

2.1981.N16

1980
16 Б265. Конформационный анализ газообразного 3-бромпропена по данным низкочастотных спектров комбинационного рассеяния. Durig J. R., Jaillia и M. R. Conformational analysis of gaseous 3-bromopropene from low-frequency Raman data. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 26, 3543—3547 (англ.)

Исследовано заторможенное вращательное движение в молекуле $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{Br}$ (I) по спектрам КР в газовой и жидк. фазах при различных т-рах. Найдено, что при т-ре окружающей среды I существует в двух конформерах, причем гош-конформер более стабилен и содержание его составляет ~90%. В спектре КР газа полоса торсионная мода гош-конформера наблюдается при 99 см^{-1} с четырьмя сопутствующими «горячими» спутниками, а внутреннее вращение цис-изомера наблюдается при 61 см^{-1} . Найдены след. значения для постоянных потенциала внутреннего вращения: $V_1 = 292 \pm 30$, $V_2 = -581 \pm 22$, $V_3 = 577 \pm 17$, $V_4 = 73 \pm 14$, $V_6 = -69 \pm 7\text{ см}^{-1}$. Из них установлена разность эн-тальпии двух конформеров, к-рая составляет величину 272 см^{-1} ($0,777\text{ ккал/моль}$). Из анализа относит. ин-

тенсивностей полос КР при 457 (цис) и 392 см^{-1} (гош)
в спектре жидкости как функции т-ры найдена раз-
ность энтальпии, к-рая составляет 320 см^{-1} .
(0,915 ккал/моль) и согласуется с величиной получен-
ной для пара.

В. М. Михайлов



$H-C \equiv C-C \equiv C-Br$

$C-H-Br$
соедин.

2.

В

Ф. 1980. № 7

7 Д365. Системы полос $A-X$ ионов $H\{C \equiv C\}_2X^+$ (${}^2\Pi \rightarrow {}^2\Pi$) и $CH_3\{C \equiv C\}_nX^+$ (${}^2E \rightarrow {}^2E$), где $n=1,2$; $X=Cl, Br$. $\tilde{A} \rightarrow \tilde{X}$ band systems of $H\{C \equiv C\}_2X^+$ (${}^2\Pi \rightarrow {}^2\Pi$), and of $CH_3\{C \equiv C\}_nX^+$ (${}^2E \rightarrow {}^2E$) $n=1,2$ with $X=Cl, Br$. Maier J. P., Marthaler O., Klosser-Jensen E. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1980, 18, № 3, 251—265 (англ.).
В области $14\,000-24\,000\text{ см}^{-1}$ получены спектры испускания газообразных катионов $H\{C \equiv C\}_2X^+$ и $CH_3\{C \equiv C\}_nX^+$. Образование возбужденных катионов осуществлялось под действием пучка электронов с энергией ~ 30 эв. Давление паров исходных в-в не превышало 10^{-4} мм рт. ст. Отождествление полос в спектрах испускания выполнено на основе анализа соответствующих HeI- и NeI-фотоэлектронных спектров, снятых при высоком энергетич. разрешении. Отмечено хорошее согласие основных колебательных частот ионов в состояниях $\tilde{A}$ и $\tilde{X}$, полученных обоими методами. Определены времена жизни ионов на нижних колебательных уровнях состояний $\tilde{A}$ всех исследованных ионов. Обсуждены каналы их релаксации. Библи. 23. М. Т.

1980

уруба

C_3H_7Bz

1981

Felps W.S., et al.

J. Chem. Phys., 1981,
74, N 9, 4832-4838.

Предсер.
переходы.

(сер. C_2H_5Bz ; III)

1981

С-Н-Br - связь

11 Д129. Молекулярная механика органических галогенидов. Ч. IV. Монобромиды и негеминальные дибромиды. Molecular mechanics of organic halides. Part. IV. Monobromides and non-geminal dibromides. Meyer A. Y., Ohmichi N. «J. Mol. Struct.», 1981, 73, 145—157 (англ.)

Метод молекулярного силового поля. (Wertz P. H., Allinger N. L. «Tetrahedron», 1974, 30, 1579) применен для расчета молекулярных геометрий, дипольных моментов и барьеров внутреннего вращения для 34 молекул органич. бромидов и негеминальных дибромидов (как циклических, так и нециклических). Рассмотрены вопросы, касающиеся границ изменения связей C—Br и двугранных углов, величины сил притяжения или отталкивания между несвязанными (валентной связью) фрагментами молекулы, конформационные равновесные состояния в несимметричных 1,4-дисзамещенных циклогексанах и т. д. Ч. III см. Meyer A. Y. «J. Comput. Chem.», 1980, 1, 111.

А. Обухов

геомет,
μ, C₆,
кв. мех.
расчет

ф. 1981, 18, № 11.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$

1981

4 Д505. Микроволновый спектр гошизомера *N*-пропилбромид. Microwave spectrum of gauche normal propyl bromide. Niide Yuzuru, Ohkoshi Ichiro, Takano Mitsuru. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 89, № 2, 387—396 (англ.)

В диапазоне 10—30 ГГц исследованы микроволн. спектры гошизомеров молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{X}$ с $\text{X} = {}^{79}\text{Br}$ и ${}^{81}\text{Br}$. Идентифицирована квадрупольная сверхтонкая структура линий вращательных переходов с $J \leq 15$ в основном колебательном состоянии и в первых двух возбужденных состояниях крутильного колебания вокруг связи $\text{C}-\text{C}$. Определены значения вращательных постоянных и постоянных квадрупольной связи ядер брома. По относит. интенсивности линий основного и возбужденных состояний оценены энергии первых двух возбужденных состояний крутильного колебания (127 и 211 cm^{-1} соответственно). М. Р. Алеев

М. П., Li

ф. 1982, 18, № 4.



1981

5 Б1151. Квантовохимическое исследование электрофильного присоединения. Часть IV. Реакция брома с этиленом. Poirier Raymond A., Mezey Paul G., Yates Keith, Csizmadia Imre G. Quantum chemical studies on electrophilic addition. Part IV. Reaction of bromine with ethylene. «J. Mol. Struct.», 1981, 85, № 1—2 («Teochem», 1981, 2, № 1—2), 153—158 (англ.)

С помощью неэмпирич. квантовохим. расчетов проведено моделирование процесса электрофильного присоединения брома к этилену. Рассчитаны геометр. и электронная структуры циклич. промежут. продукта присоединения Br^+ к этилену и линейного бромониевого иона $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}^+$. Показано, что циклич. структура на 30 ккал/моль (расчет в базисе STO—3G) или на 15 ккал/моль (расчет в расширенном базисе) более устойчива. Приведены данные по изменению электронной энергии системы вдоль координаты р-ции. Образование промежут. продукта циклич. структуры, как показывают расчеты пути р-ции, происходит в результате внутримолек. трансформации бромониевого иона за счет вращения Br и группы CH_2 вокруг связи C—C.

Р. П. Тигер

геометр,
структура

X.1982, 19, N5

C₆H₅Br

[Ommuck 14108]

1982

Niessen W., Asbrink L.

Bieri G.,

фотодетект.

спектр.

J. Electron. Spectrosc.
and Relat Phenom

● 1982, 26, N2,

173-201

C.A. 1978, 89, N26.



[Dmuck 13947]

1981

Scharfberg P., Margittai
Y.

