

Ca BH

C_2H_2D ($2C-C$; $2C-H$; $2C-D$) 43771 1934
IV-

Bradley C.A., McKellar A.

Phys. Rev. 1934, 46, 236

The photographic infra-red
"absorption spectrum" of mono-
deuterioacetylene.

2

W



C.A., 1934, 60327.

1934

4379 - IV

✓ (C₂HD, C₂H₂)

Herzberg G., Patat F., Spinks J.W.T.

Nature 1934, 133, 951

"Bands of "heavy" ...

C₂DH

J

C_2H_2 (ω ; $2c-H$; $2c-c$) 11K-4378 1934

Hertzberg G., Patai F., Spinks J. W.T.

Z. Physik 1934, 92, 87-99

Rotation-oscillation bands in the
photographic infrared of molecules,

W

C.A., 1935, 2085'

2

containing the hydrogen isotope
of mass 2. The spectrum
of C_2HD and the C-C and
C-H distance of acetylene."

C_2H_2 (C-C; C-H; C-D; ^{W#-4381/1934} транзитные
исследования)

McKellar A., Bradley C.A., Jr.

Phys. Rev. 1934, 46, 664-6

The near infrared absorption
spectrum of monodeuteroacetylene

W

C.A., 1935, 2084⁸

2

[acetylene - d.] "

4383 - IV

1934

C₂HD, C₂D₂ (W)

Sutherland G.B.B.M.

Nature 1934, 134, 775-6

"Vibration spectra and ...

J

C₂DH

11-2104

1936

C_2H_2 (C-H, C-C)

C_2H_2 (Koučubík - Novák)

Henzberg G., Satoh H., Verleger H.

Z. Physik 1936, 102, 1-22

"Rotation vibrations in the ...

C_2DH

4009 - 12

1951

ω, β (C_2H_2 , C_2D_2 , C_2HD)

Plyler E.K., Gailar N.

J. Research. Natl. Bur. Standards
1951, 47, 248-51 (Research Paper N 2249)

"Near-infrared ...

C_2DH

J

11952

С. 142

Менчберг Г.

Натуре 169 997-1001

Вращ-колеб спектров и
структура простых много-
атомных молекул

СА 46 8949h
см №20

C_2H_2D ($B_0, D_0, d_i, w_i, x_{ij}$ и др. ¹⁶ 4376) 1956
Зенгер)

Allen H.C., Tidwell E.D., Plyler E.K.,

J. Amer. Chem. Soc., 1956, 78, 513,
3034-3040 (англ).

Инфракрасный спектр ацетилена- D_1 .

РЖХ, 1957, №5, 14413

W

2

C_2H_2
и-к спектр

Overend J., Thompson H.W. 1956
Proc. Roy. Soc. 1956, 234, 306

2882
11-1

Вращательно-колебательные спектры
 C_2H_2 и молекулярные взаимодействия.

Ряд спектров C_2H_2 изучен при бо́льшей
дисперсии. Уточнены значения постоян-
ных $\tilde{\nu}_i$, $B_{00000} = 0,99105$ и

$B_e = 0,9948$

$r_e(EH) = 1,058 \text{ \AA}$; $r_e(CC) = 1,205 \text{ \AA}$

4007 - 12

1960

C_2H_2 , C_2D_2 , C_2HD , HCN, DCN ()

Overend J.,

Trans. Faraday Soc., 1960, 56,
N 3, 310-314

Равновесные длины связей ...

3

C_2DH

C₂H₂

1962

14 Б151. Инфракрасный спектр ацетилен-*d*₁. Laf-fetry Walter J., Plyler Earle K., Tidwell Eugene D. Infrared spectrum of acetylene-*d*₁. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 9, 1981—1988 (англ.)

Спектр поглощения C₂HD исследован в области 1100—1300 см⁻¹ с разрешением 0,25 см⁻¹ и в области 1775—3420 см⁻¹ с разрешением 0,02 см⁻¹. На основании анализа вращательной структуры около 20 полос определены значения основных частот (в см⁻¹) ν_1 3335,62, ν_2 1853,78, ν_3 2583,60, ν_4 ¹ 518,38, ν_5 ¹ 677,77, вращательных постоянных $B_0 = 0,99156 \pm 0,00004$, $D_0 = (1,17 \pm 0,07) \cdot 10^{-6}$, постоянных взаимодействия вращения и колебаний $\alpha_1 = 0,00484$, $\alpha_2 = 0,00431$, $\alpha_3 = 0,00670$, $\alpha_4 = -0,00284$, $\alpha_5 = -0,00105$ и постоянных *l*-удвоения $q_4 = 0,00442$ и $q_5 = 0,0036$. При использовании имеющихся данных для C₂H₂ и C₂D₂ вычислены равновесные значения длин связей в молекуле ацетилена: $r_e(\text{C—H}) = 1,2036$ и $r_e(\text{C}\equiv\text{C}) = 1,0599$ А.

