

C - Φ - H

Y390 1949

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{D}$, $\text{CH}_2\text{D}\cdot\text{CH}_2\text{D}$ (mon. isotopes)

de Hemptinne M.

J. chim. phys., 1949, 46, 98-102

(Int. Coll. Raman Effect - Bordeaux, 1948)

The determination of the symmetry of the ethane molecule and of the brominated derivatives of ethane.

W

CA, 1950, 44, 9258-8 3

C_2D_5H (v.)

IV

4409

1950

van Riet R., de Kemptinne M.

Ann. soc. sci. Bruxelles, Sér I, 1950, 64, 177-87

The Raman spectrum of the molecule
 CD_3-CD_2H

2

C.A., 1951, 10055g

W

IV-1821

1953

CH_3NO_2 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$, CH_2D (I, D)

d, Or L., Collin J.

Bull.soc.roy.sci.Liège, 1953, 22,
285-304

Behavior of aliphatic nitrites

...

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

J

IV-4404 ~~1104~~

1953

$\text{CH}_2\text{D}-\text{CH}_2\text{D}$ (Vi, Be)

Riet R., Courtoy C., Hemptinne M.

Ann. Soc. scient. Bruxelles, 1953,

67, 1, N 2, 105-121

Spectre infrarouge ...

J

$\text{C}_2\text{D}_2\text{H}_4$

IV - 4407
4407

1953

$\text{CD}_2\text{H}-\text{CD}_2\text{H}$ (Vi, Be)

Van Riet R., Courtoy C.,
Hemptinne M. de

Ann. Soc. scient. Bruxelles, 1953, ser. 1,
67, N 3, 269-308

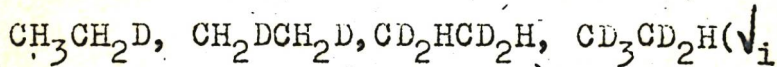
Spectre infrarouge ...

J

$\text{C}_2\text{D}_4\text{H}_2$

IV-4395
~~4395~~

1953



van Riet R., de Hemptinne M.

Bull.classe sci., Acad.roy.Belg.

1953, 39, 273-84

Infrared and Raman ...

14-975 1954
H₂CO (V_i, A''-B'', $\angle$ HCD, τ_{C-H} , τ_{C-O})

Davidson D.W., Stoicheff B.P., Bernstein H.Y.

J. Chem. Phys., 1954, 22, N2, 289-294
(ammi.)

The infrared and Raman spectra
of formaldehyde-d, vapor.

PJEX, 1954, N17, 39166

10

2

7855 -

IV

1954

$\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CD}$ (B, D)

Grisenthwaite R.J., Thompson H.W.
Trans. Faraday Soc., 1954, 50, N 3,
212-217

The infrared spectrum of ...

J

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

$\text{CD}_3 - \text{CD}_2\text{H}$ (B, A, C) IV 4408 | 1954

Riet R., van Courtoy C., Kemptinne M. de.

Ann. Soc. scient. Bruxelles, 1954, 6, N1-2,
108-118 (opgave)

Contribution expérimentale à l'étude la molécule
 $\text{CD}_3 - \text{CD}_2\text{H}$.

PXXu 1955, 11124

W

2

IV-4405
~~Widd~~

1954

$\text{CH}_2\text{D}-\text{CH}_2\text{D} (\text{J}_i)$

Riet R.van, Hemptinne M.de

Ann.Soc.scient.Bruxelles, 1954,
68, N 1-2, 92-107
Les vibrations ...

J

$\text{C}_2\text{D}_2\text{H}_4$

IV-738

1956



(ν , $\angle \text{HCH}$, $\tau_{\text{C-H}}$, $\tau_{\text{C-O}}$, $\angle \text{HCO}$)



Brand J.C.D.,

J. Chem. Soc., 1956, Apr., 853-872

(англ.)

Электронный спектр ...



РХ., 1957, N 10,

33537

Ю

948-11

$\text{CH}_3, \text{CD}_3, \text{CH}_2\text{D}, \text{CHD}_2$ (J_i, J)

1956

Hertzberg G., Shoosmith J.,

Canad. J. Phys., 1956, 34, 11 5,
523-525 (Ann.)

PX., 1957, 11 1, 84

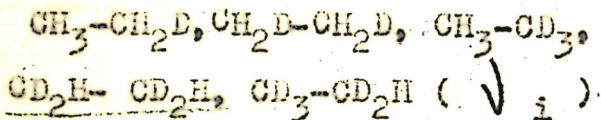
CDH_2

10

4393

IV

1954

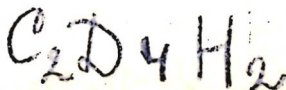


Van Riet R.

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

Спектры комбинационного ...

J



11-753
HDCO ($V_i, A, B, C, M, \tau_{x-y}, LXYZ$) 1960

Oka Takeshi, Hirakawa Hiromasa,
Shimoda Koichi

J, Phys. Soc. Japan, 1960, 15, N 12,
2265-2273, 2274-2279 (*and...*)

Microwave spectrum of ...

PX., 1962, 3 6132



CHHO

7751-11

1962

H₂CO, HDCO (mol.konst.)

Freeman D.E., Hunt G.R.

Austral.J.Chem., 1962, 15, N 4,
696-702

A force field for ...

J

CDHD

DHCO (

) 1963

Kewley R., Sastey V.L.N., Winnewisser E.
J.Molec.Spectrosc. } 1963, 10, II 6?
418-441 (

The millimeter wave ...

P ., 1964, 3D219

CDH10

1964
9 Д449. ЭПР-исследования внутренних вращений в радикалах. Fessenden Richard W. ESR studies of internal rotation in radicals. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1964, 61, № 11—12, 1570—1575. Discuss., 1575 (англ.)

СНД₂СД₂
2 2
Представлены подробные измерения сверхтонких расщеплений ЭПР спектра в пропиловом, изобутиловом, 3-бутиниловом и СНД₂СД₂ радикалах. Для радикалов этого типа зависимость константы связи от угла θ между выделенным β протоном и осью p -орбиты, содержащей неспаренный электрон, свидетельствует о добавочном расщеплении по сравнению с этиловым радикалом, возникающем от анизотропного усреднения по вращениям вокруг связи между α и β карбонами. Температурная зависимость согласуется с ожидаемой. Предложено рассмотрение, при котором угловая зависимость сначала

ф. 1965 9А

усреднена по собственным вращательным ф-циям (в случае двух барьеров по внутреннему вращению), а затем по больцмановскому распределению по различным вращательным уровням. Наблюдаемое расщепление согласуется с тем положением, что для первых трех радикалов должен быть принят барьер в 300 кал/моль, а для последнего 90 кал/моль. Проведены попытки связать эти барьеры с найденными в других молекулах. Отмечен изотопич. эффект в CHD_2CD_2 и в 7-дейтероциклопентатрине.

Р. Юльметьев

CT_4
 CH_3T
 CD_3T
 CH_2T_2
 CD_2T_2
 CHT_3
 CDT_3

1964
 № 2 Д73. Фундаментальные частоты дейтеро- и тритиевозамещенных тетраэдрических гидридов. Ковальчук Д. С., Морозов В. П. Фундаментальні частоти дейтеро-та тритієвозаміщених тетраедричних гідридів. «Укр. фіз. ж.», 1964, 9, № 8, 876—880 (укр.; рез. русск., англ.)

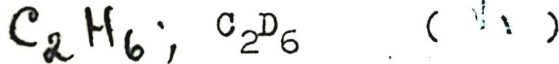
Рассчитаны фундаментальные частоты молекул типа RT_4 , RH_3T , RD_3T , RH_2T_2 , RD_2T_2 , RHT_3 , RDT_3 , где $R=C$, Si , Ge . Силовые постоянные взяты из расчетов молекулярных и спектроскопич. данных для молекул RH_4 и RD_4 . Анггармоничность колебаний учитывалась улучшенным методом спектроскопич. масс. Сравнение опытных (для случая $R=C$) и вычисленных частот приводят к удовлетворительному согласию. Методом вариаций изучено влияние исходных параметров на значения фундаментальных частот. Показано, что применение потенц. ф-ции с неполным набором силовых постоянных может вызвать отклонение отдельных частот в пределах 25 см^{-1} .

х. 1965.5



IV-9890

1964



Tejada S.B.

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

Infrared spectra of some...

J

11-9108

~~11-9108~~

HDO, HDS, CH₂O, CHCO (2) 1964

Thoddeus P., Arisher L.C., Loubser J.H.H.
J.Chem.Phys., 1964, 40, 2,
257-273 (*ans*)

Hyperfine structure in the
microwave spectrum of HDO, HDS, CH₂O and
...

P.L., 1964, 18597

LO

CH_3D_3 (n. n.) XIV 2953 1964

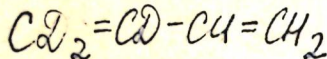
Blass W. E., Edwards T. H.,
J. Molec. Spectrosc., 1964,
24, N1, 116-21

10

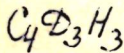
(SP)

RECEIVED

ppp 1968

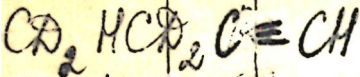


1967

 ν_i 

57416c A new method for the calculation of molecular vibrations. 1,3-Butadiene-1,1,2-d₃. Yu. N. Panchenko, G. S. Koptev, Tran Suan Hoan, and Yu. A. Pentin. *Vestn. Mosk. Univ., Ser. II* 22(2), 20-2(1967)(Russ). The frequencies of normal vibrations were calcd. for the CD₂:CDCH:CH₂ mol. with the force const. matrix found math. exactly from the exptl. frequencies of vibrations of the CH₂:CHCH:CH₂ mol. The calcd. frequencies agree with the exptl. ones; the use of the spectroscopic mass of the H atoms does not improve the results.
D. Papousek

C.A. 1967-67.12



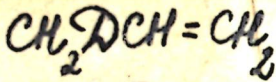
1969

26650y Infrared absorption spectroscopy study (2900-3100 cm^{-1} region) of the vibration and vibration-rotation spectra of the compounds $\text{CD}_2\text{HCD}_2\text{X}$, $\text{X} = \text{C}\equiv\text{CH}$, Br, Cl. Saur, Odette; Lavalley, Jean, C.; Romanet, Rene (Lab. Chim. Gen., Fac. Sci., Caen, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1969, 269(17), 816-19 (Fr). The structure of the rotational envelope of the strong band due to the CHD_2 group of the title compds. was analyzed. Two bands are obsd.; a type-A band centered at 2960 cm^{-1} and a type-C band centered at 2966 cm^{-1} . The spectra were interpreted in terms of 2 rotational isomers. John W. Ward

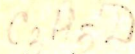
M. H.