МОН.СМ.П.П.Т., Institut für Wirkstoffor-
neopem. pac- Schung der Akademie der
rem. Wissenschaften der DDR,
1136, Berlin-Friedrich-
sfelde.

C_3H_5Br

1982

1) 18 Б88. Молекулярная структура и конформационное строение 3-бромпропена, определенные методом газовой электронографии. Schei Helene, Shen Q u a n g. The molecular structure and conformational composition of 3-bromopropene as determined by gas-phase electron diffraction. «J. Mol. Struct.», 1982, 81, № 3—4, 269—276 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена молекула

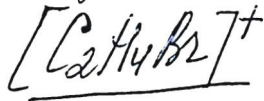
геометрия,
структура

C_3H_5Br при t -рах 50 и 150° С. Найдены следующие значения межъядерных расстояний (А) и валентных углов: C—H 1,078(15), 1,08(2), C=C 1,335(7), 1,340(7), C—C 1,485(8), 1,502(9), C—Br 1,961(6), 1,969(6), $\angle C=C=C$ 126,0(2,6), 125,0(3,5), CCBr 111,5(,08), 110,4(1,2), $\angle H-C=C$ 122,122, $\angle HCC$ 109,5 и 109,5 при 50 и 150° С соотв. При обеих t -рах присутствует смесь син- и гош-изомеров, причем гош-форма составляет 86 и 75% при 50 и 150° соотв. Торсионный угол гош-формы 117° (5). Т. В. Тимофеева

х. 1982, 19, N 18.

Соединение Вг

1983



13 Б1009. Основные состояния молекул. 64. Расчеты модифицированным методом пренебрежения дифференциальным перекрыванием (МПДП) соединений, содержащих бром. Ground states of molecules. 64. MNDO calculations for compounds containing bromine. Dewar Michael J. S., Healy Eamon. «J. Comput. Chem.», 1983, 4, № 4, с. 542—551 (англ.)

Подобраны параметры для брома в методе МПДП. Эти параметры определены так, чтобы воспроизвести теплоты образования ΔH_f , равновесную геометрию, потенциалы ионизации I_p и дипольные моменты 10 соединений одновалентного брома. Отмечено, что для описания электронного строения соединений Вг в высших степенях окисления необходим учет 3d-АО, к-рые не включены в базис МПДП. С помощью подобранных параметров проведен расчет электронного строения 54 бромсодержащих соединений. Среднее отклонение рас-

расчет М.А.,
геометр.,
структ.

х. 1984, 19, № 13

считанных значений ΔH_f по сравнению с экспериментом равно 7,2 ккал/моль, максим. отклонение меньше 20 ккал/моль. Значения I_p для 24 молекул оценены по теореме Купманса: вычисленные значения I_p завышены по сравнению с экспериментальными; средняя ошибка составляет 0,92 эВ. Введена полуэмпирич. поправка для I_p , зависящая от вклада орбиталей Вг в МО, с к-рой происходит ионизация. Ошибка рассчитанных с учетом этой поправки значений I_p в среднем составляет 0,3 эВ. Вычисленные значения валентных углов хорошо согласуются с эксперим. данными, тогда как отклонения оптим. длин связей достигают 0,15 Å в случаях, когда помимо связи Вг—Х имеется также π -связь Х—У. Обсуждены результаты расчета равновесной геометрии катиона $[\text{C}_2\text{H}_4\text{Br}]^+$. Расчет предсказывает большую устойчивость симметричной структуры с мостиковым атомом Вг по сравнению со структурами с терминальным атомом Вг.

О. Гриценко



CH_2Br

от 19461 1984

1 Л311. Первые полосы в фотоэлектронных спектрах CH_2Br , CD_2Br , CHBr_2 и CH_2I свободных радикалов. The first bands in the photoelectron spectra of the CH_2Br , CD_2Br , CHBr_2 , and CH_2I free radicals. Andrews Lester, Dyke John M., Jonathan Neville, Keddar Noureddine, Morris Alan. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 10, 1950—1954 (англ.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии изучены реакции атомов фтора с молекулами CH_3X и CH_2X_2 ($\text{X}=\text{Br}$, J). Новая структурная полоса с адиабатическим $8,61 \pm 0,01$ эв и вертикальным $8,72 \pm 0,01$ эв потенциалами ионизации отнесена к свободному радикалу CH_2Br . Наблюдаемая в полосе структура ($860 \pm \pm 30 \text{ см}^{-1}$ $\nu'=0-1$) отнесена к $\text{C}-\text{Br}$ вал. кол. в основном состоянии CH_2Br^+ , что больше, чем значение 693 см^{-1} , полученное для CH_2Br в Ar-матрице. Для

спектр, ν_i ,

м.п;

73

фр. 1985, 18, n1

первой полосы CD_2Br обнаружены прогрессии симметричных C—Br валентных ($780 \pm 30 \text{ см}^{-1}$) и CD_2 деформационных ($1130 \pm 30 \text{ см}^{-1}$) колебаний. Для свободных радикалов CHBr_2 и CH_2I найдены бесструктурные полосы при $8,41 \pm 0,03$ и $8,52 \pm 0,03$ эВ соответственно.

А. В. Головин.

CH_2Br

от. 19464

1984

23 Б1150. Первые полосы в фотоэлектронных спектрах свободных радикалов CH_2Br , CD_2Br , CHBr_2 и CH_2I . The first bands in the photoelectron spectra of the CH_2Br , CD_2Br , CHBr_2 , and CH_2I free radicals. Andrews L., Dyke J. M., Jonathan N., Keddar N., Morris A. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 10, 1950—1954 (англ.)

у, геометр.
структ.

(43)

Х. 1984, 19,
N 23

С использованием многоканального детектора электронов измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) с возбуждением излучениями He-I и Ne-I для продуктов реакции молекул CH_3Br , CD_3Br , CH_2Br_2 , CH_3I и CH_2I_2 с атомами F, образованными путем зажигания микроволнового разряда в смеси 5% F_2/He . Измерения ФЭС проведены при различных эксперим. условиях, определяющихся величиной потока атомов F и расстоянием между местом встречи последних с молекулами и камерой ионизации. В полученных ФЭС выделены особенности, связанные с фотоионизацией свободных радикалов CH_2Br (I), CD_2Br (II), CHBr_2 (III) и CH_2I (IV). Для I значения первого адиабатич. и верти-

кального потенциала ионизации (ПИ) равны 8,61 и 8,72 эВ соотв. Колебательная структура первой полосы в ФЭС I объяснена возбуждением валентных колебаний C—Br иона CH_2Br^+ с частотой $860 \pm 30 \text{ см}^{-1}$. Увеличение частоты колебаний по сравнению с лит. данными для радикала I в матрице Ag свидетельствует о более сильной связи C—Br в катионе. В ФЭС II колебательная структура первой полосы объяснена возбуждением валентных (C—Br) и симметрич. ножничных (CD_2) колебаний с частотами 780 ± 30 и $1130 \pm 30 \text{ см}^{-1}$ соотв. Для радикалов III и IV обнаружены первые полосы с неразрешенной структурой, соотв. значениям вертикальных ПИ $8,41 \pm 0,03$ и $8,52 \pm 0,03$ эВ. Слабая зависимость первых ПИ замещенных свободных метильных радикалов CH_2X , CHX_2 ($\text{X} = \text{CH}_3$, F, Cl, Br, J) от природы X (по измеренным и лит. данным) объяснена преимущественной локализацией неспаренного электрона на атоме углерода.

