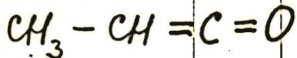


C₃H₄O



1962



м.в. спектр,

V₀

1 13 Б229. Микроволновый спектр и барьер внутреннего вращения метилкетена. Bak B., Christensen D., Christiansen J., Hansen-Nygaard L., Rastrup-Andersen J. Microwave spectrum and internal barrier of rotation of methyl ketene. «Spectrochim. acta», 1962, 18, № 11, 1421—1424 (англ.)

Исследован микроволновый спектр метилкетена (I). Идентифицированы 8 переходов и из частот переходов определены моменты инерции $I_b = 112,1488$ и $I_c = 122,1984$ ат. ед. массы $\text{\AA}^2$. Поскольку I является почти вытянутым симметричным волчком, для получения точного значения I_a (13,1896) использовано значение

X. 1966. 13

момента инерции метильной группы I_a и соотношение $I_c = I_a + I_b - I_a$. Вычислен барьер внутреннего вращения методом Вильсона ($V_3 = 1200 \pm 10$ кал/моль). Внутреннее вращение метильной группы не влияет на I_c , I_b изменяется незначительно и величина расщепления наблюдаемых линий не зависит от изменения I_a . Значение V_3 , найденное для I, мало отличается от V_3 для ацетальдегида. Это показывает, что вклад неподеленной пары электронов кислорода в барьер невелик.

М. Алиев

C_2H_3CHO

Синдр

9 Д177. Спектр пропенала в ближней УФ-области. Brand J. C. D., Williamson D. G. Near-ultraviolet spectrum of propenal. «Disc. Faraday Soc.», 1963, № 35, 184—191 (англ.)

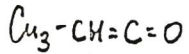
1963

Первая система очень слабых полос поглощения, обнаруженная в области 4122 Å, предположительно приписана триплетным $\pi^* \rightarrow n$ -переходам в *транс*-пропенале. Соответствующие переходы между синглетными состояниями проявляются вблизи 3865 Å. Проведен детальный анализ колебательной структуры этой системы полос. Полученные данные показывают, что конфигурация, соответствующая возбужденному синглетному состоянию, — плоская или почти плоская. Возбуждение увеличивает длину связи CO приблизительно на 0,12 Å и оказывает существенное влияние на делокализацию π -электронов вне группы CHO. В результате большая длина характерна для центральной связи CC, а не для боковой.



05.1964. 98

1966



Microwave spectrum, molecular structure, barrier to internal rotation, and dipole moment of methylketene. Boerge Bak, Joern J. Christiansen, Kaj Kunstmann, Lise Nygaard, and John Rastrup-Andersen (Univ. Copenhagen). *J. Chem. Phys.* 45(3), 883-7(1966)(Eng). The microwave spectra of the CD_3 species and of 7 monosubstituted isotopic species of $\text{MeCH}:\text{CO}$ have been examd., and a complete structure of methylketene has been obtained by the substitution method. The structural parameters found are: $\text{C}:\text{O}$ 1.171, $\text{C}:\text{C}$ 1.306, $\text{C}-\text{C}$ 1.518, $\text{C}-\text{H}$ (vinyl) 1.083, and $\text{C}-\text{H}$ (Me) 1.083 or 1.11 Å. The ketene group is linear, and the Me group is staggered, $\angle\text{CCC} = 122.6^\circ$, $\angle\text{C}(1)-\text{C}(2)\text{H}(2) = 113.7^\circ$, and $\angle\text{HCH} = 109.9^\circ$ or 108.8° . The barrier splittings were used to det. the value of the barrier to hindered rotation and the angle between the Me-axis and the principal-axis system for each of the monosubstituted species; $V_3 = 1177 \pm 20$ cal./mole. The dipole moment of methylketene was measured on the $2_{1,2} \rightarrow 3_{1,2}$ transition, yielding μ_a 1.755, μ_b 0.35, μ 1.79 D. RCJQ

C.A. 1966. 65. 9.

130372

транс $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CHO}$ Cherniak E.A.,
спектр, Costain C.C.

1966
361

м. п.,
структура

J. Chem. Phys.,
45, N 1, 104

Микроволновый спектр и
молекулярная структура
транс-акroleина.



1968

 C_3H_4O

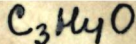
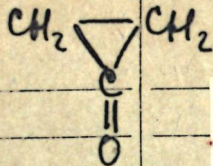
Kuchitsky K., ugr.

