

C-Φ(H)-0

M-350 - IV (vi, cur. nocm.) ~~1964~~ 1964

vi (DCOOD)₂; (HCOOD)₂; (DCOOH)₂;

(HCOOH)₂; (CD₃COOD)₂; (CH₃COOD)₂; (CD₃COOH)₂;

Kishida S., Nakamoto K.

J.Chem.Phys., 1964, 41, N 6, 1558-63

Normal coordinate analyses of ...

J.

PE, 1965, 8 138

Cy 46092

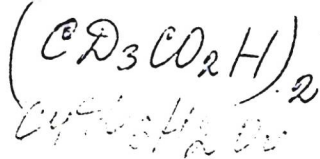
1965

CD_3CD_2OD
 CD_3CD_2OH

u.b.

Microwave rotational spectrum of the CD_3CD_2OD and CD_3CD_2OH molecules. L. M. Imanov, Ch. O. Kadzhar, and I. Dzh. Isaev. Opt. i Spektroskopiya 18(5), 904-5(1965)(Russ). The microwave spectrum of C_2D_5OD was recorded in the range of $13.0-33.5 \times 10^3$ Mc. at -40° and $10^{-1} - 10^{-2}$ mm. Some lines were attributed to C_2D_5OH which may be present in consequence of the action of the water present; this was proved by the addn. of H_2O which enhances the exchange reaction. A series of transitions of the *P*, *Q*, and *R* branches was identified. A semiempirical correction on the centrifugal distortion was used in the calcn. of the *Q* branch transitions. The rotational consts. *A*, *B*, and *C*, principal moments of inertia *I_a*, *I_b*, and *I_c*, the centrifugal distortion const. *D*, and the asymmetry parameter χ of C_2D_5OD are 22,613.2, 7346.1, and 6448.8 Mc., 22.3555, 68.8160, and 78.3909 a.m.u., 3.97 kc., and -0.888982 ; the resp. values of C_2D_5OH are 22,641.3, 7794.8, and 6792.8 Mc., 22.3278, 64.8549, and 74.4227 a.m.u., 3.93 kc., and -0.873544 . P. Adamek

C.A. 1965. 63. 7
 7790 9



(BEP-1009-M-IV)

1966

(Vi)

Carlson G. L., et al
Spectroscop. acta, 1966, 22,
NG, 1117-23

1967

СЖ ОМ
25

1) 6 Д472. Микроволновой спектр изотопа этилового спирта C_2D_5OH . Culot J. P. Spectre micro-onde de l'isotope C_2D_5OH de l'alcool éthylique. «Bull. Belg. Phys. Soc.», 1967, № 4—5, 324—325 (франц.)

Интерпретированы переходы $J_0, J - J_1, J - 1$ ветви $b_Q_{1.-1}$ изотопа этилового спирта C_2D_5OH , наблюдаемые в области 15 800—43 000 Мгц. Приписание подтверждено данными о штарковском эффекте. Отмечено, что изменение коэф. резонансного поглощения при взаимодействии двух близких вращательных частот создает дополнительные возможности для идентификации переходов.

В. П. Колобков

4. 1968. 6Ж

~~C₂H₅OH~~
C₂D₅OH

XIV-2979

1967

14 Б226. Микроволновый спектр молекулы этилового спирта. Culot Jean-Pierre. Spectre microonde de la molécule d'alcool éthylique. «Ann. Soc. scient. Bruxelles», 1967, Sér. II, 81, № 3, 272—291 (франц.)

На спектрометре со штарковской модуляцией при $t = -45^\circ$ исследованы МВ-спектры молекул $\text{CD}_3\text{—CD}_2\text{—OH}$ и $\text{CD}_3\text{—CD}_2\text{—OD}$ в диапазоне 9—50 Гц. Идентифицирован ряд линий, из частот которых определены значения вращательных постоянных $A = 22641,45$, $B = 7794,87$ и $C = 6792,75$ Мгц для $\text{CD}_3\text{—CD}_2\text{—OH}$ и $A = 22613,45$, $B = 7346,40$ и $C = 6449,15$ Мгц для $\text{CD}_3\text{—CD}_2\text{—OD}$. Из этих значений а также из значений A , B , C для других изо-

X. 1968. 14



топозамещенных этилового спирта методом Крайчмана найдены структурные параметры этой молекулы. Путем расчета с приближенным учетом поправок центробежно-го растяжения выполнена идентификация большого числа вращательных линий переходов между уровнями с большими значениями кв. чисел J и $K \pm 1$. По величине штарковского расщепления ряда линий определены компоненты дипольного момента.

М. Р. Алиев

1967

 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ (di, мол. пост.)

IV 12106

Иматов Л. М., Кадгар Э. О., Исаев И. Д.

Микроволновый спектр молекул
 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^{18}$ "Оптика и спектроскопия", 1967,
22, № 5, 837-838

$\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$

$\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OD}$

(M. L. Cowell)

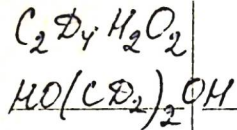
XIV-2979

1967

63349r Microwave spectrum of the ethyl alcohol molecule. Sulot, Jean Pierre (Centre Phys. Nucl., Louvain, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1967, 81(3), 272-91 (Fr). The spectrum of $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$ and $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OD}$ was measured at 9-50 GHz. and room temp. The J.K.G. Watson formula (1966, 1967) was used to correct for centrifugal distortions. Many of the newly found transitions were due to a component of the dipole moment along the *b*-axis. These transitions correspond to a trans configuration, where the hydroxyl H atom is in the plane of symmetry of the mol. The use of a fictive model for the mol. allowed the theoretical calcs. of the rotational const. 22 references.

H. Horvath

C. A. 1968. 69. 16

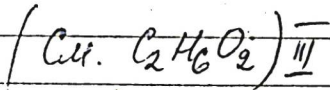


Matsuda H.,
Miyazawa T.

1967

Bull. Chem. Soc. Japan,
40, N1, 85.

ИК-спектры и колебания
мал-1 этериникоме и
его дейтерированных
производных



DO-(CH₂)₂-OD

1984

~~HO(CD₂)₂OH~~

~~C₂D₄O₂H₂~~

C₂H₄O₂D₂

109842q The vibrational spectrum of ethylene glycol. W. Sawodny, K. Niedenzu, and J. W. Dawson (Duke Univ., Durham, N. Car.). *Spectrochim. Acta, Part A* 23(4), 799-806(1967) (Eng). The ir and Raman spectra of liquid DO(CH₂)₂OD and HO(CD₂)₂OH were recorded and interpreted. As a result, an assignment of the vibrational spectrum of liquid ethylene glycol is proposed. The skeletal valence vibrations are observed at 864, 1041, and 1084 cm.⁻¹ The Raman spectrum and the ir spectrum in the 650-400-cm.⁻¹ range of liquid trimethylene glycol has also been recorded and is evaluated briefly. 21 references.