В. Юнгман

1399 8218-IV

X. 1963. 14

1962

C₂H₂D

Spang. u.s.

pp-8218-11

Infrared spectrum of acetylene-d₁. Walter J. Lafferty, Earle K. Plyler, and Eugene D. Tidwell (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* **37**, 1981-8(1962). The high-resolution absorption spectrum of C₂H₂D was studied, 1900-3400 cm.⁻¹ Several bands at lower frequencies were examd. with medium resolution. Nineteen bands were analyzed for their rotational constns. Combination differences of 4 transitions from the ground state were averaged and the rotational constns. $B_0 = 0.99156 \pm 0.00004$ cm.⁻¹ and $D_0 = 1.17 \pm 0.07 \times 10^{-6}$ cm.⁻¹ obtained. This B_0 value, together with those recently obtained for C₂H₂ and C₂D₂, were used to calc. the ground-state and equil. bond distances of the C₂H₂ mol. The *l*-doubling constns. for the degenerate modes were detd. to be $q_4 = 4.4_2 \times 10^{-3}$ cm.⁻¹ and $q_5 = 3.6 \times 10^{-3}$ cm.⁻¹ The frequencies of the bending modes were calcd. by use of difference bands to be $\nu_4^1 = 518.38$ cm.⁻¹ and $\nu_5^1 = 677.77$ cm.⁻¹ CA

C.A. 1962. 57. 13

16005 m

M-462

-IV

1964

C_2H_2 ; C_2HD ; C_2D_2 ; (v,)

Bottger G.L.

Doct.diss.Univ.Washington,
1964, 87pp.

Ref. "Dissert. Abstrs", 1964, 25,
N 5; 2774

Infrared spectre of solid acetylene

J
PF, 1965, 9 294

СН $\equiv$ СН

м.в. спектр
(м.н.)

1964
6 Д257. Микроволновый спектр, дипольный момент и поляризуемость дейтероацетилена. Muenter J. S., Laurie V. W. The microwave spectrum, dipole moment, and polarizability of acetylene d. «J. Amer. Chem. Soc.», 1964, 86, № 18, 3901—3902 (англ.)

Для обнаружения постоянного дипольного момента, возникающего при замещении водорода дейтерием, изучен микроволновый спектр молекулы ацетилена в области 59450,6 Мгц (переход $J=0 \rightarrow 1$). Величина постоянного дипольного момента равна 0,012 ед. Дебая, что приписано появлению дипольного момента при переходе от ацетилена к дейтероацетилену. Найденное значение вращательной постоянной $B_0 = 29753,3$ Мгц находится в согласии с данными по ИК-спектрам.

ф. 1965. 68

1964

Microwave spectrum, dipole moment, and polarizability of acetylene- d_1 . J. S. Muentert and V. W. Laurie (Stanford Univ., Stanford, Calif.). *J. Am. Chem. Soc.* 86(18), 3901-2(1964). The $J = 0 \rightarrow 1$ transition of HC:CD at 59,450.6 Mc. was observed; observation of a $\Delta J = 1$ transition is unequivocal evidence of a permanent dipole moment. Since it has been found that the dipole moment of $\text{CH}_3\text{C:CD}$ is 0.012 D. lower than that of $\text{CH}_3\text{C:CH}$, and it may be assumed that the permanent moment of HC:CD is approx. equal to the isotope shift in dipole moment of this related mol., the polarizability anisotropy, $\alpha_{33} - \alpha_{xx}$, may be calcd. to be $1.85 \pm 0.05 \times 10^{-24} \text{ cm.}^3$. The rotational const. was $B_n = 29.725.3 \pm 0.1 \text{ Mc.}$ C. L. Deasy

CHD
2
(u.b.)
B₀

C.A. 1964. 61. 11
12753h

1969

C₂ H₂

Borgest V. A.
Kolomiitsova T. D.

Ониона и чертёж,
27(2), 241.

(Coll. C₂ H₂) III

Ул - чертёж

XIV-1074

1970

C¹²₂HD

23 B262. Полосы C₂¹²HD в области 6—10 μ . Bal-
dacci Agostino, Ghersetti Sergio, Rao K.
Narahari. Bands of ¹²C₂HD in the region 6—10 μ . «J. Mol.
Spectrosc.», 1970, 34, № 2, 358—360 (англ.)