эфир.
мол.J. Moller. Stenest,
1968, 1, ~6, 463[Сел. C_4H_6] III

C₃H₄O
(Di)

1967
109587b) Vibrational spectra and rotational isomerism of the acrolein molecule, C₃H₄O. S. Dzheessati, V. I. Tyulin, and V. M. Tatevskii. *Vestn. Mosk. Univ.*, Ser. II 22(2), 14-19 (1967)(Russ). The Raman and ir spectra were measured of the liq. and gaseous acrolein (I), resp., and the frequencies of normal vibrations were calcd. for the cis (Ia) and trans (Ib) forms of I. The majority of the frequencies of both forms coincide; however, some of them are different and can be used in distinguishing between Ia and Ib if certain addnl. information is available. This information was obtained from the temp. dependence of the intensity of the ir bands at 630, 1100, 1930, 2370, 2930, and 3100 cm.⁻¹ at 25-100°. The 630- and 1100-cm.⁻¹ bands, according to the calcn., correspond to Ia and their frequencies differ from the analogous bands of Ib. They are, however, partially overlapped by the bands of Ib and thus, only an approx. estn. of $\Delta E = 1.7$ kcal./mole of the energy difference between the isomers in the gaseous state is possible. D. Papousek

C.A. 1968. 68. 24



1968

структура,
и. н.

6327h Microwave spectrum, structure, and dipole moment in cyclopropanone. Pochan, J. M.; Baldwin, J. E.; Flygare, W. H. (Univ. of Illinois, Urbana). *J. Amer. Chem. Soc.* 1968, 90(4), 1072-3 (Eng). The observed and calcd. rotational transitions in cyclopropanone (I) were given. No μ_b or μ_c transitions were observed indicating that I has C_{2v} symmetry. The Stark effect was observed as a function of elec. field for the $1_{10} \rightarrow 2_{11}$ and $0_{00} \rightarrow 1_{01}$ transitions. The moments of inertia were detd. from rotational consts. A simple ring-closed structure of I with 3 C atoms and one O atom in a plane and 4 protons out of the plane was suggested. The structural parameters for I are given.

BWJN

C. A. 1968. 69. 2



1969

7970r Barrier to internal rotation of methoxyethyne. Den Engelson, D. (State Univ. Utrecht, Utrecht, Neth.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 30(3), 466-73 (Eng). Reinvestigation of the microwave spectrum of methoxyethyne gave an accurate value, 1440 ± 30 cal./mole, for the barrier to internal rotation.

RCKP

 V_0

C.A. 1969. 71.2

1970

CH_3CHCO

Cyril S. Y.
Alphheim Y.

Chem. n.

Indian J. Pure and

Appl. Phys., 1970, 8,

N^o 10, 629.

(Chem. CH_2CO) III

ommuck 3293

1971.



(characteristics)
 λ, ν, E

Beir E. J.; Goetz W.,
Ramsay D. A.

Can. J. Phys., 1971, 49
N 21, 2710-2717



$\text{CH}_3\text{C}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$

1972

Иманов Л.М. и Т.Д.

"Материал. I-го Всес. симпоз. по
вращательн. спектрам молекул.
1969" Баку, 1972, 55-63.

М.П.

● (см $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$; III)

C_3H_4O

1972

17 Б45. Относительно выбора вида потенциальной кривой заторможенного внутреннего вращения молекул акролеина C_3H_4O и гидразина N_2H_4 . Марголин Л. Н., Тюлин В. И. В сб. «Материалы 1-го Всес. симпоз. по вращател. спектрам молекул. 1969». Баку, 1972, 116—122

$V_i, \Delta H_0$

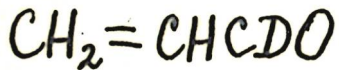
Потенциальные функции внутреннего вращения акролеина и гидразина представлены в виде ряда Фурье, и на основании эксперим. данных найдены коэф. разложения. В частности, для акролеина расшифрована вращат. структура 0—0-полосы и получено 5 обертонов крут. кол.: 157,7; 311,7; 467,7; 616,5 и 760,8 cm^{-1} . На основании этих данных получены оценки $V_1=600 \pm \pm 100 cm^{-1}$ и $V_2=1950 \pm 50 cm^{-1}$. Найденной форме потенциальной кривой отвечают $\Delta H_0=600 \pm 100 cm^{-1}$ (разность энтальпий конформеров) и $\Delta H^\ddagger=2250 \pm \pm 150 cm^{-1}$ (барьер внутреннего вращения). Для гидразина, асимметричная потенциальная функция к-рого была представлена в виде $V(\varphi)=V_2(1-\cos 2\varphi)++(V_4/2)(1-\cos 4\varphi)+(U_1/2)\sin \varphi+(U_3/2)\sin 3\varphi$, найдено: $V_2=5600 cm^{-1}$, $V_4=-200 cm^{-1}$, $U_1=-7600 cm^{-1}$ и $U_3=2500 cm^{-1}$. Этой функции отвечают энтальпии $\Delta H_0=500 cm^{-1}$, $\Delta H^\ddagger_{trans}=850 cm^{-1}$ и $\Delta H^\ddagger_{cis}=$