RCSQ

γ_i

C.A. 1967.66.24

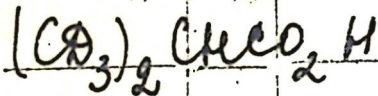
C-2(M)-0

Иманов Л.М. и др. 1969

ν_0 ,
лев. спектр
Спектроскопия, Тер. Сиб.
Совет., Чтк 1965 (Турб. 1969),
13-16. Редактор Терле-
жаева М.А., "Наука", М.

(Сел. $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$) II

1970



1:

(82186) Synthesis and vibration spectrum of isobutyric acid $(\text{CD}_3)_2\text{CHCO}_2\text{H}$. Bellocq, Anne M.; Dubien, Monique; Belloc, Jacqueline; Dizabo, Pierre; Garrigou-Lagrange, Chantal (Cent Rech. Paul Pascal, Talence, Fr.). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1970, 67(4), 785-8 (Fr). Synthesis of isobutyric acid $(\text{CD}_3)_2\text{CHCO}_2\text{H}$ was realized and assignments were made for obsd. frequencies by comparison with other isotopic species. The CH group vibrations have been localized. RCQQ

C.A. 1970.73.16

C-D-H-O

CD₂CHO

CH₂CHO

Di,

постоян

ангармонич
костен

1940

Lucasiewicz G.,
Sandorfy C.

Can. J. Chem.

1940, 48, 23, 3694

(Can. CH₂CHO) III

C-H-D-O

1970

Timidei A., XIV-2268
Terbi G.

Vi,

L. Mateeforuk,

суд. пост.

A, 1970, 25, 11, 1729.

(суд. суд. суд.) III

HCOOH , HCOOH , HCOOH , HCOOH (ред. с. 1972) 1972

Bellat J., Deldalle A. Samson C., Steen-
beckeliers G., Wörthheimer R.; XIV 350.
J. Mol. Struct., 1971, 9, N1-2, 65-
75 (apparatus.)

Etude du spectre de rotation de la
molécule d'acide formique. B.
Etude de quelques substitutions
isotopiques. Application à la dé-
termination de la structure de
la molécule.
PHEP43., 1972, 3D283 10



C-D(H)-O

BP-XIV-1874

1971

CH₂OD-CHOCH₂OH-CDO

м.и.

кван. сп-т

J/13 B203. Микроволновые спектры дейтерированных гликольальдегидов. Marstokk K.-M., Møllendal Harald. Microwave spectra of deuterated glycolaldehydes. «J. Mol. Struct.»; 1971, 7, № 1—2, 101—109 (англ.)

В области 12 300—26 000 Мгц исследованы МВ-вращательные спектры молекул $\text{CH}_2\text{OD}-\text{CHO}$ ($0 \leq J \leq 36$) (I), $\text{CH}_2\text{OH}-\text{CDO}$ ($0 \leq J \leq 34$) (II), $\text{CHDOH}-\text{CHO}$ ($0 \leq J \leq 35$) (III) и $\text{CHDOH}-\text{CDO}$ ($0 \leq J \leq 5$) (IV). Определены вращательные постоянные $A = 17490,806 \pm 0,015$ (I), $17151,310 \pm 0,033$ (II), $16987,977 \pm 0,031$ (III), $15862,78 \pm 0,15$ (IV), $B = 6499,754 \pm 0,06$ (I), $6362,975 \pm 0,021$ (II), $6385,521 \pm 0,007$ (III), $6233,30 \pm 0,10$ (IV), $C = 4882,969 \pm 0,008$ (I), $4779,018 \pm 0,010$ (II), $4843,832 \pm 0,017$ (III), $4663,73 \pm 0,10$ Мгц (IV), постоянные цент-

X. 1971. 13

робежного искажения (по Уотсону) $d_J = -23,83 \pm 0,61$
 (I), $-23,4 \pm 1,8$ (II), $-29,9 \pm 1,3$ кГц (III), $d_{JK} =$
 $= -65,04 \pm 0,48$ (I), $-54,79 \pm 0,66$ (II), $-58,35 \pm 0,80$ кГц
 (III), $d_K = 84,2 \pm 1,1$ (I), $61,4 \pm 1,3$ (II), $73,4 \pm 1,7$ кГц
 (III), $d_{WJ} \cdot 10^6 = 4,87 \pm 0,13$ (I), $5,28 \pm 0,43$ (II), $6,38 \pm 0,28$
 (III), $d_{WK} \cdot 10^6 = -4,137 \pm 0,094$ (I), $-2,32 \pm 0,11$ (II),
 $-3,54 \pm 0,17$ (III). С помощью ур-ний Крейчмена и с ис-
 пользованием вращательных постоянных молекулы
 $\text{CH}_2\text{OH}-\text{CHO}$ — определены координаты атомов H в
 молекулах гликольальдегида. Приведены структурные
 параметры гликольальдегида, вычисленные при приня-
 тых длинах связей $r(\text{C}=\text{O}) = 1,216$ и $r(\text{C}-\text{C}) = 1,501 -$
 $0,005$ Å: $r(\text{C}-\text{O}) = 1,401 - 1,406$, $r(\text{OH}) = 1,071 - 1,097$,
 $r(\text{C}-\text{HbCH}_2\text{OH}) = 1,105 \pm 1,109$, $r(\text{C}-\text{HbCHO}) = 1,085 -$
 $1,097$ Å, $\text{C}-\text{C}-\text{O} = 121,8 - 124,2^\circ$, $\text{O}-\text{C}-\text{C} = 113,2 - 114,4^\circ$,
 $\text{C}-\text{O}-\text{H} = 100,0 \pm 101,5^\circ$, $\text{C}-\text{C}-\text{H}(\text{в } \text{CH}_2\text{OH}) = 108,4 -$
 $108,7^\circ$, $\text{H}-\text{C}-\text{H} = 107,1 - 107,4^\circ$, $\text{C}-\text{C}-\text{H}(\text{в } \text{CHO}) =$
 $= 116,2 - 116,5^\circ$.

А. П. Александров

C-H-D-O

1971

DCO_2CH_3

HCO_2OD_3

Понов Е. М. и др.

М. Скрипкин. Дилемм,

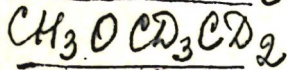
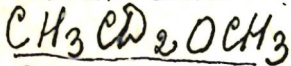
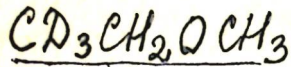
D_2O

1971, 12, 1, 61.