UK-check

CiA 1970.72.6



1970



40

м.и.

1) 1 Б86. Внутреннее вращение в асимметричном волчке. Теория и ее применение к дейтерированному пропилену $\text{CH}_2\text{DCH}=\text{CH}_2$. Hirota Eizi. Internal rotation for the asymmetric top theory and its application to the deuterated propylene $\text{CH}_2\text{DCH}=\text{CH}_2$. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 34, № 3, 516—527 (англ.)

Рассмотрена теория вращательных спектров молекул с внутренними асимм. ротаторами в предположении, что из всех возможных внутренних движений молекулы реализуется только внутреннее вращение. Особое внимание уделено случаю, когда и «остов» молекулы и внутренний ротатор обладают, по крайней мере, одной плоскостью симметрии. Отмечено значение крутильных расщеплений уровней двух эквивалентных рота-

X. 1971. 1

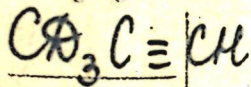
меров при определении потенциальной функции внутреннего вращения. Информация о потенциальной функции внутреннего вращения определяется также из разностей эффективных вращательных постоянных и постоянных $\bar{Q}$ в недиагональном блоке двухмерного, эффективного гамильтониана. На языке FORTRAN IV записана программа для вычисления уровней крутильной энергии и необходимых вспомогательных расчетов. Теория применена к МВ вращательным спектрам асимметрич. формы молекулы $\text{CH}_2\text{OCH}=\text{CH}_2$ (I) в основном и в первом возбужденном колебательном состоянии. В основном колебательном состоянии для повернутой формы I оценена величина барьера внутреннего вращения V_3 в интервале $\sim 694-668 \text{ см}^{-1}$, в первом возбужденном крутильном состоянии значения V_3 лежат, по-видимому, ниже на $10-30 \text{ см}^{-1}$. Обсуждено влияние высоты потенциального барьера и длины связи C—D на константы в эффективном вращательном гамильтониане для повернутой формы I. По резюме



• 1970

8971v Internal rotation of the asymmetric top. Theory and its application to the deuterated propylene $\text{CH}_2\text{DCH} = \text{CH}_2$. Hirota, Eizi (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 34(3), 516-27 (Eng). Rotational spectra of mols. with asym. internal rotors are investigated theoretically, where all internal motions are assumed frozen except for the internal rotation. Particular emphasis is given to the case where both framework and top have at least a plane of symmetry. The torsional splittings of levels of 2 equiv. rotamers are very useful in discussing the potential function to the internal rotation. Differences in the effective rotational consts. and the consts. Q in the off-diagonal block of the 2-dimensional, effective Hamiltonian also provide information on the potential barrier. Theory is applied to the rotational spectra of the asym. form of $\text{CH}_2\text{DCH}:\text{CH}_2$ in the ground as well as in the 1st-excited torsional state. The potential barrier V_3 detd. is lower than that (698.4 cm^{-1}) for the normal species by as much as $10\text{-}30 \text{ cm}^{-1}$. RCKP

C. H. 1970, 13, 2



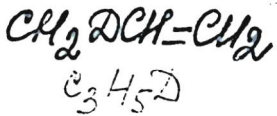
и.в. - вращ.
переходы

молек. кор.

Scharpen Le Roy H., 1970
et al.

J. Chem. Phys., 53 (6),
2513.

(см. NO) III

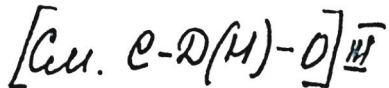


Walker G. Z.,
Quade C. R.

1970

nominal
energies
freq. sp.

J. Chem. Phys., 1970,
52, ~12, 6427.



CH_2D
 CHD_2

1971.

McDowell, C.A.; Farmer J.B.;
u gp.

"J. Phys. Chem.", 1971, 75, N 16;
2448-52.

спектр
ESR.

● (см. CH_2NO , III)

CH_2D

ommuck 3210 1972

CHD_2

Smith D. W.

CD_3

Andrews L.,

Chem. Soc.

Spectrochim Acta

1972, 28A, 493-99.

v. Anharmonic potential
functions. ●

312 18.602 5

Ch, TE

 CDH_2

29857

x 4-2725

1973

Anderson J. Edgar, Rawson David I.

Nuclear magnetic resonance. Slow rotation of a methyl group. "J. Chem. Soc. Chem. Commun", 1973, N 21, 830-831 (англ.)

1025 0118

1010

1013

1 0 1 8

ВИНИТИ

CH₃C:CD

1973.

ν_i
min

130059x Vibration bands ν_1 and $2\nu_1$ of methyl acetylene-d₁. Anttila, R.; Jaakkonen, S.; Huhanantti, M. (Dep. Phys., Univ. Oulu, Oulu, Finland). *Ann. Acad. Sci. Fenn., Ser. A6* 1973, No. 401, 12 pp. (Eng). The rotational structures of the ν_1 and $2\nu_1$ vibration bands of MeC:CD were investigated, and the hot bands that accompany these main absorptions were analyzed. Wave nos. are tabulated for the ν_1 band, $J = 2-61$; $\nu_1 + \nu_{10} - \nu_{10}$ band, $J = 9-47$; $\nu_1 + \nu_9 - \nu_9$ band, $J = 19-57$; $2\nu_1$ band, $J = 4-58$; and $2\nu_1 + \nu_{10} - \nu_{10}$ band, $J = 6-29, 43-48$. The mol. consts. ν_0 , B_0 , B_9 , B_{10} , α_1 , and D_J are tabulated for these bands, resp.

C.A. 1973. 78N20

CHD_2CCH

1973

Duncan J. L.
et al.

U.K.
chemp.

"J. Mol. Spectrosc."

1973, 46, N2, 232-39.

● (cm CHD_2Cl ; III)

CDH_2CH_3
 $(\text{CDH}_2)_2$

Kondo. Shigeo.
u.t.g.

1973

(u.11).

"Spectrochim. acta"
1973, A29, N4, 735-751

(u. C_2H_6 ; III.)

41017.4706

TC, Ch, Ph

92073

02

1974

 $C_2H_2D_4$ (см. ное) / ж 48-6960

Tanabe Kazutoshi, Saeki Shinnosuke. Force
field of allene. "Bull. (Soc. Jap.", 1974,
47, N 8, 1847-1851

(англ.)

0216 пик

202 202

208

ВИНИТИ

40923.6647

TC, Ph, Ch

 $C_2D_2H_2^+$ 296559 $C_2D_2H^+$, C_2DH^+ [Krit. Lit.] 1974
02.01

4-6435

Gordon S.M., Krige G.J., Reid N.W.

Isotope effects in the unimolecular
decomposition of ethylene by low-energy
electron impact. "Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys.", 1974, 14, N 2, 109-124

(англ.)

0197 с.:

160 163 0 1 8 9

ВИНИТИ

Pun

353



40923.6547

TC, Ph, Ch

96559

Di 02

1974

CH₃CH₂CH₂C₂D₃H: X

4-6435

Gordon S.M., Krige G.J., Reid N.W.

Isotope effects in the unimolecular
decomposition of ethylene by low-energy
electron impact. "Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys.", 1974, 14, N 2, 109-124

(англ.)

0197 стр.

160 163 0 1 8 9

ВИНИТИ

50221.8787
Ch, Ph, TC

$C_2H_2D_2$
 $C_2H_2D_2$ (Vi; сис. ное)

1974
*4-8111

Machida Katsunosuke, Tanaka Yumi Ko.

Anharmonic force field of ethylene.
"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 12, 5040-1 5049

(англ.)

0304 п.м.

279 281 0 296

ВИНИТИ

40621.6191

Ch, Ph, TC

CHD₂

31603

снечип

02

1974

*45514

McKean D.C.

CHD₂ spectra and Fermi resonances in the
CH₃ and CD₃ stretching regions: methyl
cyanide. "Spectrochim. acta", 1974, A30,
N5, 1169-1170

(англ.)

0135 ВЛМ

107 111 127

ВИНИТИ

41225.8895
Ch, TC

40892 02 1974
CH₄D⁺
4-7662

Sefcik Michael D., Henis Jay M.S.,
Gaspár Peter P.
The methanium ion, CH⁺. Evidence for the
structure of a [REDACTED] 5
nonclassical ion from reaction studies by
ion cyclotron resonance spectroscopy.
"J.Chem.Phys.", 1974, 61, N 10, [REDACTED] 4321-4328

(англ.)

0259 ДИК

245 247

25 11

ВИНИТИ

50307.4800 (A.P) 96559 $C_2H_2^+$ 1974
Ch, TC, MGU $C_2H_2^+$ (крив. *4-8280
(иониз.)

Suzuki Isao H., Maeda Kogoro. Ionization
efficiency curves and fragmentations of
deuterated ethylenes by electron impact.
"Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.",
1974, 15, N 3, 281-290 0316 пик
(англ.)

292 294 3 0 8

ВИНИТИ

40925.8703

TC, Ch

40392

D + CH₄

1974

4-6429

Valencich Trina, Bunker Don L.

Trajectory studies of hot atom reactions.
II. An unrestricted potential for CH₅.

"J.Chem. Phys.", 1974, 61, N 1, 21-29

(англ.)

0199 кат. 1

162 165

ВИНИТИ

40925.8703

TC, Ch

40392

H + CD₄

~~12~~

1974

4-6429

Valencich Trina, Bunker Don L.

Trajectory studies of hot atom reactions.
II. An unrestricted potential for CH₅.

"J.Chem. Phys.", 1974, 61, N 1, 21-29

(англ.)

0199

162 165

ВИНИТИ

40730.9149

Ph, Ch, TC

96615

 $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{C}\text{X}$

(м.н.)

1974

02 4-5970

Whitmer John C. Normal coordinates
and potential energy distributions
of methyl acetylene and some halogen
substituted analogues. "J. Mol. Struct."
1974, 21, N 2, 173-183

(англ.)