О. А. Басуринко

CH4-x Brx

(OM-20 554)

1984

Aron Z., Bunnell Z., Ford T.A.,

Z. Mol. Struct., 1984,

11.11.

110, N 3-4, 361-379.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$

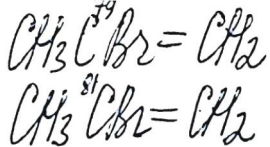
[cm. 19482]

1984

Durig J.R., Godbey S.E.,
et al.,

J. Chem. Phys., 1984,
80, N12, 5983-5993.

гашкии
лек спектр,
Раман.
спектр



Ом. 19665 1984

5 Б1231. Анализ внутреннего вращения в микроволновом спектре основного состояния 2-бромпропена. Internal rotation analysis of the ground state microwave spectrum of 2-bromopropene. Fliege E., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1984, A39, № 7, 637—645 (англ.)

На МВ-фурье-спектрометре в области частот 8—18 ГГц с высокой точностью измерены вращательные спектры двух изотопич. образцов 2-бромпропена, $\text{CH}_3\text{C}^{79}\text{Br}=\text{CH}_2$ (I) и $\text{CH}_3\text{C}^{81}\text{Br}=\text{CH}_2$ (II), в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен в приближении модели асимм. волчка с учетом одной квартичной постоянной центробежного искажения, внутреннего заторможенного вращения метильной группы и Вг-ядерного квадрупольного взаимодействия. Вращательные постоянные I и II, соотв., равны (МГц): $A=9256,00(10)$ и $9255,942(78)$, $B=3138,011(26)$ и $3112,878(18)$, $C=2375,879(26)$ и $2361,434(18)$. Анализ квадрупольной СТС выполнен для переходов вплоть

м.п., геометр.
стр., Но

х. 1985, 19, 45

до $J=20$ методом диагонализации матрицы гамильтониана. Постоянные квадрупольного взаимодействия I и II соотв. равны (МГц): $\chi_{bb} + \chi_{cc} = -534,474(53)$ и $-446,653(71)$, $\chi_{bb} - \chi_{cc} = -38,222(59)$ и $-31,546(89)$. Анализ внутреннего вращения выполнен в предположении, что взаимодействие с ядерным квадрупольным взаимодействием отсутствует и параметр момента инерции внутреннего волчка фиксирован. Для обоих образцов I и II углы между а-осью инерции молекулы и осью симметрии внутреннего волчка $57,8(34)^\circ$ и $56,9(48)^\circ$ и барьеры внутреннего вращения $V_3 = 2571(49)$ и $2558(74)$ кал/моль совпадают в пределах эксперим. точности. При ряде допущений выполнен модельный расчет r_0 -структуры 2-бромпропена. Полученные результаты согласуются с известными данными для 2-фторпропена и 2-хлорпропена. С. Н. Мурзин

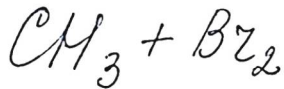
C₂HBr

1984

($\tilde{A}^2\Pi_{3/2} - \tilde{X}^3\Sigma_{3/2}$)
Franz
am.
many

/ 102: 102794d Rotational analysis of the $A^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ laser excitation spectra of the bromoacetylene and deuterobromoacetylene cations. King, Michael A.; Maier, John P.; Misy, Liubomir; Ochsner, Martin (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1437-51 (Eng). High-resoln. laser excitation spectra of the $A^2\Pi_{1/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ $3v^+$ ($v = 0-4$) bands of the bromo- and deuterobromoacetylene cations were recorded and rotationally analyzed. The new data were compared with those for the neutral mol. and discussed in terms of electronic structure.

C.A. 1985, 102, N12



1984

Kovalenko Laurie J.,
Leone Stephen R.

J. Chem. Phys., 1984,
80, N8, 3656-3667.

(see $\bullet$ $\text{CH}_3 + \text{Cl}_2$; III)



1984

5 Л188. Микроволновый спектр, структура и тензор квадрупольной связи скошенного конформера 3-бромпропена. Microwave spectrum, structure and quadrupole coupling constant tensor of skew-3-bromopropene. Niide Yuzuru. «J. Sci. Hiroshima Univ.», 1984, A48, № 1, 23—74 (англ.)

В диапазоне 8—30 ГГц исследованы МВ-спектры 15 изотопич. разновидностей молекулы $\text{CH}_2 = \text{CHCH}_2\text{Br}$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 12$ основного колебательного состояния и квадрупольная СТС линий. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных и постоянных квадрупольной связи ядер брома-79 и 81. Вычислены структурные параметры 3-бромпропена.

М. Р. Алиев

М. П.

ср. 1985, 18, N5

Br CCCCHe [Om. 22246] 1984

Sabapathy K., Ramasamy R.,
et al,

M.H.
meop.
pacerem.

Indian J. Phys., 1984, 58B,
N2, 117-122.

HC=CB₂

DC=CB₂

[Om. 22246]

1984

Sabapathy K., Ramasamy R.,
et al,

Indian J. Phys., 1984, 58B,
N2, 117-122.

Dr. R.
meop.
pacrem.

$\text{CH}_3\text{C}=\text{CB}_2$ /Om. 22246/ 1984

Sabapathy K., Ramasamy R.,
et al,

M.N.
neop.
pocrem.

Indian J. Phys., 1984, 58B,
N2, 117-122.

$C_2H_2Br^*$

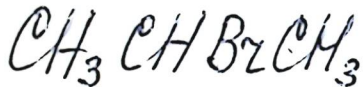
1985
9 Б1257. Структура бромвинильного радикала. Изучение методом изоляции в матрице. Structure of the bromovinyl radical: a matrix isolation study. Engdahl A., Nelander B. «J. Chem. Soc. Perkin Trans.», 1985, PT2, № 11, 1747—1750 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения продуктов, образующихся при соконденсации ($T=17$ K) ацетилена и ацетилена- d_1 и $-d_2$ с бромом в Ar при различных условиях и разбавлениях. В спектре матрицы подвергавшейся облучению (источник не назван) в процессе ее формирования наблюдались новые полосы 494,6; 793,6; 1120,4; 1564,4; 3093,8 cm^{-1} , отнесенные к радикалу $C_2H_2Br^*$ (приведены также полосы радикалов $C_2D_2Br^*$ и C_2HDBr^* и относит. интенсивности полос). Обсуждены возможные варианты отнесения полос. Полученные результаты сопоставлены с ИК-спектрами и значениями частот колебаний молекулы винилфторида, фторвинильного радикала и их дейтеропр-ных. Сделан вывод, что радикал $C_2H_2Br^*$ существует в матрице в виде 2 изомеров с несимм. расположением атома Br относительно атомов C.

В. М. Ковба

М.П., Ви.

X. 1986, 19, n 9



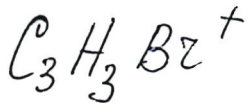
1985

Yang-Wren J. C., Setser
D. W., et al.

ИК много-
ротон. по-
мощен. и
разложе-
ние

J. Phys. Chem., 1985,
89, N 3, 414-426.

(см. $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$; III)



1985

Krailler R. E., Russell
D. H.

u.n. Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process., 1985,
66, N3, 339-357.
(see $\text{C}_3\text{H}_3\text{Cl}^+$; iii)

C_6H_5Br

1985

Milhaud J.

