

C 5 H 4

CH_3SH

Bp - 1482 - IV

1.938

E ches₄

B. vitzkus m.

C.R. Acad. Sci. 1938 p 838-40

BP-5435-III; 8671

1950

$H_2S, CH_3SH, H_2Se, H_2Te, H_2Po, HF (I), CH_3OH, (CH_3)_2S(V_1)$

Price W.O., Toegen J.P., Walsh A.D.

Proc. Roy. Soc. (London), 1950, 201A, 600-9

Far-ultraviolet absorption spectra of the hydrides and deuterides of sulfur, selenium, and tellurium and of the methyl derivatives of hydrogen sulfide.

Ch.A., 1954, 446c

10



CSH₄

cont. p. 2.

1566

1950

CH_3SH (✓) i)

Thompson H.W., Miller C.H.

Trans. Faraday Soc. 1950, 46,
22-27

Vibration-rotation bands in the ...

CSH_4

CA., 1950, 44, 5214f

1952

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{Se}$, 4318

CH_3OH , CH_3OD , CH_3SH (carbonate met.)

Siebert H.

Z. anorg. u. allgem. Chem. 1952, 271,
65-75

The force constants for ...

CSH_4

J

1562
CH3SH (τ_{ij} , $\angle$, V_0 - барьер вращ. (размер))

1955

Kilb R. W.

J. Chem. Phys., 1955, 23, 19, 1736-1737 (англ.)

Internal barrier height of methyl mercaptan.

РЖХим 1956, 31709

10

2

1564

CH_3SH (2,4,6-trimethylphenyl) 1955

Solimene N., Dailey B.P.

J.Chem.Phys. 1955, 23, N 1,
124-129 ()

Structure and barrier height of

...

PX., 1955, 48299

C_2SH_4

10

CH₃SH

T. Kojima, T. Nishikawa

1957

J. Phys. Soc. Japan 12, 680-6, 1957

Потенциальный барьер и
молекулярная структура
молекулы метантиола из исследования
в СВ-спектре

Потенц. барьер - 444 см⁻¹

с. 51

160-92

Минер. жидкая структура

минус $\gamma = 1 \leftarrow 0$ и $K = 0 \leftarrow 0$ газ. разветвленных
углеродов.

Найдено $S-H = 1.34 \pm 0.01$

$C-S = 1.810 \pm 0.005$

$C-H = 1.09 \pm 0.01$

$\angle CSH = 96^\circ 30' \pm 1^\circ$

$\angle HCH = 109^\circ 45' \pm 30'$

между CS и $CS = 2^\circ 0' \pm 30'$.

CH₃SH

(A)

BP-1489-II | 1962

Hobrock B. G.,
Kiser R. W.

J. Phys. Chem., 1962,
66, N9, 1648-52

CH_3SH

Kirtman Bernard

1962

Вращ.
Энергия

У. Chem. Phys., 1962, 37, n 11, 2516.

Взаимодействие колебаний
и заторможенного внут-
реннего вращения. I. Враща-
тельная энергия.

см. CH_3SiH_3

х. 1964. 3593

BP-11-5017 
 CH_3SH (D)

1962

Palmer T.F., Lossing F.P.

J. Amer. Chem. Soc., 1962, 84, N 24,
4661-4664 (Free radicals by mass spectrometry
XXVIII. The HS, CH_3S and phenyl-S
radicals: ionization potentials and
heats of formation

PX., 1963; 24566

CSH_v


Есть оригинал.

10

~~10~~

10

46

7982

1963

 H_2O_2 (J), C_2H_5OH (J), H_2O^+ (ΔH),

 H_2O (A), CH_3O^+ (ΔH), CH_3OH (A)

Hobrock B.G., Riser R.G.

J. Phys. Chem., 1963, 67, 13,

643-650 (англ.)

Electron impact investigations of
sulfur compounds. II. 3-methyl - 2-
thiobutane, 4-thia - 1 - pentene, and
3,4 - dithiohexane

R.L., 1964, 7535

M.10

CSH4

Есть оригинал.

2

1964

9670

 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, CH_3SH , $(\text{CH}_3)_2\text{O}$,

 CH_3OH , CH_3NH_2 , CH_2NOH , $(\text{CH}_3)_2\text{CONH}$
(str., $\angle xz/y$)

Hirshfeld F.L.

Israel J. Chem., 1964, 2, 87-90

Structural ...

 $\text{C H}_4 \text{S}$

J

C_2H_4 S

Bgp - M 866 - IV

1965

Venkateswarlu, K.
etal.

cu. n.
m. g. op.

Proc. Indian Acad.
Sci. Sect. A62 (3)

159-68

CH₃SH

[130 - 1000M - IV]

1966

(ϵ_i ,
структ.
параметр.)

Thompson S. D., et al.
J. Chem. Phys., 1966,
45, N5, 1367-79.

CH₃SH

1967

UK-chem

69030k The far infrared spectrum of methyl mercaptan from 15 cm.⁻¹ to 45 cm.⁻¹ E. D. Palik, Donald G. Burkhard, and Robert L. Wallis (Ohio State Univ., Columbus). *J. Mol. Spectrosc.* 23(4), 425-38(1967)(Eng). The ir absorption spectrum of MeSH is measured at 17-44 cm.⁻¹ Theoretical analysis shows that the absorption spectrum in this range is assocd. with end-over-end rotation (parallel transitions) of the mol. as well as with internal rotation transitions (perpendicular transitions). By calcg. both of these contributions to the absorptions, the ir spectrum is identified. A value is deduced for the rotational const. and for the centrifugal stretching const. Internal rotation energy levels and wave functions for MeSH are tabulated.

RCKP

C. A. 1967. 17. 14

CH_3SH

V_0

1967

Simpson K. O., Вейнон Э.

J. Phys. Chem., 71, no 9, 2796.

Определение барьера, препятствующего вращению вращению, из кинетических данных значения $\Delta G^\ddagger$ и $\Delta H^\ddagger$.

[См. $\text{C}_6\text{H}_3(\text{CH}_3)_3$] III

CH_3SH

CH_3SD

XIV - 9834

1968

18 Д310. Колебательные спектры метантиола. May Ingo W., P a s e E. L., The vibrational spectra of methanethiol. «Spectrochim. acta», 1968, A24, № 10, 1605—1615. (англ.)

Исследованы ИК-спектры CH_3SH и CH_3SD в газообразном, жидком и твердом состояниях с целью уточнения отнесения основных частот CH_3SH . Также исследованы спектры комб. рас. жидких CH_3SH и CH_3SD . Проведен норм. координатный анализ на основе модифицированного валентного силового поля с учетом взаимодействия между веерным колебанием метильной группы и S—H деформационным колебанием. Вычислены с до-

9. 1969. 82

статочной точностью не только наблюдаемое на опыте небольшое расщепление между двумя антисимметричными вал. кол. C—H и двумя антисимметричными деф. кол. метильной группы, но и необычно большое расщепление, наблюдаемое в случае всерных колебаний ν_6 и ν_{11} метильной группы в обоих изотопных образцах метантиола. Получено хорошее совпадение эксперим. данных и расчета. Библ. 19. Э. К.

CH_3SH

CH_3SD

γ_i

XIV - 9837

1968

101256) Vibrational spectra of methanethiol. May, Ingo W.; Pace, E. L. (Case Western Reserve Univ., Cleveland, Ohio). *Spectrochim. Acta, Part A* 1968, 24(10), 1605-15 (Eng). The ir spectra of MeSH and MeSD were investigated in the gas, liq., and solid state with the purpose of resolving some inconsistencies in the fundamental frequency assignment of MeSH. A study of the Raman spectra of liq. MeSH and MeSD to complement the ir results was also carried out. A modified valence force field which included the diagonal symmetrized force consts. plus a single added repulsive interaction const. coupling the Me wagging with the S-H bending vibrations was used in a normal coordinate treatment. Excellent agreement between the observed and calcd. frequencies was obtained. RCSQ

C.A. 1968. 69.24

CH_3SH
 CH_3SD

ν_i

11
117

11 B247. Колебательные спектры метилмеркаптана. May, Ingo W., Pace E. L. The vibrational spectra of methanethiol. «Spectrochim. acta», 1968, A24, № 10, 1605—1615 (англ.)