0106 6000

133 134

158

ВИНИТИ

$C_6H_4D_2$

numéro 5547

1977

Chapput A; et al.

Raman-
-spectr,
vi.

J. Raman Spectrosc,
1977, 6, 165-168

Etude Vibrationnelle par
Spectrometrie Raman en ...

$\text{CH}_x\text{D}_{4-x}$

1978

6 Д269. Применения F - и G -правила сумм интенсивностей: молекулы $\text{CH}_x\text{D}_{4-x}$. De Barros Neto Benicio, Bruns Roy E. F and G intensity sum rule applications: the $\text{CH}_x\text{D}_{4-x}$ molecules. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 9, 4147—4148 (англ.)

Для интенсивностей A в ИК-спектрах G -правило сумм имеет вид

$$(1/K \sum A_i = \xi_{\text{C}} m_{\text{C}} + (4+x) \xi_{\text{H}}^2 / 2m_{\text{H}}.$$

И. К. Стеккер

где $K = N\pi/3c^2$, N — число Авогадро, c — скорость света, m_{C} , m_{H} — массы атомов углерода и водорода, ξ_{C} , ξ_{H} — их эффективные заряды. Постоянство $\sum A_i^2 / \omega_i^2$ в ряду изотопич. молекул соответствует F -правилу. Приводятся численные значения F - и G -сумм для последовательности $\text{CH}_x\text{D}_{4-x}$. Оба правила хорошо соблюдаются. На основании G -правила для каждой молекулы построен график зависимости ξ_{C} от ξ_{H} . Получены оценки $0 < \xi_{\text{C}}/m_{\text{C}} < 10^{-4}e$ и $0,0261e^2 < \xi_{\text{H}}^2 < 0,0265e^2$. Эти значения согласуются с ранее вычисленными на основании полярных тензоров. Из G -правила следует также, что обе производные dp/dQ_3 и dp/dQ_4 имеют отрицат. знаки.

М. А. Кознер

Ф. 1978, № 6

C_2H_2

Ormuca 8059

1979

C_2D_2

C_2HD

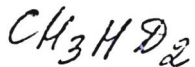
Colin R. et al

(u.n)

Mol. Phys., 1979, 37
(5), 1397 - ~~13~~ 1412.



(see C_2H_2 ; u),



M.N.

Empyrene

номер 4993

1979

Duncan J. L.; et al.

J. Mol. Spectrosc.

1979, 79 (3), 361-74.

$\text{C}_2\text{D}_3\text{CH}=\text{CHC}_2\text{D}_3$
Бутен-2

молекула
структур.

1979
7 Б264. Вращательные спектры шести- и восьми-кратно дейтерированных образцов молекулы цис-бутена-2. Guyon Pierre, Bouchy Alain, Roussy Georges. Spectres de rotation des especes hexa- et octodeuteriees de la molecule de cis-but-2-ene. «J. Mol. Struct.», 1979, 57, 53—61 (франц.)

Измерены в области частот от 18 до 40 ГГц МВ-спектры цис-2—3— $\text{H}_2\text{-d}_6$ -бутена-2 (I) и цис- d_8 -бутена-2 (II) в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом взаимодействия полного вращения молекулы с внутренним вращением двух метильных групп. Для I и II, соотв., вращательные постоянные равны (в Мгц) $A=12684,2$ (2) и $11136,1$ (3), $B=4008,11$ (4) и $3997,05$ (14), $C=3346,45$ (4) и $3170,96$ (11), и барьеры внутреннего вращения $V_3=777$ (30) и 811 (30) ккал/моль. Полученные данные использованы для определения структурных параметров молекулы: $r(\text{C}_2\text{C}_3)=1,348$ (1) Å, $r(\text{C}_1\text{C}_2)=1,498$ (2) Å, $r(\text{C}_1\text{H}_1)=1,096$ (5) Å, $r(\text{C}_2\text{H}_2)=1,0798$ (6) Å, $\angle\text{C}_3\text{C}_2\text{C}_1=126,94$ (5)°, $\angle\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_1=112,15$ (30)°, $\angle\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_2=118,66$ (7)°. Ус-

х. 1980 № 7

тановлено, что вклад внутреннего вращения двух метильных групп в МВ-спектр достаточно мал.

С. Н. Мурзин



ommuek 8384

1979

Houle F.A., et al.

J. Amer. Chem. Soc. 1979,
101, N15, 4067-74.

promos.
cicrip.



CH_3CHD_2

Оттиски 8566

1949

2 Д445. Определение барьера внутреннего вращения этана по микроволновому спектру CH_3CHD_2 . Barrier to internal rotation in ethane from the microwave spectrum of CH_3CHD_2 . Hirota Eizi, Saito Shuji, Endo Yasuki. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 3, 1183—1187 (англ.)

В диапазоне 34—140 Гц исследован микроволн. спектр молекулы CH_3CHD_2 . Идентифицированы линии 26 вращательных переходов основного колебательного состояния: обнаружено А—Е-расщепление 16 линий, обусловленное торсионным туннелированием. Анализ спектра выполнен методом внутренних осей. Определены значения вращательных постоянных, постоянных квартичного центробежного искажения и барьера внутреннего вращения ($V_3=2,8783$ ккал/моль). М. Р. Алиев

М. Р. Алиев

№

Ф. 1530. 112

CH_3CHD_2

2 Б308. Определение барьера внутреннего вращения в этане из микроволнового спектра CH_3CHD_2 . Hirota Eizi, Saito Shuji, Endo Yasuki. Barrier to internal rotation in ethane from the microwave spectrum of CH_3CHD_2 . «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 3, 1183—1187 (англ.)

Оттиски 8566

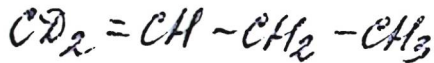
м.в. по
гемметрии

ель
г?

2-1680.12

Измерен в области частот 34—141 ГГц МВ-спектр CH_3CHD_2 . Идентифицировано 26 вращательных переходов и для 16 из них разрешено расщепление линий, связанное с внутренним вращением метильной группы. Анализ спектра выполнен с учетом эффектов центробежного искажения и внутреннего вращения. Определены вращательные постоянные (МГц) $A=60809,592(59)$, $B=17770,87(16)$, $C=17084,84(16)$ и постоянные центробежного искажения (кГц) $\Delta_J=23,33(45)$, $\Delta_{JK}=60,2(2,0)$, $\Delta_K=177(15)$, $\delta_J=0,79(16)$, $\delta_J=0,79(16)$, $\delta_K=50(81)$. $\Delta_K=177(15)$, $\delta_J=0,79(16)$, $\delta_K=50(81)$. В предположении, что величина барьера $V_6=0$, определены значения константы $F=257,70$ ГГц и барьера внутреннего вращения $V_3=2,8783(29)$ ккал/моль. Из сравнения полученных величин моментов инерции с вычисленными из r_0 и r_g структур по опубликованным данным установлена точность определения молек. постоянных. Известные структурные данные хорошо коррелируют с результатами выполненных МВ-измерений.

С. Н. Мурзин



1980

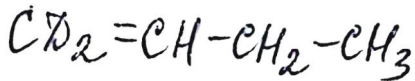
м. в. спектр

1 Д378. О микроволновом спектре 1,1- d_2 -бут-1-ена.
On the microwave spectrum of the 1,1- d_2 -but-1-ene. Bo-
richy A., Ledoux M. I. «J. Mol. Spectrosc.», 1980,
80, № 2, 453—454 (англ.)

В диапазоне 18—40 ГГц измерен микроволн. спектр
молекулы $\text{CD}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$. Идентифицированы ли-
нии 19 вращательных переходов с $J \leq 4$ в основном ко-
лебательном состоянии. Определены значения враща-
тельных постоянных и 3 (из 5) постоянных квартичного
центробежного искажения.

М. Р. Алиев

ф. 1981 № 1



1980

23 Б215. О микроволновом спектре 1,1-d₂-бутена-1.
Bouchy A., Ledoux M. J. On the microwave spectrum of the 1,1-d₂-but-1-ene. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, № 2, 453—454 (англ.)

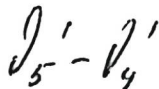
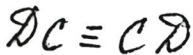
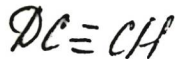
ч. в. спектр

М. И.

Измерен в области частот 18—40 ГГц МВ-спектр $\text{CD}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ в основном колебательном состоянии. Анализ спектра выполнен с учетом эффектов кватерного центробежного искажения. Вращательные постоянные равны (МГц): $A=20858(200)$, $B=3795,009(34)$, $C=3710,571(34)$, а постоянные центробежного искажения равны (кГц) $\Delta_J=3,13(24)$, $\Delta_{JK}=-53,89(72)$, $\delta_J=-0,82(40)$. Полученные молек. данные отнесены к асимм. конформеру 1,1-d₂-бутена-1. С. Н. Мурзин

X. 1980 № 23

1980



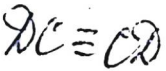
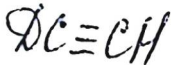
6 Д447. Полосы $\nu_5^1 - \nu_4^1 (D_1)$ -ацетилен и (D_2) -ацетилен в дальней ИК-области. The $\nu_5^1 - \nu_4^1$ far-infrared bands of (D_1) -acetylene and (D_2) -acetylene. Braund Doris B., Cole Andrew R. H. «Austral. J. Chem.», 1980, 33, № 9, 2053—2060 (англ.)

С помощью решеточного спектрометра с оптич. шириной щели $0,3 - 0,4 \text{ см}^{-1}$ исследована вращательная структура полос $\nu_5^1 - \nu_4^1$ в спектре ИК-поглощения молекул $DC \equiv CH$ и $DC \equiv CD$ в газовой фазе. По полученным данным определены постоянные колебательно-вращательного движения исследованных изотопов ацетилена. Значения постоянных хорошо согласуются с литературными данными, полученными при исследовании спектров поглощения в ближней и средней ИК-области, а также методами микроволн. спектроскопии. С помощью найденных постоянных рассчитаны частоты линий полосы $\nu_5^1 - \nu_4^1$, которые вместе с эксперим. значениями частот приведены в таблицах. Наблюдается хорошее согласие между рассчитанными и эксперим. величинами.

Н. Ф.