Исследована вращательная структура полос $2\nu_4^0$,
($\nu_4 + \nu_5$)⁰ и $2\nu_5^0$ молекулы C₂¹²HD (I) в области 1000—
1410 cm^{-1} . Определены молек. постоянные I: начала
полос — $1033,934 \pm 0,002$ ($2\nu_4^0$) $1200,493 \pm 0,002$ ($\nu_4 + \nu_5$)⁰,
 $1342,231 \pm 0,002$ cm^{-1} ($2\nu_5^0$) и разность вращательных
постоянных ($B' - B''$) $\times 10^3$ — $5,48$ ($2\nu_4^0$), $3,90 \pm 2$ ($\nu_4 + \nu_5$)⁰,
 $3,01 \pm 1$ cm^{-1} ($2\nu_5^0$). А. П. Александров

вращ. стр-ра
полос

X. 1970. 23

C₂HD

XIV-1071

1970

8984b Bands of $^{12}\text{C}_2\text{HD}$ in the region 6-10 μ . Baldacci, Agostino; Ghersetti, Sergio; Rao, K. Narahari (Ist. Chim. Org., Univ. Bologna, Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 34(2), 358-60 (Eng). The $2\nu_1^0$, $(\nu_4 + \nu_5)^0$, and $2\nu_3^0$ bands of $^{12}\text{C}_2\text{HD}$ occurring, resp., in the 9.7, 8.3, and 7.5- μ regions were measured and interpreted. A working resolution of ~ 0.05 cm^{-1} was obtained by using a liq. He cooled Ge:Hg detector. The measurements were accurate to ± 0.005 cm^{-1} . The mol. consts. were evaluated by using the data. BVJN

M.H.

C.L. 1970.13.2

C_2H_2

Di,

M.N.

¹⁹⁷¹
Herlock S.C., et al.

Mem. Soc. Roy.

Sci. Liege, 1941, 1,

N^o 2, 87.

($C_{22}H_2$)_{IV}

СНСД

1972

2 Д438. Анализ контура полосы ν_3 дейтероацетилена в растворах при различных температурах. Elbez Gérard Soussen-Jacob Janine, Vincent-Geisse Josette. Analyse du profil de la bande ν_3 de l'acétylène deutérié en solution, à température variable. «С. г. Acad. sci.», 1972, 275, № 6, В243—В246 (франц.)

И.К

полюса

Изучена температурная зависимость контура ИК-полосы поглощения ν_3 дейтероацетилена, растворенного в CS_2 при t -рах 203—303° К. По температурной зависимости полуширины оценен вклад вращательной диффузии в контур и вычислен барьер для переориентации молекулы. Определена часть полуширины, не зависящая от t -ры и связанная с колебательной релаксацией. Фурье-преобразованием наблюдаемых контуров вычислены автокорреляционные ф-ции дипольного момента, по этим ф-циям определены те же величины. Оба набора данных близки. Величина потенц. барьера $\sim 1,3$ ккал/моль, вклад колебательной релаксации в

полуширину $\sim 3,3 \text{ см}^{-1}$, соответствующее время релаксации $0,3 \cdot 10^{-12}$ сек. Библ. 5. М. В. Тонков

Рис 73-2

1974

C₂ A/D

Роль дейтерия в колебательном
анализе молекул с тройными связями

см. прот. III

Phibbs M. K. Robinson D. G.

"Can. J. Spectrosc" 1974, 19, N1, 29-31,
(англ. рус фр.)



X. 1974 N20.

(см C₂H₂; III)

51203.1989

TC, MGU, Ch

C₂H₂D

67891

1975

45-10563

Ghergetti Sergio, Baldacci Agostino, Giorgianni Santi, Barnes Russell H., Nara-hari Rao K. Infrared spectra of the carbon-13 isotopic varieties of acetylene, monodeuteroacetylene and dideuteroacetylene.

"Gazz. chim. ital.", 1975, 105, N 7-8,
875-900

C₂HD

ВР- XIV-6965

1970

8 Д490. ИК-полосы C₂¹²HD. Baldacci A., Gher-
setti S., Hurlock S. C., Narahari Rao K. In-
frared bands of ¹²C₂HD. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59,
№ 1, 116—125 (англ.)

С высоким разрешением получены спектры ИК-по-
глощения (600—6000 см⁻¹) газообразного монодейте-
роацетилена. По частотам нескольких тысяч колеба-
тельно-вращательных линий определены колебательные
частоты и вращательные постоянные молекулы для
~40 полос, соответствующих переходам типа $\Sigma^+ \rightarrow \Sigma^+$,
 $\Pi \rightarrow \Sigma^+$, $\Sigma^- \rightarrow \Pi$, $\Pi \rightarrow \Pi$, $\Delta \rightarrow \Pi$. По колебательным частотам
рассчитаны гармонич. частоты и параметры ангар-
моничности x и g , а из вращательных постоянных оп-
ределены величины B_0 и α . С привлечением данных для
легкого и дейтероацетилена найдены межатомные рас-
стояния ацетилена в основном и равновесном состоя-
нии. Библ. 8. М. В. Тонков

(м.н.)