1968

Исследованы ИК-спектры CH_3SH и CH_3SD в газ., жидк. и тв. состоянии. Получены также спектры КР этих соединений в жидк. состоянии, определена степень деполяризации линий. Предложено отнесение основных колебаний CH_3SH и CH_3SD . В спектрах CH_3SH по сравнению с CH_3SD наблюдалась большая разность частот симм. и асимм. веерн. кол. группы CH . Полагают, что это связано с тем, что в CH_3SD больше разность частот между сильно взаимодействующими веерн. кол. группы CH и деф. кол. связи $\text{S}-\text{D}$. Это находится в соответствии с расчетом нормальных колебаний, для которого было взято диагональное силовое поле с одним только отрицат. недиагональным коэф., отражающим вышеуказанное взаимодействие. Получено хорошее со-

X. 1969. 11

гласие вычисленных и наблюдаемых частот. В ИК-спектре тв. соединений наблюдалось расщепление полос, по-видимому, связанное с взаимодействием колебаний трансляционно неэквивалентных молекул, причем характер расщеплений несколько различается в спектрах, полученных до и после фазового перехода.

Я. М. Кимельфельд

CH₃SH

1968

55117q Hindered internal rotation fine structure of the 3- μ vibration-rotation spectra of methyl mercaptan. Varnell, Gilbert L. (Texas Technol. Coll., Lubbock, Tex.). 1968, 105 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 69-6451. From *Diss. Abstr. B* 1969, 29(10), 3871-2. SNDC.

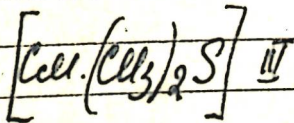
колеб.
- вращ.
мембр

C.A. 1969. 71. 12

1969

Callear An. B. u gr.

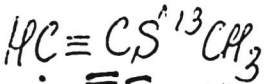
Nature, 1969, 221,
(5184), 1238



CH_3SH

метр
сметр

1969



12 Д378. Молекулярная структура и центробежное искажение метилтиоэтина. Engelsen D. den. Molecular structure and centrifugal distortion in methylthioethyne. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 30, № 3, 474—484 (англ.)

Исследованы микроволн. спектры молекул $\text{HC} \equiv \text{CS}^{13}\text{CH}_3$ (I), $\text{DC} \equiv \text{CSCH}_3$ и $\text{HC} \equiv \text{CSCDH}_2$. Определены вращательные (A, B и C) и центробежные ($\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$) постоянные основного колебательного состояния. Вычислены длины связей и углы I. Выполнен приближенный расчет τ -постоянных I из частот колебаний. Вычисленные значения τ -постоянных согласуются с экспериментальными.

М. Р. Алиев

М.И.

Ф. 1969, 129

1969

CH_3SH

Haney M.A.,
Franklin Y.L.

сродство
к протону

J. Phys. Chem.,

1969, 73, n 12, 4328

(Cell CH_3NH_2) III

1969

CH₃SH (крист.)CH₃SD

ИК-спектр

крист.

сп-ра

ф. 1940. 5D

5 Д545. Колебательные спектры кристаллического метантиола. May Ingo W., P a s e E. L. The vibrational spectrum of crystalline methanethiol. «Spectrochim. acta», 1969, A 25, № 12, 1903—1915 (англ.)

Получены ИК-спектры двух кристаллич. фаз CH₃SH и CH₃SD при 80° К. Рентгенографич. исследования закаленной высокотемпературной модификации, проведенные при т-ре жидкого азота, показали, что элементарная ячейка является орторомбической и содержит 8 молекул. Анализ фактор-группового расщепления показал, что исследованная молекула метантиола принадлежит к пространственному типу симметрии $D_{2h}^1(Pmmm)$ или $D_{2h}^5(Pmma)$. Библ. 8. Резюме

CH_3SH

гидрохлорид

Sturm G. P.
White J. M.

1969

J. Chem. Phys., 50 (11),
5035.

(CH_3SH) III

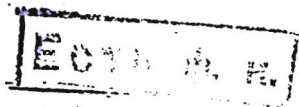
XIV -2293

1970

C₂H₄O; C₂D₄O; C₂H₄S / Vi, см. н.с.

Venkateswarlu K., Joseph P.A.,
J. Molec. Struct., 1970, 6, n2,

145-157



CH_3SH

1970

Callear A. B.,
Dickson D. R.

мен.
примеч.

Trans. Faraday Soc.,
1970, 66, 18, 1984



$[\text{Cu}(\text{CH}_3)_2\text{S}_2]_{\text{III}}$

CH_3SH

1971

De Corpo J.J., Bafus A.A.
et al

E, $\bar{e}$

J. Chem. Phys., 1971, 54,
1592 - 1597.

(Cu CF_4) III

CH₃SH

(Vi)

XIV - 4155

1972

23 Б267. Инфракрасные низкотемпературные исследования. Часть 9. Метантиол и этантиол в матрицах. Barnes A. J., Hallam H. E., Howells J. D. R. Infra-red cryogenic studies. Part 9. — Methanethiol and ethanethiol in matrices. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1972, Part 2, 68, № 5, 737—743 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения CH₃SH (I) и C₂H₅SH (II), изолированных в Ar матрице при отношении M/A от 30 до 1000 и ИК-спектры II, изолированного в матрицах N₂ и CO. В спектрах I в области вал. кол. SH обнаружены полосы мономера 2603,2 см⁻¹, димера 2576 см⁻¹ и мультимеров 2552 и 2550 см⁻¹. Предположено, что мультимер I является циклич. тетрамером. Предложено частичное отнесение основных кол. I. В ИК-спектрах всех матриц с II обнаружены полосы мономера, димера и мультимера, причем многие полосы мономера имеют дублетную структуру. Этот факт связывается с наличием транс- и гош-изомеров II. Предложено отнесение основных кол. II.

Г. Кузьянц

X-1972-23



(41)

CH₃SH

(CH₃)₃Y; V = O, S, Se, Te

1972

001021

снкрп

66108s Photoelectron spectra of the methyl, silyl, and germyl derivatives of the Group VI elements. Cradock, S.; Whiteford, R. A. (Dep. Chem., Univ. Edinb., Edinburgh, Scot.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1972, 68(2), 281-8 (Eng). Photoelectron spectra were obsd. for (MH₃)₂Y and MH₃SH (M = C, Si, Ge; Y = O, S, Se, Te) and the bands assigned to the expected valence-shell energy levels. The results agree with (*p* → *d*) π-bonding when M = Si and Ge.

CH₃SH

(CH₃)₂O

SiH₃SH

(CH₃)₂S

GeH₃SH

(CH₃)₂Se

(CH₃)₂Te

+6

⊗

C.A. 1972.

46. 12

1972

CH₃SHCH₃

133949g Photoelectron spectra of methyl mercaptan, dimethyl sulfide, thiophenol, and α -toluenethiol. Bonding between sulfur and carbon. Frost, D. C.; Herring, F. G.; Katrib, A.; McDowell, C. A.; McLean, R. A. N. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *J. Phys. Chem.* 1972, 76(7), 1030-4 (Eng). The 1st ionization potential in the photoelectron spectra of MeSH (9.42 eV) and Me₂S (8.65 eV) as in H₂S (10.47 eV) corresponds to ionization of a lone-pair electron, and, although there is a small π interaction in the C-S bond, the inductive effect is thought to cause the considerable shift to lower energy. In contrast to these mols. and PhCH₂SH (1st I.P., 9.25 eV) the S lone pair in PhSH exhibits a considerable amt. of π -interaction with the adjacent benzene ring. The higher I.P.'s of MeSH and Me₂S have been assigned, and it is shown that ionization occurs more readily from σ orbitals situated mainly in the C-S bond than the S-H bond.

C.A. 1972. 76. 22

1972

 CH_3SH $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ фотоэл.
спектры

18 Б132. Фотоэлектронные спектры CH_3SH , $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SH}$ и $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{SH}$. Связь между серой и углеродом. Frost D. C., Herring F. G., Katrib A., McDowell C. A., McLean R. A. N. Photoelectron spectra of CH_3SH , $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SH}$, and $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{SH}$; the bonding between sulfur and carbon. «J. Phys. Chem.», 1972, 76, № 7, 1030—1034 (англ.)