X. 1973
N 17



$= 10\,700\text{ см}^{-1}$. Отмечается, что вид потенциальных функций получен на основании ряда предположений, справедливость к-рых окончательно не доказана, поэтому найденную зависимость $V(\varphi)$ следует считать гипотетической.

В. Г. Дашевский



Lammuck 1198 | 1973



G. A. Asborne;
D. A. Ramsay.

(vi; chemip) "Can. J. Phys"

1973, 51, N11, 1170-75

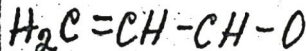
Near Ultraviolet Absorption
Spectra

41024.131

35260GR

02 1974

TC, MGU, Ch, Ph



X-7109

Ogilvie J.F. Assignments of electronic transitions in methanal azine and related molecules. "Can. J. Spectrosc.", 1974, 19, N 3, 89-95

(англ., рез. франц.)

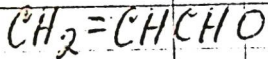
0219 пик

186 189

ВИНИТИ

номер 4320

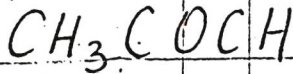
1974



Osborne R. A.

(ссылка) J. Mol. Spectrosc.,
1974, 49, 48-51.

1974



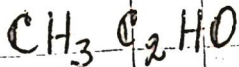
Knowles D.J.

Nicholson A.J.C.

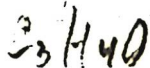
"J. Chem Phys" 1974, 60, N3,
1180-1181 (aural)

J. A.P.

($\text{cm CH}_3\text{COOH}$; III)



1975



(Ji)

9 Д648. Люминесценция и упрощенная фотофизика метилглиоксаля. Coveleskie R. A., Yardley James T. Luminescence and simplified photophysics of methylglyoxal. «J. Amer. Chem. Soc.», 1975, 97, № 7, 1667—1672 (англ.)

Получены спектры поглощения и излучения паров метилглиоксаля в присутствии Ag в широком интервале давлений. Поглощение приписано переходу $^1A''(^1A_u) \leftarrow ^1A'(^1A_g)$ с частотой $0-0$ 22 260 см^{-1} или 22 090 см^{-1} . В вибронных спектрах выделены прогрессии колебаний 270—280 см^{-1} . Записаны спектры свечения с временным разрешением. Показано, что общее

4. 1975 N 9

свечение может быть представлено как наложение флуоресценции с наносекундной кинетикой и фосфоресценции из состояния $^3A_u^1$ с временем затухания 1,92 мсек. Показано, что состояние $^3A_u^1$ расположено на 2400 см^{-1} ниже состояния $^1A_u^1$. Представлена простая кинетич. схема, описывающая изменение относит. интенсивности флуоресценции и фосфоресценции при давл. выше 2 мм рт. ст. Отмечено, что при меньших давлениях процесс синглет-триплетной конверсии носит обратимый характер, поэтому предложенная кинетич. схема непригодна. Библи. 25.

И. Н. А.

50306.9084

Ex-Ch, Ch, Ph, TC

49587

 C_2H_3CHO *

1975

4-8262

Del Bene Janet E., Worth Guy T., Marhe-
se Francis T., Conrad Michael E.

An ab initio molecular orbital study
of substituted carbonyl compounds.

"Tehor. chim. acta", 1975, 36, N 3,
195-206

(англ.) 0310 пик

296 298

3 0 0

ВИНИТИ

1975

$\text{CH}_2=\text{CHCHO}$
(акролеин)

УФ-, КР-и

ИК-спектры

Марголин Л. Н.

Автореф. канд. дис. (х. н.)

Исследование потенциала
внутреннего вращения

C₂H₄CO

1976

Fujimoto H, et al.