ф. 1976. № 8.

C₂H₂D

B9-XIV-0965

1976

17 B255. Инфракрасные полосы ¹²C₂HD. Baldac-
ci A., Ghersetti S., Hurlock S. C., Narahari
Rao K. Infrared bands of ¹²C₂HD. «J. Mol. Spectrosc.»,
1976, 59, № 1, 116—125 (англ.)

Измерены частоты и идентифицированы несколько
тысяч линий вращательной структуры около сорока
полос ¹²C₂HD в области частот от 6000 до 600 см⁻¹.
Для всех полос определены молек. постоянные. Ис-
пользуя известные спектроскопич. данные для C₂H₂ и
C₂D₂ и МВ данные для C₂HD, а также предполагая,
что потенциальная функция и межъядерные расстоя-
ния для изотопич. образцов ацетилена одинаковы, вы-
числены равновесные величины межъядерных расстоя-
ний (в А): $r_e(\text{C}-\text{H}) = 1,06215 \pm 17 \cdot 10^{-5}$, $r_e(\text{C} \equiv \text{C}) =$

$$= 1,20257 \pm 9 \cdot 10^{-5}, \quad r_0(\text{C}-\text{H}) = 1,05703 \pm 19 \cdot 10^{-5}, \quad r_0(\text{C} \equiv \text{C}) = 1,20862 \pm 10 \cdot 10^{-5}.$$

С. Н. Мурзин

х. 1976 № 17

(м.и.)
молек.
спектр.

HCCD

1976

(vi)

Hayward R. J., et al.
Chem. Phys., 1976, 12, N4,
387-396.

(as NCCM) III

C₂H₂

1977

U. K.
energie

Adams, Jan Edward
(Ohio State Univ. Colum-
bus, Ohio). 1977. 176 pp.
(Eng).

coll. C₂H₂ - III

70425.8828
Ch, Ph, TC

41125
C₂H₂

1977
**4-1824D*

Ghersetti Sergio, Adams Jan E.,
Narahari Rao K.

¹²₂ C₂H₂ and ¹²₂ C₂HD bands at 1.1 μm¹.

"J. Mol. Spectrosc.", 1977, 64, N 1, 157-161
(англ.)

0859 фшк

(см. C₂H₂, II)

824 829 0 5 0

ВИНИТИ

C₂H₂

оттиск

7809

C₂H₂

вблизи

1979

18 Б241.

Инфракрасный

спектр

700 см⁻¹. Anttila R., Nietanen J., Kauppi-
nen J. The infra-red spectrum of C₂H₂ around 700 cm⁻¹.
«Mol. Phys.», 1979, 37, № 3, 925—935 (англ.)

На фурье-спектрометре в области частот от 600 до 750 см⁻¹ с разрешением около 0,017 см⁻¹ измерен спектр колебательно-вращательной полосы ν_5 . Идентифицировано 64 линии P- и R-ветвей и 29 линий Q-ветви. При использовании полиномиального разложения по $J(J+1)$ до 4-го порядка для P- и R-ветвей и до 2-го порядка для Q-ветви определены молек. постоянные. Для P- и R-ветвей постоянные равны в см⁻¹ $\nu_5 - (B' + D') = 677,8076(2)$, $B'' = 0,991536(8)$, $B' - B'' = -0,3771(10) \cdot 10^{-3}$, $D'' = 1,137(6) \cdot 10^{-6}$, $D' - D'' = 4,1(11) \cdot 10^{-9}$ и для Q-ветви $\nu_0 - (B' + D') = 677,8048(7)$, $B' - B'' = 3,1597(33) \cdot 10^{-3}$, $D' - D'' = 38(3) \cdot 10^{-9}$. На основе полученных данных вычислены вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения в основном и возбужденном колебательных состояниях, к-рые согласуются с известными МВ-данными. Аналогичные результаты получены для горячих полос $1\nu_5 \leftarrow \nu_5$ и $\nu_4 + \nu_5 \leftarrow \nu_4$. Рассмотрено влияние резонансов l-типа для колебательных состояний $2\nu_5$ и $\nu_4 + \nu_5$.

и.к. спектр

8706-11X

2.1979, 118

С. Н. Мурзин

C₂HD

Оттиск 4809

1979

8 Д324. ИК-спектр C₂HD в области 700 см⁻¹. Anttila R., Nietanen J., Kauppinen J. The infrared spectrum of C₂HD around 700 cm⁻¹. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 3, 925—935 (англ.)