Chem. Phys. Lett.,

1985, 118, N2, 167-
-173.

Ac;

(over C_6H_5Cl ; III)

$HBrC=CHBr$ [Оп. 2232.9] 1985

$HBrC=CHBr$ Яковлев Н. Н., Богучков

$DBrC=CHBr$ И. А. и др.,

Мелкоскопические
колебания
потенц.
ор-и
внутрен-
него вра-
щения

Вестн. АН У. Химия,
1985, 26, N 5, 454-458.

$HBrC=CHBr$ [От. 2.2329] 1985

$D.BrC=CDBr$ Яковлев Н. Н., Тодунов И. А.

Менюские
колебания
потери.

и др.,

ор-и
внутрен-
него вра-
щения.

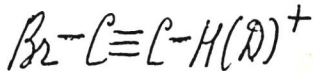
Вестн. ЛГУ. Серия,
1985, 26, N 5, 454-458.

$(CH_3)_2CHCH_2Br$ (DM-24946) 1986

далекый ИК
и низкочастотн.
Ротман-
спектр

Durig J. R., Sullivan J. F.,
Goodby J. E.,

J. Mol. Struct., 1986,
146, 213-236.

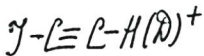


от 24141 1986

20 Б1152. Спектры излучения галоацетиленовых катионов при сверхзвуковом охлаждении: $\text{X}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}(\text{D})^+$, $\text{X}=\text{Br}$, J. Emission spectra of supersonically cooled haloacetylene cations: $\text{X}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}(\text{D})^+$, $\text{X}=\text{Br}$, J. Fulara J., Klapstein D., Kuhn R., Maier J. P. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 10, 2061—2067 (англ.)

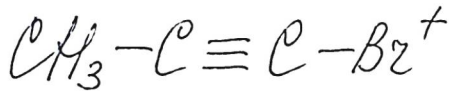
спектры излучен.

Исследованы системы полос излучения в обл. перехода $\tilde{\text{A}}^2\Pi-\tilde{\text{X}}^2\Pi$ вращательно-охлажденных бром- и йодацетиленовых катионов, а также их дейтерированных пр-ных при возбуждении электронным ударом в сверхзвуковой свободной струе гелия. Благодаря низкой вращат. т-ре (≈ 5 K), приводящей к сужению полос и разрешению изотопич. расщепления, проведен колебат. анализ спектров. Отождествлены все переходы, принадлежащие к системе компонент $\Omega=3/2$. В результате сопоставления настоящих данных и полученных ранее из спектров при лазерном возбуждении определены почти все частоты основных колебаний катионов в состояниях $\tilde{\text{X}}^2\Pi_{3/2}$ и $\tilde{\text{A}}^2\Pi_{3/2}$ с точностью ± 2 см⁻¹. Н. Н. Морозов



(X) (H)

X. 1986, 19, N20



1986

Klapstein D., Kuhn R.,
et al.

Chem. Phys., 1986, 101,
N1, 133-146.

(see $\text{CH}_3-\text{C} \equiv \text{C}-\text{X}^+$; III)

u.n.

$\text{CH}_3\text{C}:\text{CBz}$

1986

Klapstein Dieter, Kuhn
Robert, et al.

Chem. Phys. 1986,
101(1), 133-46.

спектр
лазерн.
возбужд.
 $\tilde{\chi}^2E_4 \tilde{H}^2\Sigma,$

и.п.

(см. $\text{CH}_3\text{C}:\text{CCl}$; III)

$C_6Br_3H_3$

1986

104: 213561m Electron diffraction study of the structure of sym-tribromobenzene. Novikov, V. P.; Sokolkov, S. V.; Golubinskii, A. V.; Vilkov, L. V. (Mosk. Univ., Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1986, 27(1), 50-4 (Russ). The structural parameters of sym-tribromobenzene detd. by electron diffraction $r(C-C)$ and $r(C-Br)$ are 1.395(4) and 1.876(4) Å, resp., and the CCC angle is 120.4(0.8)°. The force consts. and mol. vibrations were calcd. The Br atoms do not affect appreciably the geometry of the benzene ring.

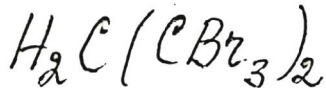
zn. grupp.
u cclnlov.

C. A. 1986, 104, N 24

$\text{Br}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$ 1986
Stølevik Reidar,
Bakken Pirkko.

ser. n. J. Mol. Spect., 1986,
145, N3-4, 287-295.

(ser. $\text{H}_2\text{C}(\text{CF}_3)_2$; III)



1986

Stølevik Reidar,
Bakken Pirkko.

sp. n.

γ-Mol. Street, 1986,
145, N3-4, 287-295.



$(BrH_2C)_2C(CH_3)_2$ (DM-24060) 1986

Stølevik R., Bakken P.,

конформі-
анаму,
сши. пост.,
мол. структ.
теор. расчеб

J. Mol. Struct., 1986,
144, N 3-4, 301-307.

CH_2Br_2 (anlgk.)

1987

(CXP)

106: 146302d Raman spectra of halogen-substituted methanes in the liquid state. 3 - Temperature effects. Fukushima, Kohji; Fukuda, Takuya; Kimura, Masao (Fac. Sci., Hokkaido Univ., Sapporo, Japan 060). *J. Raman Spectrosc.* 1987, 18(1), 47-52 (Eng). The effect of temp. on the peak positions, the isotropic and reorientational band widths and the depolarization ratios of the Raman bands for the totally sym. vibrations of CHCl_3 , CH_2Cl_2 , CH_2Br_2 , MeBr , MeI , and CD_3I was measured in the liq. state. The isotropic band width for a C-X stretching vibration decreases with increasing temp. for mol. with only 1 C-X bond, whereas it increases for a mol. with 2 or 3 equiv C-X bonds. The isotropic band width for the deformation vibrations decreases with increase in temp. For all the bands, the depolarization ratios depend only slightly on temp.

(75)
~~12~~

CHCl_3 (u),

CH_2Cl_2 (u),

CH_3Br (u)

CH_3I (u), CD_3I (u)

C.A. 1987, 106, N1P

$C_6H_2Br_4$

1987

108: 64970x Raman and infrared spectra and fundamental frequencies of 1,2,4,5-tetrabromobenzene. Yadav, R. A.; Shanker, R. (Dep. Phys., Banaras Hindu Univ., Varanasi, 221005 India). *J. Raman Spectrosc.* 1987, 18(8), 555-9 (Eng). The Raman spectrum of 1,2,4,5-tetrabromobenzene was recorded in powder form in the region 100-4000 cm^{-1} and the IR spectra in nujol mull and a CsI pellet in the region 200-4000 cm^{-1} . Tentative vibrational assignments are proposed assuming D_{2h} point group symmetry. Observation of a no. of overtone and combination bands enabled the inactive fundamentals and those fundamentals which were not obsd. exptl. to be estd.

