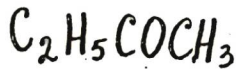


C₄H₈O





H. Hurzeler, Mark G.

1958

Inghram; J. P. Morrison

1137.

(J.P.)

"J. Chem. Phys"

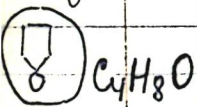
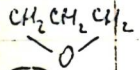
1958, 28, N1, 76-82.

1963

изученная Hernandez G. J.

публикация J. Chem. Phys., 1963, 38, 2233 (1:3)

сравнение. Вакуум 56 спектры поглощения
соединений при численных значениях: 470-
480 см⁻¹, 1600 см⁻¹, 1700 см⁻¹ и
1750 см⁻¹.



по рентгеновским спектрам частот
поглощения 33980, 35360 и 44080 см⁻¹ соответ-



1965

1 Д126. Электронографическое исследование структуры и внутреннего вращения изомасляного альдегида. Guillory J. P., Bartell L. S. Electron-diffraction study of the structure and internal rotation of isopropyl carboxaldehyde. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 2, 654—657 (англ.)

Изомасляный альдегид изучен электронографически в газовой фазе. Найдено, что из трех возможных конфигураций молекулы *цис*-, *транс*-, *гош*-наилучшее согласно с эксперим. кривой радиального распределения дает кривая, полученная смешиванием нормальных 90% *гош*- и 10% *транс*-конфигураций. Определены следующие значения межъядерных расстояний и амплитуд, не зависящие от внутреннего вращения: C—H 1,127 Å, 0,085 Å; C—C 1,528 Å, 0,044 Å; C=O 1,206 Å, 0,041 Å, $\angle \text{CCO} = 123,3^\circ \pm 1,9^\circ$, угол $\angle \text{CSH} = 110,8^\circ \pm 3,2^\circ$. Был также изучен вращательный барьер альдегидной группы. Для трехкратного потенциала барьер превышает 2 ккал/моль.

И. Ронова

ф. 1966. 170

$C_2H_5OCH_3$

H.K.

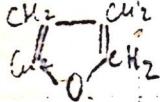
1966

The infrared spectrum and rotational isomerism of ethyl vinyl ether. N. L. Owen and N. Sheppard (Univ. Chem. Lab., Cambridge, Engl.). *Spectrochim. Acta* 22(6), 1101-6(1966) (Eng). A study of the ir spectrum of Et vinyl ether in the solid, liquid, and gaseous states shows the existence of rotational isomers. Measurements of rotational fine structure in a strong type-C band of the $:CH_2$ wagging mode shows the most stable rotational isomer to have a planar sickle-shaped skeleton with a cis configuration of the $C:C-O-C$ group. Absorption bands which vary in intensity with temps. and polarity of the solvent are attributed to less stable and more polar rotational isomers, which have probably non-planar $C:C-O-C$ groups. RCSQ

C.A. 1966. 65.3

3182 f9





1966

70573a Rotation spectra of excited vibrational states and torsion potential of furfural. F. Moennig, H. Dreizler, and H. D. Rudolph (Univ. Freiburg/Br., Ger.). *Z. Naturforsch.*, a 21(10), 1633-40(1966)(Ger). The rotation spectra in the excited state for the 3 lowest frequency vibrations is given of the 2 rotation isomers of furfural. The vibration frequencies are detd. and the vibration forms given. The results are compared with the spectrum of the mol. in the far ir. The torsion frequencies and the energy difference between the two forms leads to a hindrance potential: $V(\alpha) = (87/2) (1 - \cos \alpha) + (3178/2) (1 - \cos 2 \alpha) + (174/2) (1 - 3 \alpha) \text{ cm.}^{-1}$ The torsion levels and torsion functions have been calcd. for this potential. F. Schossberger

C.A. 1967. 66. 16



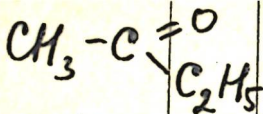
1967

(J.L.B.)