Сред. воды

D_2

$(\text{C}_6\text{H}_5\text{HCO}_2\text{CH}_3)/\text{H}$
 $\text{C}_6\text{H}_5\text{OD}_2$



Kitagamo, Teizo;

Ohno, Keiichi;

Sugeta, Hiromu;
Miyazawa, Tatsuo.

1972

(Vi, Vo)

"Bull. Chem. Soc. Jap."

1972, 45, N4, 969-75.

● (see $\text{C}_2\text{H}_5\text{OCH}_3$; III)

CH_3COOD .

1972.

$\text{C}_2\text{D}_4\text{H}_2$ Morita Hiroshi,
Nagakura Saburo.

(Vi)

"J. Mol. Spectrosc.",
1972, 42, n3, 536-546.

(см. HCOOH , III).

20522.6335 CH_3OH ; CH_3OD ; CD_3OH ; CD_3OD
XI.1.1. (сер. пост.) XIV 3965 1972

Расчет постоянных центрального иска-
жения молекулы метилового спирта и его
дейтерозамещенных. Милетнухина И.А.
Свердлов Л.М.

"Оптика и спектроскопия", 1972, 32,
№ 4, 823-824

W 86.25 пик

00 613

ВИНИТИ

40109.7318
Ch, Ph, TE

$\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{COOH}$
96615

1973
1549

Marstokk K.-M., Mollendal Harald.

Microwave spectrum of methoxyacetic
acid: assignment of the hydrogen-bonded
rotamer.

"J.Mol.Struct.", 1973, 18, N 2, 247-256
(англ.)

002 003 0 0 1 2

0019-AMK
ВИНИТИ

50203.4211

Ch, Ph, TC

76189 04

 CD_3COOH CH_3COOD
 CD_3COOD ,

1974

* 4-8080

Fogliazzo René, Novak Alexandre.

Spectres Raman des acides CH_3COOH ,
 CH_3COOD , CD_3COOH et CD_3COOD à l'état
polycristallin à 90°K.

"J. chim. phys. et phys.-chim. biol.",

1974, 71, N 10, 1322-1328

(франц. рез. англ.)

0292 чик

267 267 128 4

ВИНИТИ

41015.6743

Ch, TC

49587

02

1974

 $\text{CH}_2\text{ODCH}_2\text{OD}$ ~~$\text{CD}_2\text{OHCD}_2\text{OH}$~~

2565

Ha Tae-Kyu, Frei H., Meyer R., Günthard

Hs.H. Conformation of ethylene glycol: isometric group, ab initio study of internal H bonding and IR-matrix spectra of the species $\text{CH}_2\text{OHCH}_2\text{OH}$, $\text{CD}_2\text{OHCD}_2\text{OH}$ and $\text{CH}_2\text{ODCH}_2\text{OD}$. "Theor. chim. acta", 1974, 34, N 4, 277-292

(англ.)

0212 пик

183 1850204

ВИНИТИ

40923.6648

TC, Ph, Ch

 $(CD_3)_2OD^+$ $(CD_3)_2OH^+$

96559

02

1974

 $(CD_3)_2O^+ *$

4-6434.

Solka B.H., Harrison A.G. Bimolecular reactions of trapped ions. IX. Effect of method of preparation on the rate of reaction of $C_2H_5^+$. "Int. J. Mass. Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 14, N 2, 125-138

(англ.)

0197 с.в.

160 163 0189

ВИНИТИ

1974

 $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$

91887b Microwave rotational spectrum of an ethanol ($\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$) molecule in excited vibrational states. Kadzhar, Ch. O.; Askerov, A. B.; Abbasov, A. A.; Imanov, L. M. (Inst. Fiz., Baku, USSR). *Izv. Akad. Nauk Az. SSR, Ser. Fiz.-Tekh. Mat. Nauk* 1974, (4), 58-60 (Russ). The deformation (CCO) and torsional (C-C) vibration frequencies of 265 and 186 cm^{-1} resp., and the energy of an internal rotation barrier around the C-C bond of 3200 ± 160 cal/mol were detd. from the microwave rotational spectrum of $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$ in the ground and excited vibrational states.

C. A. Konak

Uo
и. в. череп

C. A. 1975. 82 N 14

1974



Di; No

2 Д451. Микроволновый вращательный спектр молекулы $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$ в возбужденных колебательных состояниях. Каджар Ч. О., Аскеров А. Б., Аббасов А. А., Иманов Л. М. «АзССР Елмләр Акад. хәбәрләри. Физ.-тех. və риязијат елмләри сер., Изв. АН АзССР. Сер. физ.-техн. и мат. н.», 1974, № 4, 58—60 (рез. азерб. англ.)

Исследованы микроволн. спектры молекулы $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$ (I). Определена частота деформационных колебаний ССО (262 см^{-1}), которая оказалась близкой к соответствующей частоте молекулы $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (II), равной 256 см^{-1} . Обнаружена еще одна серия линий возбужденного состояния, которую так же как и в II, отнесли к крутильным колебаниям вокруг связи С—С. Крутильная частота определена равной 186 см^{-1} , что близко к значению соответствующей частоты в II (184 см^{-1}). Высота потенц. барьера внутреннего вращения для I равна $3200 \pm 160\text{ кал/моль}$.

Ф. 1975. №2

50124.7202
Ph, Ch, TC

$C_3H_2D_4$ 6892 02
 $C_3H_4D_2O$

1974

44-7927

Wieser H., Danyluk M., (Раман спект.)
Kydd R.A.,
Kiefer W., Bernstein H.J.
Vibrational spectra and ring puckering
progression in the C-H stretching
region of trimethylene oxide and several
deuterated analogs.
"J.Chem.Phys.", 1974, 61, N 11, 4380-4393

(англ.)

0288 140

264 266

0280

ВИНИТИ

51013.9160.

Ph, Ch, TC, DB

. 96615

(и.и.)

1975

, MGU $CD_3CH_2OCH_3$

3405

Hayashi Michiro, Kuwada Kazunori.

Microwave spectrum, structure, dipole
moment and internal rotation of trans-
ethylmethylether. "J. Mol. Struct.",
1975, 28, N 1, 147-161

(англ.)

0467 г.и.и.

435 438

ВИНИТИ

vi, cur. no. (CH_3OH , CD_3OH , $\text{C D}_3\text{OD}$,
 $\text{C H}_2\text{DOH}$, $\text{C H D}_2\text{OH}$, "7.")

Mallinson P.D., XIV-7437 / 1975

J. Mol. Spectrosc., 1975, 58, v2, 194-200
(auth)

The harmonic force field of methanol.



Pu Xue, 1976, 145266

10

(90)

60225.9015

CH₂COOH
95615

1976

Ch, TC, DB

CH₂-COOH

* 15-11486

Christiansen Ingrid, Marstokk K.-M.,
Møllendal Harald. Microwave spectra of
isotopic glyoxylic acids, structure
and intramolecular hydrogen bond.