(CKP, UK, Vi)

C.A. 1988, 108, n 8

(Dm. 30960)

1988

$(CH_3)_2CBrCH_2Br$

Crowder F.A.;

список,
копировки -
нет)

Y. Mol. Street. 1988,
178, 339-341.

BrH_2CCCH

от 28906 1988

7 Л180. Эффекты ядерного квадрупольного взаимодействия и центробежного искажения в микроволновом спектре пропаргилбромида, BrH_2CCCH . Effects of nuclear quadrupole coupling and centrifugal distortion in the microwave spectrum of propargyl bromide, BrH_2CCCH . Duffy P. K. J., Hwang Christine, Cramb David T., Lewis-Bevan W., Gerry M. C. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 2, 549—555 (англ.)

Изучен микроволн. спектр молекулы BrH_2CCCH в области 20—54 ГГц с использованием спектрометра со штарковской модуляцией. Для двух изотопич. модификаций, содержащих ^{79}Br и ^{81}Br , измерена сверхтонкая структура ряда вращательных линий с вращательными квантовыми числами 6—20. Особое внимание обращено на ранее обнаруженную аномалию в структуре вращательного перехода $^{121,11} \leftarrow ^{120,12}$. Анализ данных выполнен с помощью эффективного вращательного гамильтониана, записанного в S-редуцированной форме с точностью до квартичных членов. Определены также параметры тензора квадрупольного взаимодействия.

Е. А. Ж.

М.П.

ф. 1988, 18, № 7

BrH₂CCCH

ОМ. 28908

1988

15 Б1351. Эффекты ядерного квадрупольного взаимодействия и центробежного искажения в микроволновом спектре пропаргилбромиды, BrH₂CCCH. Effects of nuclear quadrupole coupling and centrifugal distortion in the microwave spectrum of propargyl bromide, BrH₂CCCH. Duffy P. K. J., Hwang C., Cramb D. T., Lewis-Bevan W., Gerry M. C. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 2, 549—555 (англ.)

На автоматизированном штатковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 20—54 ГГц с точностью около 0,05 МГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов пропаргилбромиды, ⁷⁹BrH₂CCCH (I) и ⁸¹BrH₂CCCH (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в A- и S-редукциях с учетом квартичного центробежного искажения и Br-ядерного квадрупольного взаимодействия. По сравнению с ранее выполненными МВ-измерениями (Kikuchi Y. et al., «J. Chem. Phys.», 1959, 31, 1139; «Bull. Chem. Soc. Japan.»),

М.А.

Х. 1988, 19, N 15.

1961, 34, 348) уточнены значения вращат. постоянных для I и II, соотв., в МГц $A=21010,306(12)$ и $20986,383(15)$, $B=2169,3287(10)$ и $2154,41049(64)$, $C=1989,0591(11)$ и $1976,29845(73)$, впервые определены квартичные постоянные и существенно уточнены диагональные и недиагональные постоянные ядерного квадрупольного взаимодействия. С учетом близости к цилиндрич. симметрии C—Вг связи определен ее ионный характер 0,22. С. Н. Мурзин



BrH₂CCCH

(Dm. 28906)

1988

108: 64987h Effects of nuclear quadrupole coupling and centrifugal distortion in the microwave spectrum of propargyl bromide, BrH₂CCCH. Duffy, P. K. J.; Hwang, Christine; Cramb, David T.; Lewis-Bevan, W.; Gerry, M. C. L. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 127(2), 549-55 (Eng). The microwave spectrum of propargyl bromide was recorded and the measured transitions of the ⁷⁹Br and

⁸¹Br isotopic species are given. The accuracies of the rotational and quadrupole consts. were clearly improved and the quartic distortion consts. were detd. for the first time. If it is assumed that the C-Br bond has essentially zero π -character, then simple application of the Townes-Dailey theory gives 0.22 as its ionic character..

(46 cAMP)

C.A. 1988, 108, N 8



1988

109: 239631n The conformations and vibrational spectra including matrix isolation of 1,3-dibromo-2,2-dimethylpropane. Gatial, A.; Klaboe, P.; Nielsen, C. J.; Powell, D. L. (Dep. Chem., Univ. Oslo, 0315 Oslo, Norway). *Croat. Chem. Acta* 1988, 61(2), 375-89 (Eng). The IR spectra of $(\text{BrCH}_2)_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$ as a liq. and as 2 cryst. solids obtained at low temp. and at high pressure were recorded. Addnl. IR spectra of this compd., matrix isolated in Ar and N_2 at 14 K, were obtained using nozzle temps. of 300, 450, and 700 K. Raman spectra including polarization measurements were recorded at 230-340 K. Cryst. solids were obtained by freezing the liq. and by shock freezing the vapor at 85 K with subsequent annealing. The GG and AG conformers were present in the low temp. and high pressure crystals, resp., and the enthalpy differences were 5.6 (liq.) and 4.2 kJ mol^{-1} (vapor) with GG being the more stable. An addnl. conformer AA was detected in the liq. and in the matrix isolated spectra, being ~ 6.4 and ~ 6.5 kJ mol^{-1} less stable than GG in the liq. and vapor, resp. Vibrational assignments of the GG and AG spectra are presented, supported by a normal coordinate anal.

lik 8 damp,
ΔH konform-

C.A. 1988, 109, N 26

C_3H_5Br

1988

Heineking N., Stahl W.
et al.

Z. Naturforsch., 1988,
A43, N3, 280-282.

u.n.

(cer. CH_3CH_2F ; III)

Br-(C₆H₆) [OM. 29629] 1988

Hiraoaka K., Mizuse S.,
Yamabe S.

сверхмаленьк.,
сверхмал.

Chem. Phys. Lett., 1988,
147, N 2-3, 174-178.

Determination of the
stabilities and Structures

of $X^-(C_6H_6)$ clusters ($X = Cl,$
Br and I).

$C_4H_5Bz^+$ com. 30490 1988
 $(H(C\equiv C)_2Bz^+)$ Jacob M. E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N 2,
492.

$\text{CH}_3\text{CHBrCH}_3$

$\text{CH}_3\text{CDBrCH}_3$

$\text{CH}_2\text{DCHBrCH}_3$

нб camp,

сmpy & mpa,

н.п.

Om. 32573

1989

Ikeda Ch., Inagusa T.,
Hagashi M.,

g. Mol. Spectrosc.,
1989, 135, N2, 334-
348 ●

Br H CCD* (Dm. 32614) 1989

Westwood N.P.C.,
Lewis - Bevan W., Perry
M.C.L.,

мв спектр,
структура
и.п.

γ. Mol. Spectrosc.
1989, 136, N 1, 93-104.

C-Br-K cas. [OM. 32952]

1989

Stavnebrekk P. J.,
Stølevik R.,

дид. пост.,
структура

J. Mol. Struct., 1989,
213, 279-292.

$(CH_3)_3CBr$

1990

6 Б1281. Сверхтонкая структура во вращательном спектре трет-бутилбромида. Hyperfine structure in the rotational spectrum of tert-butyl bromide / Harder H., Stahl W., Dreizler H. // Z. Naturforsch. A.— 1990.— 45, № 6.— С. 807—810.— Англ.

