

C2 D3 H3

CH_3-CD_3

(γ_i)

IV-4406 | 1955

Van Riet R..

Bull. cl. sci. Acad. roy. Belgique, 1955, 41, N^o 2, 188-203/pp.

Spectre Raman et spectre infrarouge de la
molécule CH_3-CD_3 .

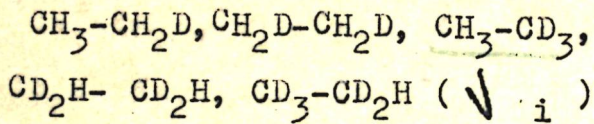
PXXuu 1955, 54425

10

2

IV-4393

1957

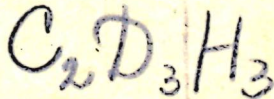


Van Riet R.

Ann. Soc. scient. Bruxelles, 1957,
Ser., 1, 71, N 2, 102-127

Спектры комбинационного ...

J



IV-4141

1962

C_2H_6 , C_2D_6 , accum. $C_2H D_3$

(Z₁L)

Stiocheff B.P.

Canad. J. Phys., 1962, 40, N 3,
358-366

High resolution Raman ...

J

$C_2D_3H_3$

M-450 - IV

1964

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$; $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$; (mol. const.)

Иманов Л.М., Каджар Ч.О.,
Абдурахманов А.А.

Тр. Комис. по спектроскопии АН СССР,
1964, вып. I, 214-220

Радиоспектроскопическое исследование
молекул ...

РХ, 1965, 22 166

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

11-9890 $\frac{C_2H_3D_3}{C_2H_6, C_2D_6}$ (vi)

1964

Tejada S.B.

Dissertation Abstr.: 1964, 25(2),
876

Infrared spectra of some...

J

CH_3CO_3

71-6971M-10
1300-141769-10

1966
Dr L. Collin F.R.,
Hong'kee F.

Bull. Cl. Sci., Acad. Roy.
Belg. 52 (4), 518.

Ionization and dissocia-
tion of ethane under
elect-ron impact.
Mass spectra and

exchange phenomena
in C_2H_6 ...

(see C_2H_6)

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

C_2H_6

ВР-ХИВ - 632

1967

22 Б190. Спектр комбинационного рассеяния этана-1,1,1- d_3 . Shaw D. E., Welsh H. L. The Raman spectrum of ethane-1,1,1- d_3 . «Canad. J. Phys.», 1967, 45, № 12, 3823—3835 (англ.)

При средней величине разрешения $\sim 0,3 \text{ см}^{-1}$ сфотографирован спектр КР $\text{CH}_3 - \text{CD}_3$ при давлении в 1 атм. Получена тонкая колебательно-вращательная структура полос невырожденных колебаний ν_1 и ν_3 и дважды вырожденных колебаний ν_7 и ν_{11} . Анализ вращательной структуры полос ν_3 и ν_7 позволил оценить значения вращательных постоянных $B_0 = 0,5491 \pm 0,0003$ и $A_0 = 1,7809 \pm 0,0016 \text{ см}^{-1}$, что находится в согласии с ранее найденными значениями для C_2H_6 и C_2D_6 . Резюме



Х. 1968. 22

1967

CH₃ - CD₃

10 Д295. Спектр комбинационного рассеяния этана-1,1,1-*d*₃. Shaw D. E., Welsh H. L. The Raman spectrum of ethane-1,1,1-*d*₃. «Canad. J. Phys.», 1967, 45, № 12, 3823—3835 (англ.)

Смешан
комб. рассея
ние

Получен спектр комб. рас. ~~CH₃-CD₃~~ при давлении паров 1 атм и с разрешением $\sim 0,3 \text{ см}^{-1}$. Подробно исследована вращательная структура следующих основных колебаний (в см^{-1}): $\nu_1=2955$ — невырожденное валентное С—Н-колебание, $\nu_3=904$ — невырожденное валентное С—С-колебание, $\nu_7=2977$ — дважды вырожденное валентное С—Н- и $\nu_{11}=1063$ — дважды вырожденное деформационное С—D₃-колебание. На основании анализа контуров колебаний ν_3 и ν_7 получены следующие значения вращательных постоянных: $A_0=1,781 \pm 0,002 \text{ см}^{-1}$ и $B_0=0,5491 \pm 0,003 \text{ см}^{-1}$. Вычисленные отсюда структурные параметры таковы: $\angle \text{HCH} = \angle \text{DCD} = 107,8^\circ \pm 0,2^\circ$, $r_0(\text{C—C}) = 1,534 \pm 0,002 \text{ \AA}$, $r_0(\text{C—D}) = 1,093 \pm 0,001 \text{ \AA}$, $r_0(\text{C—H}) = 1,095 \pm 0,002 \text{ \AA}$.
А. П. Коузов

B97-XIV-632

ф. 1968. 102

CH_3CD_3

B9- XIV-632

1964

44584b Raman spectrum of ethane-1,1,1-d₃. D. E. Shaw and H. L. Welsh (Univ. Toronto, Can.). *Can. J. Phys.* 45(12), 3823-35(1967)(Eng). The Raman spectrum of CH_3CD_3 at 1 atm. pressure was photographed with a spectral resolution of $\sim 0.3 \text{ cm}^{-1}$. The nondegenerate ν_1 and ν_3 and the doubly degenerate ν_7 and ν_{11} fundamentals were observed. Analysis of the rotational structure of the ν_3 and ν_7 bands gave the rotational consts., $B_0 = 0.5491 \pm 0.0003 \text{ cm}^{-1}$ and $A_0 = 1.780_9 \pm 0.001_6 \text{ cm}^{-1}$, resp. These are consistent with rotational consts. previously obtained for C_2H_6 and C_2D_6 . RCCN

C.A. 1968. 68. 10

CD_3-CH_3

1967

58844c Analysis of some of the near infrared absorption bands of the molecule ethane-1,1,1-d₃. Peter Christian Lysne (Arizona State Univ., Tempe). *Diss. Abstr. B* 27(9), 3218 (1967)(Eng). Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 67-3206, 100 pp. SNDC

C.A. 1967. 67. 12



ν_i

Weiss Sh., Gerai ¹⁹⁶⁸ 9.8.

J. Chem. Phys., 48, №3, 962.

Прямое наблюдение
критических колеба-
ний в ИК-спектре



III (см. C_2H_6)

1968

 CH_3CD_3

(и.к.)

22 Б275. Инфракрасный спектр этана-1,1,1- d_3 в ближней области. Lysne P. C., Meister A. G. Near-infrared spectrum of ethane-1,1,1- d_3 . «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 2, 918—921 (англ.)