"J. Mol. Struct.", 1976, 30, N 1, 137-
144 (англ.).

0558 ппк

544 544 550

ВИНИТИ

70214.3652

Ch, Ph, TC

 CH_3COOD
96200 CH_3COODH

1976

X-16661

Cugley J., Meyer R., Günthard H.H.
 Infrared spectra, force constants and
 thermodynamic functions of matrix isolated
 peroxyacetic acid. "Chem. Phys.",
 1976, 18, N 3-4, 281-292 (англ.)

0809 фнк

795 795

ВИНИТИ

XIV-7315 1976
Vi(HCOOCH₃, DCOOCH₃, HCOOCD₃) 4-11569

Harris W.C., Cole D.A., George W.O.
Spectrochim. acta, 1976, A32, N1,
1-10.

HDCOOCHDO

ЖУ-14145

1976

12 Д393. Микроволновый спектр и структура этиленозонида: роль вращения вокруг оси с наименьшим моментом инерции при вычислении структурных параметров. Kuczkowski Robert L., Gillies C. W., Gallaher K. L. Microwave spectrum and structure of ethylene ozonide: effects of large axes rotations in structure calculations. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 60, № 1—3, 361—372 (англ.)

М.Н.

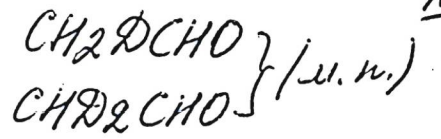
В диапазоне 18—40 ГГц исследованы микроволн. спектры 14 изотопич. разновидностей молекулы этиленозонида (с D, ^{13}C и ^{18}O в различных положениях). Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 5$ в основном колебательном состоянии и определены значения вращательных постоянных. По значениям вращательных постоянных изотопзамещенных молекул

Ф 1976 N 12

методом Крайчмана вычислены структурные r_s -параметры этиленозонида. Расчет выполнен при использовании вращательных постоянных 6 различных наборов изотопзамещенных. При этом получены сильно различающиеся значения для некоторых из параметров: наибольшее изменение от 1,458 до 1,502 Å получено для O_p-O_p -расстояния, которое интерпретировано взаимодействием колебаний с вращением вокруг a -оси с наименьшим моментом инерции. Выбран набор изотопзамещенных молекул, в котором отсутствует молекула с замещением вблизи a -оси, и для этого набора получены следующие r_s -параметры: $CO_e=1,416$, $CO_p=1,412$, $OO=1,461$ Å; $Co_eC=104,8^\circ$, $O_eCO=105,50^\circ$, $CO_pO_p=99,3^\circ$.
М. Р. Алиев

XIV-7851

1976



Turner P.H., Cox A.P.

Chem. Phys. Lett., 1976, 42, N1, 84-88

ORIGINAL

CH₃-O-C₂D₃

2, 40

7 Б199. Низкочастотные колебательные спектры, торсионные потенциальные функции метильной группы и потенциалы внутреннего вращения метилвинилового эфира и метил-*d*₃-винилового эфира. Durig J. R., Compton D. A. C. Low frequency vibrational spectra, methyl torsional potential functions, and internal rotational potential of methyl vinyl ether and methyl-*d*₃ vinyl ether. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 5, 2028—2035 (англ.)

На фурье-спектрометре в области частот 480—80 см⁻¹ с разрешением 0,25 см⁻¹ и на КР-спектрометре в области частот 500—100 см⁻¹ с разрешением 3 см⁻¹ измерены колебательные спектры метилвинилового эфира (I) и метил-*d*₃-винилового эфира (II). Присутствие поляризованных линий КР вблизи 140 см⁻¹ в газовой фазе I и II указывает на то, что более высокоэнергетичным является гош-конформер. Расчет торсионной потенциальной функции для II показал, что гош-кон-

2.1949, №7

формеры обладают необычно большим торсионным углом 144° и низким барьером к интерконверсии 290 см^{-1} . Барьер между S-цис и гош-конформерами много выше и равен 2220 см^{-1} при переходе от S-цис к гош-конформеру и 1770 см^{-1} при переходе от гош к S-цис-конформеру. Барьеры внутреннего вращения метильной группы в гош-конформере много ниже, чем в S-цис-конформере, и равны для I и II соотв. 514 и 479 см^{-1} .

С. Н. Мурзин

HOCCOOH (Di) 1978

HOCCCOOD (Di), DOCCCOOD (Vi)

Redington R.H., Redington T.E.

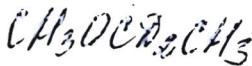
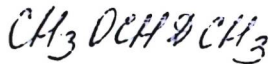
J. mol. Struct., 1978, 48, n2, 165-176 (442)

Infrared matrix-isolation
spectra of monomeric oxalic acid.

XIV - 9152

Proc. Chem., 1978, 22 5 232 10 (9)

1978



"g"

Shimanechi T.
et al.

J. Phys. and Chem.

Ref. Data, 1978, 7 (4)

1323-1443

Математическое моделирование.

Календарь. Часть 9

(см. математика; 5)

(10)

Математическое моделирование.

CH₂DCOOH

1979

21 Б245. Равновесная конфигурация уксусной кислоты. Caminati W., Schappini F., Corbelli G. Equilibrium configuration of acetic acid. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 327—332 (англ.)

С целью определения равновесной конфигурации молекулы уксусной к-ты получены микроволновые спектры двух ее дейтеропр-ных CH₂DCOOH и CH₂DCOOD. Показано, что Me группа находится в «затененной» конфигурации по отношению к карбонильной группе. Вычислены постоянные центробежного искажения, свободные от внутренних вращательных эффектов. Получена структура для 4-х атомов водорода и частичная r_0 структура для всей молекулы. Резюме

равнов.
конфигурац.

22. 1979/21

CHO-O-CHO

CHO-O-CHO

CHO-O CHO.

суд. пос.

кв. мех. факт

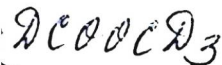
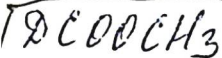
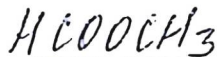
смет в майске

Ломовица 8604 | 1979

Катке Н., et al.

J. Mol. Spectrosc.

1979, 77, 251-69.



(see notes)

[common 8918]

1979.

Marmar E.B.; et al.

J. Mol. Struct., 1979,
57, 189-200

DCCCHO

1980

9 B261. Спектроскопия инфракрасного микроволнового двойного резонанса DCCCHO при использовании 3,51 мк He—Xe-лазера. Takami M., Suzuki M. Infrared-microwave double resonance spectroscopy of DCCCHO using the 3.51 μm He—Xe laser. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 7, 4089—4098 (англ.)