Ф. 1981. № 6

1980



ν_1, μ, μ, μ
1

11 Б236. Полосы $\nu_5^1 - \nu_4^1$ (D_1)-ацетилен и (D_2)-ацетилен в далекой инфракрасной области. Braun D. and Doris B., Cole Andrew R. H. The $\nu_5^1 - \nu_4^1$ far-infrared bands of (D_1)acetylene and (D_2)acetylene. «Austral. J. Chem.», 1980, 33, № 9, 2053—2060 (англ.)

Измерена и проанализирована вращательная структура полос $\nu_3^1 - \nu_4^1$ в спектрах молекул $DC \equiv CH$ (I) и $DC \equiv CD$ (II). В спектре I наблюдались линии P ($Y \leq 15$) и R ($Y \leq 23$) ветвей. Значения $G_0(v')$ — $G_0(v'')$, $B_{v'}$ и $B_{v''}$ (в cm^{-1}): $159,431 \pm 0,018$, $0,99273 \pm 0,00079$ и $0,99406 \pm 0,00079$. В спектре II наблюдались только линии R -ветви ($Y \leq 29$), т. к. остальная часть вращательной структуры (P -ветвь) лежала ниже границы работы спектрофотометра. Значения $G_0(v')$ — $G_0(v'')$, $B_{v'}$ и $B_{v''}$ (в cm^{-1}): $27,17 \pm 0,05$; $0,846 \pm 0,004$; и $0,846 \pm 0,004$. В спектре I наблюдались также Q -ветви горячих полос $2\nu_5^2 - (\nu_4 + \nu_5)^2$ и $(\nu_1 + \nu_5)^2 - 2\nu_4^2$. Приведена схема уровней колебательной энергии C_2HD и C_2D_2 и переходов, проявляющихся в области 160 и $30 cm^{-1}$ соответственно.

В. М. Ковба

2.1981.N44

CH_3CD_3

(22)₃

1980
10 Б235. Инфракрасные вращательно-колебательные спектры этана. Параллельная полоса, $2\nu_3$, CH_3CD_3 . Heise H. M., Cole A. R. H. Infrared rotation-vibration spectra of ethane. The parallel band, $2\nu_3$, of CH_3CD_3 . «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 245—260 (англ.)
В области частот $2715\text{--}2780\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,025\text{ см}^{-1}$ измерен спектр поглощения этана, CH_3CD_3 . В результате специальной обработки спектра разрешение доведено до величины $0,015\text{ см}^{-1}$. Идентифицировано 710 линий, из них 466 отнесены к параллельной полосе $2\nu_3$ и 244 — к горячей полосе $2\nu_3 + \nu_6 - \nu_6$. Из комбинац. разностей частот определены молек. постоянные в основном и возбужденном крутильном $\nu_6 = 1$ колебательных состояниях, соотв. (в см^{-1}): $B = 0,5462\text{ (3)}$ и $0,54961\text{ (6)}$, $D_J = 0,65\text{ (2)} \cdot 10^{-6}$ и $0,70\text{ (8)}$.

$\cdot 10^{-6}$, $D_{JK} = 0,13 (4) \cdot 10^{-5}$ и $0,13 \cdot 10^{-5}$. Полученные значения постоянных уступают по точности МВ-данным. Аналогичным образом определены молек. постоянные в возбужденных колебательных состояниях ($\nu_3=2$) и ($\nu_3=2$, $\nu_6=1$), соотв. (в см^{-1}): $\nu_0 = 2752,642 (3)$ и $2752,683 (5)$, $B' = 0,54177 (3)$ и $0,54173 (4)$, $D_J' = 0,43 (4) \cdot 10^{-6}$ и $0,22 (8) \cdot 10^{-6}$, $D_{JK}' = 0,69 (2) \cdot 10^{-5}$ и $0,80 (5) \cdot 10^{-5}$, $A' - A'' = 0,00428 (8)$ и $0,00440 (14)$. Полученные значения молек. постоянных сопоставлены с данными для этана — d_3 : (A. R. Sc. Cole et al. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, 233. С. Н. Мурзин

CH_3CD_3

1980

6 Д445. Колебательно-вращательный инфракрасный спектр этана. Параллельная полоса $2\nu_3$ молекулы CH_3CD_3 . Infrared rotation-vibration spectra of ethane. The parallel band $2\nu_3$ of CH_3CD_3 . Heise H. M., Cole A. R. H. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 245—260 (англ.)

На дифракционном спектрометре с разрешением $0,015\text{ см}^{-1}$ измерена вращательная структура ИК-полосы $2\nu_3$ молекулы H_3CCD_3 вблизи 2750 см^{-1} . Идентифицированы линии P -, Q -, R -ветвей с $J \leq 30$. Обнаружены аномалии в подветвях с $K=2 \div 6$, обусловленные главным образом кориолисовым резонансом между $2\nu_3$ и $\nu_2 + \nu_{12}$ (или $\nu_3 + \nu_6 + \nu_0$). Определены значения вращательных и центробежных постоянных. М. Р. Алиев

М. Р.

Ф. 1981. N 6

CHD_2CH_2

ВФ-ХIV-9492 1980

12 Д178. О барьере вращения относительно связи $\text{C}-\text{C}$ в этил-радикале. On the barrier for rotation about the $\text{C}-\text{C}$ bond of the ethyl radical. Pacansky J., Coufal H. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 5285—5286 (англ.)

Si. Согласно расчетам по неэмпирич. методу ССП этил-радикал стабилен в скрученной конфигурации, тогда как энергия затменной конформации на 0,2 ккал выше. Если вращение относительно связи $\text{C}-\text{C}$ свободно, то в ИК-спектре CHD_2CH_2 должна наблюдаться одна частота вал. кол. $\text{C}-\text{H}$. В случае заторможенного вращения должны наблюдаться две частоты вследствие неэквивалентности связей $\text{C}-\text{H}$ в двух конформациях. Этил-радикалы были получены путем фотолиза перекиси дипропионила в аргоновой матрице. В ИК-спектре наблюдается только одна частота 2846 см^{-1} , принадлежащая этил-радикалам. Сделан вывод об отсутствии барьера внутреннего вращения. М. А. Ковнер

ф. 1980
N 12

HCD_2CD_2

ВР-ХIV-9492

1980

24 Б192. О барьере вращения вокруг связи $\text{C}-\text{C}$ в этильном радикале. Pacansky J., Soufal H. On the barrier for rotation about the $\text{C}-\text{C}$ bond of the ethyl radical. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 5285—5286 (англ.)

и.к. спектр

То

При фотоллизе (УФ-облучение, $\lambda > 2800 \text{ \AA}$) дипропионилпероксида $\text{HCD}_2\text{CD}_2\text{CO}_2\text{O}_2\text{CD}_2\text{CD}_2\text{H}$ (I) в матрице аргона (конц-ия 1/600) после полной фотодеструкции I получают этильный радикал HCD_2CD_2 (II) и CO_2 . Измерен ИК-спектр изолированного в аргоне II при $t = 38 \text{ K}$. ИК-полосы 2846 и 2955 см^{-1} отнесены, соотв., к вал. кол. CH радикала II и продуктов диспропорционирования I. Наличие одной полосы вал. кол. CH в метильной группе радикала II свидетельствует, по мнению авторов, о эквивалентности всех CH связей в метильной группе этильного радикала и, как следствие, о свободном вращении вокруг связи $\text{C}-\text{C}$ в этом радикале.

С. С. Букалов

Х. 1980 IV 24

CH_3CD_3

оттиск 13087 1981

9 Б261. Инфракрасный спектр высокого разрешения этана-1,1,1- D_3 . Ровибронные исследования CH_3CD_3 и $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$. Duncan J. L., Harper J., Morri-
sson A. R., Nivellini G. D., Tullini F. The
high-resolution infrared spectrum of ethane-1,1,1- D_3
Rovibration studies of CH_3CD_3 and $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$. «J. Mol.
Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 197—214 (англ.)

Спектр поглощения ряда основных полос молекул
 CH_3CD_3 и $^{13}\text{CH}_3\text{CD}_3$ записан на фурье-спектрометре с
разрешением $\sim 0,05 \text{ см}^{-1}$. Проведен анализ спектров
след. основных ИК-полос, к-рые ранее детально не изу-
чались, ν_2 (CD_3 симм вал.), ν_7 (CH_3 асимм. вал.),
 ν_9 (CH_3 асимм. деф.), ν_{11} (CD_3 асимм. деф.) и ν_{12}
(CD_3 маятн.) и определены спектроскопич. постоянные
для верхних колебательных состояний для каждой по-
лосы.

В. М. Михайлов

ИК спектр
поглощен.

Х. 1982, 19, № 9.

CH₃CD₃

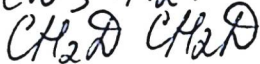
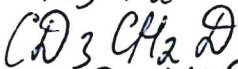
O.M. Muck 13027 1981

Vi, UK center

95:194661w The high-resolution infrared spectrum of ethane-1,1,1-D₃. Rovibration studies of CH₃CD₃ and ¹³CH₃CD₃. Duncan, J. L.; Harper, J.; Morrisson, A. R.; Nivellini, G. D.; Tullini, F. (Dep. Chem., Univ. Aberdeen, Aberdeen, Scot. AB9 2UE). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 90(1), 197-214 (Eng). The IR spectra of a no. of fundamentals of MeCD₃ and ¹³CH₃CD₃ were recorded at ~0.05 cm⁻¹ resolu. by using a Nicolet Fourier transform spectrometer. Complete analyses at this resolu. were performed for the ν_2 (CD₃ sym. stretch), ν_7 (Me asym. stretch), ν_9 (Me asym. deformation), ν_{11} (CD₃ asym. deformation), and ν_{12} (CD₃ rock) fundamentals, and sets of upper-state parameters were derived. Perturbations in the ν_9 band were accounted for in terms of an A₁-E Coriolis interaction with ν_3 (Me sym. deformation), and in the ν_{11} band in terms of the combined effects of an A₁-E Coriolis interaction with ν_4 (CD₃ sym. deformation) and an E($\pm$ l) - E($\mp$ l) interaction with ν_{10} (Me rock). A small, localized perturbation in ν_7 was identified as due to a higher-order rotational resonance with 2 ν_9^2 . All 1st- and 2nd-order Coriolis interaction parameters were detd. Limited spectroscopic information was obtained on ν_3 , ν_4 , and ν_{10} , all of which are extremely weak in the IR. The perpendicular band analyses enable the centrifugal distortion D_K^0 const. to be estd.