Измерены ИК-спектры этана-1,1,1- d_3 в интервалах 4600—5100 и 5600—6300 см^{-1} . Обнаружено 8 центров колебательно-вращательных систем. Из них только для двух перпендикулярных систем: $\nu_5 + \nu_7$ (5065,9 см^{-1}) и $2\nu_7$ (5945,5 см^{-1}) — удалось получить достаточно хорошее разрешение. Из анализа тонкой структуры этих двух систем обнаружено, что вращательные постоянные $A^1(2\nu_7) = 1834 \text{ см}^{-1}$ и $A^1(\nu_5 + \nu_7) = 1787 \text{ см}^{-1}$ и коэф. кориолисова взаимодействия $\zeta_{2\nu_7} = -0,264$ и $\zeta_{\nu_5 + \nu_7} = 0,170$. Сравнение вращательных постоянных для полосы $2\nu_7$ с подобными величинами для других полос показывает, что полоса $2\nu_7$ сильно возмущена. Резюме

X. 1968. 22

1968

 $C_2H_3D_2$

(H.K.)

91344h Near-infrared spectrum of ethane-1,1,1- d_3 . P. C. Lysne and A. G. Meister (Arizona State Univ., Tempe, Ariz.). *J. Chem. Phys.* 48(2), 918-21(1968)(Eng). The ir spectrum of ethane-1,1,1- d_3 in the 4600-5100- and 5600-6300- cm^{-1} regions was obtained. Of the eight band centers that were located, only the perpendicular bands $\nu_5 + \nu_7$, at 5065.9, and $2\nu_7$, at 5945.5 cm^{-1} , were sufficiently resolved to make a rotational anal. possible. From this anal. it was found that $A'(2\nu_7) = 1.834$, $A'(\nu_5 + \nu_7) = 1.787$ cm^{-1} , $\zeta_{2\nu_7} = -0.264$, and $\zeta_{\nu_5 + \nu_7} = 0.170$. A comparison of the rotational consts. of the $2\nu_7$ perpendicular band with likely values for these same consts. detd. from other bands indicates that the $2\nu_7$ band is strongly perturbed.

RCJQ

C.A. 1968.68.20

CH₃CD₃

1941

82161p' Microwave spectrum of ethane. Hirota, Eizi; Matsumura, Chi (Fac. Sci., Kyushu Univ., Fukuoka, Japan). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(2), 981-2 (Eng). A fairly strong line was obsd. at 65,896.92, $\pm$ 0.05 MHz in the microwave spectrum of CH₃CD₃, which was assigned to the $J = 2 \leftarrow 1$, $K = 1$ transition. The Stark effect was linear with field strengths <3500 V/cm. An addnl. line, with an intensity of about 1/5 of the main line intensity, was obsd. at 65,675.53, $\pm$ 0.05 MHz, which can be assigned to the transition in the torsionally excited state.

u.n.

u.b. ченкп

C. A. 1941. 75 12

CH₃CD₃

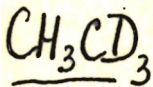
1971

24 Б317. Микроволновый спектр этана. Hirota Ei-
zi, Matsumura Chi. Microwave spectrum of ethane.
«J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 2, 981—982 (англ.)

На спектрометре со штарковской модуляцией при т-ре
сухого льда исследован МВ-спектр молекулы CH₃CD₃.
На частоте $65896,2 \pm 0,05$ Мгц обнаружена сравнительно
интенсивная линия, состоящая из 2 штарковских компо-
нент с одинаковой интенсивностью. Эта линия отнесена
к вращательному переходу $J=2 \leftarrow 1$, $K=1$ CH₃CD₃ в ос-
новном колебательном состоянии. Для вращательной по-
стоянной и дипольного момента получены значения
 $B=16474,29$ Мгц и $\mu=0,01078$ D. Обнаружена также сла-
бая линия при $65675,53$ Мгц, к-рая отнесена к переходу
 $J=2 \leftarrow 1$, $K=1$ в возбужденном состоянии крутильного ко-
лебания CH₃CD₃. М. Р. Алнев

ш. п.

X. 1971. 24



(с.п. ν_i)

4 Б236. Инфракрасный спектр и силовые коэффициенты в CH_3CD_3 . Eggers D. F., Jr, Wilson H. W. Infrared spectrum and force constants in CH_3CD_3 . «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 5, 1858—1861 (англ.)

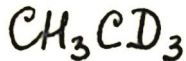
Исследован ИК-спектр поглощения CH_3CD_3 (I) (газ) в области $670\text{—}3000\text{ см}^{-1}$. Затабулированы измеренные положения центров полос нормальных колебаний, обертонов и составных тонов I ниже 3000 см^{-1} . Установлено положение RQ_0 -переходов для трех из шести полос нормальных колебаний I. Из расстояний между ветвями в соотв-щих полосах определены постоянные корiolисова взаимодействия I: $\xi_7=0,17$, $\xi_9=-0,29$, $\xi_{11}=-0,36$, $\xi_{12}=0,24$. С использованием трех различных силовых полей (общее квадратичное силовое поле, гибридно-орбитальное силовое поле Данкена и силовое поле Юри-Брэдли — Такахаша) вычислены частоты нормальных колебаний и ξ -постоянные I. Наилучшее согласие с эксперим. данными наблюдается в случае силового поля Данкена.

А. П. Александров

Х. 1973. № 4

1972

681-5284-89
XIV-4383-89



1972.

F) 107257f Infrared spectrum and force constants in ethane-1,1,1-d₃. Eggers, D. F., Jr.; Wilson, H. W. (Dep. Chem., Univ. Washington, Seattle, Wash.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(5), 1858-61 (Eng). The gas-phase ir spectrum of MeCD₃ was obsd. under moderately high resoln. Three of the *E* fundamentals were sufficiently resolved so that a clear-cut choice of the *R*_Q transition was possible. Band centers were obtained for all fundamentals, and combinations and overtones at <3000 cm⁻¹ were also measured and assigned. Exptl. Coriolis ζ 's were deduced from *Q* branch spacings in 4 of the *E* fundamentals. Theoretical values of the vibration frequencies and Coriolis ζ 's were computed from 3 different potential functions. The constrained hybrid orbital force field of Duncan agrees best with expt.

Vib. n;

XIV-4383-189

C.A. 1972. 77. N16 .

CH_3CD_3

1973

[2 Б89.] Молекулярная структура этана. Сопоставление структурных параметров CH_3CD_3 в торсионно-возбужденном и основном состояниях. Iijima Takao. Molecular structure of ethane. Comparison of the structure parameters of CH_3CD_3 in the torsionally excited state and in the ground state. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1973, 46, № 8, 2311—2314 (англ.)

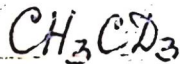
молек.
структ.

