ-спектрам CH₃Br определено поглощение
центра полосы $\nu_6(\text{CH}_3\text{Br}^{81}) = 954,76 \text{ см}^{-1}$. Для полосы
 ν_6 изотопного аналога CH₃Br⁷⁹ центр находится при
954,825 см⁻¹. Б. В. Рассадин

2. 1977 N 1

CH_3Br

1976

(9i)
85:114078s Measurement of the band center of the ν_6 perpendicular band of methyl bromide. Herlemont, Francois; Lemaire, Jean (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille I, Villeneuve d'Ascq, Fr.). *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., Ser. B* 1976, 282(22), 511-13 (Fr). The presence of a coincidence in frequency between the P_{10} emission band ($\nu_3 - \nu_1$) of the CO_2 laser and the $4P_6$ (7) transition of the ν_6 band of Me^{81}Br permits, with the aid of microwave results, the precise detn. of the center of this perpendicular band. The method utilizes a laser emission in order to calibrate the ir spectrum and the rotation consts. in order to recalc. the band center.

C.A. 1976, 85 N16

CH_3Br

* 68-14197

1976

1 Д463. Определение знака постоянной l -удвоения методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса. Herlemont F., Thibault J., Lemaire J. Determination of the sign of an l -type doubling constant by infrared-microwave double resonance. «J Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 1, 138—140 (англ.)

(м.к.)
Методом двойного ИК—МВ-резонанса с использованием $P(10)$ -линии CO_2 -лазера найден знак q_l -постоянной l -удвоения для колебательного состояния с $\nu_6=1$ молекулы CH_3Br : знак q_l определяется по относит. интенсивности квадрупольных компонентов подуровней A_1 , A_2 l -удвоения уровней с $|K-l|=0$. Показано, что $q_6(\text{CH}_3\text{Br}) > 0$ (по ИК-спектру ранее было найдено: $|q_6| = 8,91 \pm 0,03$ Мгц). М. Р. Алиев

9 1977 №1

CH_3Br

X-43-14/97

1976

1 Б270. Определение знака постоянной l -удвоения
методом инфракрасномикроволнового двойного резонанса. Herlemont F., Thibault J., Lemaire J.
Determination of the sign of an l -type doubling constant
by infrared-microwave double resonance. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 1, 138—140 (англ.)

определение
 l -удвоения

Методом двойного ИК-МВ-резонанса с использованием $P(10)$ -линии CO_2 -лазера для накачки найден знак q_l -постоянной l -удвоения для колебательного состояния с $\nu_6=1$ молекулы CH_3Br : знак q_l определяется по отношению интенсивности квадрупольных компонентов подуровней A_1 , A_2 l -удвоения уровней с $|K_l|=0$. Показано, что $q_6(\text{CH}_3\text{Br}) > 0$ (по ИК-спектру ранее было найдено: $|q_6| = 8,91 \pm 0,03$ Мгц).

М. Р. Алиев

И. 1977 №1

CH₃Br

XIV - 7/10/9

1976

Isotani S., et al.

J. Chim. phys. et plus -
- Chim. Biol. 1976, 73,
N^o 5, 535-9.

(cud. uocm.)

(all CH₃F) III

1976

 CHBr_3
 CBr_4

(У; А.Р)

 (+1) ☒

 x 1976
 N 22

22 Б82. Масс-спектрометрическое определение термохимических характеристик CHBr_3 и CBr_4 в процессе распада при электронном ударе и в условиях гетерогенного пиролиза. Karosi Olivér, Riedel Miklós, Balthazárné Vass Katalin, Sánchez G. Roberto, Lelik László. CHBr_3 és CBr_4 termokémiai adatainak meghatározása tömegspektrometriás módszerrel az elektronütközéses és heterogén pirolitikus bomlás tanulmányozásával. «Magy. kém. folyóirat», 1976, 82, № 4, 155—166 (венг.; рез. англ.)