М.П.

Методом ИК-МВ двойного резонанса измерен в области частот 0,001—80 ГГц МВ-спектр пропиналя- d_1 , DCCCHO, в возбужденном колебательном состоянии $\nu_2=1$. В кач-ве источника ИК-излучения использован 3,51 мк He—Xe-лазер с зеемановской перестройкой частоты в области около 0,1 см^{-1} . При идентификации переходов использованы результаты измерений ИК-спектра поглощения, штарковского ИК-спектра и ИК—МВ—РЧ тройного резонанса DCCCHO. Вращательные постоянные в основном и возбужденном $\nu_2=1$ колебательных состояниях, соотв., равны $A=66778,016$ и $66811(302)$, $B=4463,8489$ и $4466(26)$, $C=4177,7950$ и $4178(26)$ МГц. Однако полученные данные не обеспечивают удовлетворительного согласия между измеренными и вычисленными частотами. Стандартное отклонение для частот МВ-переходов с учетом центробежного искажения составляет 321 МГц. Наряду с

Х. 1981 № 9

чисто вращательными переходами в состоянии $v_2=1$ наблюдались МВ-переходы из колебательного состояния $v_2=1$ в др. ближайшие колебательные состояния. Их интерпретация дана на основе модели квазиконтинуума колебательных состояний. С. Н. Мурзин

ФССНО

1980

23 Б220. Миллиметровый спектр DCCCHO в основном колебательном состоянии. Takami M. Millimeter-wave spectrum of DCCCHO in the ground vibrational state. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 301—306 (англ.)

Измерен в области частот 59—184 ГГц МВ-спектр пропиная- d_1 , DCCCHO (I) в основном колебательном состоянии. Анализ спектра выполнен с использованием приведенного гамильтониана в представлении Уотсона с учетом квартичных и секстичных постоянных центробежного искажения. При определении молекулярных постоянных I использованы известные МВ-данные и данные по ИК-МВ двойному резонансу. Вращательные постоянные в основном состоянии равны (в МГц) $A = 66778,016(12)$, $B = 4463,8489(7)$, $C = 4177,7950(7)$, а постоянные центробежного искажения $\Delta_J = 0,0015919(5)$, $\Delta_{JK} = -0,139214(13)$, $\Delta_K = 9,4328(18)$, $\delta_J = 0,0002885(4)$, $\delta_K = 0,03069(4)$, $H_{JK} = -0,817(13) \cdot 10^{-6}$, $H_K = -9,62(4) \cdot 10^{-6}$, $h_I = 0,0047(3) \cdot 10^{-6}$. Установлено, что постоянная Δ_K для DCCCHO приблизительно на 5% превышает соответствующую постоянную для HCCCHO ($\Delta_K = 8,991$ МГц). С. Н. Мурзин

М.И.

X. 1980
N 23

ДСССНО

1980

i Д377. Вращательный спектр основного колебательного состояния молекулы ДСССНО в миллиметровом диапазоне. Millimeter-wave spectrum of ДСССНО in the ground vibrational state. Takami Michio. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 301—306 (англ.)

В диапазоне миллиметровых волн исследован вращательный спектр молекулы ДСССНО. Идентифицированы линии вращательных переходов a - и b -типа с $F \leq 36$ в основном колебательном состоянии. Кроме того, идентифицированы линии 7 переходов основного состояния методом двойного ИК — МВ-резонанса с использованием He — Xe-лазера с зеемановской перестройкой частоты. Обработка спектра выполнена с использованием приведенного вращательного гамильтониана Уотсона. Определены значения вращательных постоянных и постоянных квартичного и секстичного центробежного искажения.

М. Р. Алиев

вращат.
спектр

м.п.

ф. 1981 № 1

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

1981

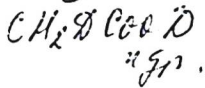
95: 212253w Microwave spectrum of deuterated 1-propanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OD}$). I. List of the absorption lines. Abdurakhmanov, A. A.; Ismailzade, G. I. (Inst. Fiz., Baku, USSR). *Izv. Akad. Nauk Az. SSR, Ser. Fiz.-Tekh. Mat. Nauk* 1981, 2(2), 91-6 (Russ). The microwave spectrum of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OD}$ mol. was studied in the frequency range between 11.9 and 27.3 HHZ. The frequencies of about 600 transitions were measured and the intensity of absorption lines was estd., the Stark-shifts directions were detd. The series of Q^b -branch transitions were assigned.

(yb cn ext)

C.A. 1981, 95, N 24



[Osmeca 12040] 1981.



Van Eucken B.P., et al.

M. L. Ensign,
Geophys.

J. Mol. Spectrosc., 1981,

M. N.

86 (2), 465-79.

Di.

$\text{CH}_3\text{COOCD}_3$ [Ummuck 13964] 1982

McC Kean D.C., Torto J.,

лк снхрп,
Vi, снх.носб.

J. Mol. Struct., 1982,
81, N1-2, 57-60.

Оммуек 13964

1982

$\text{CHD}_2\text{COOCD}_3$

UK cнexmy,
Vi,
cнeл. нocm.

Mc Kean D.C., Torto I,

J. Mol. Struct.,
1982, 81, N1-2, 51-60.

$\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$

1984

Peterson K. I., Klem-
perer W.

Сейруктура,

Вейтп. Вранс.

Цо;

J. Chem. Phys.,
1984, 80, N 6, 2439-
● -2445.

(см. $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$; III)

[Am. 23564]

1985

$\text{CH}_2\text{D}\text{COOH}$

Van Eijck B.P., Van Zoeren E,

J. Mol. Spectrosc., 1985,
111, N 1, 138-163.
N.B. enamp,
(V₀)

$(\text{HCOOD})_2$ (Om. 26 186) 1986

u gp.

Bertie F.E., Michaeli-
an L.H., et al.,

(Vi)

J. Chem. Phys., 1986
85, N 9, 4779-4789.



$\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{D}$ (Om. 26268)

1986

Vacher and J.M., Van Eijck
B. P.

УВ спектр,
et al.,

V_0 , эмиссия-
ра J. Mol. Spectrosc.,

1986, ● 120, N1, 118-
126

$\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{D}$

1986

105: 199435k The rotational spectrum of acetone: deuterated species, internal rotation, and structure. Vacherand, J. M.; Van Eijck, B. P.; Burie, J.; Demaison, J. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille I, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 120(1), 118-26 (Eng). The microwave and millimeter-wave rotational spectra of $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{D}$, $\text{CD}_3\text{COCD}_2\text{H}$, and CD_3COCD_3 were measured. For these 3 isotopic species the rotational consts., the centrifugal distortion consts. and the 3 internal rotation parameters (barrier, Me top moment of inertia, and angle between the internal rotation axis and the a inertial axis) were accurately detd. using 2 computer programs based on the Internal Axis Method. The decrease of the potential barrier upon deuteration is evident. The substitution coordinates of the H atoms could also be detd. The in-plane Me H has a position *cis* with respect to the O atom.