Bull. Chem. Soc. Jap.
1976, 49, No. 1508-11

(parent
compound
isolated)

(Cell C₃H₆)

III

C_2H_3-CHO

(x6. max. p.)
220m

1976
Del Bene J. E., et al.

J. Amer. Chem. Soc., 1976,
98, N24, 7526-32

(cu. MCHO; III)

CH_2CHCHO

1977

Ei, fmr

Hague W.

J. Chem. Phys., 1977,
67, 18, 3629-35.

coll. CH₄ - III

CH_2CHCOH

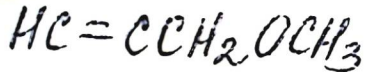
Van der Plaats G.,
Smit W. M. A.

1977

раствор
сук.
носив.

"J. Mol. Struct.",
1977, 36, № 2, 309-316.

●
(сук. COF_2)



1980

м. в. спектр,
структура
и

17 Б321. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение метилпропаргилового эфира. Hayashi M., Nakagawa J., Kato H. Microwave spectrum, structure, dipole moment, and internal rotation of methylpropargylether. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 362—374 (англ.)

Измерены в области 8—35 ГГц МВ-спектры десяти изотопич. образцов метилпропаргилового эфира, $\text{HC}=\text{CCN}_2\text{OCH}_3$ (I), в основном колебательном состоянии. При идентификации МВ-переходов с низкими значениями J использован эффект Штарка. Анализ спектров вы-



X. 1981 № 17

понен с учетом кватертичного центробежного искажения. Для нормального изотопич. образца вращательные постоянные равны (в МГц) $A=11756,83(17)$, $B=3323,73(8)$, $C=2795,43(7)$, постоянные центробежного искажения (в кГц) — $d_J=2,7(30)$, $d_{JK}=-19(9)$, $d_K=100(40)$, компоненты дипольного момента $\mu_a=(0,289(5) D$, $\mu_b=-0,502(28) D$, $\mu_c=1,017(14) D$, а полный дипольный момент $\mu=1,170(18) D$. Полученные данные отнесены к конформеру с гош-формой по отношению к связи CH_2-O . При ряде допущений определена возможная r_s -структура молекулы. Структурные параметры I несколько отличаются от соотв-щих данных для галометилметилловых эфиров (II). Длина связи CH_3-O заметно короче в I по сравнению с II и близка к длинам связей $\text{C}-\text{O}$ в диалкиловых эфирах. В то же время одна из CH -связей в метиловой группе I, почти параллельная фрагменту $\text{HC}=\text{C}-\text{C}$, намного превосходит соответствующую длину связи в II. На основе известных данных Марстока и Моллендела (Marstokk K. M., Møllendal H., «J. Mol. Struct.», 1976, 32, 191) по $A-E$ расщеплению в МВ-спектре I выполнен уточненный расчет параметров барьера внутреннего вращения метильной группы. Для величин параметров барьера и гармонич. частоты крутильных колебаний могут быть приняты значения $V_3=-2314(120)$ кал/моль, $V_6=-284(320)$ кал/моль, $\omega_1=115 \text{ см}^{-1}$.

С. Н. Мурзин

C_3H_4O

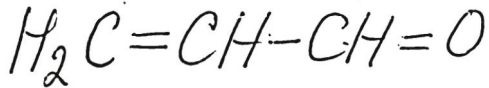
1980

Walker R, et al.

J. Chem. Phys. 1980,
73, N7, 3095-7

спектр

см. $CHCl_3$ - III



1982

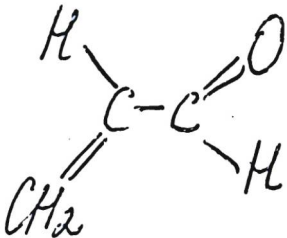
2000 г. 1982 г.
 структура,
 сир. пост.
 Bock Ch. W., Tra-
 ctman et al.
 Chem. Phys., 1982,
 68, N 1-2, 143-154.



Акролеин

1982

Ниспан М. В.,



структура

Электроннографическое
исследование строения
некоторых органических
молекул с сопряженны-
ми связями.

Автореферат диссертации
на соискание ученой
степени К. Х. Н., Москва,
1982

(HC≡COCH₃) 0.71 23/74 1985
19 Б1362. Вращательный спектр метоксиацетилен:

анализ центробежного искажения и внутреннего вращения. The rotational spectrum of methoxyethyne: centrifugal distortion and internal rotation analysis. Van Eijck B. P., Dubrulle A., Demaison J., Ripoll J. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 1, 95—103 (англ.)