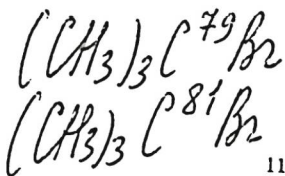
На микроволновом -(МВ) фурье-спектрометре с волноводной ячейкой в области частот 4—20 ГГц с разрешением около 5 кГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов трет-бутилбромида, $(CH_3)_3C^{79}Br$ (I) и $(CH_3)_3C^{81}Br$ (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели симм. волчка с учетом квартичного центробежного искажения, ядерного квадрупольного вз-вия и спин-вращат. вз-вия. Для I и II, соотв., определены вращат. постоянные $B=2044,2400$ (2) и $2028,3777$ (1) МГц, квадрупольные постоянные $eQ_q=511,987$ (4) и $427,708$ (3) МГц и спин-вращат. постоянные $C_N=4,7$ (3) и $5,8$ (2) кГц, $C_K=1,0$ (7) и $0,8$ (5) кГц. Полученные МВ-результаты существенно уточняют ранее выполненные измерения.

С. Н. Мурзин

М.А.

Х.1991, N6

1990



Franz
no cmr 44.

113: 141086w Hyperfine structure in the rotational spectrum of tert-butyl bromide. Harder, H.; Stahl, W.; Dreizler, H. (Inst. Phys. Chem., Univ. Kiel, D-2300 Kiel, Fed. Rep. Ger.). Z. Naturforsch., A: Phys. Sci. 1990, 45(6), 807-10 (Eng). The rotational spectra of tert-Bu bromide $(\text{CH}_3)_3\text{C}^{79}\text{Br}$ and $(\text{CH}_3)_3\text{C}^{81}\text{Br}$ were reinvestigated with high precision of microwave Fourier transform spectroscopy. The rotational and quadrupole coupling consts. were improved, the centrifugal distortion and bromine spin-rotation consts. were detd.

C. A. 1990, 113, N16

C_3H_5Br

11 Б1301. Новое определение спектроскопических постоянных циклопропилбромида через возмущения в Br квадрупольной сверхтонкой структуре в его микроволновом спектре. Refinement of the spectroscopic constants of cyclopropyl bromide via perturbations in the Br quadrupole hyperfine structure in its microwave spectrum / Li H., Gerry M. C. L., Lewis-Bevan W. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 144, № 1.— С. 51—69.— Англ.

1990
0660

М.Л.

На штатковском микроволновом (МВ) спектрометре в области частот 8—90 ГГц с точностью 0,50 МГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов циклопропилбромида, $C_3H_5^{79}Br$ (I) и $C_3H_5^{81}Br$ (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в S-редукции с учетом квартичного центробежного искажения и Br-ядерного квадрупольного вз-вия. В результате получены уточненные значения вращат. постоянных для I и II, соотв. в МГц $A=16334,244$ (17) и $16333,03$ (2), $B=2579,9204$ (4) и $2650,5404$ (6), $C=2457,7159$ (4) и $2440,1495$ (4), и постоянных квадрупольного вз-вия в МГц $\chi_{aa}=463,9$ (2) и $388,2$ (2), $\chi_{bb}-\chi_{cc}=-105,89$ (7) и $-88,30$ (7), $|\chi_{ac}|=266,4$ (3) и $222,0$ (3).

С. Н. Мурзин

Х. 1991, N 11

C₃BrH₂

1990

113: 240429s Refinement of the spectroscopic constants of cyclopropyl bromide via perturbations in the bromine quadrupole hyperfine structure in its microwave spectrum. Li, Hao; Gerry, M. C. L.; Lewis-Bevan, W. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 144(1), 51-69 (Eng). The microwave spectra of 2 isotopic species of cyclopropyl bromide is measured in the frequency region 8-90 GHz. Since the mol. is slightly asym. prolate rotor with strong a-type and weak c-type transitions, it was necessary to use perturbations in the Br quadrupole hyperfine structure of the a-type transitions to improve the accuracy of A₀ and reduce the search region for the c-type lines. All rotational, quartic centrifugal distortion, and Br nuclear quadrupole coupling const. were evaluated. The rotational const. are compared with those calcd. from published structures.

ЦИКЛОПРО-
ПИЛБРОМИД

МВ спектр
М.Л.

С.А. 1990, 113, N 26

C₄H₉Br

1990

113: 161412c Microwave spectrum and quadrupole coupling constant tensor of gauche-isobutyl bromide. Nüde, Yuzuru; Ohkoshi, Ichiro (Dep. Math. Phys., Natl. Def. Acad., Yokosuka, Japan 239). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 142(2), 227-37 (Eng). Microwave spectra of iso-Bu bromide were measured in the frequency region 10-38 GHz. Only a-type R-branch transitions of one conformer, gauche, were assigned. Two hundred and twelve quadrupole hyperfine component spectra were measured for the 53 transitions of the ⁷⁹Br species and 209 quadrupole hyperfine component spectra for the 54 transitions of the ⁸¹Br species. The rotational consts. of the ground vibrational state were detd. to be $A = 7483.20 \pm 0.28$, $B = 1411.1193 \pm 0.0057$, and $C = 1250.5110 \pm 0.0056$ MHz for the ⁷⁹Br species, and $A = 7481.46 \pm 0.51$, $B = 1398.8895 \pm 0.0043$, and $C = 1240.8924 \pm 0.0053$ MHz for the ⁸¹Br species. From the quadrupole hyperfine splittings of the bromine nucleus, the nuclear quadrupole coupling consts. in the principal axes system were detd. to be $\chi_{aa} = 38.0 \pm 2.2$, $\chi_{bb} = -144.8 \pm 4.1$, $\chi_{cc} = -235.1 \pm 4.6$, and $|\chi_{ab}| = 282.5 \pm 1.7$ MHz for the ⁷⁹Br species, and $\chi_{aa} = 302.5 \pm 2.0$, $\chi_{bb} = 110.4 \pm 3.3$, $\chi_{cc} = -192.1 \pm 3.8$, and $|\chi_{ab}| = 236.4 \pm 2.0$ MHz for the ⁸¹Br species.

Уб спектр,
квантам.
расчет.

C. A. 1990, 113, N 18

$C_3H_5Br^+$

1991

117:34018m The structure of the molecular ion of allyl bromide. Carrupt, Pierre Alain; Riveros, Jose M.; Stahl, Daniel (Ec. Pharm., Univ. Lausanne, 1015 Lausanne, Switz.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1991, 110(1-2), R1-R5 (Eng). Results are presented of preliminary calcs. at the semi-empirical level by the AM1 method and at the ab initio STO-3G level for the mol. ions $C_3H_5X^+$ (X = F, Cl, Br, I). The structure of the allyl bromide ion is discussed in detail. This ion exists in lower-energy structures obtained by elongation of the C-Br bond: one corresponds to a sym. ammonium-type ion, and the other to an asym. structure with the Br atom out of the C plane.

анализ,
неоп. павел

E. A. 1992, 117, 24



1991

Hamilton T.P. Schaefer (III)
H.F.

meop.
pacrem

J. Amer. Chem. Soc. 1991.
113, N 19. C. 7147-7151.

(corr. ● $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}^+$, III)



1991

5 Б1275. Микроволновые вращательные спектры 1-бром-2,2-дифторэтилена и тензор бром-ядерного квадрупольного взаимодействия. The microwave rotational spectra of 1-bromo-2,2-difluoroethylene and the bromine nuclear quadrupole coupling tensor / Oldag F., Sutter D. H. // Z. Naturforsch. A.— 1991.— 46, № 6.— С. 513—526.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре, штарковском МВ-спектрометре и МВ-спектрометре двойного резонанса в области частот 8—33 ГГц с точностью около 3 кГц впервые измерены вращат. спектры двух изотопомеров 1-бром-2,2-дифторэтилена, $F_2C=CH^{79}Br$ (I) и $F_2C=CH^{81}Br$ (II), в основном колебат. состоянии. Идентифицировано 40 переходов I и 38 переходов II. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квартичного центробежного искажения и Br-ядерного квадрупольного вз-вия. Для I и II, соотв., определены вра-

М.Н.