С применением теории колебаний большой амплитуды к торсионному движению изучено влияние торсионно-возбужденных состояний на структуру молек. скелета. В соответствии с данными неэмпирич. расчетов МО для этана (РЖХим, 1969, 19Б14) и микроволновыми данными для CH_3CD_3 (РЖХим, 1971, 24Б317) найдено увеличение расстояния С—С на 0,0028 Å и уменьшение угла HCH на 0,05° в первом торсионно-возбужденном состоянии молекулы CH_3CD_3 по сравнению с основным.

В. Спиридонов

х. 1974
N2

⊗
⊕1 Ембз



структ.
нафаз.

Tajima Takao. 1973

"Bull. Chem. Soc. Jap"

1973, 46, N 8, 2311-14.

(ser. C_2H_6 ; III)

C_2D_6

CD_3CH_3

(cf. n)

Kondo Shigeo

1973

u.s.g.

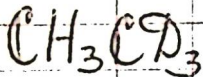
Bp-4672-XIV

"Spectrochim acta"

1973, A29, N4, 735-751

(on C_2H_6 ; III)

1974



(Ji, м.и.)

15 B290. Микроволновый спектр этана. Matsumura Chi. «Tokē kogē siken sē hokoku, Tokyo kogyo shikensho hokoku, J. Nat. Chem. Lab. Ind.», 1974, 69, № 12, 508—509 (япон.; рез. англ.)

Измерена частота перехода $J=2 \leftarrow 1$, $K=1$ молекулы CH_3CD_3 в основном состоянии, равная $65896,923 \pm \pm 0,05$ МГц. Линия зарегистрирована при напряженности постоянного поля 1116 в/см и переменного 447 в/см и состоит из двух штарковских компонент приблизительно одинаковой интенсивности. Для двух значений постоянной центробежного искажения $D_J = 2,7 \times 10^{-7} \text{ см}^{-1}$ или $4,2 \times 10^{-7} \text{ см}^{-1}$, взятых из работ др. авторов, определены два значения вращательной постоянной B_0 в см^{-1} , соотв., $0,0549523 \text{ см}^{-1}$ или $0,549524 \text{ см}^{-1}$. По эффекту Штарка для исследованного перехода определен дипольный момент: $\mu = 0,01078 \pm \pm 0,00009 D$.

С. Н. Мурзин

л. 1975 № 15

40227.6040

Ch, Ph, TE

 CH_3CD_3

41125

1974

1971

Susskind Joel.

Theory of torsion-vibration-rotation interaction in ethane and analysis of the band $\nu_{11} + \nu_4$.

"J. Mol. Spectrosc.", 1974, 49, N1, 1-17
(англ.)

039

040

046

0054 ВИНИТИ

CH_3CD_3

ХЧ-15251

1976

6 Б231. Колебательно-вращательные спектры этана и дейтероэтанов. Полоса ν_2 молекулы CH_3CD_3 . Suzuki Isao. Vibration-rotation spectra of ethane and deuterioethanes the ν_2 band of CH_3CD_3 . «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 2, 289—298. (англ.)

С разрешением $0,04\text{ см}^{-1}$ измерен ИК-спектр поглощения молекулы CH_3CD_3 в области $2130\text{—}2060\text{ см}^{-1}$. Идентифицировано около 400 линий вращательной структуры полосы ν_2 . Определены значения вращательных и центробежных постоянных. М. Р. Алиев

м.п.

1897-1118

Л. 1977 № 6

$C_2H_3D_3$

Hy 15251

XIV-7681

1976

(u,n)

85: 53958c Vibration-rotation spectra of ethane and deuterioethanes. The ν_2 band of ethane- d_3 . Suzuki, Isao (Educ. Comput. Cent., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 61(2), 289-98 (Eng). The ν_2 band of CH_3CD_3 was measured under an effective resolution of 0.04 cm^{-1} . About 400 transitions obsd. in the region from 2130 to 2060 cm^{-1} were identified as due to the ν_2 fundamental band. The least-squares anal. of these transitions yields the band constants: $\nu_0 = 2089.957$, $B' = 0.548937$, $D_J' = 6.97 \times 10^{-7}$, $D_{JK}' = 1.92 \times 10^{-6}$, $A' - A'' = -0.01158$, and $D_{K}' - D_{K}'' = 1.30 \times 10^{-6}\text{ cm}^{-1}$. The ground-state constants B'' , D_J'' , and D_{JK}'' are fixed to the values obtained from microwave spectroscopy.

C. J. 1976. 85. N8

CH_3CD_3

83-15251

1976

3 Д372. Колебательно-вращательные спектры этана и дейтерозетанов. Полоса ν_2 в ИК-спектре CH_3CD_3 . Suzuki Isao. Vibration-rotation spectra of ethane and deuterioethanes the ν_2 band of CH_3CD_3 . «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 2, 289—298 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($2050—2350\text{ см}^{-1}$) газообразных CH_3CD_3 (I) и CD_3CD_2 (II) при разрешении $0,04\text{ см}^{-1}$. Эффективная длина кюветы составляла 6 м при давлении паров I и II, равном 1 мм рт. ст. В ИК-спектре I в области $2130—2060\text{ см}^{-1}$ зарегистрировано ~400 переходов, приписанных вращательной структуре полосы ν_2 валентного колебания группы CD_3 . По методу наименьших квадратов определены спектроскопич. константы полосы ν_2 I: $\nu_0 = 2089,957$; $B' = 0,548937$, $D_J' = 6,97 \cdot 10^{-7}$, $D_{JK}' = 1,92 \cdot 10^{-6}$, $A' - A'' = -0,01158$ и $D_{K'} - D_{K''} = 1,30 \cdot 10^{-6}\text{ см}^{-1}$, причем значения констант основного состояния B'' , D_J'' и D_{JK}'' вычислены по данным микроволн. спектра I и составляют $0,549528$; $6,54 \cdot 10^{-7}$ и $1,7 \cdot 10^{-6}\text{ см}^{-1}$ соответственно. Библ. 20.

И. В. А.

сн, н.

1837-11K

(41) X

ф. 1977
N 3

CH_3CD_3

* 4 - 18389

1977

10 Д554. Микроволновые спектры молекул $^{13}\text{CH}_3^{12}\text{CD}_3$ и $^{12}\text{CH}_3^{13}\text{CD}_3$ и длина связи С—О-этана. Hirota Etzt, Matsumura Keiji, Imachi Misako, Fujio Mizue, Tsuno Yuho, Matsumura Chi. Microwave spectra of $^{13}\text{CH}_3^{12}\text{CD}_3$ and $^{12}\text{CH}_3^{13}\text{CD}_3$ and the C—C bond length of ethane. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 6, 2660—2663 (англ.)