На сантиметровом в обл. частот 16—40 ГГц и миллиметровом в обл. частот 150—240 ГГц радиоспектромах измерен вращат. спектр метоксиацетилена (HC≡COCH₃) в основном и первом возбужденном торсионных состояниях. Анализ спектра выполнен с учетом квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения и внутр. вращения метильной группы с использованием метода внутр. осей. Вращат. постоянные в основном состоянии для переходов A-типа равны (МГц): A=37927,9814 (253), B=5136,69884 (177), C=4651,73771 (167). На основе модельного расчета определены молек. параметры внутр. вращения. Полученные данные представляют интерес для радиоастрономич. исследований. С. Н. Мурзин

М. П. Кошечко,
структура

X. 1986, 19, N19

$C_3H_4O^+$

(DM-27104)

1987

107: 121468v Gaseous $[C_3H_4O]^+$ radical cations: expected structures. Bouchoux, G. (Lab. Synth. Org., Ec. Polytech., 91128 Palaiseau, Fr.). THEOCHEM 1987, 36, 107-11 (Eng). Ab-initio MO calens. of thirteen $[C_3H_4O]^+$ radical cations are presented. The remarkable stability of unusual structures such as $[CH_2CH_2CO]^+$; $[CH_2-CH_2...OC]^+$; $[CH_2CHCOH]^+$ and $[CHCHCHOH]^+$ when compared with ionized methyl-ketene and acrolein is established.

мгнущая,
мел. пачет

C.A. 1987, 107, ~14

(Om. 27476)

1987



концепция,

помехи.

Q-ил.

суперн.

прислеш.

ab initio

факта

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

J. Mol. Struct., 1987,
160, N 3-4, 327-335.

C_3H_4O

(Dm. 30 724)

1988

Bock Ch. W., Panchenko
Yu. N., et al.,

Эмпирика,
ab initio
расчет

Chem. Phys. 1988, 125, N1,
63-75.

$H_2C=CH-CHO$ (Om. 29311)

1988

монхы.
структура

Bostrom F.O.,
Bakken P., et al.,

J. Mol. Struct.,
1988, 172, 227-240.



$H_2CO \cdot HCCH$

Om 29932

1988

109: 45387s Rotational spectrum of a weakly bound dimer of formaldehyde and acetylene: identification and characterization of a bridged planar form involving two nonlinear hydrogen bonds. Howard, N. W.; Legon, A. C. (Dep. Chem., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QD). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(11), 6793-800 (Eng). Pulsed-nozzle, Fourier-transform microwave spectroscopy was used to observe and measure the rotational spectra of the following 5 isotopomers of a weakly bound dimer formed between H_2CO and C_2H_2 : ($H_2CO, HCCH$), ($H_2CO, DCCD$), ($H_2CO, HCCD$), ($H_2CO, DCCH$), and ($D_2CO, HCCH$). Rotational consts. A_v, B_v, C_v , and centrifugal distortion consts. ΔJ , Δ_{JK} , and δJ were detd. for the ground state ($v = 0$) for all species and for a vibrationally excited state ($v = 1$) for the 1st 2. The values for the $v = 0$ state in ($H_2CO, HCCH$) are: $A_0 = 30\,400.567(3)$ MHz, $B_0 = 2355.8304(3)$ MHz, $C_0 = 2180.3335(5)$ MHz, $\Delta J = 13.159(8)$ kHz, $\Delta_{JK} = -311.4(2)$ kHz, and $\delta J = 1.526(5)$ kHz. Anal. of the rotational consts. led to the conclusion that the dimer has an unusual, bridged planar geometry, with the 2 subunits bound through 2 nonlinear H bonds. One bond has C_2H_2 as the H^+ donor and the O atom of H_2CO as the acceptor, while in the other a H_2CO H^+ interacts with the C_2H_2 π bond. The

уб спект,
спаван-нод
спектрн-
параметр

(H)

~~IX~~

C.A. 1988, 109, 46

$D_2CO \cdot HCCH$ и др.

geometry is characterized by the following distances and angles: $r = 3.86(2)$ Å is the distance from the C atom of H_2CO to the center of C:C, $\theta = 80.3(16)^\circ$ is the angle made by the C_2 axis of H_2CO with r while $\phi = 40.1(17)^\circ$ is the corresponding angle made by the C_2H_2 axis. The H bond distances are $r(\text{O}\cdots\text{H}) = 2.39$ Å and $r(\text{center}\cdots\text{H}) = 3.12$ Å. The vibrationally excited state was identified with a motion involving the torsional oscillation of the H_2CO subunit about its C_2 axis. A relatively high barrier to this motion at 90° to the mol. plane is postulated.