C.A. 1981, 95, 122

1981



геом., структ.,

м.п.

7 Б290. Микроволновые спектры дейтерированных этанов. Потенциальная функция внутреннего вращения и r_z -структура. Hirota E., Endo Y., Saito S., Duncan J. L. Microwave spectra of deuterated ethanes: internal rotation potential function and r_z structure. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 89, № 2, 285—295 (англ.)

Измерены в области частот 100—160 ГГц МВ-спектры CH_3CHD_2 (I) в первом возбужденном крутильном состоянии, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{D}$ (II), $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{D}$ (III) и гош- $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{D}$ (IV) в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом кватерного центробежного искажения и внутреннего вращения. Для I—IV соотв., вращательные постоянные равны (в МГц) $A=60847$ (106), $69640,504$ (69), $48650,630$ (58) и $61360,344$ (23), $B=17703,167$ (48), $18876,23$ (14), $15656,793$ (64) и $17642,0291$ (75), $C=17030,976$ (54), $18209,90$ (13), $15194,324$ (63) и $17036,3299$ (75). Из анализа A—E-расщепления вращательных переходов вследствие внутреннего вращения для I, II и III соотв. опре-

X. 1982, 19, № 7.

делены параметры потенциальной функции $V_3 = 2,8659$ (18), $2,88838$ (36) и $2,862$ (11) ккал/моль при фиксированном значении параметра $V_6 = 0,0$ ккал/моль. С учетом зависимости между параметрами V_3 и V_6 для I в колебательных состояниях $v=0$ и $v=1$ получены значения $V_3 = 2,8618$ (80) и $V_6 = 0,0196$ (66) ккал/моль.

С. Н. Мурзин

$(C_2H_4) \cdot (C_2D_4)$

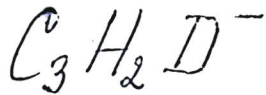
1983

Hoffbauer Mark A.,
Liu Kopin, Giese Clay-
ton F., et al.

прегус-
коуназ.

J. Chem. Phys., 1983,
78, N 9, 5567-5581.

($\bullet$ $(C_2D_4)_2$; II.)



1983



Oakes John M.,
Ellison G. Barney.

Ae;

J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N10, 2969-
-2978.

(see $CH_2C \equiv CH$; III)

$C_6D_3H_3$

$C_6D_2H_4$

ср. пост.,
колебат.
энергии
распределен.
расчет.

[Om. 16365]

1983

Steger E., Weber K.,

Z. Phys. Chem. (DDR),
1983, 264, N1, 137 -
- 145.

$C_3H_2D^+$

1984

Craig N. C., Pranata J.
et al.

Vi, cer.
nocu.

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N 24, 7637-
-7638.

(cer. $C_3H_3^+$; III)

$\text{CH}_2\text{CDCH}_2^-$

1984

Oakes John M.,
Ellison G. Barney.

рецепт,
сепрежм.,
He;

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N25, 7734-
●-7741.

(cell $\text{CH}_2\text{CHCH}_2^-$; III)

$C(CH_2D)_4$

1984

/ 102: 69544x CH-stretching gas phase overtone spectrum of symmetric neopentane- d_4 . Tarr, Allan W.; Henry, Bryan R. (Dep. Chem., Univ. Manitoba, Winnipeg, MB Can. R3T 2N2). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 112(4), 295-301 (Eng). The overtone spectrum of neopentane- d_4 , $C(CH_2D)_4$, was examd. and the local mode model was used to assign the prominent peaks. Proposed coupling routes for intramol. vibrational relaxation of CH-stretching overtones are discussed. The dominant vibrational relaxation pathway was identified by comparisons of neopentane- d_4 , neopentane, and benzene overtone bandwidths.

(Vi)

C.A. 1985, 102, N8

CH₃ OD

1985

510 Л193. Угловая зависимость нулевой энергии колебаний в частично дейтерированных метиловых спиртах. Повторное рассмотрение. τ dependence of the vibrational zeropoint energy in the partially deuterated methyl alcohols, revisited. Chang T. L., Quade C. Richard. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 2, 398—402 (англ.)

Для ряда дейтеропроизводных метанола (CH₃OD, CD₃OD, CD₃OH, CH₂DOH, CH₂DOD, CHD₂OH и CHD₂OD) приведены данные повторных расчетов вклада в величину потенц. барьера вращения группы (CH₃—) от нулевой колебательной энергии других 3N—7 колебаний с использованием уточненных значений силовых констант колебаний, взятых из ИК-спектра. Получены зависимости потенц. барьера от угла (τ): $V(\tau) \sim V_1(\tau) + V_2(\tau) + V_3(\tau)$, где $V_n(\tau) \sim V_n \cdot (1 - \cos(n\tau))$, причем значения V_1 ($\sim 11,95$ см⁻¹), V_2 ($\sim 0,17$ см⁻¹) и V_3 ($\sim 370,5$ см⁻¹) совпадают с экспериментально определенными величинами с точностью $\sim 1\%$. Приведены таблицы частот всех 11 колебаний CH₂DOH для «гош» и «транс» форм.

В. А. Л.

(М.П.)

ср 1986, 18, N10

CH₃ OD

1985

9 Д81. Модель молекулы типа квазисимметричного волчка для колебательно-вращательной задачи молекул типа CH₃XY: применение к молекуле CH₃OD. Quasi-symmetric top molecule approach to the rotational-vibrational problem of CH₃XY molecules: application to CH₃OD. Korp ut J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 2, 440—450 (англ.)

Рассмотрены энергии изгибно-торсионно-вращательных уровней молекул типа CH₃XY с нелинейной группой СХУ по модели квазисимметричного волчка с учетом торсионно-вращательного взаимодействия. Торсионная потенц. ф-ция выбрана в виде ряда Фурье, а потенц. ф-ция изгибного колебания в виде квартичной ф-ции с параболич. барьером. С использованием перестановочно-инверсионной группы С₆, изоморфной к точечной группе С_{3v}, проведена классификация уровней по симметрии и определены правила отбора для ди-

М.А.

ср. 1986, 18, № 9

польных переходов. Модель применена к численному анализу МВ- и далеким ИК-спектров молекулы CH_3OD . Из частот 94 вращательных переходов ($J \leq 4$) и 55 торсионно-вращательных переходов ($K \leq 4$) определены параметры потенц. ф-ции и структурные параметры CH_3OD . Для торсионного и изгибного барьеров получены величины 366 и 7000 см^{-1} соответственно.

М. Р. Алиев

C_6H_5D

1986

20 Б1232. Субдоплеровские двухфотонные спектры молекул типа асимметричного волчка: анализ вращательной структуры qqQ -ветви системы $S_1(^1B_{2u})14^1 \leftarrow S_0(^1A_{1g})$ бензола- d_1 . Sub-doppler two-photon spectrum of asymmetric rotor molecules: analysis of the qqQ rotational branch of the $S_1(^1B_{2u})14^1 \leftarrow S_0(A_{1g})$ system of benzene- d_1 . Bruno A. E., Riedle E., Neusser H. J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 6, 558—566 (англ.)

Методом насыщ. поглощения с использованием непрерывного лазера на красителе с внешним concentric резонатором измерен субдоплеровский двухфотонный спектр поглощения молекулы C_6H_5D в обл. частот полосы 14^1 системы электронного перехода $S_1 \rightarrow S_0$. Идентифицировано более 200 линий qqQ -ветви с $J \leq 20$. Анализ спектра выполнен с использованием вращат. гамилтонианов Уотсона для основного и возбужденного состояний и определены значения вращат. постоянных

М.А., Р.

X. 1986, 19, № 20

и постоянных кватричного центробежного искажения.
для обоих состояний.

Е. В. Алиева



$C_2H_2CH_2$

(DM-27900)

1987

и др.

Claxton T.A., Graham A.M.,

V. барьер
внутрен.
фрагмент.

J. Chem. Soc. Chem.
Commun., 1987, N 15,
1167.

$C_3D_2H^+$ om. 24560 1986

Craig N.C., Pranata J.,
et al.

u. n. J. Amer. Chem. Soc., 1986,
108, N15, 4378-4386.

(cur. $C_3H_3^+$; III)

$C_3H_2D^+$

(Om. 24560)

1986.

$C_3D_2H^+$

Craig N. C., Pranata J.,
et al.

констан-
спектр
и сечев.
постоян.

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N 15, 4378-



- 4386.

$CD_3CH_2CD_3$ (OM-23784) 1986

Gough K.M., Baerclais F.Z.
et al.,

(CPR, UK,
Di)

J. Chem. Phys., 1986,
84, 112, 549-560.

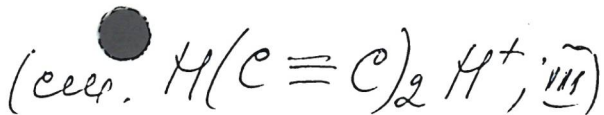


1986

Kuhn R., Maier J.P.
et al.

Mol. Phys., 1986, 59,
N 3, 441-448.

спектр
высокого
разреше-
ния



$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CO}-\text{O}(\text{O.M. } 27 \text{ } 476)$

1987

конечный,
номерис-
р-ил,
кеггс. р.,
ab initio
расчеты

De Maré. G. R.,
Panchenko Y. N., et al.,

J. Mol. Struct.,
1987, 160, N 3-4,

327-● 385.



1987

4 Л212. Микроволновый спектр циклопропана-1,1- d_2 . Молекулярная структура циклопропана. The microwave spectrum of cyclopropane-1,1- d_2 . Molecular structure of cyclopropane. Endo Yasuki, Chang Man Chai, Hirota Eizi. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 63—71 (англ.)

М. П.

На МВ-спектрометре с модуляцией частоты источника в диапазоне 320—400 ГГц исследован МВ-спектр молекулы $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CD}_2$. Идентифицированы линии 64 вращательных переходов a -типа с $J \leq 17$ в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных и постоянных кватертичного центростремительного искажения.

М. Р. Алиев

ср. 1988, 18, № 4

CH₂CD₂

1987

5 Л173. ИК-спектр газообразного цис-*d*₂-этилена ниже 1400 см⁻¹. The infrared spectrum of gaseous cis-*d*₂-ethylene below 1400 cm⁻¹. Hegelund F., Nicolaisen F. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 32—57 (англ.)