На штарковском спектрометре с чувствительностью 10^{-10} см^{-1} исследованы микроволн. спектры трех изотопич. разновидностей (с $^{12,13}\text{C}$) квазиполярной молекулы CH_3CD_3 . Вблизи 65 и 100 Гц идентифицированы линии вращательных переходов с $J=1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ основного колебательного состояния этих молекул. Определены значения вращательной постоянной B_0 , по которым вычислены r_s -длина связи С—С (1,5261 Å). По эффекту Штарка на переходе $1 \rightarrow 2$ измерен дипольный момент CH_3CD_3 (от 0,0106 до 0,0109 ед. Дебая). М. Р. Алиев

ф. 1977 № 10

$\text{CH}_3.\text{CD}_3$

19 Б292. Микроволновые спектры $^{13}\text{CH}_3^{12}\text{CD}_3$ и $^{12}\text{CH}_3^{13}\text{CD}_3$ и длина С—С связи в этане. Hirota Eizi, Matsuura Keiji, Imachi Misako, Fujio Mizue, Tsuno Yuho, Matsumura Chi. Microwave spectra of $^{13}\text{CH}_3^{12}\text{CD}_3$ and $^{12}\text{CH}_3^{13}\text{CD}_3$ and the C—C bond length of ethane. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 6, 2660—2663 (англ.)

1477

Измерены в области частот от 60 до 100 Гц МВ-спектры этанов $^{12}\text{CH}_3^{12}\text{CD}_3$ (I), $^{13}\text{CH}_3^{12}\text{CD}_3$ (II), и $^{12}\text{CH}_3^{13}\text{CD}_3$ (III). Для I идентифицированы две компоненты $K=1$ и 2 перехода $J=3-2$ и для II и III по одному переходу $J=2-1$, $K=1$. Для I, II и III, соотв., определена вращательная постоянная (в Мгц) $B_0=16474,438\pm 0,03$, $16088,428\pm 0,03$ и $16251,914\pm 0,03$. Постоянные центробежного искажения для I равны $D_J=0,0196$, $D_{JK}=0,05$ мгц, что хорошо согласуется с расчетными значениями. Вычислены r_s -координаты двух атомов углерода в I и определена длина связи С—С: $r_s(\text{C—C})=1,526131\pm 0,000083$ А. По эффекту Штарка для $J=2-1$ перехода найдены значения дипольных моментов II и III, соотв.: $\mu=0,01067\pm 0,00010$ и $0,01094\pm 0,00011$ D. Полученные результаты сравниваются с известными данными для родственных молекул.

С. Н. Мурзин

68381-54

м. в.
спектр

Х. 1977
N 19

CH_3CD_3 m m m m m 5800 1977

Suzuki T. H.; et al

Can. J. Chem., 1977, 55

3124-3131.

Behavior of hydrogen atoms
in the fragmentation of CH_3CD_3 .

CH_3CD_3

1980

(2i)

1980: 212369v Infrared rotation-vibration spectra of ethane.
The parallel band, $2\nu_3$, of ethane- D_3 . Heise, H. M.; Cole, A.
R. H. (Sch. Chem., Univ. West. Australia, Nedlands, 6009
Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 33(2), 245-60 (Eng).
The parallel band, $2\nu_3$, of MeCD_3 was measured at 2715-2780
 cm^{-1} under a spectral resolu. of $\sim 0.025 \text{ cm}^{-1}$, increased to
 $\sim 0.015 \text{ cm}^{-1}$ by deconvolution. About 460 lines are identified in
the $2\nu_3$ band, and ~ 240 lines in a hot band arising from the 1st
excited torsional state. Least-squares analyses with $\Delta_2 F''$
combination differences yield lower-state parameters. An
individual subband anal. was undertaken because of perturbations
in the vibrational bands studied. Finally, band consts. were
derived.



C. A. 1980. 93 v 22

CH_3CD_3

[number 10734]

1980.

Heise H. M., Cole A. R. H.

спектр

di, m. n.

J. Mol. Spectrosc., 1980,

83, 245-60.

CH₃CD₃

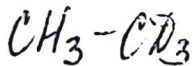
emmic 10044

1980

93: 16052z Rotational fine structure of the perpendicular band, ν_7 , of ethane-1,1,1-d₃. Heise, H. M.; Cole, A. R. H. (Sch. Chem., Univ. West. Australia, Nedlands, 6009 Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(2), 320-33 (Eng). The gas-phase IR spectrum of CH₃CD₃ in the region of the perpendicular C-H stretching band, ν_7 , near 3000 cm⁻¹ was studied under a spectral resolu. of ~0.025 cm⁻¹, increased to ~0.015 cm⁻¹ by deconvolution. An assignment of lines in the subbands $K\Delta K = +15$ to -3 is proposed, and their upper-state consts. are reported. The interpretation of the effective rotational const. of the individual subbands is complicated by a strong perturbation.

(ν_7)

CA 1980 93 12



Смтмсс 100С/4

1980

1 Д396. Тонкая вращательная структура перпендикулярной полосы ν_7 этана-1,1,1- d_3 . Rotational fine structure of the perpendicular band, ν_7 , of ethane-1,1,1- d_3 . Heise H. M., Cole A. R. H. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 320—333 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного этана CH_3-CD_3 вблизи 3000 см^{-1} при давлении 1—2 мм рт. ст. с разрешением $0,025\text{ см}^{-1}$. С помощью деконволюции разрешение увеличено до $0,015\text{ см}^{-1}$. Приведены спектры и частоты наблюдаемых полос, определенные со средней точностью $0,002\text{ см}^{-1}$. С помощью диаграммы Лумиса — Вуда выполнено отнесение линий к колебательно-вращательным переходам перпендикулярной полосы валентного колебания группы $\text{CH}_3\ \nu_7$. С привлечением микроволн. данных для основного состояния определены параметры молекулы в возбужденном колебательном состоянии. При анализе учтены константы центробежной деформации и ее влияния на кориолисово взаимодействие, член $D_k'-D_k''$ при анализе исключен. Совместным анализом получен-

(и.п.; δ_i)

Ф. 1981/VI

ных данных и спектра комб. рас. найдены колебательная частота ν_7 , вращательные постоянные A и B в основном и возбужденном колебательном состоянии и константа кориолисова взаимодействия. Отмечен случай локального резонанса вблизи подполос $K=8,9$.
Бл. 19. М. Т.

лож
чен

CH_3CD_3

1981

5 Д400. ИК-спектр высокого разрешения этана-1,1,1- D_3 . Колебательно-вращательные спектры CH_3CD_3 и $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$. The high-resolution infrared spectrum of ethane-1,1,1- D_3 rovibration studies of CH_3CD_3 and $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$. Duncan J. L., Harper J., Morrisson A. R., Nivellini G. D., Tullini F. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 197—214 (англ.)