и.к. спектр

С помощью фурье-спектрометра получены спектры газообразного C₂HD в области основного тона ν_5 . Подробно исследована вращательная структура полосы ν_5 и горячих полос $2\nu_5 \leftarrow \nu_5$ и $\nu_4 + \nu_5 \leftarrow \nu_4$. Измерены их относит. интенсивности. Определены вращательные постоянные и постоянные центробежного растяжения в основном и возбужденных состояниях. Особое внимание уделено структуре уровней $2\nu_5$ и $\nu_4 + \nu_5$, связанной с наличием резонансных взаимодействий l-типа.

Н. Филиппов

9726-118
XIV-9248



Ф.1949, N8

C_2HD

Оттиск 9278

1979

11 Б226. Инфракрасный спектр C_2HD в области фундаментального ножничного колебания ν_4 . Nieta-pen J., Anttila R., Kauppinen J. The infra-red spectrum of C_2HD in the region of the bending fundamental ν_4 . «Mol. Phys.», 1979, 38, № 5, 1367—1377 (англ.)

С использованием фурье-спектрометра получены ИК спектры $^{12}C_2HD$ в области 520 см^{-1} с разрешением, лучшим чем $0,02\text{ см}^{-1}$ при давл. 200—400 Па и длине оптич. пути 3 м. Приведены положения 39 линий для P, R, Q ветвей полосы ν_4 , а также горячих полос $2\nu_4 \leftarrow \nu_4$ и $\nu_4 + \nu_5 \leftarrow \nu_5$. Рассмотрено влияние резонансов l-типа на колебательные уровни $2\nu_4$ и $\nu_4 + \nu_5$. Вычислены колебательные постоянные для ножничного колебания и величины нек-рых колебательных термов. Б. Н. Тарасевич

И.К. Смирнов

БФ-ХИ-9344

2.1980. N11

C_2HD

1979

Kostyk E.

(Ckp)

Diss. Abstr. Int. B, 1980,
40(8), 3808-9.

(see C_2D_2 ; III)

C₂H¹⁸O

C₂D₂

omni 10936 1980

Chen

(+1) ☒

✓ 93: 194901h The ν_5^1 - ν_4^1 far-infrared bands of acetylene-d₁ and acetylene-d₂. Braund, Doris B.; Cole, Andrew R. H. (Sch. Chem., Univ. West. Australia, Nedlands, 6009 Australia). *Aust. J. Chem.* 1980, 33(9), 2053-60 (Eng). Rotational lines in the ν_5^1 - ν_4^1 band of DC:CH and DC:CD were located and measured at a spectral slit width of 0.3-0.4 cm⁻¹. Spectroscopic consts. obtained from anal. of the lines are consistent with more accurate consts. obtained from mid- and near-IR, and microwave work.

A. 1980, 93 N. 20

1980

CatHD
(creamp
nouveau.)

Colin R., et al.,
Spectres Mol. simples
Lab. Astrophys. Commun.
Colloq. Int. Astrophys.,
21st 1977 (pub. 1980),
355-84.
(Cell. CatH; III)

C_2H_2

номер 9918

1980

Kostyk E., Welsh H.

ν_2 ; ν_1
раман
спектр

Can. J. Phys., 1980, 58
912 - 920

High-resolution rotation-
-vibration Raman Spectra.

(см. C_2D_2 ; III)

C₂H₂D

1980

93: 14008v Micr. Microwave spectrum of acetylene-d in excited vibrational states. Matsumura, Keiji; Tanaka, Takehiko; Endo, Yasuki; Saito, Shuji; Hirota, Eizi (Fac. Sci., Kyushu Univ., Fukuoka, Japan 812). *J. Phys. Chem.* 1980, 84(14), 1793-1797 (Eng). The $J = 2 \leftarrow 1$ transitions of acetylene-d in the ν_4 , ν_5 , $3\nu_4(\Pi)$, and $3\nu_5(\Pi)$ states were obsd. by a Stark-modulation microwave spectrometer. From Stark effects the dipole moments were (in Debye) 0.02359(5) for ν_4 , 0.05601(9) for ν_5 , 0.09077(26) for $3\nu_4$, and 0.1472(21) for $3\nu_5$, with 2.5σ in parentheses. These obsd. moments, when analyzed by use of a linear dependence of the dipole moment on vibrational quantum nos. as predicted by a perturbation treatment, led to the ground-state moment of 0.01001(15) D and to the dipole moments of the ν_4 and $3\nu_4$ states that are opposite in direction to that of the ground state. Vibrational effects on the dipole moment were discussed in detail. Rotational consts. detd. for the 4 vibrational states were compared with IR values where available.

(M. B. Enenp)

C. A. 1980, 93 n10

C_2HD

1980

8 Б269. Микроволновый спектр ацетилена- d в возбужденных колебательных состояниях. Matsumura K., Tanaka T., Endo Y., Saito S., Hirota E. Microwave spectrum of acetylene- d in excited vibrational states. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 14, 1793—1797 (англ.)