В целях изучения структуры и силовых полей молекулы этилена исследован ИК-спектр газообразного цис-*d*₂-этилена (I) в области 700—1400 см⁻¹ с разрешением 0,03 см⁻¹. Проведен вращательно-колебательный анализ фундаментальной полосы ν_7 типа C при 842 см⁻¹ и двух фундаментальных полос ν_6 и ν_{12} типа a при 1040 и 1341 см⁻¹ соответственно. Определены значения вращательных постоянных и постоянных центробежного искажения для основного состояния I. Определены спектроскопич. постоянные для верхнего возбужденного состояния в случае каждой из трех полос ν_7 , ν_6 и ν_{12} и исследован характер наблюдаемых возмущений уровней с учетом кориолисовых резонансных взаимодействий ν_7 с ν_8 , ν_6 с ν_4 и ν_8 , ν_{12} с $2\nu_{10}$. А. М. М.

М. П.

Ф. 1988, 18, № 5

Cy H₂

1987

Owen Hoel L.,
Smith Ch. H., et al.

колебаний.
спектр

J. Mol. Spectr.,
1987, 161, 33-53.

(see CyH₂; III)

C_4H_7D

1987

4 Л215. Наблюдение чисто вращательного спектра молекулы циклобутана — d_1 методом микроволновой фурье-спектроскопии. The pure rotational spectrum of cyclobutane- d_1 observed by microwave Fourier transform spectroscopy. Vogelsanger B., Caminati W., Bauder A. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 3, 245—250 (англ.)

На импульсном МВ-фурье-спектрометре со сверхзвуковой импульсной молекулярной струей исследован МВ-спектр молекулы C_4H_7D в диапазоне 12—40 ГГц. Методом двойного резонанса идентифицированы линии 53 вращательных переходов с $J \leq 40$ в основном колебательном состоянии экваториального и аксиального конформеров. Определены значения вращательных постоянных и постоянных кватичного центробежного искажения. Оценены структурные параметры циклобутана.

М. Р. Алиев

М. П.

ф. 1988, 18, 24

CD_3OH

1988

113: 240416k Rotational spectrum of the ground-state trideuterated methanol (CD_3OH) molecule. Baskakov, O. I.; Pashaev, M. A. (USSR). *Kolebat.-vrashchatel. Spektry Molekul*, M. 1988, 199-209 (Russ). From *Ref. Zh., Fiz. (A-Zh.)* 1990, Abstr. No. 4D91. Title only translated.

Получено
Секрет, Л.Н.

С.А. 1990, 113, N 26

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{D}$
 CH_3CHD_2
и др.

1988

З Б1358. Вращательно-колебательные взаимодействия в несимметричных дейтерированных производных этана. Изучение колебательных спектров. Interacción rotación-vibración en derivados deuterados asimétricos del etano / Campos-Vallette M., Escribano R. // An quim. A: / Real soc. esp. quim. — 1988. — 84, № 2. — С. 167—173. — Исп.; рез. англ.

Измерены ИК-спектры высокого разрешения дейтерозамещ. этанов $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{D}$, CH_3CHD_2 , $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{D}$, $\text{CHD}_2\text{CH}_2\text{D}$, CHD_2CHD_2 , $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{D}$, CHD_2CD_3 типа асим. волчков в обл. 3000—2200 cm^{-1} . Предложено отнесение наблюдаемых полос к модам типа ν_1 , ν_5 , ν_7 и ν_{10} вал. кол. $\text{CH}(\text{CD})$. Обсужден характер колебат. взаимодействий в измеренных спектрах. Б. В. Рассадин

М.П.

Х. 1989, № 3

CH(CD₃)₃ (DM-30736,"a") 1988

Duncan J. L., McKean D. C.
et al.,

Срешни-
резонанс.
постом.
амгарион.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. Pt II 1988, 84, N 9,
1423-42.

C₂H₂D

1988

108: 212820r Coriolis perturbations in the infrared spectrum of the $\nu_4 + \nu_7$ and $\nu_7 + \nu_8$ bands of cis-d₂-ethylene. Hegelund, F.; Nicolaisen, F. M. (Dep. Chem., Aarhus Univ., Aarhus, DK-8000 Den.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(2), 321-33 (Eng). The IR spectra of the $\nu_4 + \nu_7$ and $\nu_7 + \nu_8$ type a combination bands of cis-C₂H₂D at 1816 and 1599 cm⁻¹, resp., were recorded with a resolu. of ca. 0.03 cm⁻¹. Both bands are locally perturbed by a no. of Coriolis resonances with nearby binary combination levels. From a model taking into account Coriolis interactions with $\nu_6 + \nu_8$ and $\nu_6 + \nu_7$, spectroscopic consts. were obtained for $\nu_4 + \nu_7$. For the anal. of $\nu_7 + \nu_8$ Coriolis resonance with ν_2 was included. None of the perturbing levels were obsd. However, from the perturbation effect alone the band centers for $\nu_6 + \nu_8$, $\nu_6 + \nu_7$, and ν_2 were located.

(Pi)

C.A. 1988, 108, N24

$C_2H_2D_4$

1988

Kim K.C., Krohn B.J.
et al.

J. Mol. Spectrosc. 1988,
132 (1), 207-15.

(V₃)

(see  PuF_6 ; iii)

DCCCCH

DM 31043

1988

110: 104072f Microwave spectrum of diacetylene-d in the ground and excited vibrational states. Tanaka, Keiichi; Kato, Kinya; Tanaka, Takehiko (Fac. Sci., Kyushu Univ. 33, Fukuoka, Japan 812). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 131(2), 272-7 (Eng). Rotational spectra of DCCCCH, which is nonpolar in the equil. configuration, were obsd. with a source-modulated microwave spectrometer. Rotational transitions in the ground, ν_8 , and ν_9 vibrational states were newly identified, where ν_8 and ν_9 denote the $\angle C...C-D$ bending and lowest skeletal bending modes, resp. Small dipole moments, 0.0115 ± 0.0012 D for the ground state and 0.030 ± 0.008 D for the ν_8 state, were obtained from the intensity measurement. The rotational and centrifugal distortion consts. for the ground state are 4084.4546 ± 0.0018 MHz and 0.402 ± 0.012 kHz, resp., where the uncertainties correspond to 3σ .

1/8 cncmp



C.A. 1989, 110, N12

ДСССН

DM 31043

1988

10 Б1316. Микроволновый спектр диацетилен-*d* в основном и возбужденных колебательных состояниях. Microwave spectrum of diacetylene-*d* in the ground and excited vibrational states / Tanaka K., Kato K., Tanaka T. // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 131, № 2.— С. 272—277.— Англ.

На усовершенствованном микроволновом (МВ) спектрометре с модуляцией источника в обл. частот 40—82 ГГц с точностью 10 кГц при чувствительности $2 \cdot 10^{-8} \text{ см}^{-1}$ измерен вращат. спектр диацетилен-*d*, ДСССН, в основном и двух возбужденных колебат. состояниях. Анализ МВ-спектра выполнен в приближении модели линейной молекулы с учетом вклада колебат. углового момента, кватричного центробежного искажения и *l*-удвоения для Π ($l=1$) состояний. Возбужденные колебат. состояния отнесены к деф. кол. ν_8 группы $\text{C}\equiv\text{C}-\text{D}$ и к низшему деф. кол. состава молекулы ν_9 . Для основного и возбужденных ν_8 и ν_9 колебат. состояний, соотв., определены вращат. постоянные $B=4084,4546(18)$, $4089,6490(51)$ и $4095,6938(52)$ МГц и дипольные моменты $\mu=0,0115(12)$, $0,030(8)$ и $0,010(5)$ D. С. Н. Мурзин

ув спектр,

М. Н.

X. 1989, N 10

$C_3H_2D^+$

DM 32415

структура
ан. нсч.,
нсч. анал.
Vi

(+3)

C.A. 1989, 110,
N 26

110: 239282v Theoretical study of anharmonicity in the vibrational spectra of the cyclopropenyl cation and its deuterated analogs. Xie, Yaoming; Boggs, James E. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 78712 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(8), 4320-9 (Eng). Completely theor. calcs. for the structure, anharmonic force field up to partial 6th order, and vibrational frequencies of $C_3H_3^+$, $C_3H_2D^+$, $C_3HD_2^+$, and $C_3D_3^+$ were carried out. The procedure included ab initio calcn. of the vibrational energy surface at the 6-311 G⁺ + local MP4(SDQ) level and anharmonic vibrational configuration-interaction (CI) calcn. using a variational expansion in a large, well-selected harmonic oscillator basis. The geometric parameters of $C_3H_3^+$ are optimized as 1.363₂Å for the C-C bond length and 1.079₅Å for the C-H bond length. The fundamental vibrational frequencies of $C_3H_3^+$ are 3193.5, 1622.1, 1015.5, 3148.8, 1297.5, 916.2, 756.8, and 1002.7 cm⁻¹; those of $C_3H_2D^+$, (3190.6, 3144.8), 2405.3, 1274.7, 913.4, 1001.2, 3146.3, 1295.2, 995.4, 717.8, 916.7 and 663.6 cm⁻¹; those of $C_3HD_2^+$, are 3164.7, 2434.0 (1541.6, 1506.8), 1276.0, 672.1, 824.3, 2361.6, 1261.3, 9667, 762.3, 960.3, and 603.9 cm⁻¹; and those of $C_3D_3^+$ are (2536.7, 2451.8), 1487.4, 837.5, 2358.1, 1256.9, 671.9, 562.6, and 823.5 cm⁻¹. The frequencies enclosed in parentheses are for Fermi resonance pairs, the prediction of which is handled automatically by this procedure. The theor. vibrational frequencies agree with the exptl. data available from both Raman and IR spectra with 0.5% relative mean deviation. This agreement is as good as the exptl. data allow, since the expts. were carried out in condensed phases and in the presence of counterions. The 1st

1489

overtone vibrational frequencies of $C_3H_3^+$ are also predicted. The general applicability and present limitations of the method are discussed.

$C_3 H_2 D_2^+$

DM-32415

1989

Xie Yaoming, Boggs
James E.

структура,
ссыл. посей.,
посей. ангари,
 V_i ;

J. Chem. Phys.

1989, 90(8),



4320-9.