Получены ИК-спектры ($1500-1000\text{ см}^{-1}$) газообразных молекул CH_3CD_3 (I) и $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$ (II) со спектральным разрешением $\sim 0,05\text{ см}^{-1}$. Идентифицированы вращательные компоненты ИК-полос валентных симметричных колебаний групп CD_3 , асимметричных вал. кол. групп CH_3 , асимметричных деф. кол. групп CD_3 и CH_3 , а также крутильного колебания ν_{12} группы CD_3 I и II. Определены значения вращательных постоянных основного и возбужденных колебательных состояний I и II. Предположено, что искажения асимметричных дефор-

м.п., ν_i

ф. 1982, 18, N5.

мационных колебательных движений в I и II обусловлены кориолисовым взаимодействием этих колебаний с симметричными деф. кол. групп CH_3 и CD_3 , соответственно и взаимодействием с крутильным колебанием ν_{10} групп CH_3 II. Вычислены постоянные кориолисова взаимодействия 1-го и 2-го порядков в I и II. Проведена оценка констант центробежного искажения D_K^0 I и II. Библ. 11. И. В. А.



CH₃CD₃

Оттиск 14313 1982

23 Б262. Разрешение эффектов главного резонанса Ферми в фундаментальных частотах валентных колебаний ν_7 CH в CH₃CD₃ и C₂H₆. Duncan J. L. Resolution of the effects of a major Fermi resonance in the ν_7 CH stretching fundamentals of CH₃CD₃ and C₂H₆. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 5, 385—389 (англ.)

$\nu_i, \text{м.н.};$

(4) 

Проанализированы имеющиеся лит. данные по спектрам CH₃CD₃ в области основной полосы перпендикулярного типа ν_7 вал. кол. CH. Показано, что кроме локализованных резонансов Кориолиса существенное влияние на вращательную структуру оказывает резонанс типа Ферми между полосами ν_7 и $2\nu_9 \pm 2$. На базе простой модели ферми-резонансного взаимодействия между этими колебаниями объяснен вид спектра в области полосы ν_7 и аномально высокие значения постоянных ξ . Рассчитаны новые значения спектроскопич.

Х. 1982, 19, №23

параметров для полосы ν_7 с учетом резонансных взаимодействий (см^{-1}): $\nu_0=2967,05$, $\alpha_7^A-\alpha_7^B=0,000$, $A\xi_7=0,090$, $D_K=0$, $\xi_7=0,05$, $W=20,0$. Предложенная схема применена к анализу спектра в области полосы вал. кол. СН в C_2H_6 , где колебание ν_7 находится в резонансе Ферми с колебанием $\nu_8^{\pm 1}+\nu_{11}^{\pm 1}$ с теми же параметрами взаимодействия. Для полосы $\nu_7\text{C}_2\text{H}_6$ также рассчитаны новые спектроскопич. параметры с учетом резонанса Ферми (см^{-1}): $\nu_0=2977,76$, $\alpha_7^A-\alpha_7^B=-+0,007$, $A\xi_7=0,133$, $D_K=9,5\times 10^{-6}$, $\xi_7=0,05$, $W=20,0$. Отмечено, что наблюдение лишь небольшого участка структуры в P -ветви полосы ν_7 , а также существенное различие спектроскопич. параметров для полос ν_7 , рассчитанных с учетом ферми-взаимодействия и без него, не позволяют считать предложенную интерпретацию однозначной.

С. Б. Осин



CH_3CD_3

О.М. 14313

1982

1 Д549. Определение влияния главного резонанса Ферми на валентные колебания CH основных полос ν_7 CH_3CD_3 и C_2H_6 . Resolution of the effects of a major Fermi resonance in the ν_7 CH stretching fundamentals of CH_3CD_3 and C_2H_6 . Duncan J. L. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 5, 385—389 (англ.)

Выполнен повторный анализ спектров ИК-поглощения газообразных C_2H_6 и CH_3D_3 в области основных колебаний CH , отличный от предыдущего учетом резонанса Ферми с обертонами деф. кол. Показано, что совместный учет кориолисова взаимодействия и резонанса Ферми устраняет аномалии в кориолисовых постоянных ζ и дает возможность обеспечить хорошее согласие рассчитанных и наблюдаемых спектров.

М. В. Т.

М.П.

(+1) 

 C_2H_6

р. 1983, 18, n1

CH₃CD₃

[Ommuck 14328]

1982

97: 82025b The ν_5 Raman band of ethane-d₃. Jensen, Per; Brodersen, Svend (Dep. Chem., Univ. Aarhus, Aarhus, DK-8000 Den.). *J. Raman Spectrosc.* 1982, 12(3), 295-99 (Eng). The ν_5 Raman band of CH₃CD₃ was photographed with a resolu. of $\sim 0.4 \text{ cm}^{-1}$ and analyzed by an iterative method, in which the peak wavenos. of the obsd. and computed contours are compared directly. Precise values for ν_0 and ΔB were obtained, whereas it only could be shown that ΔA is an order of magnitude smaller than ΔB . Some basic problems of the method of anal. are discussed.

ν_5 ;

c.A. 1982, 97, N 10

CH₃CD₃

Оттиск 14328 1982

12 Д681. Полоса ν_5 комбинационного рассеяния CH₃CD₃. The ν_5 Raman band of CH₃CD₃. Jensen Per, Brodersen Svend. «J. Raman Spectrosc.», 1982, 12, № 3, 295—299 (англ.)

Получен спектр изотропной компоненты комб. рас. газообразного CH₃CD₃ при давл. ~1 атм в области полосы ν_5 с разрешением 0,4 см⁻¹ при возбуждении линией 488 нм лазера Ar⁺ с фотоаграфич. регистрацией. Выполнено отнесение компонент дискретной структуры полосы, связанное с изменением квантового числа J , приведены частоты этих компонент. С использованием литературных данных для постоянных A_0 , B_0 и D_0 сравнением рассчитанных спектров с экспериментальными определены изменения этих констант при возбуждении колебания ν_5 . Библ. 17. М. В. Т.

М.П.

ср. 1982, 18, N 12

CH_3CD_3

Оттиск 14328 1982

22 Б228. Полоса ν_5 в спектре комбинационного рассеяния CH_3CD_3 . Jensen P., Brodersen S. The ν_5 Raman-band of CH_3CD_3 . «J. Raman Spectrosc.», 1982, 12, № 3, 295—299 (англ.)