Изучены фотоэлектронные спектры H_2S и его пр-ных RSH и R_2S , где $\text{R} = \text{Me}$, Ph , $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2$, и измерены потенциалы ионизации (ПИ) этих соединений. $I - e - \text{ПИ} = \text{рав-}$

X. 1972. 18

ны (эв): H_2S 10,47; MeSH 9,42; Me_2S 8,65. Уменьшение ПИ по мере роста степени замещения соответствует ионизации электрона из неподеленной пары атома S, энергия связи к-рого снижается из-за индуктивного эффекта R, хотя величина π -взаимодействия в связи C—S мала. В отличие от этих молекул и α -толуолтиола (1-й ПИ 9,25 эв), в тиофеноле неподеленная пара электронов атома S обнаруживает значительное π -взаимодействие с соседним бензольным кольцом. Проведено отнесение высших ПИ MeSH и Me_2S и показано, что ионизация происходит более легко с σ -орбитали связи C—S по сравнению со связью S—H.

В. Е. Скурат

1972

CH₃SH

119325u Normal coordinate analysis of methanethiol. Gebhardt, O. (Inst. Teor. Kjemi, Norges Tek. Høysk., Trondheim, Norway). *Acta Chem. Scand.* 1972, 26(1), 155-8 (Eng). A normal coordinate anal. was performed for MeSH. Harmonic force fields, potential energy distribution, and calcd. mean amplitudes of vibration are reported.

chem. n.

V_i

C.A. 1972. 76. 20

CH₃SH

1972

16 Б72. Анализ нормальных координат метантиола.
Gebhardt O. Normal coordinate analysis of metha-
nethiol. «Acta chem. scand.», 1972, 26, № 1, 155—158
(англ.)

Из частот колебаний молекул CH₃SH и CH₃SD и
структурных параметров CH₃SH вычислены силовые по-
стоянные метантиола (симметрия C_s). Вычислены также
средние амплитуды колебаний (при т-рах 0° и 298° K) и
распределение потенциальной энергии колебаний по внут-
ренним колебательным координатам для обеих молекул.
На основании результатов расчета распределения потен-
циальной энергии дано отнесение частот по форме ко-
лебаний.

М. Р. Алиев

ш. и.

X. 1972. 16

CH_3SH

кв. мех.
расчет.

Christoffersen, Ralph E. 1973
Comput. Chem. Res. Educ.,
Proc. Int. Conf. 1973, 2,
4/249 - 4/293 (Eng)

(all HSSH; III)

CH_3SH

1973

спектр.
снелт.

Katrib A., Dobis T.P., et al.
"Chem. Phys. Lett."
1973, 22, III, 196-200.

(сер. №2, III)

41023.1883

TC, Ch

 CH_3SH 40771

1974

02
#4-6992

Gordon Mark S., Mcubauer Loren. Second row molecular orbital calculations. Geometries, internal rotation barriers, and dipole moments of methylsilane, disilane, methyl mercaptan, and methylphosphine. "J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 18, 5690-5693 (англ.)

0218 пик

189 191 2 10

ВИНИТИ

CH_3SH

1974

Phita Shigeru et al.

электр.
спектр.

" Сигурі бунсэки, Mass
Spectrosc " 1974, 22, 4,
233-238 (амм)

(ам CH_3NH_2 ; III)

CH_3SH

1974.

(40)

Lombardi E., et al.,
J. Chem. Phys., 1974,
61, 13, 894-901,

(chem. C_2H_6 ; III)

50131.4723

Ch, Ph, TC

49587

02

1974

CH₃SH

*4-8029

Pecul Krzysztof, Janoschek Rudolf. Calculated vibrational spectra of weak hydrogen bonds. I. Methanethiol dimer. "Theor. chim. acta", 1974, 36, N 1, 25-36

(англ.)

0293-пик

ВИНИТИ

266 267 28 5

Зак. 8750

CH₃SH

1974

Спектры излучения CS₂, H₂S и
тиолов, возбуждаемые электрон-
ными пучками.

спектры
излучен.

Toyoda Minoru, Ogawa Teichiro
"Bull. Chem. Soc. Jap." 1974, 47,
N1, 95-98 (англ)



(all CS₂; III)
(all H₂S; III)

ф. 1974. 8

H- β CH₃

OTT. 4824

1975

(^{Do}
~~Q~~)

Kerr J. A., et al.
Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

CH_3SH
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$
(7 ches4)

Saethre Leif J. 1975
„Acta chem scand“
1975, A29, N 5, 558-562
(aww1)
(cuc S₂ H₂; III)

50328.7208
Ch, TC

CH₃SH92073

1975

* 4-8388

Sakai Hideki, Yamabe Tokio, Kato Hiroshi,
Nagata Shinichi, Fukui Kenichi.

An MO theoretical investigations of
the electronic spectra of divalent
sulfur compounds.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1975, 48, N 1, 33-36

(англ.)

0328 пик

312 312

ВИНИТИ

51002.9045

Ch. TC. MGH

96559 (A.P.)
 CH_3SH

1975

813-10032

Solka B.H., Harrison A.G.

Bimolecular reactions of trapped ions.

Part XI. Rates and equilibria in

proton-transfer reactions of CH_3SH_2^+ .

"Int. J. Mass Spectrom. and Ion

Phys.", 1975, 17, N 4, 379-394 (англ.)

425 427

4

0401

1144

ВИНИТИ

50217.8735
Ch, Ph, TC

40771 02
 CH_3SH

1975

* 4-8079

Streitwieser Andrew, Jr, Williams James
E., Jr.

Ab initio SCF-MO calculations of thiomethyl anion. Polarization in stabilization of carbanions.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 1,
191-192

(англ.)

283 285 2 8 9

0207
ВИНИТИ

61102.6641

Ph, Ch, TC

96201

1976

CH₃ SH

* 4-15271

Collins H. J. S., Duke B. J.

The role of d-orbitals in predicting
accurate geometries using ab initio
molecular orbital methods.

"Chem. Phys. Lett.", 1976, 42, N 2,
364-366 (англ.)

(см. H₂S; III) 0738 тек

736 707 730

ВИНИТИ

60401.9107

Ph, B, Ch, TC

Кв. лев. лист
96200 CH_3SH

1976

8 4-12249

Pappas Jan A. Theoretical studies
of thiols and disulfides. Conformations,
barriers and proton affinities. "Chem.
-Phys.", 1976, 12, N 4, 397-405
(англ.)

059177K

564 565

5.83

ВИНИТИ

70117.6651

96615 (20)

1976

Ex-C, TC, DB;

Ch, MGU H-CH₂SH

4881

Schlegel H. Bernhard, Wolf Saul.
Bernardi Fernando, VAB initio

computation of force constants. III.

A simple procedure for the evaluation of
X-H bond dissociation energies. "J. Mol.
Struct.", 1976, 35, N 1, 149-153
(англ.)

0793

743 744

3.85

ВИНИТИ

CH₃SH

[* 48-18367]

1977

(parent
isol. root)

J. Amer. Chem. Soc.
1977. 99, - N6, 1685-9)

DeWitt Michael J. S.

HSCH₃

loun 5380 | 1977

Gibson H. W.

Can. J. Chem. 1974,
55, 2637-41

(J)

1977

CH_3SH

Schlegel H.B. et al.

J. Chem. Phys. " 1977
67, 19, 4181 - 4193 (рус.)

факт
кон. мет

(вер. на основе)



чек
О

см. CH_3OH , "1"

х.х. 1978

молекул CH_3NH_2 , CD_3ND_2 , CD_3NH_2 , CH_3ND_2 , CH_3OH , CD_3OH , CH_3OD , CD_3OD , CH_2DOH (типа симметрии C_s и C_1), CHD_2OH (C_s и C_1), CH_3SH , CD_3SH , CH_3SD , CD_3SD , CH_2DSH (C_s и C_1), и CHD_2SH (C_s и C_1). Максим. отклонения рассчитанных значений частот от эксперим. получены равными $\sim 100 \text{ см}^{-1}$. Показано, что учет ангармонич. силовых постоянных улучшает согласие с эксперим. частотами, в особенности с частотами вал. кол. Проведено сопоставление найденных силовых полей с эксперим. наборами силовых постоянных и обсуждены наблюдаемые при этом расхождения. Результаты расчета применены для изучения полос Больмана (явление понижения частоты вал. кол. связи $\text{C}-\text{H}$, находящейся в анти-положении по отношению к неподеленной паре электронов) в соединениях I, II и III. Отмечено, что понижение частот Больмана связано с ослаблением соотв-щих связей $\text{C}-\text{H}$ (уменьшение силовой постоянной и удлинение связи) и влиянием резонанса Ферми. Найдено, что оба эффекта имеют место в I и II, а в III преобладает первый фактор, что находится в согласии с ранее полученными результатами.