X. 1992, N 5

щат. постоянные в МГц $A=10717,20898(90)$ и $10717,19761(94)$, $B=1453,47833(17)$ и $1439,46581(15)$, $C=1279,25529(15)$ и $1268,38766(14)$ и квадрупольные постоянные в МГц $\chi_{aa}=453,959(20)$ и $379,262(24)$, $\chi_{bb}-\chi_{cc}=132,662(9)$ и $110,835(8)$, $\chi_{ab}=-354,369(24)$ и $-296,094(34)$. Определена возможная молек. структура.

С. Н. Мурзин



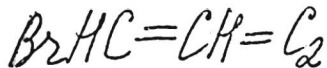
C_3H_3Br

1992

Глуховцев Л. Н.;
Лайтер С. Ю. и др.

и.п. Ж. орган. химии. 1992.
28, N 9. С. 1789 - 1797.

(смет. C_3H_3F ; III)



1992

22 Б1337. Микроволновый спектр моногалогенированных алленов. Бромаллен. Microwave spectrum of monohalogenated allenes: Bromoallene /Moazzen N., Ogata Teruhiko, Niide Yuzuru //J. Chem. Soc. Faraday Trans. — 1992. — 88, № 24. — С. 3517—3519. — Англ.

В диапазоне 15—35 ГГц измерен МВ-спектр бромаллена на $^{79,81}\text{BrHC}=\text{CH}=\text{C}_2$. Для обоих изотопомеров приведены рассчитанные значения вращат. постоянных, параметров центробежного искажения и тензора ядерного квадрупольного вз-вия. Межъядерное расстояние R ($\text{C}-\text{Br}$) = 1,899 Å, $\angle \text{CCBr} = 121,7^\circ$. В. М. Ковба.

М.А.

Х. 1994, № 22

Br(anner)

Om. 37235

1992

(A, B, C, D_J)

118: 69203r Microwave spectrum of monohalogenated allenes: bromoallene. Ogata, Teruhiko; Niide, Yuzuru (Fac. Lib. Arts, Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan 422). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1992, 88(24), 3517-19 (Eng). The microwave spectrum of bromoallene for ^{79}Br and ^{81}Br species was studied from 15 to 35 GHz. A least-squares anal. of the obsd. a - and b -type transition frequencies gave rotational, quartic centrifugal distortion consts. and the components of the nuclear quadrupole coupling consts. tensor in the principal axes system: $A = 27\,849.952$ (63), $B = 2009.8672$ (40) and $C = 1897.3682$ (27) MHz, $D_J = 0.705$ (25), $D_{JK} = -46.1$ (10), $\Delta J = 0.0915$ (29) kHz, $\chi_{aa} = 377.11$ (94), $\chi_{bb} = 152.78$ (13) and $|\chi_{cc}| = 351.32$ (24) MHz for ^{79}Br species; and $A = 27\,820.459$ (52), $B = 1996.0270$ (33) and $C = 1884.8908$ (22) MHz, $D_J = 0.632$ (21), $D_{JK} = -46.5$ (8), $\Delta J = 0.0931$ (16) kHz, $\chi_{aa} = 316.26$ (36), $\chi_{bb} - \chi_{cc} = 152.42$ (10) and $|\chi_{cc}| = 318.00$ (16) MHz for ^{81}Br species. The structural parameters are calcd. from the obsd. rotational consts. The bond length C-Br in bromoallene was found to be longer than that in bromoethene, in accordance with lower π character for C-Br in bromoallene than in bromoethene.

C.A. 1993, 118, N8

$C_2H_4Br^+$

1992

Reynolds Ch. H.

J. Mol. Struct. Theo-

chem. 1992. 259. C.

257-263.

(see  $C_2H_4F^+$; III)

$(CH_3)_3CBr$

1993

(118: 135033p Rotational spectra of tert-butyl bromide and iodide measured in the millimeter-wave region and by Fourier-transform techniques. Brotherton, Stuart; Legon, A. C.; Thorn, Joanna C.; Turner, B.; Wallwork, Andrew L.; Carpenter, John H.; Johnson, Elizabeth; Smith, John G. (Chem. Dep., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QD). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1993, 89(3), 397-404 (Eng). Millimeter-wave rotational spectra were recorded for the mols. $(CH_3)_3C^{79}Br$, $(CH_3)_3C^{81}Br$, and $(CH_3)_3C^{127}I$. In addn., the authors recorded low- J spectra at much greater precision using a Fourier-transform spectrometer. The combined results yield rotational, centrifugal distortion, quadrupole, and spin-rotation consts. which are more accurate than any det'd. independently.

(see encomp)

C.A. 1993, 118, N14

$(CH_3)_3CBr$

1993

MM checkup,
Franz -
no cm.

118: 222133q Rotational spectra of 2-bromo-2-methylpropane in excited vibrational states. Carpenter, John H.; Gowland, Christopher D.; Read, Daniel C.; Smith, John G. (Dep. Chem., Univ. Newcastle upon Tyne, Newcastle upon Tyne, UK NE1 7RU). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 159(1), 192-209 (Eng). The millimeter-wave rotational spectra of the mols. $(CH_3)_3C^{79}Br$ and $(CH_3)_3C^{81}Br$ in an excited vibrational state were recorded and analyzed. The spectra were assigned to a low lying doubly degenerate vibrational mode. Moderate l-resonance interactions are present in both mols., but at one particular J an accidental resonance is found which enables a detn. of the axial rotational const. $A_r = 4519.4$ MHz for $(CH_3)_3C^{79}Br$ and 4524.3 MHz for $(CH_3)_3C^{81}Br$.

C. A. 1993, 118, N22

CH₂Br

(I, Ae, cpekm
pomoctny.)

CH₂Br⁺
CH₂Br⁻

(Ae, I,
meop. pacem)

c. A. 1994, 120, 44

1993

120: 38772n Adiabatic ionization energy and electron affinity of bromomethyl (CH₂Br). Ma, Z. X.; Liao, C. L.; Ng, C. Y.; Ma, Ngai Ling; Li, Wai Kee (Ames Lab., Iowa State Univ., Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(9), 6470-3 (Eng). The photoionization efficiency spectrum of supersonically cooled CH₂Br has been measured near its ionization threshold. The adiabatic ionization energy (IE) of CH₂Br is detd. to be 8.61±0.01 eV, in excellent agreement with the value obtained previously using the He I photoelectron spectroscopic method. The authors have also performed Gaussian-2 (G2) calcs. on CH₂Br⁺, CH₂Br, and CH₂Br⁻ which yield values of 8.47 and 0.97 eV for the IE and electron affinity of CH₂Br, resp. The G2 electron affinity is in accord with the literature value of 1.0±0.3 eV calcd. from the acidity of CH₃Br.

C-Br-H
соедин.