Изучены процессы распада бромметанов при электронном ударе и в условиях гетерог. пиролиза на поверхности вольфрамового катода. Определены потенциалы ионизации и появления продуктов пиролиза CHBr_3 и CBr_4 . Энергия активации процессов пиролиза бромметанов понижается в ряду $\text{CH}_3\text{Br} \rightarrow \text{CH}_2\text{Br}_2 \rightarrow \text{CHBr}_3 \rightarrow \text{CBr}_4$. В таком же порядке уменьшается энергия связей $\text{C}-\text{H}$ и $\text{C}-\text{Br}$, рассчитанная из экспериментальных результатов. Распад бромметанов на вольфрамовой поверхности происходит по радикальному механизму.

Резюме

70113-3464

22009

1976

Ch. TC

 CH_3Br (AP; Y)

*4-16324

Kaposi O., Riedel M., Vass-Balthazar
K., Sánchez G.R., Lalik L. Mass-spectrometric
determination of thermochemical data

of CH_3Br and CH_3I by electron impact and heterogeneous catalytic
decompositions. "Acta chim. Acad. sci. hung." 1976, 89, N 3, 221-244 (Hung., 323, 370, 737-740).

737 740

70290

SMIENKIN.

СМЗ ВГ

(7:1)

м. 17.

СМЗ СН

Москвинко М.В. и др. 1976.

III симпозиум по молекуляр.
спектроскопии вращательного и
сверхвысокого разрешения.

Новосибирск 1976. стр 202-205.

Изменение
спектров молекул. в основном и возбужденных
состояниях. колебательных состояниях.

CH₃Br

XIV-7711 1976.

Nieto J. L., et al

An. quim. Real Soc.
esp. fis. y quim. 1976,
72, N^o 4, 339-44,

(~~porcelana~~
sil. uveu)

(sil. CH₃F) III

4-15588; XIV-7991 1976

J, Vi (CH₃Br, CBr₂CH₂, CHBrCHBr)

Schander J, Russell B.R.

J. Amer. Chem. Soc., 1976, 98, N22,
6900-6904

10

CH_3Br

Ж-У-16835

1976

6 Д485. Вращательный спектр бромистого метила в основном состоянии и состоянии $v_3=1$. Sergeant-Rozey Michèle, Pesenti Jacques. Spectre de rotation pure du bromure de méthyle dans les niveaux fondamental et $v_3=1$. «C. r. Acad. sci.», 1976, 283, № 13, В373—В375 (франц.; рез. англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры газообразного бромистого метила в области $20\text{--}30\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,05\text{--}0,025\text{ см}^{-1}$ при давл. $1\text{--}6\text{ мм рт. ст.}$ в слое $2,5\text{ м}$. Приведены спектры и частоты наблюдаемых вращательных линий, определенные с точностью $\sim 5 \cdot 10^{-3}\text{ см}^{-1}$. Эти линии отнесены к вращательным переходам молекул $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$ в основном колебательном состоянии и состоянии $v_3=1$, заселенность которого при комнатной т-ре 6% от основного. Рассчитанные по литературным данным частоты вращательных линий молекул в состоянии $v_3=1$ хорошо согласуются с опытными данными.

М. Тонков

М.И.
ф. 1977 № 6

CH_3Br

XU-15835

1976

12 Б231. Чисто вращательный спектр бромистого метила в основном и $v_3=1$ состояниях. Sergeant-Rozey Michele, Pesenti Jacques. Spectre de rotation pure du bromure de méthyle dans les niveaux fondamental et $v_3=1$. «C. r. Acad. sci.», 1976, 283, № 13, B373—B375 (франц., рез. англ.)

На ИК-спектрометре с фурье-преобразованием измерен спектр бромистого метила в области волновых чисел от 10 до 40 см^{-1} . Наряду с чисто вращательным спектром в основном колебательном состоянии наблюдались вращательные переходы с J от 31 до 45 в возбужденном колебательном состоянии $v_3=1$ для двух изотопич. образцов: $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$ и $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$. С. Н. Мурзин

(м.н.)

X. 1977. №12

70311.4291

Ph, TC, MGU

CBZH₃ 34457 u. n.