Ю. Н. Панченко

CH_3SH .

1978

5 Д756. ИК-хемилюминесценция в реакциях атомов галогенов с H_2S и CH_3SH . Dill Bernd, Heydtmann Horst. Infrared chemiluminescent reactions of halogen atoms with hydrogen sulfide and methanethiol. «Chem. Phys.», 1978, 35, № 1-2, 161—176 (англ.)

И. К.

Спектр Хемилюм.

7

⊠

Ф. 1978. N5

CH₂SH

number 7755

1978

Nagy-Melsobuki E. et al

kb. uet.
paerem

J. Chem. Soc. Faraday Trans.,
1978, Part 2, n12, 2204-2209.



(u. ~~CS~~ CS; (II))

1949

CH₃SH

6 Б117. Фотоэлектронные спектры метансульфенилхлорида и метансульфенилбромиды. Nagy-Felsobuki Ellak, Peel J. Barrie. The photoelectron spectra of methanesulfenyl chloride and methanesulfenyl bromide. «Phosph. and Sulfur», 1979, 7, № 2, 157—160 (англ.)

фотоэл.
спектр

Измерены фотоэлектронные спектры с возбуждением He-I молекул CH₃SCl и CH₃SBr, полученных при комн. т-ре в газофазных р-циях галогенирования метилмеркаптана CH₃SH. Интерпретация спектров проведена на основе неэмпирич. расчетов валентных МО в минимальном базисе OCT-3ГФ с помощью разработанного авторами метода модельного потенциала для валентного приближения («J. Chem. Soc., Faraday Trans. II», 1978, 74, 2204). Расчетные результаты хорошо согласуются с данными полного неэмпирич. расчета CH₃SCl и с экспериментом. Использовано также сопоставление со спектрами CH₃SH, SCl₂, S(CH₃)₂. В спектрах обеих



х. 1980. № 6

молекул наблюдается по 7 полос. Первый потенциал ионизации (ПИ) отнесен к МО симметрии a'' , локализованной на атоме S с разрыхляющей примесью np -орбитали галогена. Шестой и 7-й ПИ соответствуют МО, локализованных на CH_3 , а 5-й — σ -связи CS. Существенное отличие между спектрами наблюдается в области 2-го — 4-го ПИ. Очень узкий второй пик для CH_3SBr соответствует неподеленной электронной паре атома Br. Для CH_3SCl три пика имеют приблизительно одинаковую ширину. Сделан вывод, что $p\pi-p\pi$ -взаимодействие для связи S—Cl больше, чем для S—Br.

М. Гофман

CH₃SH.

номер 4755

1978

Nagy-Felsobuki E.,
etal.

патров.

Г.И. Свдун

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. II, 1978, N 12,
2204-09

CH_3SH

1979

Matsushita T., et al.

кв. сек.
фракт.

Bull. Chem. Soc. Jap., 1979,

52 (9), 2521-26.

(сер. H_2CS ; III)

1980

CH₃SH

У 3 Д562. Микроволновый спектр метилмеркаптана: переходы α -типа R -ветви. Microwave spectrum of methyl mercaptan α -type R -branch transitions. Kojima Takeshi. «J. Phys. Soc. Jap.», 1980, 49, № 3, 1197—1198 (англ.)

М. П.

И Исследован микроволн. спектр молекулы CH₃SH. В диапазоне 25—76 ГГц идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 4$ основного колебательного состояния и первого возбужденного состояния крутильного колебания. Определены значения вращательных и кватичных центробежных постоянных и барьера внутреннего вращения ($V_3 = 444 \text{ см}^{-1}$). М. Р. Алиев

Ф. 1981 N 3

CH_3SH

1980

4 Д422. Спектр метилмеркаптана в диапазоне миллиметровых волн. Millimetre wave spectrum of methyl mercaptan. Lees R. M., Ali Mohammadi M. «Can. J. Phys.», 1980, 58, № 11, 1640—1648 (англ.; рез. франц.)

м.п.

В диапазоне 25—107 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы $\text{CH}_3^{32}\text{SH}$. Идентифицированы линии вращательных переходов R -ветви с $J \leq 4$ в первых четырех состояниях крутильного колебания ν_t CH_3 -группы и Q -ветви с $J \leq 40$ в первых двух состояниях, колебания ν_t . Идентифицировано также туннельное $A-E$ -расщепление линий. Определены значения вращательных и центробежных постоянных и параметров барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3 = 445$, $V_6 = 2.07 \text{ см}^{-1}$)

М. Р. Алиев

Ф. 1981 № 4

CH_3SH

1980

8 Б270. Миллиметровый спектр метилмеркаптана.
Lees R. M., Ali Mohammadi M. Millimetre wave
spectrum of methyl mercaptan. «Can. J. Phys.», 1980,
68, № 11, 1640—1648 (англ.)

Измерен в области частот 25—107 ГГц вращательный
спектр метилмеркаптана, $\text{CH}_3^{32}\text{SH}$, в основном и первых
двух возбужденных ~~крутильных~~ состояниях. Анализ
спектра выполнен с учетом заторможенного внутренне-
го вращения, центробежного искажения и крутильно-
колебательно-вращательного взаимодействия. Уточнены
значения вращательных постоянных $(B+C)/2 =$
 $= 12666,169(64)$, $(B-C)/2 = 276,317(20)$ МГц, постоян-
ных центробежного искажения $D_J = 0,0159(20)$, $D_{JK} =$
 $= 0,1062(54)$ МГц, параметров барьера крутильных ко-
лебаний $V_3 = 444,763(87)$ см⁻¹, $V_6 = -2,070(66)$ см⁻¹,
постоянных крутильно-колебательно-вращательного
взаимодействия и главных моментов инерции. На осно-
ве полученных спектроскопич. данных идентифицирова-
ны частоты переходов P-, Q- и R-ветвей с $\Delta k \neq 0$,
представляющих астрофиз. интерес. С. Н. Мурзин

и. п.

X. 1981 N 8

CH₃SH.

ommuch 10561

1980

M. S. Chervip

94: 22375u Millimeter wave spectrum of methyl mercaptan. Lees, R. M.; Mohammadi, M. Ali (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *Can. J. Phys.* 1980, 58(11), 1540-8 (Eng). An investigation of the rotational spectrum of CH₃³²SH, one of the most recent mols. to be detected in the interstellar medium, was carried out over the 25-107 GHz region. The frequencies of α -type $\Delta k = 0$ R-branch transitions were measured for the $J = 1 \leftarrow 0$ up to $J = 4 \leftarrow 3$ multiplets for torsional states $v_t = 0-3$. In addn., many P-, Q-, and R-branch transitions with $\Delta k \neq 0$ were identified in order to provide a catalog of lines for potential radio astronomical applications. Improved values of rotational and centrifugal distortion consts., α -type torsion-vibration-rotation interaction consts., and torsional barrier parameters ($V_3 = .444.76$ cm⁻¹; effective $V_6 = -2.07$ cm⁻¹) were detd. from least-squares analyses of the spectra.

C. A. 1981. 94 N 4

1980

 CD_3SH $CD_3SD(2)$

u.k. chuckip

94: 55176h The vibrational spectra of deuterated methanethiols: CD_3SH and CD_3SD . Saur, Odette; Travert, Josette; Lavalley, Jean Claude; ~~Chabanel, Martial~~ (Lab. Spectrochim., Univ. Caen, 14032 Caen, Fr.). *C. R. Seances Acad. Sci., Ser. C* 1980, 291(9), 227-30 (Fr). The gas phase IR and liq. phase Raman spectra of CD_3SH and CD_3SD were investigated at 4000-200 cm^{-1} . A strong coupling between the 3 A' modes: Me rocking, S-H (or S-D) bending and C-S stretching, was obsd. It leads to a large splitting for the A' and A'' Me rocking modes while the A' and A'' antisym. Me stretching and deformation modes are nearly degenerate. An assignment of the fundamental frequencies is proposed.

C.A. 1981.94.18

M3C-SM

1980

Wiberg K.B.

расчет
дл. волны.
J. Amer. Chem. Soc.,
1980, 102, n 4, 1229-34

u

См M3C-H ; III

CH₃SH

спектр

1981

6 Б1391. Хемилюминесцентная реакция озона с метилмеркаптаном. Glinski Robert J., Sedarski John A., Dixon David A. The chemiluminescent reaction of ozone with methyl mercaptan. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 17, 2440—2443 (англ.)

