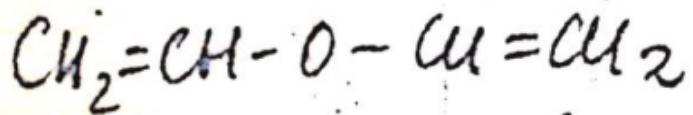


C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O



1967

 $\nu_i$ coagulation

99859j Molecular structure and vibrational spectra of divinyl ether. - A. D. H. Clague and A. Danti (Texas A. & M. Univ., College Station). *J. Mol. Spectrosc.* 22(4), 371-82 (1967)(Eng). Ir spectrum of the vapor from 50 to 4000  $\text{cm}^{-1}$  and the Raman spectrum of the liquid with polarizations have been obtained for divinyl ether. These data indicate the presence of 2 rotational isomers. The more stable isomer has  $C_s$  symmetry, in which the 2 vinyl groups, although coplanar, are nonequiv. The 2nd isomer appears to have  $C_1$  symmetry. A vibrational assignment of the observed fundamental modes is presented. 24 references.

RCKP

C.A. 1967. 66:22

1970

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

Cyber S.Y.,

Alfheim J.

case n.

Indian J. Pure and  
Appl. Phys., 1970, 8,  
n 10, 629.

(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>CO)<sub>2</sub>

$\text{CH}_2=\text{CH}_2\text{O}$

1971

5 11 Д466. Микроволновый спектр, конформация и дипольный момент дивинилового эфира. Nirose Chikai, Curi R. F., Jr. Microwave spectrum, conformati-  
on, and dipole moment of divinyl ether. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 38, № 2, 358—366 (англ.)

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией при т-ре сухого льда исследован спектр молекулы дивинилового эфира (I) в области 7,5—34,5 Ггц. Измерено более 700 линий. Отождествлены переходы *a*-, *b*- и *c*-типа для конформера в *цис-транс*-конфигурации. Хотя значения вращательных постоянных указывают в поль-

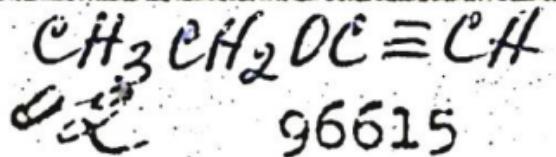
м. в.  
спектр  
дин.  
момент

Ф. 1971.110

зу плоской структуры I, другие величины: дефект инерции ( $\Delta = -8,018$  ат. ед. массы, Å), неибулевая *c*-компонента дипольного момента ( $\mu_c = 0,225 \pm 0,035$  ед. Дебая) и переходы *c*-типа предопределяют неплоскую структуру I. Неплоскость объясняется сильным отталкиванием между  $\beta$ -протоном *цис*-CH<sub>2</sub>-группы и  $\alpha$ -протоном *транс*-CH<sub>2</sub>-группы.

Г. П.

40411.8874  
TE, Ch, Ph



1974

2017

Bjørseth Alf.

Microwave spectrum and rotational isomerism of ethoxy ethyne.

"J. Mol. Struct.", 1974, 20, 61-74

(англ.)

= 0.86

0002 ВКН

064 067 075

ВИНИТИ

40725.1813

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O

ИК спектр

1974

TC, Ch

67891 02

\*45699

Cadioli Beniamino, Fortunato Bruno, Gal-  
linella Enzo, Mirone Paolo, Pincelli Ugo.

Vibrational spectroscopic study and ab  
initio calculation of the rotational iso-  
merism in divinyl ether.

"Gazz. chim. ital.", 1974, 104, N 3-4,  
369-383 (англ., рез. итал.)

133:134 = 1

0153 №3 ВИНИТИ

CH3CH=CHCHO

УФ, КР,

ИК-спектр

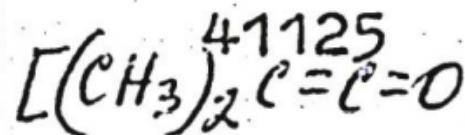
Марголин А.Н.

Автограф. Канд. хим. (Х. Н.)

1975

Исследование по механизму  
стимулированного вращения

60726.2248  
Ch, TC, Ph



1976

\*45-13599

Demaison J., Schwoch D., Tan B.,  
Rudolph H.D. Microwave spectrum od dimeth-  
ylketene. Centrifugal distortion and Corio-  
öos omteraction. "J. Mol. Spectrosc.",  
1976, 59, №2, 226-234 (англ.)