М. П.

Измерены в области 118—121 ГГц частоты перехода $J=2 \leftarrow 1$, C_2HD в возбужденных колебательных состояниях ν_4 , ν_5 , $3\nu_4$ (П), $3\nu_5$ (П), эффект Штарка на этом переходе и т-ная зависимость интенсивности линий в диапазоне 135—200°. Анализ спектра выполнен с учетом эффектов центробежного искажения, l -удвоения и эффекта Штарка, а также зависимости параметров вращательного гамильтониана от колебательного квантового числа. С учетом квартичных центробежных постоянных, оцененных на основе имеющихся ИК-данных,

Х. 1981 № 8

определены вращательные постоянные в исследованных
 колебательных состояниях, соотв., $B=29803,003(6)$,
 $29766,750(4)$, $29969,052(43)$ и $29861,189(27)$ МГц.
 В предположении линейной зависимости дипольного мо-
 мента от колебательных квантовых чисел для всех
 состояний, соотв., определены дипольные моменты
 $(\nu_4) = -0,02359(5) D$, $\mu(\nu_5) = 0,05601(9) D$, $\mu(3 \nu_4) =$
 $= 0,09077(26) D$, $\mu(3 \nu_5) = 0,1472(21) D$, и вычислено
 значение дипольного момента в основном состоянии
 $\mu = 0,01001(15) D$.

С. Н. Мурзин

C₂HD

М.П.

12 Д471. Микроволновый спектр ацетилена-d в возбужденных колебательных состояниях. Microwave spectrum of acetylene-d in Excited vibrational states. Matsumura Keiji, Tanaka Takehiko, Endo Yasuki, Salto Shuji, Hirota Eizi. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 14, 1793—1797 (англ.)

Изучены полосы вращательных переходов $J=2 \leftarrow 1$ (область ~ 120 Гц) газообразного ацетилена-d (C_2HD) в возбужденных колебательных ν_4 , ν_5 ($T \sim 25^\circ C$), $3\nu_4$ и $3\nu_5$ ($T \sim 100-200^\circ$)-состояниях. Исследование проводилось на спектрометре со штарковской модуляцией (частота модуляции 100 кГц), напряженность электрич. поля в штарковской ячейке 1,7—8,7 кВ/см. Рассчитаны значения вращательных постоянных для всех четырех изученных колебательных состояний, полученные данные хорошо согласуются с результатами анализа ИК-спектров поглощения. По эффекту Штарка определены величины дипольных моментов, они оказались равными 0,02359; 0,05601; 0,09077 и 0,1472 ед. Дебая для колебательных состояний ν_4 , ν_5 , $3\nu_4$ и $3\nu_5$ соответственно. С учетом линейной зависимости дипольного момента от колебательного квантового числа дипольный момент молекулы в основном колебательном состоянии оценен в 0,01001 ед. Дебая.

В. В. Белякова

1980

Ф. 1980
N 12

C_2HD

1981

Watson J. K. G.

раб. н.
м. н.

Mol. Phys., 1981, 44
N3, 623 - 627.

●
(ср. C_2H_2 ; III)

C_2H_2

1982

Domingo C., Escribano
R., et al.

спектр

J. Chem. Phys., 1982,
77, N 9, 4353-4359.

(сст. C_2H_2 ; III)

Оттиск 13746

1982

CaH_2

Mertan M., Colin R.

спектр
поглощения
высокого
расширения.

Physica Scripta, 1982,
25, 275-290.

Ридберг
Серии

C₂H₂

Lomnick 11351 1981.

Kerman M., Colin R.

спектр
полюс,
вертикаль

J. Mol. Spectrosc.,
1981, 85, 449-51.

HCCD
HCCH

1983.

Om. 16681

(C-H
u

C-D coreban)

' 98:151883q Local mode predictions for excited stretching vibrational states of acetylene (HCCD) and $H^{12}C^{13}CH$). Halonen, L.; Noid, D. W.; Child, M. S. (Theor. Chem. Dep., Univ. Oxford, Oxford, UK OX1 3TG). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(5), 2803-4 (Eng). A simple potential model for the stretching vibrational states of HCCH was extended to HCCD and $H^{12}C^{13}CH$ and the results are in excellent agreement with recent observations by photoacoustic spectroscopy. The Hamiltonian was diagonalized in a bond oscillator basis, using Morse eigenfunctions for CH (and CD) vibrations. Convergence to within 5 cm^{-1} even for the highest levels was achieved by including in the basis all CH(CD) functions with $v_1 + v_3 \leq 10$ and all CC functions with $v_2 \leq 10$.