Методом оптич. спектроскопии испускания в интервале длин волн 330—500 нм изучена хемилюминесцентная р-ция O₃ с CH₃SH (I) в газовой фазе при напуске O₃ в молек. пучке при давл. $9 \cdot 10^{-3}$ мм в р-ционную камеру, содержащую I при давл. $\approx 3 \cdot 10^{-3}$ мм. Спектр хемилюминесценции (Хл) при этом представляет широкую бесструктурную полосу от 440 до 300 нм. При добавлении в р-ционную камеру He до давл. $\geq 5 \cdot 10^{-2}$ мм в спектре появляются серии резких полос, наложенных на широкую бесструктурную полосу. Идентифицирована серия полос, обусловленная переходом из состояния $v' = (0, 0, 0)$ SO₂(³B₁) в $v'' = (n, m, 0)$ основного состояния ¹A₁. При изменении давл. O₃ от $2 \cdot 10^{-3}$ до $4 \cdot 10^{-2}$ мм происходит уменьшение интенсивности флуоресценции (Фл) при 447 нм с достижением предельной постоянной величины, а ин-

Х. 1982, 19, №6.

тенсивность Фл при 385 и 330 нм при этом возрастает почти линейно, достигая максимума при давл. O_3 $(5-10) \cdot 10^{-3}$ мм с последующим уменьшением. Таким же образом проходит через максимум зависимость интенсивности фосфоресценции (Фф) при 396 и 405 нм. Интенсивности Фл и Фф изменяются одинаково при изменении давл. I. С ростом давл. O_3 полная интенсивность Хл при 375 нм возрастает с замедляющейся скоростью, а при 337 нм быстро достигает предельной постоянной величины. Образование возбужденных молекул SO_2^* объяснено процессами: $I + O_3 \rightarrow H_2COO + HSO$, $HSO + O_3 \rightarrow OH + SO + O_2$, $SO + O_3 \rightarrow SO_2^* + O_2$. Образование $SO_2(^3B_1)$ происходит при интеркомбинац. конверсии из состояния A^1A_2 в результате нескольких столкновений молекулы SO_2^* с атомами He. Изучена также р-ция O_3 с H_2S . В хемилюминесцентном спектре этой р-ции обнаружены три слабые полосы при 562, 586 и 609 нм, обусловленные излучением частицы HSO^* . Установлено отношение сечений σ Хл, обусловленной SO_2 : $\sigma(H_2S) : \sigma(I) = 1 : 3$. Ю. И. Дорофеев

CH_2SH_2

Оттиск 13380

1981

расчет геометр,
структ., диссо-
циации

11 Б29. Теоретическое исследование гиперповерхностной CSH_4 и CPH_5 . Геометрии, таутомеризация и диссоциация сульфониевых и фосфониевых илидов. Mitchell David John, Wolfe Saul, Schlegel H. Bernhard. A theoretical study of the CSH_4 and CPH_5 hypersurfaces. Geometries, tautomerization, and dissociation of sulfonium and phosphonium ylides. «Can. J. Chem.», 1981, 59, № 23, 3280—3292 (англ.; рез. фр.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в различных базисах с варьированием всех независимых степеней свободы рассчитаны илиды CH_2SH_2 и CH_2PH_3 , их стабильные изомеры, продукты диссоциации и протонированные формы.

В. Фавстов

(4) 17



Х. 1982, 19, № 11.

CH₂SH₂

Ommuck 13380

1981

neopem.
pacem

⊗
(+1) CH₂PH₃

95: 209938t A theoretical study of the methylenesulfurane and methylenephosphorane hypersurfaces, geometries, tautomerization, and dissociation of sulfonium and phosphonium ylides. Mitchell, David John; Wolfe, Saul; Schlegel, H. Bernhard (Dep. Chem., Queen's Univ., Kingston, ON Can. K7L 3N6). *Can. J. Chem.* 1981, 59(23), 3280-92 (Eng). Calcns. were performed at 4 basis set levels (STO-3G, STO-3G*, 4-31G, 4-31G*) on the model ylides methylenesulfurane (CH₂SH₂) and methylenephosphorane (CH₂PH₃), their stable tautomers (MeSH and MePH₂), their dissocn. products (SH₂, PH₃ and CH₂), and the protonated species MeSH₂⁺ and MePH₃⁺. At each basis set level, all geometries were optimized fully. The conformational behavior of the ylides as a function of C-X bond-stretching, C-X torsion, and CH₂ (or SH₂) bending was examd. The exptl. properties (i.e., geometries, relative stabilities, proton affinities, rotation-inversion behavior) of sulfonium and phosphonium ylides are reproduced well by the model calcns. with the 4-31G* basis set, which contains d-type functions on both C and S (or P). All other basis sets are deficient in different ways and for different reasons, which are discussed.

C.A. 1981, 95, N24

The *d*-type functions are essential for a proper description of the hypervalent species CH_2SH_2 and CH_2PH_3 , but not for the normal-valent species SH_2 , PH_3 , MeSH , and MePH_2 . The conclusion concerning hypervalent species reverses earlier views. The role of the *d*-type functions is to conc. charge into the C-X region of the ylides, and thus to stabilize the system. Evidence for this effect was obtained from quant. perturbational (PMO) analyses of interactions assocd. with the C lone pair, as well as comparison of electron d. plots with and without the *d* AO's. The imposition of various geometrical constraints has major and previously unrecognized consequences.

C_2H_4S

1982

2 Д249. Исследование водородной связи тиран — HX ($X=F, Cl$) неэмпирическим методом МО ССП. Hydrogen bonding in thiirane ... HX ($X=F, Cl$): an ab initio SCF—MO study. Hinchliffe Alan. «Adv. Mol. Relax. and Interact. Process.», 1982, 24, № 1, 1—6 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в обширном базисе сгруппированных гауссовых ф-ций рассчитано строение молекул C_2H_4S (I), HF , HCl и гетеродимеров $I...HF$ (II) и $I...HCl$ (III). Предполагалось, что образование димеров не приводит к деформации мономеров. Установлено, что II и III имеют неплоскую равновесную конфигурацию; ось $H-F$ ($H-Cl$) образует с плоскостью CCS угол $69,9^\circ$ ($66,7^\circ$). Длина водородной связи $S...H$ составляет $2,537 \text{ \AA}$ в II и $2,874 \text{ \AA}$ в III, энергия ее разрыва оценена в $23,87$ и $12,76 \text{ кДж/моль}$ соответственно. Анализ заселенностей АО показал, что образование связи сопровождается значительной поля-

геометрии,

структура

и.п.

(4)

р. 1983, 18, №2

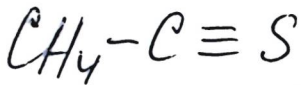
$HF, HCl, C_2H_4S...HF,$

$C_2H_4S \dots HCl$

ризацией мономеров и переносом отрицательного заряда от I к HF (HCl). Рассчитаны дипольные и квадрупольные моменты изученных молекул. Полученные значения дипольных моментов мономеров завышены по сравнению с экспериментальными, тем не менее предполагается, что их изменение при образовании гетеродимера оценено достаточно точно.

А. В. Зайцевский





1982

Ha Tae-Kyu, Nguyen M.T.
et al.

Мол. структур., 7. Mol. Struct., 1982,
септ. 10, N 1-2, Suppl.: Theo-
chem, 7, N 1-2, 107-114.
(ср. $\text{H}_2 - \text{C} \equiv \text{S}$; III)

CH₃SH

[Ummuck 14927] 1982

энергии
ионизации,
относит.
интенсив.
(расчет и
экспери-
мент).

Niessen W., Cederbaum
et al., L.S.,

J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom.,
1982, ● 28, 45-78.

SH₂ CH₂

Оттиск 18557

1982

барьер
вращения

ΔЕв,

ΔЕи

Зубов А. С., Таркин О. М.,
ис. морфол. явления,
1982, 27, №3 565-570.

CH_2DSH
 CHD_2SH

1983

12 Б1221. Микроволновые спектры CH_2DSH и CHD_2SH . The microwave spectra of CH_2DSH and CHD_2SH . Su C. F., Quade C. R. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 12, 5828—5834 (англ.)