639 651

658

0668 514F

ВИНИТИ

1978

(CH=CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>

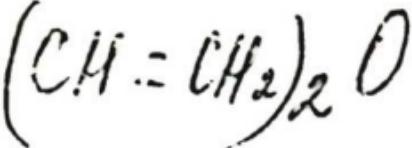
2 Д460. Микроволновый спектр дивинилового эфира.  
Анализ дублетного расщепления в переходах типа *b* и  
*c* и внутреннее вращение винильных групп. Hirose  
Chiaki, Maeda Shiro. Microwave spectrum of divi-  
nyl ether. Analysis of doublet splittings in *b* and *c* type  
transitions and internal rotation of vinyl groups. «J. Mol.  
Spectrosc.», 1978, 72, № 1, 62—85 (англ.)

М. В. Смирнов  
В диапазоне 7,5—42 ГГц измерены микроволны спектры  
молекул цис- и трансизомеров дивинилового эфира. По  
эффекту Штарка и методом двойного резонанса иденти-  
фицированы линии вращательных переходов с  $J < 42$  в  
основном колебательном состоянии. Обнаружено дублет-

Р. д. 1978

ное расщепление большинства линий, обусловленное туннелированием винильных групп через плоскую конфигурацию молекулы. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных и параметров барьера инверсии. Для барьера инверсии получено значение  $580 \text{ см}^{-1}$ .

М. Р. Алиев



1978

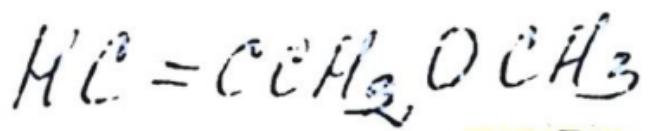
ЗБ273. Микроволновый спектр дивинилового эфира. Анализ дублетных расщеплений переходов типа *b* и *c* и внутреннее вращение винильных групп. Hirose Chiaki, Maeda Shiro. Microwave spectrum of di-vinyl ether. Analysis of doublet splittings in *b* and *c* type transitions and internal rotation of vinyl groups. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 1, 62—85 (англ.)

*М. б. спектр,  
изо.спектр*

Измерен в области частот от 7,5 до 42 ГГц МВ-спектр цис,транс-дивинилового эфира. Определены вращательные постоянные (в МГц)  $A = 15669,73(14)$ ,  $B = -3220,98(3)$ ,  $C = 2790,20(2)$  и постоянные центробежного искажения  $\tau_{aaaa} = -1,3389(16)$ ,  $\tau_{vvvv} = -0,0106(2)$ ,  $\tau_{cccc} = -0,0059(2)$ ,  $\tau_{aabv} = 0,1646(22)$ ,  $\tau_{vbcv} = -0,0057(1)$ . Для переходов типа *b* и *c* и некоторых переходов *a*-типа наблюдается дублетное расщепление, связанное с туннельным переходом двух винильных групп через плоскую конфигурацию. Неплоскость молекулы вызвана сильным отталкиванием между  $\alpha$  и  $\beta$  атомами водорода транс- и цис-винильных групп, соотв. Величина туннельного расщепления  $\Delta_v = 27,28$  МГц. С. Н. Мурзин

9.07.1

2.1979, N3



1980

9 Д462. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение метилпропаргилэфира. Microwave spectrum, structure, dipole moment, and internal rotation of methylpropargylether. Hayashi Michiyo, Nakagawa Jun, Kato Hiroshi. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 362—374 (англ.)

В диапазоне 8—32 Гц исследованы микроволны спектры молекулы  $\text{HC}=\text{CCH}_2\text{OCH}_3$  (I) и девяти ее изотопич. разновидностей. Идентифицированы линии вращательных переходов с  $J \leq 4$  в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных. Из полученных значений вращательных постоянных всех изотопозамещенных I вычислены структурные  $v_s$ -параметры I. Определены также дипольный момент и барьер внутреннего вращения метильной группы.

М. Р. Алиев

φ 1981 N9

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O [osmica 12266] 1981.

Broeckere G., et al.