* u - 17356

1946

Thiruganasambandam P., Karunani-
dhi N. Molecular constants of some axia-
lly symmetric XYZ₃ molecules. "Indian
J. Phys.", 1976, 50, N 5, 527-543
(англ.)

0830 тик

781 781

ВИНИТИ

CH_3Be^+

ommuc 6281

1977

Chan F. T. et al.

электрон.
спектр,
структура

Phys. Scr. 1977, 16(5-6), 258-67
(Eng)

ср. $\text{CH}_3\text{Cl}^+ - \text{III}$

1977

 CH_3Br

оттиски 5329

12 Д125. Неэмпирические расчеты молекулы CH_3Br методом МО ССП. Del Conde P. Guillermo, Bauschlicher Charles W., Jr. Ab initio SCF MO calculations on the CH_3Br molecule. «Theor. chim. acta», 1977, 45, № 2, 121—126 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в двухэкспоненц. базисе сгруппированных гауссовских ф-ций $8s6p2d/4s2p/2s$ для атомов Br, C и H, соответственно, рассчитана молекула CH_3Br . Проведена оптимизация геометрии по длине связи C—Br и углам HCH при эксперим. значениях длины связи C—H. Оптимальные длины связей и валентные углы найдены равными 3,762 ат. ед. и $111,24^\circ$ соответственно (эксперим. значения 3,6638 и $111,63^\circ$). Для оптимальной геометрии рассчитаны валентные и основные по-

У; геометр.

Р. 1977 N12.

тенциалы ионизации как разности полных энергий молекулы и соответствующих ионов, а также по теореме Купманса. Рассчитаны дипольный момент, диамагн. восприимчивость, анизотропия диамагн. восприимчивости, z -компонента электр. поля, квадрупольный момент и z^2 -компонента градиента поля. Проведен анализ заселенностей по Малликену. Найдено, что шесть верхних ионизационных потенциалов, рассчитанные обоими способами согласуются между собой. В остальных случаях потенциалы ионизации оцененные по теореме Купманса на 10—15 эв. больше. Вычисленное значение дипольного момента 2,43 ат. ед. Дебая на 34% больше экспериментального.

В. А. Корсунов

CH_3Br

М. П.
геометрия

И. 1974
N 24

24 БЗІ. Неэмпирический расчет методом МО ССГ молекулы CH_3Br . Del Conde P. Guillermo, Bаgus Paul S., Bauschlicher Charles W., Jr Ab initio SCF MO calculations on the CH_3Br molecule «Theor. chim. acta», 1977, 45, № 2, 121—126 (англ.).
Методом МО ЛКАО ССП в базисе ГФ (H, 4s; C, 9s5p; Br, 15s12p5d), сгруппированном в [H, 2s; C, 4s2p, Br, 8s6p2d], выполнен расчет электронного и геометр. строения молекулы CH_3Br . Вычисленные значения длины связи C—Br, угла $\angle\text{HCH}$ и частоты вал. кол. C—Br: 3,762 ат. ед., $111,24^\circ$, и 602 см^{-1} , согласуются с эксперим. данными: 3,664 ат. ед., $111,63^\circ$ и 611 см^{-1} . Значение дипольного момента, 2,43 D, превышает эксперим. на 34%. Заряды на атомах C и H близки к зарядам в CH_4 , а атом Br остается почти нейтральным ($-0,04 e$). Вычисленные значения трех первых потенциалов ионизации (ПИ) согласуются с эксперим. данными, значение 4-го ПИ (23,71 эв), отвечающего удалению электрона с МО $9a_1$, отличается от эксперим. (15,85). Сделан вывод, что эксперим. отнесение ошибочно, и указанное значение отвечает удалению электрона с колебательно-возбужденного уровня или связано с расщеплением конфигурации $5e^3$ иона, обусловленным эффектом Яна-Теллера. А. Клягина

1974
5325
Омиче

CH_3Br

1977

1 Д465. Спектр высокого разрешения метилбромида в миллиметровом диапазоне. Тензоры спин-вращательного взаимодействия и ядерного экранирования для брома. Demaison J., Dubrulle A., Boucher D., Burie J. High resolution millimeter-wave spectrum of methyl bromide. Spin-rotation and nuclear shielding tensors of bromine. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 1, 254—257 (англ.)