На усовершенствованном МВ-спектрометре измерены в области частот 12,5—48,0 ГГц крутильно-вращательные спектры 2 изотопич. образцов меркаптана, CH_2DSH (I) и CHD_2SH (II), в основном колебательном состоянии. При отнесении МВ-переходов использованы метод двойного резонанса по трехуровневой схеме и эффект Штарка. Анализ спектров выполнен в приближении модели жесткого асимметрич. волчка с учетом внутреннего вращения группы SH по отношению к метильной группе. Использован эффективный крутильно-вращательный гамильтониан, в котором крутильно-вращательное взаимодействие учтено только для двух гош-уровней и крутильная энергия представлена через два параметра потенциальной энергии внутреннего вращения. На основе эмпирич. спектроскопич. коэф. для I и II соотв. определены параметры потенциальной энергии внутреннего вращения $V_1 = -3,40(10)$ и $4,45(10)$ см^{-1} , $V_3 =$

м.п., №;

X. 1984, 19, № 12

$=456,3(5)$ и $424,5(5)$ см^{-1} . Из полученных значений параметров вычислена разность энергий конформеров ΔE для I и II соотв. $-2,4$ и $3,2$ см^{-1} . Расположение уровней конформеров в I и II такое же, как для метиламина. Для метилового спирта и ацетальдегида порядок уровней был найден обратным. С. Н. Мурзин



CH₂DSH
CHD₂SH

1983

100: 58959u The microwave spectra of methyl mercaptans (CH₂DSH and CHD₂SH). Su, Chun Fu; Quade, C. Richard (Dep. Phys., Texas Tech Univ., Lubbock, TX 79409 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(12), 5828-34 (Eng). The microwave torsional-rotational spectra of CH₂DSH and CHD₂SH were measured and analyzed over the frequency range 12.5-48.0 MHz. The *a*-, *b*-, and *c*-dipole transitions were assigned for both species which makes it possible to det. the tunneling frequency between the 2 gauche torsional levels for both species. An internal rotation anal. gives the torsional potential energy coeffs. $V_1 = -3.40 \pm 0.10$ cm⁻¹, $V_3 = 456.3 \pm 0.5$ cm⁻¹ for CH₂DSH and $V_1 = 4.45 \pm 0.10$ cm⁻¹, $V_3 = 424.5 \pm 0.5$ cm⁻¹ for CHD₂SH with V_2 constrained to zero.

not complete,
 V_0 ;

c.A. 1984, 100, N8

CH_3SH
 CH_3SD и др

1984

12 Б1188. Анализ частот и форм нормальных колебаний метантиола и его изотопических аналогов. Normal coordinate analysis of methanethiol and isotopic analogs. Byler D. M., Gerasimowicz W. V. «J. Mol. Struct.», 1984, 112, № 3—4, 207—219 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($4000-400\text{ см}^{-1}$) CH_3SH , CH_3SD , CD_3SH , CD_3SD и $^{13}\text{CH}_3\text{SH}$ в газ. фазе. Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний для 5 изотопозамещенных (симметрия C_s) и вычислены силовые постоянные в координатах симметрии валентно-силового поля (всего 19 параметров). На основании расчета предсказаны частоты ненаблюдаемых торс. кол. В результате уточнения силовых постоянных средняя ошибка составляет менее 5 см^{-1} . Расчет в целом подтвердил отнесение колебаний для 5 изотопозамещенных, сделанное на базе эксперимента, за исключением одного переотнесения: на основании расчета полоса 643 см^{-1}

ν_i , см. пост;

х. 1984, 19, ~ 12

в спектре CH_3SH отнесена к $\delta(\text{CSH})$, а 688 см^{-1} — к $\nu(\text{CS})$. Во всех изотопозамещенных деф. кол. $\rho_{\parallel}(\text{CH}_3)$ и $\delta(\text{CSH})$ сильно смешаны друг с другом. В CD_3SH $\nu(\text{CS})$ смешано с $\delta(\text{CSH})$ и с $\delta_s(\text{CD}_3)$. Силовые постоянные CH_3SH вычислены также неэмпирич. методом МО. Структура силового поля, полученного этим методом, совпадает с силовым полем, найденным на базе колебательных спектров, хотя есть колич. различия между обоими силовыми полями: частоты вал. кол. CH_3 и SH выше, а вал. кол. CS , вычисленные с неэмпирич. силовым полем — ниже экспериментальных.

Е. Р. Разумова

CH₃SH

1984

7 Д59. Анализ нормальных координат метантиола и его изотопических аналогов. Normal coordinate analysis of methanethiol and isotopic analogs. Byler D. Michael, Gerasimowicz Walter V. «J. Mol. Struct.», 1984, 112, № 3—4, 207—209 (англ.)

Частоты 55 полос ИК-спектров метантиола (CH₃SH) и его d_1 -, d_3 -, d_4 - и ^{13}C -замещенных аналогов в газовой фазе использованы для расчета 19 параметров валентного силового поля указанных молекул. Лучшая под-

ν_i , см. пост.

ор. 1984, 18, № 7

гонка дает среднюю ошибку $< 5 \text{ см}^{-1}$ ($\sim 0,4\%$) между рассчитанными и эксперим. частотами для пяти изотопомеров. Проведенные расчеты подтверждают принятые отнесения колебат. частот для указанных молекул. Сделано одно уточнение, а именно, полоса, наблюдаемая при 643 см^{-1} , относится к δCSH молекулы CD_3SH , а νCS связано с поглощением при 688 см^{-1} . Проведено сопоставление между рассчитанным силовым полем и ранее полученными результатами для CH_3S и для селенового аналога CH_3SeH . Определены значения ряда валентных силовых постоянных в терминах внутренних координат для сравнения с известными данными для CH_3OH , некоторых алкантиолов и алкилсульфидов, а также с неэмпирич. силовым полем для CH_3SH . Н. В. В.

SHCH₃

SH₂CH₃⁺

теор.
расчет

1984

Magnusson Eric.

J. Comput. Chem.
1984, 5(6), 612-28.

● (c.c. PH₃ ; III)

$(H_2SH_2^+)$

o.w. 19097

1984

Maquin F., Stahl D.,
et al.

J. Chem. Soc. Chem.
Commun., 1984, N 8, 504-
● - 506.

CM₃ SM

1984

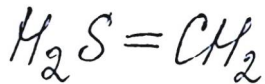
Rauk Arvi, Collins Scott.

ab initio
pariis

J. Mol. Spectrosc.

1984, 105 (2), 438-
-452

( cer. H₂S; III)



1984

Volatron F., Eisenstein O.

J. Amer. Chem. Soc., 1984,
106, N20, 6117-6119.

(cer. $\bullet$ $\text{H}_3\text{P} = \text{CH}_2$; III)

CH_2SH_2

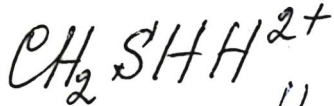
1984

Yates Brian F., Bouma
Willem J., et al.

нодсеп.,
септукт.,
Vi, Uo;

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N20, 5805-
- 5808.

(сеп. CH_2PH_3 ; III)



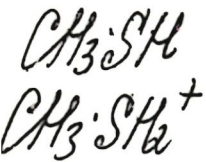
1985

Rock Wolfram,
Maquin F., et al.

Структ.,
волеетр.
(обзор)

Chimia, 1985, 39,
N 12, 376-384.





[om. 23 335]

1986

гелеметр,
структ.,
столбиком.
конформаци.
теор. расчет.

Magrussor E.,

J. Amer. Chem. Soc.,

1986, 108, N1, 11-16.

SHCH₃(2) [DM-25343] 1986

Magnusson E.,

М.Н.
КВ.Мех.
раchem.

Austral. J. Chem.,
1986, 39, N5, 735-
-745.

CH₃SH

DM-25110

1986

6 Б1323. Исследование полосы ν_8 молекулы CH₃SH на диодном лазерном спектрометре. Diode laser spectrum of the ν_8 band of CH₃SH. Nakagawa Kunia-ki, Kojima Takeshi, Hirota Eizi. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1986, 59, № 9, 2935—2937 (англ.)

На диодном лазерном спектрометре в обл. 703,3—718,2 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения молекулы CH₃SH при давл. 0,3÷2 Торр. Идентифицирована вращат. структура полосы ν_8 ($J \leq 9$) по штарковскому расщеплению линий. Обнаружено туннельное А—Е-расщепление линий. Анализ спектра выполнен с учетом заторможенного внутр. вращения CH₃-группы по модели внутр. осей и определены значения 12 параметров этой модели. Е. В. Алиева

М.Н.