$\nu_i, \text{м.п.}$

С разрешением $0,4 \text{ см}^{-1}$ сфотографированы (экспозиция 16 ч.) спектры КР с возбуждением $\lambda 488,0 \text{ нм}$ анизотропной компоненты полосы ν_5 в области $800—1000 \text{ см}^{-1}$ газ. (760 Торр) CH_3CD_3 . С использованием гамильтониана, учитывающего внутреннее вращение в CH_3CD_3 , для модели с молекулярной симметрией G_{18} проведен вращательный анализ спектра. Несмотря на то, что К-структура полосы ν_5 в спектре КР не разрешалась, примененная итерационная процедура, в которой сравнивались значения волновых чисел наблюдаемого и рассчитанных контуров, разбитых на отрезки в $0,01 \text{ см}^{-1}$, получены уточненные значения молек. постоянных CH_3CD_3 основного состояния, см^{-1} : $B_0 = 0,549526 (2)$, $D_I = 6,66 (7) \times 10^{-7}$, $D_{IK} = 1,45 (15) \times 10^{-6}$ и колебательного состояния ν_5 , см^{-1} : $\nu_0 = 904,638 (10)$, $\Delta A = -0,00010 (1)$, $\Delta B = -0,003028 (4)$. Обсуждено влияние «горячих» полос и взаимодействия ν_5 с др. колебательными со-

X. 1982, 19, N 22

стояниями на точность определения молек. постоянных
 CH_3CD_3 . А. Н. Курский

CH₃ CD₃

1982

6 Д444. ИК-спектр высокого разрешения этана-1,1,1-D₃. Колебательно-вращательный анализ псевдоперпендикулярной A₁A₂ полосы $\nu_9 + \nu_{10}$ и параллельных полос $\nu_3 + \nu_4$ и ν_5 . The high-resolution infrared spectrum of ethane-1,1,1-D₃ rovibration analyses of the pseudoperpendicular A₁A₂ $\nu_9 + \nu_{10}$ band and the parallel $\nu_3 + \nu_4$ and ν_5 bands. Nivellini G. D., Tullini F., Duncan J. L., Morrisson A. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 1, 183—194 (англ.)

и, м.п.

Получены спектры ИК-поглощения газообразного этана CH₃CD₃ в слое 18,75 м при давл. 5 мм рт. ст. с разрешением 0,05 см⁻¹. С абс. точностью 0,01 см⁻¹ измерены частоты линий. Приведены спектры в области полос ν_5 , $\nu_3 + \nu_4$ и $\nu_9 + \nu_{10}$. Выполнен колебательно-вращательный анализ этих полос. Полоса $\nu_9 + \nu_{10}$ обнаруживает псевдоперпендикулярную структуру из-за большого значения эффективной константы кориолисова

90. 1983, 18, № 6

взаимодействия почти вырожденных компонент A_1 и A_2 этого колебания для всех ненулевых квантовых чисел K . Вследствие этого расстояние между ветвями Q подполос достигает $2,5 \text{ см}^{-1}$. Для анализа полосы ν_5 выполнены расчеты контура Q -ветви. Использование данных по полосам ν_9 и $2\nu_3$ позволило определить параметры молекулы в состояниях ν_4 и ν_{16} , недоступных непосредственному изучению. Библиография 10.



CH₃CD₃

1982

(ν_i)

(98: 24873m The high-resolution infrared spectrum of ethane-1,1,1-D₃ rovibration analyses of the pseudoperpendicular A_1A_2 $\nu_9 + \nu_{10}$ band and the parallel $\nu_3 + \nu_4$ and ν_5 bands. Nivellini, G. D.; Tullini, F.; Duncan, J. L.; Morrisson, A. R. (Ist. Spettrosc. Mol., CNR, Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 96(1), 183-94 (Eng). A complete vibration-rotation anal. was made of the A_1A_2 combination band $\nu_9 + \nu_{10}$ of CH₃CD₃ at 2582 cm⁻¹. This band exhibits pseudoperpendicular structure due to the large effective Coriolis interaction const. ($\xi \approx 0.7$), which couples the almost degenerate A_1 and A_2 vibrational components for all nonzero values of the rotational quantum no. K , and gives a subband Q-branch spacing of 2.5 cm⁻¹. The location of the band center is assisted through an interruption of the perpendicular-like structure, since both $K = 0$ Q branches are forbidden by the vibrational and rotational selection rules. The conventional A_1 parallel bands $\nu_3 + \nu_4$ at 2507 cm⁻¹ and ν_5 (CC stretch) at 905 cm⁻¹ were also analyzed. For ν_5 , a combination of numerical anal. and band contour simulation was used to det. a set of upper-state rotation parameters. Combination of the present results with previous data for ν_9 and $2\nu_3$ permits rotational parameters to be derived for the ν_4 and ν_{10} fundamentals of CH₃CD₃. Neither of these fundamentals are amenable to straightforward anal., both being very weak in the IR and overlaid by the intense ν_{11} fundamental.

C.A. 1983, 98, N 4.

CH_3CD_3

[Om. 18230]

1982

ν_5 ,

Per Jensen and Svend Bro-
dersen,

J. Raman Spectrosc.,
1982, ● 12, N3, 295-
299.

CH_3CD_3

Ум. 16821

1983

11 Д97. Эмпирическое общее гармоническое силовое поле этана. The empirical general harmonic force field of ethane. Duncan J. L., Kelly R. A., Nivellini G. D., Tullini F. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 98, № 1, 87—110 (англ.)

Получены спектры КР- и ИК-спектры CH_3CD_3 , $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$ и $\text{CH}_3^{13}\text{CD}_3$. Выполнен анализ резонансов Ферми ~~между частотами~~ ν_1 , $2\nu_9^0$, $2\nu_3$; ν_2 , $2\nu_{11}^0$, $2\nu_4$ и ν_7 , $2\nu_9^2$. На основании этих спектров определены 12 частот колебаний, изотопич. сдвиги, нулевые частоты, постоянные Кориолиса и постоянные центробежного искажения этих трех молекул. 175 частот колебаний, изотопич. сдвигов, постоянных Кориолиса и центробежного искажения этана и 9 его замещенных, содержащих дейтерий и ^{13}C , использованы для определения 22 параметров общего валентного поля этана с большой точностью. Учитывалась ангармоничность валентных и деформационных колебаний. Вычисленные эмпирические силовые постоянные очень хорошо согласуются с найденными при помощи неэмпирических квантовомеханич. расчетов. Гармонические силовые постоянные использованы для вычисления

ν_i , м.п.;

ср. 1983, 18,
N 11

постоянных Кориолиса 12 изотопич. модификаций этана
и постоянных центробежного искажения 20 изотопиче-
ских его производных и поворотных изомеров.
М. А. Ковнер



$\text{CH}_3 \text{ CD}_3$

1984

23 Б1298. Определение анизотропии магнитной восприимчивости молекулы CH_3CD_3 по вращательному Зееман-эффекту второго порядка. The susceptibility anisotropy of CH_3CD_3 from the second-order rotational Zeeman effect. Hüttner W., Häussler H., Majer W. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 109, № 4, 359—362 (англ.)