На микроволн. спектрометре с молекулярным пучком в диапазоне 75—230 ГГц измерены вращательные спектры молекул $\text{CH}_3^{79,81}\text{Br}$ в основном колебательном состоянии. Идентифицирована сверхтонкая структура линий вращательных переходов с $J \leq 11$ и $K \leq 4$. Анализ спектров выполнен с учетом кватерного и секстичного центробежного искажения и квадрупольного, спин-вращательного и спин-спинового взаимодействий и определены значения вращательной и центробежных постоянных и параметров этих взаимодействий. По значениям спин-вращательных констант вычислены параметры ядерного экранирования.

М. Р. Алиев

М. П.

Ф. 1978 № 1

CH_3Br

1977

mm.-cm
M.N.

87: 93018w High resolution millimeter-wave spectrum of methyl bromide. Spin-rotation and nuclear shielding tensors of bromine. Demaison, J.; Dubrulle, A.; Boucher, D.; Burie, J. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille 1, Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(1), 254-7 (Eng). The ground state rotational spectrum of CH_3Br was obsd. using a mol. beam-absorption spectrometer. The B rotational const. and the quartic and sextic centrifugal distortion consts. are detd. with great accuracy. From the hyperfine splitting the quadrupole coupling const. and the spin-rotation consts. of the 2 isotopic species ^{79}Br and ^{81}Br can also be deduced. These data are used to det. the elements of the Br nuclear magnetic shielding tensor.

C.A. 1977. 87 n 12

CH₃Br

оттиски 5046

1977

8 Д520. Изучение вращательного спектра CH₃⁸¹Br в основном колебательном состоянии в микроволновой области. Dutelage Brigitte, Boucher Daniel, Burie Jean, Demaison Jean, Dubrulle Alain. Etude en ondes millimétriques du spectre de rotation de bromure de méthyle CH₃ ⁸¹Br dans l'état fondamental de vibration. «C. r. Acad. sci.», 1977, 284, № 11, B213—B215 (франц.; рез. англ.)

В области 18—305 ГГц исследован вращательный спектр молекулы CH₃⁸¹Br в основном колебательном состоянии. Определены молекулярные постоянные: $B = 9531827 \pm 1$ кгц; $D_g = 9,780 \pm 0,007$ и $D_{JK} = 127,83 \pm 0,02$; $H_J = 0,04 \pm 0,01$, $H_{JK} = 0,12 \pm 0,05$ и $H_{KJ} = 5,9 \pm 0,1$ гц; $eqQ = 482,1 \pm 0,4$ Мгц.

м.к.

ф. 1977. № 8

8858-111-264

CH_3Br

17 Б287. Изучение вращательного спектра $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$ в основном колебательном состоянии в миллиметровой области. Dutelage Brigitte, Boucher Daniel, Burie Jean, Demaison Jean, Dubrulle Alain. Etude en ondes millimétriques du spectre de rotation de bromure de méthyle $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$ dans l'état fondamental de vibration. «C. r. Acad. sci.», 1977, 284, № 11, B213—B215 (франц.; рез. англ.)

В области 18—305 Гц измерен вращательный спектр $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$ в основном колебательном состоянии. Получены след. вращательные молек. постоянные: $B=9\,531\,827 \pm 1$ кгц, $D_I=9,780 \pm 0,007$ кгц, $D_{IK}=127,83 \pm 0,02$ кгц, $H_I=0,04 \pm 0,01$ гц, $H_{JK}=0,12 \pm 0,05$ гц, $H_{KY}=5,9 \pm 0,1$ гц, $eqQ=482,1 \pm 0,4$ мгц. В. М. Ковба

М.И.