(yf cnekmf)

C. A. 1986, 105, n 22

$\text{HOCH}_2\text{CD}_2\text{CH}$

1987

8 Б1315. Микроволновый спектр $\text{HOCH}_2\text{CD}_2\text{OH}$ и отнесение второй конформации с водородной связью этиленгликоля. Microwave spectrum of $\text{HOCH}_2\text{CD}_2\text{OH}$, and the assignment of a second hydrogen-bonded conformation of ethylene glycol. Kristiansen P.-E., Marstokk K.-M., Mollendal H. «Acta chem. Scand.», 1987, A41, № 7, 403—414 (англ.)

М.П.

На микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 18,0—40,9 гГц с точностью 0,10 МГц измерены вращат. спектры двух гош-поворотных изомеров (ПИ) с внутримолек. Н-связью, gGa и gGg , этиленгликоля, $\text{HOCH}_2\text{CD}_2\text{CH}$, в основном колебат. состоянии и для ПИ gGa в первом возбужденном С—С торсионном состоянии. Для каждого ПИ наблюдалось по два МВ-спектра, принадлежащих двум изотопомерам. Анализ МВ-спектров четырех изотопомеров двух ПИ выполнен в приближении модели асимм. волчка с учетом квартичного цен-

X. 1988, 19, n 8

тробежного искажения. Для всех образцов определены дипольные моменты. Впервые исследованный ПИ gGg на 1,4(4) кДж/моль менее стабилен, чем gGa . Определена возможная структура ПИ с двугранными углами $O-C-C-O$ $53,64(40)^\circ$ для gGa и $53,94(24)^\circ$ для gGg .
С. Н. Мурзин



$\text{CD}_3\text{COOCH}_3$ (DM-30754) 1988
 $\text{CH}_3\text{COOCD}_3$ Dybal J., Krimm S.,

Наблюдения. J. Mol. Struct. 1988,
и расч. 189, 383-392.
Установки

$H_2CO \cdot DCCH$

$H_2CO \cdot HCCD$

$H_2CO \cdot DCCH$

$D_2CO \cdot HCCCH$

for analysis -

checkup,

M. N.

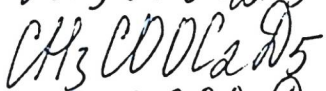
(OM. 29932) 1988

Howard N.W., Legon A.C.,

J. Chem. Phys., 1988,

88, N11, 6793-6800.

(OM-29938) 1988



Mido Y., Shiomi H.
et al.,

колебат.

спектр,

нормальн.

колеб.

и вращат.

интерпрет.

J. Mol. Spect.

1988,

277

176, 253 -

CH₃CH₂CDO

1988

4 Л180. Микроволновый спектр и потенциальная функция пропаналя. The microwave spectrum and potential function of propanal / Randell J., Hardy J. A., Cox A. P. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. Pt2.— 1988.— 84, № 8.— С. 1199—1212.— Англ.

Определена потенц. ф-ция для внутреннего вращения альдегидной группы в пропанале. Все известные данные МВ и дальнего ИК-диапазона включены в потенциал $V(\alpha) = 1/2 \sum_n^n V_n (1 - \cos n\alpha)$, где (в см⁻¹)

$V_1 = 251(2)$, $V_2 = 736(8)$, $V_3 = 550(4)$, $V_4 = -179(5)$ и $V_5 = -7(4)$. Для вращательных изомеров цис- и гош-пропаналя угол α равен 0° и 128,2° соответственно.

Разность энергий между двумя стабильными конфигурациями молекулы определялась по измерению относит. интенсивностей в МВ-диапазоне и составила $\Delta W = 420(27)$ см⁻¹. По штарк-эффекту определено расщепление уровней вследствие внутреннего вращения для изотопов CH₃CH₂CH¹⁸O и CH₃CH₂CDO. Показано, что дипольный момент гош-пропаналя ориентирован внутри угла 0,6° относительно С=О связи, и величина его составляет 2.864(8) ед. Дебая. Б. С. Д.

М.А.

ср. 1989, № 4

CD₃CHO

1989

12 Л190. Ферми-резонансная структура в области обертоновых СН-колебаний CD₃CHO. Fermi resonance structure in the CH vibrational overtones of CD₃CHO / Amrein A., Hollenstein H., Quack M., Zenobi R., Segall J., Zare R. N. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 8.— С. 3944—3951.— Англ.

С помощью фурье-спектрометра в интервале 700—17 500 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения, обусловленный СН-валентными и -деформационными колебаниями CD₃CHO. Изучена колебательная структура последовательности обертоновых резонансов, вызванных наличием резонанса Ферми между СН-валентной и СН-деформационной колебательными модами. В результате анализа наблюдаемых резонансных структур показано, что резонансное взаимодействие имеет место между СН-валентными и плоскими СН-деформационными колебаниями, а для неплоских СН-деформационных колебаний такое взаимодействие отсутствует. Определено значение постоянной резонансного взаимодействия $|k_{sbb}| = 93$ см⁻¹. Библ. 32.

В. К.

М.А.

ср. 1989, № 12

CD₃CHO

1989

2Б1298. Ферми-резонансная структура полос обертонов колебаний CH в CD₃CHO. Fermi resonance structure in the CH vibrational overtones of CD₃CHO / Amrein A., Hollenstein H., Quack M., Zenobi R., Segall J., Zare R. N. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 8.— С. 3944—3951.— Англ.

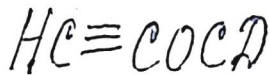
На ИК-фурье-спектрометре в обл. частот 700—11 000 см⁻¹ с разрешением 0,004 см⁻¹ и на лазерном спектрометре с фотоакустич. приемником в обл. частот 12 000—17 500 см⁻¹ измерены спектры основных полос и обертонов вал. кол. и СО 2,2,2-тридейтероацетальдегида, CD₃CHO, в газ. фазе. Впервые осуществлен полный анализ резонанса Ферми в спектрах обертонов между вал. кол.-СН и плоскими деф. кол. СН. Большая величина эффективного параметра ангармонизма 93 см⁻¹ соответствует времени переноса энергии между вал. и деф. СН-модами ~0,1 пс. Идентифицирован обертоном вал. кол. СО вплоть до колебат. квантового числа $\nu=4$ и его комбинац. полосы с деф. кол. СН.

С. Н. Мурзин

М.А.

X. 1990, №2.

1989



Изматов И. С.,
Лазарев Я. Н. и др.