23439p Microwave spectrum and structure of tetrahydrofuran. Murty, K. Sree Rama (C.M. Coll., Sambalpur, India) *Proc. Int. Conf. Spectrosc., 1st, Bombay 1967*, 2, 396-9 (Eng). The title compd. is planar based on its microwave spectrum. The 3 moments of inertia, 73.8402, 72.2787, and 133.1729 at. mass units/A.², indicate the following bond distances and angles: C-O, 1.435 ± 0.015 A.; C-H, 1.097 ± 0.010 A.; COC, $110^\circ 48' \pm 1^\circ$; CCO, $109^\circ 08' \pm 1^\circ$; CCC, $105^\circ 28' \pm 1^\circ$.

Wendell L. Dilling

C.A. 1968. 69. 6



(2)

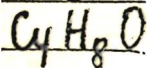
$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$

Серкарев А. И.
Дворовенко Н. И.

1967

Сб. статей по физ. вопр. спектро-
скопии, Клемерово, 1967 22-40
Изучение спектров КР кар-
боксилсодержащих соедине-
ний в разных фазовых
состояниях.

(См. $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$) III



Сир-ра
мал-мал

12 Б167. Изучение молекул с пятичленными кольцами. II. Электронографическое исследование газообразного тетрагидрофурана. Almenningen A., Seip H. M.,

1969

Willadsen T. Studies on molecules with five-membered rings. II. An electron diffraction investigation of gaseous tetrahydrofuran. «Acta chem. scand.», 1969, 23, № 8, 2748—2754 (англ.)

Проведено электронографич. исследование тетрагидрофурана C_4H_8O . Удовлетворительное совпадение эксперим. и теоретич. кривых радиального распределения получено как для модели симметрии C_2 (конформация полукресла), так и C_s (конформация конверта с отогнутым клапаном), что находится в согласии с результатом конформац. расчетов о приблизительно свободном псевдовращении в тетрагидрофуране. Наилучшее соответствие найдено для модели с преимущественной симметрией C_2 и нек-рым вкладом C_s и длинами связей $C-O$ 1,528, $C-C$ 1,538, $C-H$ 1,110 Å. Б. П. Бирюков

X. 1970. 12

C_4H_8O

1969

7 Б132. Электронографическое исследование газообразного тетрагидрофурана. Geise H. J., Adams W. J., Bartell L. S. Electron diffraction study of gaseous tetrahydrofuran. «Tetrahedron», 1969, 25, № 15, 3045—3052 (англ.)

Строение

Строение молекулы тетрагидрофурана C_4H_8O исследовано электронографически в газовой фазе с применением сектор-фотометрич. методики. При расшифровке вводились поправки на эффекты ангармоничности, неупругое рассеяние и неточность борновского приближения. Электронограммы получены при ускоряющем напряжении 40 кВ и расстояниях сопло испарителя — фотопластика 6,5, 11 и 21 см. Эксперим. кривые хорошо согласуются с моделью свободной псевдо-вращающейся

X. 1970. 7

молекулы Ср. величина псевдо-вращательной координаты складывания цикла равна $0,38 \pm 0,02$ А, несколько больше величины, найденной из ИК-спектров. Межъядерные расстояния и среднеквадратичные амплитуды колебания (в А) С—Н 1,115 (0,002); 0,079 (0,003), С—О 1,428 (0,001); 0,051 (0,002); С—С 1,536 (0,001); 0,051 (0,002).

И. Ронова

C_4H_8O

1970

8 Б627. Тетрагидрофуран. Отнесение частот колебаний. Термохимические свойства и давление пара. Scott D. W. Tetrahydrofuran: vibrational assignment, chemical thermodynamic properties, and vapor pressure. «J. Chem. Thermodyn.», 1970, 2, № 6, 833—837 (англ.)