C.A. 1983, 98, N18.

НССЯ

От. 16681

1983

10 Д71. Локальные моды для возбужденных состояний валентных колебаний в молекулах HCCD и $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$. Local mode predictions for excited stretching vibrational states of HCCD and $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$. Halonen L., Noid D. W., Child M. S. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2803—2804 (англ.)

расчет ε_i, ν_i

Проведен квантовый расчет уровней энергии возбужденных валентных состояний колебаний для молекул HCCD и $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$. Использовался предложенный ранее («Mol. Phys.» 1982, 47, 1097) потенциал взаимодействия, усредненный по низшему деформационному состоянию молекул. Диагонализация матрицы гамильтониана проводилась на базисе морзевских ф-ций для C—H(D)-колебаний и ф-ций гармонич. осциллятора для C—C-колебаний. Рассчитанные уровни энергии хорошо согласуются с эксперим. значениями. А. А. Зембеков

Ф. 1983, 18, N 10

НССА
НССН

16681 1983

18 Б209. Расчеты энергий возбужденных валентных колебательных состояний HCCD и $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$ в рамках модели локальных колебаний. Local mode predictions for excited stretching vibrational states of HCCD and $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$. Halonen L., Noid D. W., Child M. S. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2303—2304 (англ.)

В рамках модели локальных колебаний с использованием потенциальной функции, в к-рой колебания CH (CD) описываются функцией Морзе, а колебания CC — гармонич. функциями, рассчитаны энергии вал. кол. состояний ν_1 , ν_2 , ν_3 молекул $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$ (I) и HCCD (II) с $\nu_1=0-6$, $\nu_2=0-2$, $\nu_3=0-6$. Согласие с экспериментом в пределах 5 см^{-1} получено при использовании параметров функции Морзе: $D (10^4 \text{ см}^{-1}) = 5,2715$ (I) и $5,2189$ (II); $a (\text{Å}^{-1}) = 1,73863$ (I) и $1,74985$ (II). Приведены параметры потенциальной функции CC -колебаний.

А. Н. Курский

и, потенци-
альные

(H) X

X. 1983, 19, N 18

C_2HD

1983

Lehmann K.K., Scherer
G.J., et al.

M.N.

J. Chem. Phys., 1983,
79, N3, 1369-1376.

(C_{2}H_2 ; III)

МССА

От 20359

1984

Д56. Алгебраический модельный гамильтониан для неэквивалентных локальных колебаний и его применение к молекулам HCCD и $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CD}$. A model algebraic Hamiltonian for interacting nonequivalent local modes with application to HCCD and $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CD}$. Benjamin I., van Roosmalen O. S., Levine R. D. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 3352—3353 (англ.)

Е, И. П.

Гамильтониан локальных колебаний, учитывающий кватертичный ангармонизм и содержащий 4 параметра, применен для расчета энергии уровней валентных колебаний молекул HCCD и $\text{H}^{12}\text{C}^{13}\text{CH}$. Расчеты выполнены для 27 уровней с энергией вплоть до $20\,000\text{ см}^{-1}$. Расхождение между вычисленными и измеренными значениями энергии уровней составляет около 3 см^{-1} .

М. Р. Алиев

Ф. 1985, 18, № 4.

НССД

(От. 20359)

1984

БЫ1082. Модельный алгебраический гамильтониан для взаимодействующих неэквивалентных локальных колебаний с применением к НССД и $H^{12}C^{13}CH$. A model algebraic Hamiltonian for interacting nonequivalent local modes with application to HCCD and $H^{12}C^{13}C$. Benjamin I., van Roosmalen O. S., Levine R. D. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 3352—3353 (англ.)

Развитый ранее алгебраич. подход к описанию ангармонич. локальных колебаний («Chem. Phys. Lett.», 1983, 105, 212) применен к анализу эксперим. данных по обертонам НССД и $H^{12}C^{13}CH$. Введенная модель позволила описать 13 экспериментально известных колебательных переходов в НССД и 9 в $H^{12}C^{13}CH$ (включающих обертоны вплоть до шестого) при использовании шести параметров в модельном алгебраич. гамильтониане. Б. И. Жилинский.