РФ-ХИВ-8588

Х. 1977 № 17

1977

Витмен 5046

CH₃Br

omnueu 5046
BP- XIV-8588

1977

2
MIN .
180065g Study in the millimeter range of the rotational
spectrum of methyl bromide (bromine-81) in the ground
state of vibration. Duterage, Brigitte; Boucher, Daniel; Burie,
Jean; Demaison, Jean; Dubrulle, Alain (Lab. Spectrosc.
Molécule, Univ. Sci. Tech., Villeneuve-d'Ascq, Fr.). C. R.
Acad. Sciences Acad. Sci., Ser. B 1977, 284(11), 213-15 (Fr).
The rotational spectrum of Me⁸¹Br in its vibrational ground state
was measured between 18-305 GHz. Its anal. allowed the detn.
of the const. B, D_J, D_{JK}, H_J, H_{JH}, H_{KJ} and eq Q.

C.A. 1977. 86 N24

CH₃Br

ommuch 5695

1977

V.V.

cell. no. 5.

Kaila R., Dixit L., Gupta P.L.
Indian J. Pure and Appl. Phys.,
1977, 15, 238-41.

CH_3Br

number 6307

1977

Karlsson L. et al.

Phys. scr., 1977, 16, 225-34

Vibrational and vibronic
structure in the ...

or. CH_3F III

CH₃Br

вращат.
спектр

и.п.

1947

13 Б259. Вращательный спектр метилбромида в возбужденных колебательных состояниях ν_3 и $2\nu_3$. Москвено М. В., Дюбко С. Ф. «Оптика и спектроскопия», 1977, 43, № 5, 850—852

Приведены результаты исследования вращательного спектра поглощения молекул метилбромида $^{12}\text{CH}_3^{81}\text{Br}$, $^{12}\text{CH}_3^{81}\text{Br}$, $^{12}\text{CD}_3^{79}\text{Br}$ и $^{12}\text{CD}_3^{81}\text{Br}$ в возбужденных колебательных состояниях ν_3 и $2\nu_3$. Впервые полученные константы B_v , D_j , D_{jk} , H_{jjj} , H_{jjk} и H_{jjk} позволяют рассчитывать спектры указанных модификаций метилбромида до частот порядка 760 ГГц с погрешностью не более $\pm 0,2$ МГц.

Резюме

ж. 1948, N 13

1977

CH_3Br

CD_3Br

М. П.

8 Д343. Квадрупольные спектры молекул высокого разрешения. Осипов Б. Д. «Достижения спектроскопии. 18-й Съезд по спектроскопии, Горький, 1977, Ч. 1». М., 1978, 182—193

На основе принципа модулированного двойного резонанса построен микроволн. спектрометр с разрешением 1 Кгц для получения спектров переходов между компонентами квадрупольной сверхтонкой структуры вращательных уровней молекул: накачка ведется мощным клистроном в диапазоне 30—100 Ггц, а сигнальные спектры наблюдаются в диапазоне 100—500 Мгц. На этом спектрометре измерены квадрупольные спектры молекул CH_3J , CH_3Br , CD_3J и CD_3Br . Определены значения постоянных квадрупольной связи eqQ и коэф. вращательной зависимости eqQ . М. Р. Алиев

□



Ф. 1979, № 8

CH_3Br

Shimoda Koichi

1977

"3. Int. Tag., 28.3.-1.4.", 1977,
"Dresden. Laser und ihre
Anwend.", S. 1., S. d. 4-6.

микр.
спектр.



III
(ver. NH_3)

CH_3Br

ommuch 5889

1977

20.000g,

CU.I. NOCT

Skaron S.A., et al.
J. Amer. Chem. Soc.,
1977, 99, 5253-5261.

70531.3737
Ch, Ph, TC, MGU

U.17. *Росстеп?*
CH₃Br *соещ.*

1977
*18-18338

Spence David.

Prediction of low energy molecular Rydberg
states from Feshbach resonance spectra.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 2, 669-674

(англ.) (см. *CH₃Cl*; III)
0883 пик

833 842 874

ВИНИТИ

CH_3Br

оттис 5623

1977

интенсив-
ность

2 Д359. Абсолютные значения интенсивности ИК-поглощения бромистого метила и всех его дейтеропроизводных. Van Straten A. J., Smit W. M. A. Absolute infrared intensities of methyl bromide and all deuterium derivatives. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 3, 970—982 (англ.)