Х. 1987, 19, № 6

CH₃SH

1986

8 Л145. Спектр метилмеркаптана в миллиметровом диапазоне. The millimeter-wave spectrum of methyl mercaptan. Sastry K. V. L. N. Herbst Eric, Booker Randy A., De Lucia Frank C. J. Mol. Spectrosc., 1986, 116, № 1, 120—135 (англ.)

В диапазоне 100—300 ГГц исследован МВ-спектр молекулы CH₃SH. Идентифицированы линии около 400 торсионно-вращательных переходов с $J \leq 10$ и $v \leq 2$. Анализ спектра выполнен по модели внутренних осей. При анализе использованы также литературные данные по частотам 200 линий в диапазоне 14÷107 ГГц. Определены значения вращательных постоянных, постоянных квартичного центробежного искажения и параметров барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3 = 443,03$, $V_6 = -1,64$ см⁻¹). Из этих параметров вычислены частоты более 1900 переходов, включая переходы в длинноволн. ИК-диапазоне, которые могут быть использованы для поиска метилмеркаптана в межзвездной среде.

М. Р. Алиев

М. Р.

ф. 1986, 18, № 8

CH₃SH

1986

19 Б1363. Миллиметровый спектр метилмеркаптана.
The millimeter-wave spectrum of methyl mercaptan.
Sastry K. V. L. N., Herbst E., Booker R. A., De Lucia F. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 120—135
(англ.)

На оригинальном автоматизированном широкодиапазонном радиоспектрометре в обл. частот 100—300 ГГц с точностью 50 кГц измерен вращат. спектр газ. метилмеркаптана, CH₃SH. Идентифицировано ~400 линий с вращат. $J \leq 10$ и торсионным $v \leq 2$ квантовыми числами. Анализ вращательно-торсионного спектра вместе с данными др. авторов для ~200 линий выполнен методом внутр. осей. Определены вращат. постоянные (МГц): $A = 102755,3022$ (3989), $B = 12946,77758$ (8007), $C = 12386,19043$ (9100), торсионные постоянные, постоянные центробежного искажения и вращательно-торсионного взаимодействия. Вычислены частоты 1900 линий с точностью 1—10 МГц, представляющие интерес для радиоастрономии.

С. Н. Мурзин

(м.п., ν_i)

X. 1986, 19, N19

CH_3SH

1987

Nakagawa Kuniaki,
Tsunekawa Shozo, et al.

Mr. N. J. Mol. Spectrosc., 1987,
126, N2, 329-340.

(cer. CH_3OH ; III)

CH_3SH ,
 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$,
 $(\text{CH}_3)_2\text{CHSH}$

Теор. расч.
структ.
стаб.

1987

Rodriguez, C.F.;
Hopkinson, A.C.

THEOCHEM 1987, 37(1-2),
55-68.

(ссл. CH_3NH_2 ; III)

CH₃SH

1987

† 2 Л446. Изучение фотовозбуждения и флуоресценции фотофрагментов метанэтиола в ВУФ-области. Photoexcitation and photofragment fluorescence studies of methanethiol in vacuum ultraviolet. Tokue I., Hiraya A., Shobatake K. «Chem. Phys.», 1987, 116, № 3, 449—456 (англ.)

С использованием синхротронного источника в области длин волн 130—200 нм получены спектральные зависимости сечения поглощения метанэтиола CH₃SH и спектры возбуждения его люминесценции. На основании анализа структуры спектров поглощения идентифицированы 3 ридберговских серии в области 130—180 нм. Обнаружена флуоресценция с порогом возбуждения $(175,2 \pm 2,0)$ нм, которая приписана переходу $\tilde{A}^2\tilde{A}_1 - \tilde{X}^2E$ радикала CH₃S, являющегося одним из продуктов фотодиссоциации метанэтиола. Библ. 28. В. К. Р.

М.П.

ф. 1988, 18, N 2

CH₃SH u
D-jansen, CH.

OM 27477 1987

(Di)

107:186261s The vibrational spectra of CD₃SH and CD₃SD in various phases and of CH₃SH and CH₃SD in the torsion vibration region of the two solid phases. Wolff, Hans; Szydlowski, Jerzy (Phys.-Chem. Inst., Univ. Heidelberg, D-6900 Heidelberg, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1987, 160(3-4), 221-8 (Eng). The vibrational spectra of CH₃SH, CH₃SD, CD₃SH and CD₃SD were examd. Measurements of liq. CD₃SH and CD₃SD correspond to a former detn. of an inverse vapor pressure isotope effect, even though assocn exists. Investigation of the 4 solid compds. in the low-frequency range permits identification of the torsion modes of the low-temp. phase as doublets between 200 and 400 cm⁻¹. The splitting of these doublets by ~100 and 60-70 cm⁻¹ is as large as for solid MeNH₂ and MeOH, but differs from the alc. and cannot be explained exclusively by intermol. coupling. Like the splitting of the close-spaced doublets of the SH or SD stretching vibrations, it is caused partly by coupling and partly by the presence of different types of sites of the unit cell. Corresponding to the changed crystal structure and to the weaker H bonding, the torsion modes of the high-temp. phase appear as triplets or quartets at lower wave nos.

C. A. 1987, 107, N 20

CH_4S^+ [om. 30490] 1988
(CH_3SH^+) Jacob M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 472.

CH₃SH

1988

7 16 Б1155. Теоретическое исследование электронных спектров метантиола. Theoretical study of the electronic spectra of methanethiol. Mouflih B., Lallieu C., Chaillet M. «New J. Chem.», 1988, 12, № 1, 65—69 (англ.; рез. фр.)

М.П.
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия конфигураций проведены расчеты Потенциала ионизации (ПИ) и энергий переходов в первые шесть низколежащих возбужденных состояниях молекулы CH₃SH. При расчетах использовался базис гауссовых функций (4,31 G**), дополненный 4s, 4p диффузными и 3d поляризац. орбиталями. Значения первых 4-х ПИ, полученных в рамках приближения Купманса с учетом корреляц. и поляризац. эффектов, хорошо согласуются с эксперим. и лит. теорет. данными, рассчитанными с использованием расширенных базисов. Проведен анализ заселенностей диффузных орбиталей всех рассмот-

Х. 1988, 19, N 16

ренных синглетных возбужденных состояний и сделан вывод, что последние имеют преимущественно ридбергов. характер. На основе полученных результатов предложено отнесение полос в спектре фотопоглощения CH_3SH . Сопоставление эксперим. и теорет. данных для молекул CH_3SH и H_2S показало, что в обоих случаях электронные спектры в рассмотренной обл. ридберговых переходов аналогичны и отличаются лишь параллельным сдвигом полос на 1 эВ.

О. А. Басченко

CH₃SH

1989

/ 111: 204382w High-resolution far-infrared spectrum of methanethiol. Nakagawa, Kuniaki; Johns, J. W. C. (Fac. Sci., Josai Univ., Sakado, Japan 350-02). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 138(1), 102-7 (Eng). Far-IR (11-215 cm⁻¹) spectra of MeSH were recorded with a high-resoln. FTIR spectrometer which has an app. function of ~0.0015 cm⁻¹. Besides pure rotational transitions, torsion-rotation transitions involving ν_{12} were obsd. at >130 cm⁻¹, and most of the Q branches in this band were resolved. The obsd. transitions were fitted with an root-mean-square error of ~0.0003 cm⁻¹ using an effective Hamiltonian.

гашуи
лек спектр,
 ν_{12} , н.н.

C.A. 1989, 111, N 22

CH₃SH

1989

9 Б1321. Далекий инфракрасный спектр высокого разрешения CH₃SH. High-resolution far-infrared spectrum of CH₃SH / Nakagawa K., Johns J. W. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 1.— С. 102—107.— Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в обл. частот 11,5—215 см⁻¹ с разрешением около 0,0015 см⁻¹ и точностью 0,0001 см⁻¹ измерен колебательно-вращат. спектр CH₃SH. Идентифицировано 1019 переходов торсионной полосы ν_{12} с квантовыми числами $\nu_{12} \leq 1$, $J \leq 12$. Анализ ИК-спектра выполнен с использованием гамильтониана с 29 параметрами. Начала полос $\nu_{12} = 1 \leftarrow 0$ торсионной симметрии A и E, соотв., равны 214,6850 и 196,1334 см⁻¹. Полученные значения параметров несколько отличаются от ранее определенных значений, что связано с использованием различных массивов частот и влиянием взаимодействия между ν_8 и ν_{12} полосами. Модельный расчет интенсивностей ИК-переходов хорошо согласуется с эксперим. данными.