л.л.

Исследован эффект Зеемана на линии вращательного перехода с $J=0 \rightarrow 1$ основного колебательного состояния молекулы CH_3CD_3 . По зеемановскому сдвигу этой линии (2-го порядка по магнитному полю) измерена анизотропия магнитной восприимчивости $\Delta\xi$. Полученное значение $\Delta\xi = -0,973 \cdot 10^{-29} \text{ см}^3$ согласуется с результатами измерения эффекта Коттона — Мутона и деполяризации релеевского рассеяния, к-рые дают величины $\Delta\alpha \cdot \Delta\xi = -0,713 \cdot 10^{-53} \text{ см}^6$ и $\Delta\alpha = 0,711 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$, соотв. ($\Delta\alpha$ — анизотропия оптич. поляризуемости).

Е. В. Алиева

X. 1984, 19, N 23

CH_3CD_3

21268

1984

17 B1251. Внутреннее вращение, эффект Штарка и вращательные магнитные моменты CH_3CD_3 . Internal rotation, Stark effect, and rotational magnetic moments in CH_3CD_3 . Ozier I., Meerts W. L. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1844—1854 (англ.)

С использованием метода пересечения уровней вместе с методом эл. резонанса в молек. пучке (Ozier I., Meerts W. L. «Can. J. Phys.», 1981, 59, 1150) измерено торсионное расщепление в спектре этана-1,1,1- d_3 , CH_3CD_3 . Измерены разности энергий уровней $J=1$ и 2 в нулевом поле для запрещенных переходов. Определены вращат. постоянные $A=53499$ (11) МГц, $B=16503,81$ (8) МГц. Из измеренного расщепления определена эффективная высота барьера внутр. вращения $V_3=1004,13$ (21) см^{-1} . Полученные результаты сопоставлены с известными данными для др. дейтерированных изотопич. образцов этана. Измерение барьера внутренне-

М. Н.

X. 1985, 19, N 17.

то вращения при дейтерировании составляет $-3,05(13) \text{ см}^{-1}$ на один дейтерий. По эффектам Штарка и Зеемана измерены эффективный дипольный момент, анизотропия поляризуемости, g -факторы и анизотропия магн. восприимчивости. Полученные результаты представлены в виде набора 19 молек. постоянных.

С. Н. Мурзин

CH₃CD₃

DM. 21268

1989

102: 87366v Internal rotation, Stark effect, and rotational magnetic moments in ethane (CH₃CD₃). Ozier, Irving; Meerts, W. Leo (Dep. Phys., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 2A6). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1844-54 (Eng). Ethane-1,1,1-d₃ was studied by the elec.-resonance mol.-beam method. By anticrossing techniques, the zero-field energy differences for $J = 1$ and 2 were measured corresponding to the normally forbidden selection rules ($J \leftrightarrow J$), ($K = \pm 1 \leftrightarrow \mp 1$), and ($\sigma = \mp 1 \leftrightarrow 0, \mp 1$). From these splittings, 3 splitting ratio measurements, and 4 existing R-branch microwave frequencies, detns. were made of the moment of inertia of the CH₃-top $I_a = 3.1549(12)$ amu Å² and of the effective ht. of the 3-fold barrier to internal rotation $V_3 = 1004.13(21)$ cm⁻¹, as well as of B and several distortion consts. From the current CH₃CD₃ value of V_3 together with previous values for asym. deuterated forms of C₂H₆, it was shown that the change of V_3 with deuteration is -3.05(13) cm⁻¹ per deuteron. By conventional beam methods, the Stark and Zeeman effects were studied. The Stark measurements were analyzed in terms of the anisotropy ($\alpha_{||} - \alpha_{\perp}$) in the polarizability and the effective dipole moment for the matrix elements diagonal in J , namely $\mu_Q = \mu_0 + \mu_J J(J+1) + \mu_K K^2$; $\mu_0 = 0.0108617(5)$ D, $\mu_J = 0.809(53)$ μD, $\mu_K = -2.06(10)$ μD, and $(\alpha_{||} - \alpha_{\perp}) = 0.672(27) \times 10^{-24}$ cm³. The 2 mol. g factors were measured, $g_{||} = 0.16451(25)$ nm and $g_{\perp} = 0.00325(16)$ nm, and the anisotropy ($\chi_{||} - \chi_{\perp}$) in the magnetic susceptibility was evaluated.

(V₀)

e. A. 1985, 102, N10

CH_3CD_3

1984

10 Л142. Внутреннее вращение, эффект Штарка и вращательные магнитные моменты в CH_3CD_3 . Internal rotation, Stark effect, and rotational magnetic moments in CH_3CD_3 . Ozier Irving, Meerts W. Leo. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1844—1854 (англ.; рез. фр.)

М.П.

ср. 1985, 18, N 10

CH₃CD₃

1986

(25)

123231q Internal rotation in ethane-1,1,1-d₃: Raman spectroscopy of torsional overtones. Van Helvoort, K.; Fantoni, G.; Meerts, W. Leo; Reuss, J. (Fys. Lab., Kathol. Univ. Nijmegen, 3525 ED Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 128(5-6), 491-6 (Eng). MeCD₃ torsional overtones were obsd. by spontaneous Raman scattering in a laser intracavity app. $\Delta v = 2$ Multiplet splittings of ≤ 6 th torsional level were measured. The new data are compared with $\Delta v = 0$ transitions from ref. 1985 and 1986.

C.A. 1986, 105, N14

CH₃ CD₃

(м.п.)

Ф. 1986, 18, N 12

1986
† 12 Л275. Внутреннее вращение в CH₃CD₃: спектроскопия комбинационного рассеяния крутильных обертонов. Internal rotation in CH₃CD₃: Raman spectroscopy of torsional overtones. Van Helvoort K., Fantoni R., Meerts W. Leo, Reuss J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 128, № 5—6, 494—500 (англ.)

Методом внутривибрационной спектроскопии, с разрешением $\sim 1,2 \text{ см}^{-1}$ исследован спектр КР в области обертоновых переходов CH₃CD₃, обусловленных крутильными колебаниями. С точностью $0,5 \text{ см}^{-1}$ при отстройках от частоты возбуждающей линии в интервале $250—500 \text{ см}^{-1}$ измерены частоты линий крутильно-вращательной структуры полос с $\Delta v = 2$, соответствующих переходам в крутильные состояния вплоть до $v = 6$, определены относ. интенсивности линий. С привлечением литературных данных по микроволн. спектру основного состояния и ИК-спектрам колебательно-вращательных полос с $\Delta v = 1$ выполнен анализ эксперим. данных, учитывающий крутильно-вращательное взаимодействие, и предложена интерпретация крутильно-вращательных линий. Представлено сравнение наблюдаемых частот и интенсивностей линий с рассчитанными. Определены высоты барьеров внутреннего вращения CH₃ и CD₃ групп. В. К.