(DM. 37585)

1994

Aarset L., Hagen K.,
Stølevik R.,

исследование
структура

J. Phys. Chem., 1994, 98,
5249 - 5256

Molecular structure and con-
formational composition of

1,4-Dichlorobutane and 1,4-Dibromobutane. A Gas-Phase Electron Diffraction and ab Initio Investigation.

1995

F: HCCBr

P: 3

6B1356. ИК-фурье-спектры высокого разрешения HCCBr и HCCI. High resolution FTIR spectra of HCCBr and HCCI / Vaittinen Olavi, Saarinen

Maria, Jungner Peter, Halonen Lauri, Burger Hans, Polanz Oliver // 10th Int. Conf. Fourier Transform Spectrosc., Budapest, Aug. 27 - Sept. 1, 1995: Book Abstr. and Program. - Budapest, 1995. - С. A10.11. - Англ. С высоким разрешением ($0,01-0,003 \text{ см}^{-1}$), фурье-спектрометр) измерены ИК-спектры поглощения монобромацетилен (230-10 000 см^{-1}) и моноиодацетилен (3800-10 000 см^{-1}). Выполнен анализ вращательной структуры спектров, получены значения молекулярных постоянных. Численные данные не приводятся.

Р.ЖС.Х. №6, 1996

HCCBr

1995

123: 126036t High-resolution vibration-rotation FTIR spectrum of the $2\nu_4$, ν_1 , $2\nu_1$, and $3\nu_1$ bands of HCCBr. Vaittinen, Olavi; Lukka, Tuomas; Halonen, Lauri; Burger, Hans; Polanz, Oliver (Lab. Phys. Chemistry, Univ. Helsinki, FIN-00014 Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(2), 503-19 (Eng). The IR spectrum of a sample of natural monobromoacetylene (HCCBr) has been recorded with the Bruker IFS 120 Fourier spectrometer in the wavenumber region 1100-9800 cm^{-1} with a resolu. close to the Doppler limit. The $2\nu_4$, ν_1 , $2\nu_1$, and $3\nu_1$ band systems have been analyzed. Altogether, 24 vibrational bands belonging to the HCC^{79}Br and 26 bands belonging to the HCC^{81}Br isotopic species have been obsd. and rotationally assigned. An anharmonic resonance model based on rectilinear normal coordinate theory has been used to produce the vibrational assignments for the obsd. bands.

(ex creep)

C.A. 1995, 123, N10

CH₄ - HF

1998

Chandra, Asit K; et al.,

смп-ра
и

J. Phys. Chem. A 1998,

стабильн., 102 (24), 6865-70

теор.

расчет

(coll.



CH₄ - HF; III)

CHBr_2

(DM. 39868)

1999

см-ра,
консам.
спектр,
универс.
гартер

Jerzy Moc,
Chem. Phys. 1990,
247, 365-373

CH_2Br

[Om. 39868]

1999

Jerzy Moc,

Chem. Phys., 1999,

247, 365-373

теорет.
расчет
сп-ра,
комбам-
спектр,
интерс.
барьер

F: C6H5Br

1999

P: 3

131:121125 Very low energy electron scattering
in C6H5F, C6H5Cl, C6H5Br a

C6H5I. Lunt, S. L.; Field, D.; Hoffmann, S. V.;
Gulley, R. J.; Ziesel, J-

(ISA, University of Aarhus, Aarhus C DK-8000, Den.).
J. Phys. B: At., Mol. Phys., 32(11), 2707-2717
(English) 1999 Integral and backward scattering
cross sections are reported for the scat of
electrons from C6H5F, C6H5Cl, C6H5Br and C6H5I over
the energy range b 10 and 20 meV to 10 eV. The
measurements were made in transmission expts a
synchrotron radiation photoionization app. with an
energy resoln. in th incident electron beam of ~3.5
meV (FWHM). The abs. accuracy of the cros sections
is limited by exptl. difficulties with respect to

C.A. 1999, 131

strong rotational inelastic forward scattering, due to the dipolar nature of the target mol. Integral scattering cross sections are found to rise to more than 1500 A² at lowest energies in C₆H₅F, C₆H₅Cl and C₆H₅Br and to more than 2000 A² in C due to an addnl. contribution from electron attachment. At low energy, b integral and backward scattering cross sections are very similar in C₆H₅F C₆H₅Cl and C₆H₅Br. Data are interpreted in terms of rotationally inelastic scattering, with values of cross sections essentially dictated by the correspondingly similar dipole moments (1.6-1.7 D) of these three species. Born model for rotationally inelastic scattering consistently underestimates exptl. cross sections and overestimates the degree of forward scattering. Data illustrate the limitations of the Born model for the estn. of low-energy scattering cross sections for plasma modeling.

F: CHBr₂

P: 3

1999

131:322241 Theoretical study of the CH₂Br,
CHBr₂ and CBr₃ radicals. Moc, Jerzy

Faculty of Chemistry, Wroclaw University
Wroclaw 50-383, Pol. Chem. Phys., 247(3),
365-373 (English) 1999 Equil. structures,
vibrational spectra, inversion barriers, and
adiabatic ionization energies are detd. for the
series of bromomethyl radicals CH₂B CHBr₂ and CBr₃
using both ab initio correlated and hybrid UB3LYP
d. funct theory (DFT) methods in conjunction with
the large TZ2P and 6-311 + + G(3 basis sets. In
particular, the trends in the calcd. mol.
properties with series are indicated and the
performance of the two theor. approaches is
assessed.

F: CH2Br

P: 3

131:322241 Theoretical study of the CH2Br,
CHBr2 and CBr3 radicals. Moc, Jerzy

Faculty of Chemistry, Wroclaw University
Wroclaw 50-383, Pol. Chem. Phys., 247(3),
365-373 (English) 1999 Equil. structures,
vibrational spectra, inversion barriers, and
adiabatic ionization energies are detd. for the
series of bromomethyl radicals CH2B CHBr2 and CBr3
using both ab initio correlated and hybrid UB3LYP
d. funct theory (DFT) methods in conjunction with
the large TZ2P and 6-311 + + G(3 basis sets. In
particular, the trends in the calcd. mol.
properties with series are indicated and the
performance of the two theor. approaches is
assessed.

1999

[Om. 39957]

1999

CH₂Br

CH₂Br⁺

comp-ra,
konutaj.

chikn,
ab initio
pavut

N², 2,

Zhuangjie Li,
Joseph S. Francisco,

J. Chem. Phys., 1999; 110,
817-822.

c-C₅H₉Br

2000

132:327207j Microwave spectrum, ab initio calculations, and structural parameters of bromocyclopentane. Durig, J. R.; Zhao, W.; Zhu, X. (Department of Chemistry, University of Missouri-Kansas City, Kansas City, MO USA). *J. Mol. Struct.* 2000, 521, 25-35 (Eng), Elsevier Science B.V. The microwave spectrum of bromocyclopentane, c-C₅H₉Br, was recorded at 19.7-38.3 GHz. The a-type R-branch transitions were obsd. and assigned for the ground state for both the axial and equatorial conformations of the ⁷⁹Br and ⁸¹Br isotopic species. One vibrationally excited state of both isotopic species of the axial conformation were identified and assigned. Addnl., some c'-type Q-branches of both isotopic species of the axial conformer were assigned. For most of the transitions partly resolved hyperfine structure

46 спектры,
A, B, C.
см. приложение

C.A. 2000, 132, N24