С. Н. Мурзин

М. П.

Х. 1990, № 9

CH_3SH

[Om. 36143]

1991

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

Dezarnaud C., Tronc N.,

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

$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{S}$

Chem. Phys. 1991,

u gp. 156, N1, 129-140

Shape resonances in low-energy

electron transmission and sulfur
K-shell photoabsorption

spectroscopies: CH_3SH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$,
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{S}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SH}$,
 $\text{C}_6\text{H}_5\text{SCH}_3$, CH_3SCN , CH_3NCS ,
 SCl_2 .

CH₃SH

1991

115: 123624g Vacuum ultraviolet photodissociation and photoionization studies of methanethiol and mercapto (CH₃SH and SH). Nourbakhsh, S.; Norwood, K.; Yin, H. M.; Liao, C. L.; Ng, C. Y. (Ames Lab., Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(2), 946-54 (Eng). The kinetic energy releases of the photodissocn. processes, CH₃SH + $h\nu$ (193 nm) $\rightarrow$ CH₃ + SH, CH₃S + H, and CH₂S + H₂, were measured using the time-of-flight mass spectrometric method. These measurements allow the direct detn. of the dissocn.

energies for the CH₃-SH and CH₃S-H bonds at 0 K as 72.4 ± 1.5 and 90 ± 2 kcal/mol, resp. The further dissocn. of SH according to the process SH + $h\nu$ (193 nm) $\rightarrow$ S + H was also obsd. The appearance energy (AE) of S produced in the latter process is consistent with the formation of S(³P) + H. The photoelectron-photoion coincidence (PEPICO) spectra for CH₃SH⁺, CH₃S⁺ (or CH₂SH⁺), and CH₂S⁺ from CH₃SH were measured in the wavelength range of 925-1460 Å. The PEPICO measurements make possible the construction of the breakdown diagram for the unimol. decompn. of internal-energy-selected CH₃SH⁺ in the range of 0-83 kcal/mol. The AE measured for CH₂S⁺ is consistent with the conclusion that the activation energy is negligible for 1,2-H₂ elimination from CH₃SH⁺.

Do

CH₃SH⁺ (Ac)

⊕ (H)

c.A. 1991, 115, N12

SH

CH₃SH⁻ 1992
CH₃SH⁺ Chiu See-Wing, Li Wai-ke,
et al.

M.N. J. Chem. Phys. 1992,
97, N9, C. 6557-6568

(cell. CH₂ • SH; III)

CH₃SH

1992

№ 3 Б1088. Теоретическое исследование адиабатического и диабатического поведения остовно-возбужденных состояний CH₃SH. A theoretical investigation of the adiabatic and diabatic behavior of the core-excited states of CH₃SH /Sevin Alain, Dézarnaud-Dandine Christine, Tronc Michel //Chem. Phys. .—1992 .—165 ,№ 2—3 .—С. 245—255 .—Англ.

Неэмпирическим методом конфигурац. вз-вия в базе 6-31ГФ, дополненном 5sp-, 6sp- и 7sp-АО S, изучено адиабатич. и диабатич. поведение двух низших остовно-возбужденных состояний CH₃SH. Адиабатич. кривые потенц. энергии (КПЭ) обнаруживают сложное поведение, тогда как диабатич. КПЭ проявляют простые тенденции. Для всех типов элементарных движений одна из диабатич. КПЭ имеет доминирующий $\sigma^*(S-C)$ -характер с валентно-ридберговским p-характером на S, а другая носит $\sigma^*(S-H)$ - и валентно-ридберговский s-характер на S. Поведение диабатич. состояний легко интерпретируется с помощью корреляций диабатич. МО. В. Я. Беспалов

М.П.

X. 1994, № 3

CH₃SH

1992

/ 117: 198802p A theoretical investigation of the adiabatic and diabatic behavior of the core-excited states of methanethiol (CH₃SH). Sevin, Alain; Dezarnaud-Dandine, Christine; Trepo, Michel (Lab. Chim. Org. Theor., Univ. Pierre Marie Curie, 75231 Paris, Fr.). *Chem. Phys.* 1992, 165(2-3), 245-55 (Eng). The adiabatic and diabatic behavior of the first pair of core-excited states of CH₃SH was studied. The potential energy curves (PECs) obtained for small geometry changes simulating various vibrational modes were calcd. by an SCF-CI procedure. Though adiabatic PECs display a complex behavior, the diabatic ones exhibit simple trends. For all types of elementary motion, one diabatic PEC always has a dominant σ^* (S-C) character assocd. with p (valence and Rydberg) character on S, while the second one bears σ^* (S-H) and s (valence and Rydberg) characters on S. The relative variations of these components may be explained using a simple qual. model based on diabatic MO correlations. The diabatic state that is likely to yield a sizeable centrifugal barrier bears at the same time σ^* (S-C) character. The actual nature of the matrix elements used for obtaining diabatic states allows for establishing a parallel with the behavior of CH₃SH.

(nomenus. kpub.)
meop. paeem

C. A. 1992, 117, N 20

CH₃SH

1992

11Д114. Теоретическое исследование адиабатического и диабатического поведения остожно-возбужденных состояний CH₃SH. A theoretical investigation of the adiabatic and diabatic behavior of the core-excited states of CH₃SH / Sevin Alain, Dézarnaud-Dandine Christine, Tronc Michel // Chem. Phys.. — 1992. — 165, № 2—3. — С. 245—255. — Англ.

The adiabatic and diabatic behavior of the first pair of core-excited states of CH₃SH have been studied. The potential energy curves (PECs) obtained for small geometry changes simulating various vibrational modes have been calculated by an SCF-CI procedure. Though adiabatic PECs display a complex behavior, the diabatic ones exhibit simple trends. For all types of elementary motion, one diabatic PEC always has a dominant σ^* (S—C) character associated with p (valence and Rydberg) character on S, while the second one bears

дд.н.

дд 1993, № 11-12

1994

F: CH3SH

P: 3

17Б1106. Расчет поверхностей потенциальной энергии возбужденных состояний CH[3]SH неэмпирическим методом эффективного гамильтониана для валентной оболочки. Excited potential energy surfaces of CH[3]SH from the ab initio effective valence shell Hamiltonian method / Stevens Jonathan E., Freed Karl F., Arendt Michael F., Graham Richard L. // J. Chem. Phys. - 1994. - 101, 6. - С. 4832-4841. - Англ.

РМХ 1997

CH_3SH

(DM-38918)

1997

CH_3SCH_3

Branko L. Jursic,

geomem; Internat. J. Quantum
ab initio
param Chem., 1997, 62, N3,
291-296. ●

CH₃SH

1999

(mm cmrp)

130: 273441u The millimeter- and submillimeter-wave spectrum of methyl mercaptan (CH₃SH). Bettens, Fiona L.; Sastry, K. V. L. N.; Herbst, Eric; Albert, Sieghard; Oesterling, Lee C.; De Lucia, Frank C. (Department of Chemistry, Australian National University, Canberra, 0200 Australia). *Astrophys. J.* 1999, 510(2, Pt. 1), 789-794 (Eng), University of Chicago Press. MeSH, a 3-fold internal rotor and the S analog of MeOH, was detected in the interstellar medium, although little is known about its chem. or about the phys. conditions most favorable for its synthesis. Until the present, the assigned and fitted rotational-torsional spectral lines of MeSH were mainly confined to transitions

C. A., 1999, 130, N20

involving low rotational quantum nos. Many new lines of the rotational spectrum of this species were measured through the rotational quantum no. $J = 20$ using 2 spectrometers: the std. klystron-based system and a new fast scan sub-mm spectroscopy. The newly measured lines were combined with previous data at mainly lower frequencies to form a data set consisting of ~1000 lines that was fitted to nearly the accuracy of the expts. using the internal axis method previously applied to MeOH. The spectral consts. obtained from the fit have allowed prediction of the frequencies of many addnl. lines ≤ 600 GHz in frequency and $J \leq 25$ in rotational quantum no.



(CH₃SH)

[Om. 41506]

2002

Imre Baxo et al.,

ab initio
pacem

J. Mol. Struct. (Theochem)
2002, 594, 179-184.