Получены ИК-спектры газообразного CH_3Br и всех его дейтеропроизводных в области основных полос. Вращательная структура колебательных полос размыта добавлением 37 атм. азота. Проведена выполнимость закона Бэра и определены абс. интегр. интенсивности полос, причем перекрывающиеся полосы разделены графич. методом. При отсутствии перекрывания полос погрешность определения значений интенсивности по-

Ф. 1978 № 2

лос составляет 1—3%. Определены производные дипольного момента молекул по нормальным координатам. Рассчитаны производные дипольного момента по координатам симметрии, выбор знаков уточнен по результатам расчета этих величин методом ППДП. Определены параметры эффективных зарядов связи и их перестройки. Вычислены электроопт. параметры молекулы и элементы полярного тензора. Справедливость полученных параметров проверена расчетом интенсивности несимметричных изотопных производных по результатам, полученным для CH_3Br и CD_3Br . Библи. 25.

М. Тонков

CH_3Br

1977

4 Д164. Самоуширение и сдвиг линий вращательных переходов $J=0 \rightarrow 1$ и $J=1 \rightarrow 2$ в CH_3Br и CH_3J . Wensink W. A., Dijkerman H. A. Self-broadening and self-shifting of $J=0 \rightarrow 1$ and $J=1 \rightarrow 2$ rotational transitions of CH_3Br and CH_3J . «J. Phys. Atom and Mol. Phys.». 1977. B10. № 17. L663—L667 (англ.)

Самоуширение

Ф; N4, 1978

В температурном интервале $T = 215 \div 300^\circ \text{K}$ методом поглощения измерены ширины C_w и сдвиг C_s линий вращательных переходов $J = 0 \rightarrow 1$ и $J = 1 \rightarrow 2$ молекул $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$, $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$, $\text{CH}_3^{127}\text{I}$ в собств. газе. Найдено, что для перехода $0 \rightarrow 1$ при 300°K величины C_w и C_s (выраженные в Мгц·мм рт. ст.) соответственно равны 17,17 и 0,85 (для $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$); 17,08 и 0,86 (для $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$), 13,98 и 0,7 (для $\text{CH}_3^{127}\text{I}$). С ростом T параметры C_w и C_s уменьшаются по закону $C_w \sim (300/T)^\beta$, $C_s \sim (300/T)^\alpha$, где α и β лежат в пределах: $\alpha \approx 1,85 \div 2,32$; $\beta \approx 0,85 \div 0,97$.

Б. Ф. Горднец

1977

CH₃BrCH₃Iсамоушир
самосдвиг

(41) ☒

12 Б232. Самоуширение и самосдвиг $J=0 \rightarrow 1$ и $J=1 \rightarrow 2$ вращательных переходов CH₃Br и CH₃I. Wen-sink W. A., Dijkerman H. A. Self-broadening and self-shifting of $J=0 \rightarrow 1$ and $J=1 \rightarrow 2$ rotational transitions of CH₃Br and CH₃I. «J. Phys. Atom and Mol. Phys.», 1977, В10, № 17, (англ.)

Экспериментально измерены сдвиги и уширения линий вращательных переходов: CH₃⁷⁹Br, $J=0 \rightarrow 1$, $F=3/2 \rightarrow 5/2$; CH₃⁸¹Br, $J=0 \rightarrow 1$, $F=3/2 \rightarrow 5/2$; CH₃⁸¹Br, $J=1 \rightarrow 2$, $K=1$, $J=1/2 \rightarrow 7/2$; CH₃¹²⁷I, $J=0 \rightarrow 1$, $F=5/2 \rightarrow 7/2$; CH₃¹²⁷I, $J=1 \rightarrow 2$, $K=1$, $F=3/2 \rightarrow 1/2$, вызванные столкновениями молекул. Определены зависимости параметров уширения и сдвига линий от температуры. Отмечена сильная зависимость параметра сдвига линии от квантовых чисел J, J' для молекул типа симметричного волчка.

Ю. Л. Малинkevич

2, 1978, N12