CH₃CD₃

1993

119: 236839g Millimeter-wave spectrum of 1,1,1-trideuteroethane in the three lowest torsional states. Moazzen-Ahmadi, N.; Ozier, I.; Mukhopadhyay, I.; Amano, T. (Dep. Phys., Univ. Lethbridge, Lethbridge, AB Can. T1K 3M4). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(4), 2429-38 (Eng). The pure rotational spectra of CH₃CD₃ in the three lowest torsional states has been obsd. using a mm-wave spectrometer. A total of 87 rotational frequencies were measured between 230-363 GHz for $J = 7 \leftarrow 6$ to $11 \leftarrow 10$ in $v_6 = 0, 1$, and 2, where v_6 is the torsional quantum no. For the lowest two torsional states, the spectra have the classic form expected for a sym. top (with no internal rotation) in the ground vibrational state. For $v_6 = 2$ and for a given $(J+1) \leftarrow J$, a markedly different splitting pattern is obsd. as a result of the (K, α) dependence of the effective rotational const. B, where α labels the torsional sublevels. In order to identify the individual features in the ($v_6 = 2$) spectrum, an assignment procedure was developed which is based on the fact that the ratio of moment of inertia of the top about the mol. symmetry axis to that of the whole mol. about the same axis is to a very good approxn. 1/3. The torsion rotation Hamiltonian discussed earlier in connection with CH₃SiH₃ [N. Moazzen-Ahmadi et al. *J. Mol. Spectrosc.* 119, 299

memo for
exam. prep.
V₀

C. A. 1993, 119, N 22

(1986)) was used to analyze the rotational frequencies along with the mol. beam anticrossing data and the origin of the torsional fundamental. Several constn. which characterize the J -dependence of the energy levels were detd. Effective values for the barrier height V_b and the shape parameter V_a assocd. with the first-order correction in the Fourier expansion of the potential function were obtained. The effect of redundancies on the interpretation of the measurements is discussed.

CH₃CD₃

1993

751247. Миллиметровый спектр CH₃CD₃ в трех низших торсионных состояниях. Millimeter-wave spectrum of CH₃CD₃ in the three lowest torsional states /Moazzen-Ahmadi N., Ozier I., Mukhopadhyay I., Amano T. //J. Chem. Phys. .—1993 .—99 ,№ 4 .—С. 2429—2438 .—Англ.

На миллиметровом спектрометре в области частот 230—370 ГГц с разрешением около 1 МГц и точностью около 40 кГц измерен вращат. спектр дейтерированного этана CH₃CD₃ в основном и первых двух возбужденных торсионных состояниях. Анализ спектра выполнен в приближении модели симм. волчка с учетом кватричного центробежного искажения, внутр. вращения и торсионно-вращат. вз-вия. Определены вращат. постоянные в МГц: $A=53499,0000$, $B=16503,2070(54)$ и параметры барьера внутр. вращения в см⁻¹: $V_3=994,04(16)$, $V_6=12,65(18)$. Обсуждаются трудности интерпретации полученных данных в связи со взаимной зависимостью молек. постоянных. Библ. 33. С. Н. Мурзин

М.А.

Х. 1994, № 7

1996

F: CH₃CD₃

P: 3

16Б1292. Торсионный спектр CH[3]CD[3]. The torsional spectrum of CH[3]CD[3] / Moazzen-Ahmadi N., Ozier I., McKellar A. R. W., Zerbetto Francesco [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 105, N 19. - С. 8536-8542. - Англ.

РЖХ 1997

CH₃CD₃

1997

} 24Б1716. ¹²CH₃¹²CD₃. Триада ν_4 , ν_{10} , ν_{11} с резонансом Кориолиса. ¹²CH₃¹²CD₃. The Coriolis resonating triad ν_4 , ν_{10} , ν_{11} / Nivellini Giandomenico, Fusina Luciano, Tullini Franca, Poluzzi Andrea // Gazz. chim. ital.— 1997.— 127, № 1.— С. 45-52.— Англ.

В областях 1123,5–1119,5 см⁻¹, 1134,5–1131,5 см⁻¹ и 1035,5–1032,5 см⁻¹ получены ИК-фурье-спектры этана-d₃ с разрешением вращательной структуры и отнесением частот к вращательным квантовым числам. Определены спектроскопич. параметры основного и возбужденных колебательных состояний и параметры взаимодействия Кориолиса.

М. Ковнер

ν_4 , ν_{10} , ν_{11}

Х. 1997, № 24

CH₃CD₃

2001

135: 202079z Torsional Splitting in the ν_5 Fundamental Infrared Band of CH₃CD₃ and ¹³CH₃CD₃. Lattanzi, E.; di Lauro, C.; Claveau, C.; Valentin, A.; Nivellini, G. D. (Dipartimento di Chimica Farmaceutica e Tossicologica, Universita di Napoli Federico II, I-80131 Naples, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 2001, 207(2), 193-200 (Eng), Academic Press. The ν_5 fundamental (C-C stretching) of CH₃CD₃ shows a resolved torsional structure, caused by perturbations due mainly to the linear dependence of the torsional potential barrier on the normal coordinate Q₅. We were able to analyze this structure and to assign vibration-rotation transition wavenumbers for all five torsional components, classified according to the symmetry species of the G₁₈⁽³⁾ extended mol. group. The torsional splitting pattern is qual. similar to that of a non-degenerate vibrational state with an even no. of excited torsional quanta ν_6 . Explorative calcns. show that the main perturber system should consist of the torsional components of the vibrational ground state cor-

(ν_5 , морщин-
расщепл.)

C.D. 2001, 135, №14

relating with $\nu_6 = 4$ in the high barrier limit. The strength of the perturbation on the E_{r0} torsional components of ν_6 increases rapidly with r , the E_{40} component being the most affected. The obsd. transition wavenumbers can be reasonably fitted by a simplified model contg. independent effective vibration-rotation parameters for the five different torsional components of ν_6 , for both CH_3CD_3 and $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$. The trend of the detd. values of the effective vibrational wavenumbers and rotational parameters over the torsional components supports the proposed vibration-torsion interaction mechanism, responsible for the obsd. torsional splittings. A strong anomaly obsd. in the rotational intensity distribution of ν_6 is discussed. (c) 2001 Academic Press.