колеб.
частоты

Вычислены основные колебательные частоты ТГФ. Интерпретированы ИК- и КР-спектры ТГФ. По молек., спектроскопич. и термохим. данным вычислены термодинамич. ф-ции ТГФ в состоянии идеального газа в интервале 200—1000° К с учетом заторможенного псевдовращения в молекуле. При t -ре 298,15° К $C_p^\circ = 18,22$; $S^\circ = 72,26$; $(H^\circ - H_0^\circ)/T = 11,69$; $(G^\circ - H_0^\circ)/T = -60,57$ кал/моль·град; $\Delta H^\circ(\text{обр.}) = -44,03$; $\Delta G^\circ(\text{обр.}) = -19,43$ ккал/моль; $\lg K(\text{обр.}) = 14,24$. Методом сравнительной эбуллиометрии измерено давл. пара ТГФ в интервале 23—100°. Результаты аппроксимированы ур-нием $\lg P(\text{атм}) = A(1 - 339,114/T)$, где $\lg A = 0,829231 - 6,77774 \cdot 10^{-4} \cdot T + 6,91492 \cdot 10^{-7} \cdot T^2$.

+P

И. Васильев

Г и III

X. 1971.8

(см. также C_4H_8O) I

50218.9133

Ph, Ch, TC, MGU

96601

 $\text{CH}_3\text{COC}_2\text{H}_5$

1975

2953

Kimura Katsumi, Katsumata Shunji,
Yamazaki Tomoko, Wakabayashi Hidechika.
UV photoelectron spectra and sum rule
consideration. Out-of-plane orbitals
of unsaturated compounds with pla-
nar-skeleton structure.

"J. Electron Spectrosc. and Relat.
Phenom.", 1975, 6, N 1, 41-52



1981

5 Б353. Микроволновый спектр, внутримолекулярная водородная связь, дипольный момент и центробежное искажение 3-бутен-1-ола. Marstock K. - M., Møllendal H. Microwave spectrum, intramolecular hydrogen bond, dipole moment and centrifugal distortion of 3-buten-1-ol. «Acta chem. scand.», 1981, A35, № 6, 395—401 (англ.)

Измерены в области частот 18,0—32,0 ГГц МВ-спектры $\text{CH}_2\text{OHCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ (I) и $\text{CH}_2\text{ODCH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ (II), в основном колебательном состоянии и I в трех возбужденных торсионных состояниях. Анализ спектров во всех состояниях выполнен с использованием гамильтониана в представлении Уотсона с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения. Для I и II соотв. вращательные постоянные в основном состоянии равны (в МГц) $A=9185,7124(74)$ и $8852,609(33)$, $B=3330,0652(26)$ и $3324,908(14)$, $C=2742,3434(24)$ и $2710,228(14)$. Полученные данные относятся к ротамеру с внутримолек. Н-связью, образованной между атомом

геометр.,
структура,
м.п.;

X.1982, 19, N 5

водорода гидроксильной группы и двойной связью. Углеродный остов конформера близок по форме к асимм. конформеру 1-бутена. Из измерений относит. интенсивностей линий в двух возбужденных состояниях определена частота $C2-C3$ торсионной моды $84(20) \text{ см}^{-1}$, к-рая довольно близка к соотв-щей частоте $93(4) \text{ см}^{-1}$ 1-бутена. Для третьего возбужденного состояния частота $C3-C4$ торсионной моды равна $172(15) \text{ см}^{-1}$. По эффекту Штарка 2-го порядка для трех переходов определены компоненты дипольного момента $\mu_a = 1,23(2) D$, $\mu_b = 1,02(2) D$, $\mu_c = 0,44(7) D$ и полный дипольный момент $\mu = 1,65(5) D$. При ряде допущений определена возможная структура конформера. Двугранные углы $\angle C1C2C3C4 = 75(3)^\circ$, $\angle C2C3C4O = 116(3)^\circ$ ' довольно близки к соответствующим значениям $61,6(43)^\circ$ и $109,3(25)^\circ$, определенным из данных по электронной дифракции. Для син-конформера двугранный угол $\angle C2C3C4O$ равен $64(3)^\circ$. Для двугранного угла $\angle C3C4ON$ получено значение $225(10)^\circ$.