(H₂CO, HCCH)

от 29 932

1988

и др

12 Л168. Вращательный спектр слабо связанного димера формальдегида и ацетилена: идентификация и характеристики мостиковой плоской формы, включающей две нелинейные водородные связи. Rotational spectrum of a weakly bound dimer of formaldehyde and acetylene: Identification and characterization of a bridged planar form involving two nonlinear hydrogen bonds. Howard N. W., Legon A. E. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 11, 6793—6800 (англ.)

и др.

С помощью фурье-спектрометра измерены вращательные спектры 5 изотопомеров димеров: (H₂CO, HCCH), (H₂CO, DCCD), (H₂CO, HCCD), (H₂CO, DCCH) и D₂CO, HCCH). Определены вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения для основного колебательного состояния ($\nu=0$) этих изотопомеров и для 1-го возбужденного колебательного состояния ($\nu=1$) для первых двух из приведенных выше изотопомеров. Детальный анализ враща-

(H)
12

(H₂CO, DCCD) и др.

ср. 1988, № 12

тельных постоянных позволил сделать заключение о
 необычной геометрии димеров, которая характеризу-
 ется следующими расстояниями и углами: $r=3,86(2) \text{ \AA}$ —
 расстояние от атома С молекулы H_2CO до центра свя-
 зи $\text{C}\equiv\text{C}$, $\theta=80,3(16)^\circ$ — угол, образуемый осью C_2 мо-
 лекулы H_2CO с направлением вектора r ; $\Phi=$
 $=40,1(17)^\circ$ — угол, образуемый осью молекулы аце-
 тилена с направлением вектора r . Длина водородной
 связи $r(\text{O}\dots\text{H})=2,39 \text{ \AA}$ и $r(\text{центр}\dots\text{H})=3,12 \text{ \AA}$. Коле-
 бательное возбуждение димера идентифицировано как
 крутильные колебания молекулы H_2CO вокруг ее
 оси C_2 с относительно высоким барьером.

В. А. Морозов



HC: COCM₃

Om 31929

1989

110: 239375c Vibrational spectra and structure of methoxyacetylene. Ignat'ev, I. S.; Lazarev, A. N.; Al'pert, M. L. (Inst. Khim. Silik., Leningrad, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1989, 63(3), 642-51 (Russ). The IR spectra were investigated by HC:COMe and HC:COCD in the gas phase, as well as Raman spectra in the liq. phase. An inspection was made of frequency attribute. A nonempirical quantum-chem. calcn. was made, using the gradient method of the equil. configuration of the mol. of methoxyacetylene and its force consts., with the utilization of the ref. at. functions of the type 4-21 G and 4-21 G*. The calcn. of the frequency with the quantum-chem. force consts. was carried out at fixed values of the scaling multipliers, detd. from calcns. in the same ref. of force fields of fluoroacetylene and di-Me ether. The geometric and dynamic manifestations of disturbance of the local C_{3v}-symmetry of the methoxy group were examd. These disturbances and detd. by the influence of unshared pairs, and are less than in satd. ethers, as a consequence of the characteristics of the structure and the orientation of the unshared pairs.

(UK)

C.A. 1989, 110, N 26

$\text{HC} \equiv \text{COCCH}_3$

07 31929 1989
+ 6 Л193. Колебательный спектр и строение метокси-
ацетилен / Игнатъев И. С., Лазарев А. Н., Аль-
перт М. Л. // Ж. физ. химии.— 1989.— 63, № 3.— С.
642—651

Изучены ИК-спектры $\text{HC} \equiv \text{COCCH}_3$ и $\text{HC} \equiv \text{COCOD}$ в газовой фазе и спектры комб. рас. — в жидкой. Проведен пересмотр отнесения частот. Выполнен неэмпирический квантовохимич. расчет градиентным методом равновесной конфигурации молекулы метоксиацетилен и ее силовых постоянных с использованием базисных атомных ф-ций типа 4-21G и 4-21G*. Расчет частот с квантовохимическими силовыми постоянными проведен при фиксированных значениях масштабирующих множителей, определенных из расчетов в том же базисе силовых полей фторацетилен и диметилового эфира. Рассмотрены геометрические и динамич. проявления нарушений локальной C_{3v} -симметрии метоксигруппы. Показано, что эти нарушения определяются влиянием неподеленных пар и, что по величине эти нарушения меньше, чем в насыщенных эфирах, вследствие особенностей строения и ориентации неподеленных пар.

Резюме

сф. 1989, № 6