(ссыл. $C_3 H_2 D_2^+$; I)

$C_4H_2D_4$ Zerbetto Francesco, 1989
Łgierski Marek Ł.

$1Ag \rightarrow 1Bu$, Chem. Phys. Lett. 1989,
meop. 157 (6), 515-520.
pacrēm

(ca.  C_4H_6 ; III)

$C_4H_4D_2$

1989

Lerbetto Francesco,
Łgierski Marek Ł.

$1Ag \rightarrow 1Bu$,

Chem. Phys. Lett.

meop.

1989, 157(6), 515-520.

pačiem

($\bullet$ C_4H_6 ; III)

CH_2D_2

1990

Makushkin Yu. S.,
Ulenikov O. N., et al.

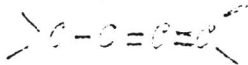
et al.

J. Phys. B. 1990. 23,
N.Y.C. 1149-1163.

(see CH_4 ; III)

C-2-H

1990



КОНФАМЕНА
СНЕРП, Д.

113: S7233b Overtone spectroscopy of cis-propene-1,2- d_2 . Baylor, Lewis C.; Weitz, Eric (Dep. Chem., Northwestern Univ., Evanston, IL 60208 USA). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(16), 6209-20 (Eng). Vibrational spectra of the terminal cis and Me C-H stretches of cis-propene-1,2- d_2 were obtained for vibrational levels (v) one through seven. The C-D stretches were obsd. up to $v = 3$. For comparison, spectra for all the C-H stretching modes of propene were obtained from the $v = 1$ to the $v = 7$ level. Lower level overtones were obtained by std. IR techniques, and higher absorptions (>12000 cm^{-1}) were obtained by intracavity dye laser photoacoustic spectroscopy. The C-H stretches in both mols. were analyzed in terms of the local-mode model, and harmonic frequencies (ω_e) and anharmonicities (X_e) were calcd. In cis-propene-1,2- d_2 , these values are (cis terminal olefinic C-H stretch) $\omega_e = 3076 \pm 28$ cm^{-1} and $X_{ee} = -56 \pm 5$ cm^{-1} , (in-plane Me C-H stretch) $\omega_e = 3020 \pm 17$ cm^{-1} and $X_{ee} = -58 \pm 4$ cm^{-1} , and (out-of-plane Me C-H stretch) $\omega_e = 2975 \pm$

C.A. 1990, 113, N410

17 cm^{-1} and $X_{13} = -60 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$. The ω 's and X_{ii} 's for propene are in good agreement with prior work. Behavior characteristic of the normal-mode description of vibrations was obsd. for all C-H stretching modes at $v = 1$ and 2, whereas local-mode behavior prevails at $v = 3$ and higher. Line widths were measured for all C-H stretching modes for $v = 3, 7$. Broadening of the Me C-H absorptions in propene and *cis*-propene-1,2- d_2 was obsd. at $v = 6$ and 7. Possible resonances that lead to efficient intramol. energy transfer and the obsd. line broadening in both mols. are discussed. The role of mol. geometry in the difference in behavior of the olefinic vs. Me C-H line widths is considered. Peak absorption cross sections were measured in both mols.

НССОД [Ом. 35542] 1991

ДССОД Баскаков О.И., Яковко С.Ф.
Серота С.В.,

д.п. д.л. прикн. спектроскопии
1991, 54, N 5, 725-728

CH_2D^+ [om. 36426]

1991

Ladonapp. Kösslein M., Jagod Mary-
uk Cherny Frances, et al.

U.S.
N. H.
CO CH.
Astrophys. J., 382, N1,
1991,

Laboratory 51-153. Infrared
Spectra of CH_2D^+ and HCCD^+

and predicted microwave
transitions.

CHD_2

Westre S.B., Liu X.,
et al.,

1991

see
note.

J. Chem. Phys. 1991,
95 (12), 8793-802.

[all. CH₃ i 

CH₂D

1991

Westre S.F., Liu X.,
et al.,

and

WCM.

J. Chem. Phys. 1991,
95(12), 8793-802.

(all - CH₃; III)

CHD₃

1992

116: 94440g Fourier-transform intracavity laser absorption spectra of the 6_{r1} band of methane-d₃. Domingo, C.; Del Olmo, A.; Escribano, R.; Bermejo, D.; Orza, J. M. (Inst. Estruct. Mater., Consejo Super. Invest. Cient., Madrid, Spain 28006). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(2), 972-5 (Engl). Absorption spectra in the 16,100-16,320 cm^{-1} region were recorded for gaseous CHD₃ at room temp. with 0.12 cm^{-1} resolu. using a Fourier transform intracavity laser absorption technique. Two bands belonging to the $N = 6$ polyad, 6_1 (6_{r1}) and 6_2 ($5_{r1} + 2_{r3}$), were identified and a rotational anal. for 6_1 including transitions up to $J = 13$, verified by means of ground-state combination differences, is reported. Comparison with rotational consts. obtained from photoacoustic laser spectra at 77 K is discussed.

Franzmann - 116

C.A. 1992, 116, N 10

CH_2D^+
 CHD_2^+

1992
9 Б1132. Инфракрасные спектры полос ν_1 и ν_4 CH_2D^+ и полосы ν_1 CHD_2^+ . - Infrared spectra of the ν_1 and ν_4 bands of CH_2D^+ and the ν_1 band of CHD_2^+ /Jagod M.-F., Rösslein M., Gabrys C. M., Oka T. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992. —Columbus (Ohio), 1992. —С. 78. —Англ.

Радиоастрономическое определение метильного катиона CH_3^+ затруднено из-за его высокой симметрии и нулевого дипольного момента. Чтобы получить данные о частотах, сделана попытка определения спектров дейтерированных катионов CH_2D^+ и CHD_2^+ , имеющих дипольные моменты 0,329 и 0,310 Д соотв. Оба катиона получены при пропускании электрич. разряда с частотой 6 кГц при токе ~ 150 мА через газ. смесь $\text{CD}_4:\text{CH}_4:\text{H}_2:\text{He}=120:10:100:7000$ мТорр. Проведен анализ вращат. структуры полос ν_1 и ν_4 в ИК-спектре CH_2D^+ и полосы ν_1 в ИК-спектре CHD_2^+ . Определены начала полос: ν_1 3004,7650(5) см^{-1} ν_4 3105,8406(6) см^{-1} для CH_2D^+ и ν_1 3056,1694(8) см^{-1} для CHD_2^+ . Рассчитаны инерц. дефекты, постоянные центробежного искажения и энергии вращат. переходов.

И. А. Гарбузова

М.А.
(+) X
X. 1993, N 9

CHD_2^+

1992

116: 244131y Carbo-ions. Part VII. Infrared spectroscopy of carbo-ions: the ν_1 and ν_4 bands of methylium (CH_2D^+), and the ν_1 band of CHD_2^+ . Jagod, Mary Frances; Roesslein, Matthias; Gabrys, Charles M.; Oka, Takeshi (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637-1403 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 153(1-2), 666-79 (Eng). The ν_1 and ν_4 bands of CH_2D^+ and the ν_1 band of CHD_2^+ were obsd. and analyzed. Both species were formed concurrently in a gas mixt. of $\text{CD}_4:\text{CH}_4:\text{H}_2:\text{He}::120:10:100:7000$ mtorr discharged at 6 kHz a.c. with ~ 150 mA in a multiple-inlet multiple-outlet, liq.-nitrogen-cooled cell. Their IR vibration-rotation spectra were recorded with a difference-frequency spectrometer and detected by velocity modulation with unidirectional multipassing and noise subtraction of the probing IR radiation. The transitions of each band were fitted sep. to a Watson A-reduced Hamiltonian to det. the rotational and quartic centrifugal distortion consts. The detd. band origins (in cm^{-1}) are $\nu_1 = 3004.7650(5)$ and $\nu_4 = 3105.8406(6)$ for CH_2D^+ and $\nu_1 = 3056.1694(8)$ for CHD_2^+ . The inertial defects Δ , centrifugal distortion consts., and rotational transitions were calcd. and are given for these two species.

C.A. 1992, 116, N 24

C2HD

1992

Tensamari M., Abbouti A. F.,
et al.,

un. 47th Ohio State Univ. Int.
Symp. Mol. Spectrosc.,
Columbus, Ohio, June
15-19, 1992, - Columbus
(Ohio), 1992, c. 140

P. 21. X., N 16, 1993,

16 5 1164

CH₂D
CHD₂

1993

118: 201418w Electronic spectra of the heteroisotopic methyl-d and methyl-d₂ radicals by resonance enhanced multiphoton ionization. Brum, Jeffrey L.; Johnson, Russell D., III; Hudgens, Jeffrey W. (Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(5), 3732-6 (Eng). The $3p^2B_1 \leftarrow X^2B_1$ bands of CH₂D and CHD₂ radicals were obsd. between 305 and 335 nm by mass resolved, 2 + 1 resonance enhanced multiphoton ionization spectroscopy (REMPI). Spectroscopic consts. were found for the $3p^2B_1$ Rydberg state of the CH₂D radical ($\nu_{00} = 59,940$ cm⁻¹, $\nu_{1\alpha_1}$ CH₂ stretch = 2995 cm⁻¹, $\nu_{2\alpha_1}$ CD stretch = 2220 cm⁻¹, ν_{4b_1} out-of-plane large amplitude (OPLA) = 1260 cm⁻¹, ν_{5b_2} CH₂ asym. stretch = 3055 cm⁻¹, ν_{6b_2} CD bend = 1115 cm⁻¹) and of the CHD₂ radical ($\nu_{00} = 59,920$ cm⁻¹, $\nu_{1\alpha_1}$ CH stretch = 3040 cm⁻¹, $\nu_{2\alpha_1}$ CD₂ stretch = 2150 cm⁻¹, ν_{4b_1} OPLA = 1165 cm⁻¹, ν_{6b_2} CH bend 1210 cm⁻¹). Vibrational frequencies calcd. by ab initio theory agree well with the exptl. data.

($3p^2B_1 \leftarrow X^2B_1$)

C.A. 1993, 118, N20

CH₃ CD₃

1993

118: 222138v Millimeter-wave spectrum of 1,1,1-trideuteroethane. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Nivellini, G. D.; Tullini, F. (Dip. Chim. "G. Ciamician", Univ. Bologna, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 159(1), 279-81 (Eng). An accurate centrifugal distortion anal. was undertaken for the vibrational ground state of CH₃CD₃ and ¹³CH₃CD₃, for which IR band analyses are in progress.