Же. физ. химии. 1989.

63, № 3. С. 642-651.

(Сел. $\text{HC}\equiv\text{COC}\text{H}_3$; III)



1989

Nimlos M. R.

Soderquist J. A. et al.

J. Amer. Chem. Soc.

1989. 111, N20. c.

7675 - 7681.

(see. CH_3CO^- ; III)

u. n.

CHD₂OH

1989

110: 124234p Microwave detection of direct gauche to trans transitions in methan-d₂-ol (CHD₂OH). Su, Chun Fu; Quade, C. Richard (Dep. Phys., Mississippi State Univ., Mississippi State, MS 39762 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(3), 1396-402 (Eng). A portion of the microwave torsional-rotational spectrum of CHD₂OH was assigned at 12.4-41.3 GHz. The detection and identification are given of direct gauche to trans transitions from both gauche states and gauche to gauche transitions. The energy level system has 3 substates in the torsional motion with a rotational manifold for each torsional substate. In terms of torsional substate, 10 Q-type and 3 R-type transitions were assigned for e₀(gauche) to e₁(trans). Addnl. lines were assigned within each torsional substate. Spectral anal. was made using a phenomenol. rotational Hamiltonian plus an internal axis torsion-rotation Hamiltonian in zeroth order. The approx. torsional energy level differences are gauche-gauche = 184.7 GHz, gauche(upper)-trans = 202.5 GHz, and gauche(lower)-trans = 387.2 GHz. Two sets of potential energy coeffs., one with pos. V₂ and the other with neg. V₂, were detd. that give essentially equiv. fit in the spectral anal.

(46 crkmp)

C.A. 1989, 110, N 14

$(\text{CH}_3\text{OD})_2$ [Om. 34109] 1990
 $(\text{CH}_3\text{OH})(\text{CH}_3\text{OD})$ La Cosse J.P., Lisy J.M.,

J. Phys. Chem. 1990,
94, 4398 - 4400

Vibrational
spectroscopy ~~88~~



Predissociation
 $(\text{CH}_3\text{OD})_2$ and

(CH₃OH) (CH₃OD) in the 9.6 - μ m
Region.

CH₂DCOH

Dm 34941

1990

113-111119) Assignment in methanol-d₁ of the far-infrared laser emission optically pumped by the 10P(46) carbon dioxide line and associated infrared spectrum. Mukhopadhyay, I.; Lees, R. M. (Dep. Phys., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 2A6). *Infrared Phys.* 1990, 30(5), 443-7 (Eng). High-resoln. Fourier transform spectroscopy of the IR OCD bending mode of methanol-d₁ has led to the identification of the 374 μ m far-IR (FIR) laser transition optically pumped by the 10P(46) CO₂ laser line in CH₂DCOH. The IR pump transition coincident with the 10P(46) line is assigned as the R(17), K = 4 transition of the $\sigma' = 0$ torsional species in the torsional ground state. The 374 μ m FIR laser line is then assigned to the $J_K = 18_4 \rightarrow 17_4$ transition in the excited OCD-bend state. The assignment scheme is supported by combination relations among R, P and Q-branch IR transitions in the OCD-bending band. This is believed to be the first FIR laser line assignment for an asym.-deuterated methanol species, as well as the 1st reported high-resoln. study of the IR spectrum.

lek-cnekmp,
M.N.

C.A. 1990, 113, N 16

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ [om. 34759]

1990

~~CH₃CH~~

Shaw R.A., Wieser H.
et al.,

J. Amer. Chem. Soc., 1990,
112, N14, 5401-5410.

Vibrational

Optical Acti-

Vity of (S) - 1-d-Ethanol.

HC:CCDO

1991

114: 132185w Stark quantum beat spectroscopy of polyatomic molecules. Hack, E.; Bitto, H.; Huber, J. R. (Phys. Chem. Inst., Univ. Zurich, CH-8057 Zurich, Switz.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1991, 18(1), 33-44 (Eng). Anal. expressions were derived for Stark quantum beat signals of polyat. mols. and they are discussed with regard to mol. and geometrical parameters. The general treatment is specified for near prolate asym. rotor mols. and a method for detg. rotational consts. and all components of the dipole of electronically excited polyat. mols. is presented. The method was tested and illustrated for the vibrationless S_1 state of deuterated propynal (HC:CCDO, C_s symmetry) and its lowest frequency nontotally sym. state 12^1 . The results of the vibrationless state are compared with structural data reported in the literature. For the 12^1 state, $A = 1.5004(43) \text{ cm}^{-1}$, $B = 0.16131(34) \text{ cm}^{-1}$, $C = 0.14623(34) \text{ cm}^{-1}$, and the components of the elec. dipole moment in the mol. plane $\mu_a = -0.88(2) \text{ D}$, $\mu_b = 1.03(2) \text{ D}$. The modulation depth of Stark quantum beat signals can be used to quantify the contribution of the individual components of the transition moment to the total emission.

M.A.

C.A. 1991, 114, N 14

¹³C D₃ OH

1991

115: 290056e FTIR spectroscopy and FIR laser assignments for methanol (¹³CD₃OH). Xu, Li Hong; Lees, R. M.; Johns, J. W. C. (Phys. Dep., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1991, 1576 (Conf. Dig. - Int. Conf. Infrared Millimeter Waves, 1991), 258-9 (Eng). Progress to date is discussed in the study of new IR spectral regions of ¹³CD₃OH, and the detn. of mol. consts. and FIR laser assignments.

UC - CRIMP,

M.N.

C.A. 1991, 115, 1426.

CH₂DOD

1991

115: 145339v The microwave torsional-rotational spectrum of methyl-d alcohol-d. Su, Chun Fu; Liu, Mujian; Quade, C. Richard (Dep. Phys., Mississippi State Univ., Mississippi State, MS 39762 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 149(2), 435-40 (Eng). The microwave torsional-rotational spectrum of CH₂DOD was predicted, identified, assigned, and analyzed to det. the internal rotation potential energy coeffs. and selected nonrigidity corrections. Although trans to gauche transitions are too weak for observation in the torsional ground states, transitions have been obsd. between 3 excited torsional states as well as the usual gauche(+) to gauche(-) transitions for the torsional ground states. Taken together, these allow for the detn. of the potential energy coeffs. for CH₂DOD; $V_1 = 8.03 \pm 0.10$ cm⁻¹, $V_2 = 2.73 \pm 0.10$ cm⁻¹, and $V_3 = 364.72 \pm 0.25$ cm⁻¹.

48 CRRMP,

M.N.