Rb. ex.  
jacket

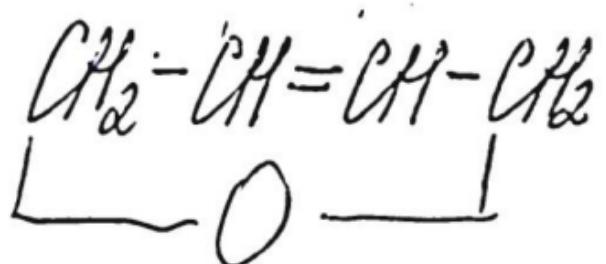
Mol. Phys., 1981, 43 (5)

1939-50



(Om. 27008)

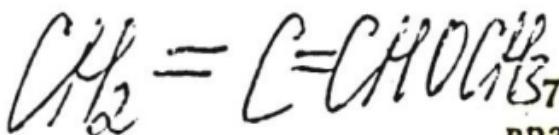
1987



дигидрофуран Villamizar R.M.,  
Lopez J.C. et al.,

francan. Chem. Phys., 1987,  
спектр 115, N<sub>1</sub> 103-108.

1988



Л104. Микроволновый спектр, барьер внутреннего вращения и дипольный момент метоксиаллена. Micro-wave spectrum, barrier to internal rotation and dipole moment of methoxyallene / Ogata Терухико, Sugimoto Куюji // J. Mol. Struct.— 1988.— 190.— С. 61—67.— Англ.

С использованием микроволн. спектрометра со штартковской модуляцией в области частот 18—40 ГГц изучен вращательный спектр молекулы  $\text{CH}_2 = \text{C}=\text{CHOC}_3$  (I) в основном и 1-ых 2 возбуждённых колебат. состояниях  $V=1$ , I  $V=1$ , II. По величине дублетного расщепления линий найдено, что высота барьера внутреннего вращения метильной группы равна  $2835 \pm 30$  кал/моль. Определены вращательные константы:  $A_0 = 12124,795(12)$ ,  $B_0 = 3385,966(4)$  и  $C_0 = 2740,237(4)$  МГц. Оценены компоненты дипольного момента молекулы вдоль главных осей инерции  $\mu_a = 0,470(6)$ ,  $\mu_b = 0,841(20)$  и полный момент  $\mu = 0,963(20)$  ед. Дебая. Приведены также значения постоянных центробежного искажения и структурные параметры I. В. А. Морозов

М.П.

сб. 1989, № 7

1988

$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CHOCH}_3$

14 Б1257. Микроволновый спектр, барьер внутреннего вращения и дипольный момент метоксиаллена. Microwave spectrum, barrier to internal rotation and dipole moment of methoxyallene / Ogata T., Sugimoto K. // J. Mol. Struct.— 1988.— 190.— С. 61—67.— Англ.

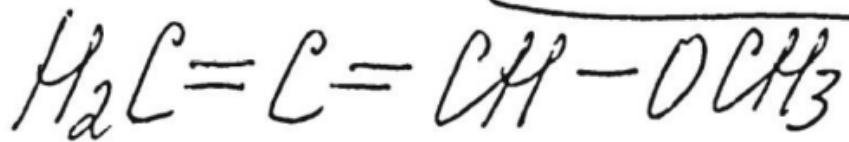
На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 18—40 ГГц с точностью не хуже 0,1 МГц измерен вращат. спектр метоксиаллена,  $\text{CH}_2=\text{C}=\text{CHOCH}_3$ , в основном и двух возбужденных колебат. состояниях. Анализ МВ-спектра выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в  $A$ -редукции с учетом квартичного центробежного искажения и внутр. вращения метильной группы. В основном состоянии определены вращат. постоянные в МГц  $A=12124,795(12)$ ,  $B=3385,966(4)$ ,  $C=2740,237(4)$  и полный дипольный момент  $\mu=0,963(20)$  D. По  $A-E$  расщеплению переходов в возбужденном состоянии определены параметры внутр. вращения с барьером  $V_3=2835(30)$  кал/моль. Полученные МВ-результаты отнесены к цис-форме с плоской структурой тяжелых атомов. С. Н. Мурзин

М.Л.

Х. 1989, № 14

Dm. 32247/

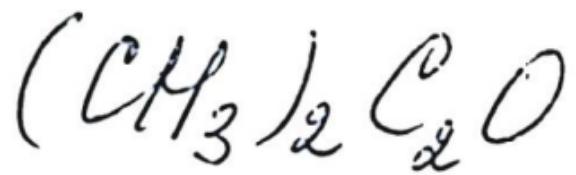
1989



UK, CKP,  
neopentyl-  
acetate,  
isopropyl

Rastelli A., Fallinel-  
la E., Burdisso M.,

g. Mol. Street.,  
1989, 196,  
79-99.



1994

Fowler J.E., Galbraith J.M.  
et al.

et al.

J. Amer. Chem. Soc.

1994. 116, N<sub>20</sub>. C. 9311 -  
9319.

(cu.   $(BH_2)_2C_2O$ ;  $\text{II}$ )