(MM CAMP)

C. A. 1993, 118, N22

CH₂DCH₂D, 119

1993

119: 213121c The conformational problem studied through the torsional Raman spectra of ethane isotopomers (CH₂DCH₂D, CHD₂CHD₂, and CH₂DCHD₂). Fernandez-Sanchez, J. M.; Gomez, P. C.; Montero, S. (Inst. Estruct. Mater., CSIC, Madrid, Spain 28006). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(3), 1575-90 (Eng). The torsional Raman spectra of CH₂DCH₂D, CHD₂CHD₂, and CH₂DCHD₂, recorded with an improved conventional Raman spectrometer, are interpreted using an exact rotational-torsional Hamiltonian. The kinetic and potential operators of this Hamiltonian are discussed, showing that the term responsible for the existence of 2 distinguishable conformers is of kinetic nature. For CH₂DCH₂D and CHD₂CHD₂ the rotational and the torsional motions can be sep'd. by an appropriate choice of the mol. axis system. The wavenum. and intensities of both torsional Raman spectra are reproduced within the limits of the expt. with the following effective potential parameters: CH₂DCH₂D, $V_3 = 1002 \text{ cm}^{-1}$, $V_4 = 6.0 \text{ cm}^{-1}$; CHD₂CHD₂, $V_3 = 995 \text{ cm}^{-1}$, $V_4 = 7.3 \text{ cm}^{-1}$. For CH₂DCHD₂, only partially tractable in the present approach, an approx. est. of $V_3 = 995 \text{ cm}^{-1}$ was obtained. Besides the quant. interpretation of the torsional spectra, a discussion of the main facts of the conformational problem in connection to the spectroscopic observation is presented. The described induced conformational transitions may contribute to the understanding of the elementary photoisomerization processes in mols. AX₂Y-AX₂Y.

(Vi)

C.A. 1993, 119, 1420

CD₃CCH

1993

118: 69214v The 2_ν band of propyne-d₃. Singh, K.; Rajappan, Geetha; Job, V. A.; Kartha, V. B.; Weber, A.; Olson, W. B. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400085 India). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 157(2), 467-78 (Eng). High-resoln. Fourier transform spectra of CD₃CCH at room temp. and at 195 K were recorded in the region of the 2_ν band (1225-1285 cm⁻¹) at an apodized resolu. of 0.004 cm⁻¹. Approx. 1000 vibration-rotation transitions in the P and R branches of 2_ν (A₁) were fitted with a std. deviation of 0.00035 cm⁻¹. Two vibration-rotation interactions, a Fermi resonance with (ν₂ + 2ν₁₀)⁻¹ (A₁), and a weak xy-Coriolis interaction with (ν₂ + 2ν₁₀)⁺¹ (E), were identified and analyzed. The parameters of the 2_ν(A₁) state and some of the those of the interacting states were detd.

(2 ν₂)

C.A. 1993, 118, N 8

1993

118: 179302e High-resolution laser spectroscopy of asymmetrically deuterated cyclopentadienyl radicals: a study of vibronic degeneracy resolution and Jahn-Teller distortion. Yu. Lian; Cullin, David W.; Williamson, James M.; Miller, Terry A. (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(4), 2682-98 (Eng). The rotationally resolved, laser induced fluorescence, excitation spectra of the partially deuterated cyclopentadienyl radicals, C_5H_4D and $C_5H_3D_2$, were obsd. at low temp. in a supersonic free jet expansion. The obsd. electronic transition in the UV region corresponds to the $A^2A'' \rightarrow X^2E''$ transition in the sym. cyclopentadienyl isotopomers with D_{5h} symmetry. In the reduced C_{2v} symmetry of the $C_5H_3D_2$ and C_5H_4D isotopomers, this electronic transition splits into 2 distinct vibronic bands, sepd. by $\sim 9 \text{ cm}^{-1}$, which arise from the 2 vibronic components X_1 and X_2 into which the X state is resolved when the symmetry is lowered. In C_5H_4D the ground X_1 state has 2A_1 symmetry and a permanently distorted, elongated allyl-like structure while the low-lying X_2 state has 2B_2 symmetry and a compressed dienelike structure. The symmetries of the energy levels and the distortions are reversed for the $C_5H_3D_2$ species. A detailed theor. model is developed to describe the splitting and the rotational structure of the X_1 and X_2 states. Application of this model yields a precise value for the alternation of

сверх-
проводя

C.A. 1993, 118, N 18

the C-C bond lengths in the distorted structures. This value is the same as that describing the dynamically pseudorotating, Jahn-Teller distorted structures in the D_{5h} isotopomers. Addnl., the theory explains anomalous values of the obsd. inertial defects and relates them to phys. meaningful quantities for all the isotopomers in both their $\tilde{X}_1$ and $\tilde{X}_2$ states. The results are compared to previous exptl. work and ab initio calcns. on the cyclopentadienyl radical.

CH₃CCD

1994

122: 19209j Perturbations in the $2\nu_9$ and ν_8 bands of propyne-d.
Job, V. A.; Kartha, S. B.; Sule, N. S.; Kartha, V. B.; Weber, A.;
Olson, W. B. (Spectroscopy Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay,
400 085 India). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 168(1), 166-84 (Eng).
The anal. of the complex rotational structures of the $2\nu_9$ parallel
band and the ν_8 perpendicular band of CH₃CCD is presented. All
the levels of $2\nu_9(A_1)$ and $\nu_8(E)$ states are perturbed to varying degrees.
A large no. of off-diagon perturbations connecting a quartet of
interating states, which included the E component of $2\nu_9$ and the
(A₁,A₂) component of $(2\nu_{10} + \nu_9)$, account for the obsd. complex
pattern. A few transitions of the type $\Delta K = +2$ to the $2\nu_9(E)$ state
and $\Delta K = 0$ to the $(2\nu_{10} + \nu_9)(A_1 + A_2)$ state have also been
identified. The major interactions are Fermi resonance between
 $2\nu_9(A_1)$ and the lower component of $(2\nu_{10} + \nu_9)(A_1, A_2)$, Fermi
resonance between $2\nu_9(E)$ and $\nu_8(E)$, " $\pm 2, \pm 2$ " l-type resonance
between $2\nu_9(A_1)$ and $2\nu_9(E)$, and xy-Coriolis interaction between
 $2\nu_9(A_1)$ and $\nu_8(E)$. Parameters of the four states and the interaction
parameters have been detd.

(Di)

C.A. 1995, 122, N2

$C_6H_3D_3$

1995

123: 43334n Raman and CARS spectra of sym-trideutero benzene in the gaseous phase. Zeindl, S.; Sailer, K.; Bauer, F.; Schroetter, H. W.; Ruoff, A. (Sektion Physik der LMU Muenchen, Schellingstrasse 4, D-80799 Munchen, Germany). *J. Mol. Struct.* 1995, 350(3), 185-94 (Eng). The Raman spectrum of sym-trideutero benzene ($1,3,5-C_6H_3D_3$) in the gaseous phase was recorded at its vapor pressure at room temp. In addn. to the $4a'_1$, four of the $7e'$ and two of the $3e''$ fundamentals and some hot bands, 55 overtone and combination vibrations were obsd. and 30 of them could be assigned. Depolarization ratio measurements showed that most of the 2nd-order bands were polarized. The Q-branches of the ν_1 and ν_2 vibrations could be resolved into subbands by continuous wave CARS spectroscopy. Together with earlier results on benzene and hexadeutero benzene, the 2nd-order Raman spectra of benzene and its sym. deuterated derivs. are now documented.

(C₆H₃D₃, ν_i)

C. A. 1995, 123, N4

CH₃CCD

1997

uk, ν_{CD}

128: 146820a The C-D stretch of monodeuterated propargyl radical (CH₂CCD). Eckhoff, Wade C.; Miller, Charles E.; Billera, Charles F.; Engel, Paul S.; Curl, R. F. (Chemistry Department, Rice Quantum Institute, Rice University, Houston, TX 77005 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 186(1), 193-202 (Eng), Academic Press. The high-resoln. IR spectrum of the monodeuterated propargyl radical (CH₂CCD) was obtained in the region of its acetylenic C-D stretch. Lower state rotational consts. were detd. for the mol. The upper state was significantly perturbed making the upper state rotational consts. detd. much more uncertain.

—199-146820a C-D stretch of monodeuterated propargyl radical

C.A. 1998, 128, N12

C6H5D

1997

photoacoustic for a laser beam

128: 140407z Excited vibrational states of benzene: high resolution FTIR spectra and analysis of some out-of-plane vibrational fundamentals of C_6H_5D . Snels, Marcel; Beil, Andreas; Hollenstein, Hans; Quack, Martin (Ist. Mater. Speciali, Zona Industriale Tito Scalo, I-85050 Potenza, Italy). *Chem. Phys.* 1997, 225(1-3), 107-130 (Eng), Elsevier Science B.V.. We have measured the IR spectra of the ν_4 , ν_{10b} and ν_{11} fundamental bands of C_6H_5D in the range $540-830\text{ cm}^{-1}$ with an instrumental bandwidth of 0.0024 cm^{-1} (unapodized FWHM) using a Bomem DA 002 Interferometric Fourier Transform spectrometer. The rotational anal. for ν_4 yields ground state consts. by combining ground state combination differences and published microwave data. Excited state consts. for the ν_4 level were obtained up to quartic terms, using Watson's A-redn. Hamiltonian in the III^r representation, resulting in a band center $\tilde{\nu}_4^0 = 697.593\text{ cm}^{-1}$. A partial anal. is presented for the ν_{10b} fundamental ($\tilde{\nu}_{10b}^0 = 778.027\text{ cm}^{-1}$), which appears to be locally perturbed by the $\nu_{16a} + \nu_{16b}$ combination band. The very strong ν_{11} band is strongly perturbed, most probably by ν_{6a} and ν_{6b} . The results are discussed in relation to comparison with accurate ab initio electronic structure calcns. including non Born-Oppenheimer effects as well as potential applications with isotope tracer detection and IR laser chem.

FTIR -
C6H5D

C.A. 1998, 128, N12