С. Н. Мурзин

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

1982

7 Д376. Микроволновый спектр метилэтилкетона в основном колебательном состоянии. Мамлеев А. Х., Гундерова Л. Н., Дронов В. И., Поздеев Н. М. «Хим. физ.», 1982, № 3, 309—311

УВ спектр

В диапазоне 7—40 ГГц исследован микроволн. спектр метилэтилкетона $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_3$. Обнаружено А—Е-расщепление спектральных линий, обусловленное взаимодействием общего вращения с внутренним вращением метильной группы, ближайшей к карбонильной. По частотам 27 вращательных переходов с $J \leq 4$ определены спектроскопич. параметры молекулы в основном колебательном состоянии А- и Е-типов симметрии. Не возмущенные вращательные постоянные равны $A_r = 9545,236$, $B_r = 3597,020$, $C_r = 2746,617$ МГц. Высота потенц. барьера внутреннего вращения составляет 183 см^{-1} . По эффекту Штарка определены компоненты дипольного момента $\mu_b = 2,79$, $\mu_a = 0,111$ ед. Дебая.

В. И. Дронов

Резюме

Ф. 1982, 18, № 7.

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

1986

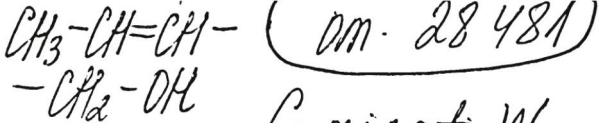
20 Б1238. Определение предпочтительных поворотных изомеров изобутиральдегида, их дипольных моментов и возбужденных колебательных состояний с помощью микроволновой спектроскопии. Preferred rotameric conformations of isobutyraldehyde, their dipole moments and vibrationally excited states by microwave spectroscopy. Stiefvater O. L. «Z. Naturforsch.», 1986, A41, № 3, 483—490 (англ.)

На микроволновом (МВ) спектрометре двойного резонанса с модуляцией частоты (Stiefvater O. L. «Z. Naturforsch.», 1975, 30a, 1742 и 1756) измерены вращат. спектры гош(г)- и транс(т)-конформеров изобутиральдегида, $(\text{CH}_3)_2\text{CHCHO}$ (I), в основном и возбужденных состояниях трех колебат. мод. Обзорные спектры и эффект Штарка изучены на обычном штарковском МВ-спектрометре. Для г-I и т-I соотв. определены вращат. постоянные в основном состоянии (МГц): $A = 7494,62(2)$

м.п., геометр.
структура

X. 1986, 19, № 20

и $7707,84(3)$, $B=4107,51(2)$ и $3736,63(2)$, $C=2980,70(2)$ и $2815,08(2)$ и дипольные моменты $\mu=2,69(3)$ и $2,86(3)$ D. Возбужденные колебат. состояния в МВ-спектрах отнесены к трем наименьшим состояниям торсионной моды, внутр. вращению CH_3 и изгибной моде CC_2 ($\nu_{18}=273 \text{ см}^{-1}$). С. Н. Мурзин



(DM. 28481)

1987

Caminati W., Velino B.,
et al.,

ув спектр
высокого
разрешения;
потенци.
поверхн.

Mol. Phys., 1987, 61, N 5,
1269-1282.

$\text{CH}_3 \cdot \text{COCH}_2\text{CH}_3$ (от. 28538)

1988

Аоздеев Н.М., Мамлеев А.Х.
и др.

Ув спектр,
строение
и
внутрен.
вращен.

Д. структур. химии,
1988, 29, N 1, 62-68.

90, N 3, 197-209.

CyH₂O

(am. 37526)

1994

Aarset K., Faxsnes L.G.,
et al.,

et al.

J. Phys. Chem., 1994, 98,
2848 - 2852.