C.A. 1991, 115, N14

CH₃CH₂CHO

1992

118: 87930e Valence force field of propanal conformers by geometry relaxed ab initio and normal coordinate calculations. Gupta, V. P.; Ram, Basakhi; Vaish, Sangeeta (Dep. Phys., Univ. Jammu, Jammu Tawi, 180 001 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1992, 30(9), 452-6 (Eng). Valence force fields of *cis* and *gauche* conformers of propanal have been calcd. using the geometry relaxed extended basis 4-31G ab initio and GVFF normal coordinate calcns. Consistency of the force field has been verified by extending the normal coordinate calcns. to the *cis* conformers of CH₃CH₂CD₃ and CH₃CD₂CHO. Using the isomer enrichment technique at low temps. all the absorption bands of the higher energy *gauche* conformer have been identified. A complete interpretation of the vibrational spectra of propanal and its mono- and di-deutero derivs. (*cis* conformers) and the *gauche* conformer has been provided. Scaling factors for the ab initio force field have been obtained.

(neop. parum)

C.A. 1993, 118, N10

H_2COO

1992

Tao W., Klemm L.B. et al.,

фотометрич. з. Phys. Chem. 1992, 96 (1),
масс-спектр. 10 4-7
з

(см. H_2COH ; ● III)

CHCOOH

1994

Henderson D.O.,
Mu R. et al.

ilk enekmp

6 exampere,

Vi

Proc. SPIE-Int.
Soc. Opt. Eng. 1994,
2138, 85-96.

(see. HCOOH; III)

DCOOCH₃

1995

123: 126034r The millimeter- and submillimeter-wave spectrum of symmetric mono-deuterated methyl formate (DCOOCH₃). Oesterling, L. C.; Ferguson, D. W.; Herbst, Eric; De Lucia, Frank C. (Dep. Phys., The Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(2), 469-84 (Eng). The rotational-torsional spectrum of DCOOCH₃, the sym., singly deuterated isotopomer of Me formate, has been extended into the millimeter-wave and submillimeter-wave regions of the electromagnetic spectrum. A total of 885 lines belonging to the A and E torsional substates of the ground ($v_t = 0$) torsional state has been measured through rotational quantum no. $J = 30$ up to a frequency of 377 GHz. These lines have been added to 27 previously measured microwave lines and the combined data set was analyzed using a global internal axis method. A root-mean-square deviation of 85 kHz has been obtained by varying 31 rotation and internal rotation parameters. The newly measured spectra reported should be useful for interstellar searches for DCOOCH₃, which has yet to be detected unambiguously in interstellar clouds despite the existence of copious nos. of obsd. transitions for Me formate.

(new enexp)

C.A. 1995, 123, N10

Lab. CDD [DM 38 617] 1996

Tavladorakis K., Parkin J.E.

Magnet Spectrochim. Acta 1996,
Part A 52, N 14, 1823-27.

UK Rotational analysis
check of the pair of bands
 $\nu_7, \nu_{11},$ $\nu_7, \nu_{11} (a', a'')$
N.N.

the infrared spectrum of
the deuterium substituted
propynal molecule $C_2H.CD_3$

C₂D₅OH

1997

130: 145551t Band structure nature of O-H stretching of liquid ethanol. Danchuk, V. D. (Ukr. Transp. Univ., Kiev, Ukraine). *Dopov. Nats. Akad. Nauk Ukr.* 1997, (10), 98-101 (Ukrain), Prezidiya Natsional'noi Akademii Nauk Ukraini. The Raman spectra of O-H vibrations of pure liq. C₂D₅OH and C₂D₅OH:C₂D₅OD mixt. are exptl. studied. Quantum-chem. calcns. of the vibrational spectra of model clusters of these liqs. were made by the AM1 method with optimization of the space structure. The model clusters are trans- and gauche-conformers of EtOH mol. The formation of the band of O-H vibrations is interpreted within the mechanisms of resonant dynamical intermol. interaction and conformational dynamics.

(CKP)

C. A. 1999, 130, N 11

F: CH2DOD

P: 3

131:329091 Torsional energies, matrix elements and predictions of microwave transitions in CH2DOD.

Mukhopadhyay, I.; Bhand, S. G.; Mishra, N. N.

Lase Programme, Centre for Advanced Technology

Indore, India Spectrochim. Acta Part A,

55A(12), 2485-2493 (English) 1999 The torsional-

rotational mol. parameters of asym. deuterated MeOH

(CH2DO were calcd. up to $K = 15$ in the torsional

vibrational ground state. Matr elements for

.DELTA.K=+-1 transitions were calcd. up to the 4th

excited torsional state. Using previously obsd.

microwave (MW) transitions effect state dependent mol. parameters were evaluated for the states involved. parameters allow the predictions for unobserved microwave transitions to with a precision which should enable future lab. and astrophys. detection matrix elements and the torsional energies will be valuable in the assign of far-IR absorption spectra and optically pumped far-IR laser lines in the mol. isotopomer of MeOH.

The energy levels calcd. will form a useful data to aid in the detection of this isotopic variant of MeOH in astrophys. so which might be of useful for the detn. of parameters like the D/H ratio in universe.

$(\text{CH}_3)_2\text{CHOD}$

2001

135: 202081u Internal Rotation of the Hydroxyl Group in Isopropanol and the Chirality of the Gauche Form: Fourier Transform Microwave Spectroscopy of $(\text{CH}_3)_2\text{CHOD}$. Hirota, Eizi, Kawashima, Yoshiyuki (The Graduate University for Advanced Studies, Hayama, Kanagawa, Japan 240-0193). *J. Mol. Spectrosc.* 2001, 207(2), 243-253 (Eng), Academic Press. The rotational spectrum of the deuterated isopropanol $(\text{CH}_3)_2\text{CHOD}$ has been obsd. by Fourier transform microwave spectroscopy and analyzed to yield tunneling splitting of 4431.4613 (17) MHz, between the antisym. and the sym. gauche forms, which is much larger than the 2400 MHz estd. from the internal-rotation potential function reported in the literature. The potential function for the OH internal rotation has been examd. in view of the discrepancy between the obsd. and estd. tunneling splitting, and it was accounted for by taking into account isotope effects on the potential.

(140 CAXXMP)

C. A. 2001, 135, 19/14

consts. The deuterium quadrupole coupling effect has been included together with the Coriolis terms in the off-diagonal block of the Hamiltonian matrix for the gauche form. The deuterium quadrupole coupling consts. obtained for the trans form were employed to calc. the components of the coupling consts. as functions of the internal-rotation angle, and the components at around 120° were compared with the values obsd. for the gauche form, thereby leading to unambiguous detn. of the signs of the consts. in the off-diagonal block; the signs are not obtainable from an ordinary anal. of the rotational spectra. The chirality of the gauche form was discussed by placing special emphasis on the effect of intermol. interactions between two chiral mols. (c) 2001 Academic Press.