Х. 1985, 19, № 6

C₂HD

1984

5 Б1242. Постоянные ядерного квадрупольного взаимодействия дейтерия в колебательно-возбужденных C₂HD. Доказательство перегруппировки электронов. Deuterium nuclear quadrupole coupling constants in vibrationally excited C₂HD: Evidence for electron reorganization. Marshall Mark D., Klemperer William. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 2928—2932 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молек. пучках измерена ядерная СТС спектров *l*-удвоения монодетероацетилен в колебательно-возбужденных состояниях $\nu_4=1$ (деф. колеб. C—D) и $\nu_5=1$ (деф. колеб. C—H). Значения параметров СТС: $\nu_4=1-eqQ_{aa}^D=297$, $eqQ_{bb}^D-eqQ_{cc}^D=-31$, $C_D=-6$ (все в кГц), $\mu=0,02359$ Д, $q=133,0506$, $g_I=133,0529$ (в МГц); $\nu_5=1-eqQ_{aa}^D=221$, $eqQ_{bb}^D-eqQ_{cc}^D=-6$, $C_D=-1,5$, $C_H=-20,0$, $\mu=0,05624$, $q=105,6993$, $q_I=105,7015$. Согласно полученным данным электронное распределение вокруг ядер дейтерия не имеет цилиндрич. симметрии для этих возбужденных колебательных состояний. В. М. Ковба

М.П.

X. 1985, 19, 25

C₂H₂D

1984

3 Л190. Константы ядерного квадрупольного взаимодействия дейтерия в колебательно-возбужденных молекулах C₂HD: подтверждение наличия электронной реорганизации. Deuterium nuclear quadrupole coupling constants in vibrationally excited C₂HD: Evidence for electron reorganization. Marshall Mark D., Klemperer William. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 2928—2932 (англ.)

ИК-спектры C₂HD в области полос $\nu_4=1$ (вал. кол. C—D) и $\nu_3=1$ (вал. кол. C—H) исследованы с разрешением, достаточным для определения констант ядерного квадрупольного взаимодействия. Результаты проанализированы с точки зрения распределения электронной плотности вокруг ядер дейтерия. Показано, что предположение о цилиндрич. распределении электронной плотности вокруг C—D-связи в колебательно-возбужденных состояниях противоречит полученным результатам. Показано также, что отклонение от цилиндрич. симметрии связано с искажениями поперечного сечения электронного распределения, не сопровождающимися изменениями распределения вдоль оси C—D-связи.

В. С. Иванов

Рi, м.п;

ф. 1985, 18, № 3

GHD

(DM 28329)

1987

Ashfold M. N. R., Titcher B.,

Руберг
СОСНАМ.

J. Chem. Phys., 1987, 87,
N 9, 5105-5115.

C_2H_2

1988

Тюков А. Д., Вандышева
Т. А. и др.

Матер. 8 Всес. симп. по
сп. н. спектроскопии высок. раз-
решения. Ч. 2. Томск, 1988.

С. 59-66.

● (сер. CO_2 ; III)

CaH₂D

(om. 29123)

1988

опущенный

Ohsugi Y., Kitamura A.
et al;

ИК спект.
лазерный

спектр,

J. Mol. Spectrosc.,
1988, 128, N 2,

$3\nu_1 + \nu_3$,

и.п.

592-593.

CaHPO

[om. 29615]

1988

Weber A.,

адгези.
Синков.
стат.
веса.

J. Chem. Phys., 1988,
88, N 6, 3428-3433



СМА

ОМ 32642

1989

7 Б1205. A^1A'' электронное состояние монодейтерированного ацетилена. The A^1A'' electronic state of monodeuterated acetylene / Auwera J. V., Huet T. R., Herman M., Hamilton C., Kinsey J. L., Field R. W. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 137, № 2.— С. 381—395.— Англ.

Исследованы спектры лазерного возбуждения Фл при сверхзвуковом расширении паров и электронные спектры поглощения с высоким разрешением монодейтерированного ацетилена, C_2HD (I) в обл. электронного перехода $\tilde{A}-X$ ($42\,200-47\,000\text{ см}^{-1}$). Проведен колебательно-вращат. анализ спектров I, предложена интерпретация переходов с участием всех 6 нормальных колебаний I в состоянии $\tilde{A}$. Для возбужденного электронного состояния I рассчитаны вращат. и колебат. постоянные. Набор фундаментальных частот I в возбужденном электронном состоянии проверен на выполнение изотопич. правила Теллера—Редлиха и оценки неизвестных частот колебаний в возбужденном электронном состоянии молекул C_2H_2 и C_2D_2 .

Г. М. Курамшина

М.Н.

Х. 1990, № 7



(OM 34140)

1989

Erwin K.M., Ho J., et al.

J. Chem. Phys., 1989, 91,
N10, 5974-5992.

CHKKMP

A study of the singlet
and triplet states of vinyl-
lidene by photoelectron spec-
troscopy of $\text{H}_2\text{C}=\text{C}^-$, $\text{D}_2\text{C}=\text{C}^-$.

and $HDC = C^-$

Vinylidene-acetylene isomerization.

C₂H₂

1989

/ 111: 204423k The A¹A" electronic state of monodeuterated acetylene. Vander Auwera, J.; Huet, T. R.; Herman, M.; Hamilton, C.; Kinsey, J. L.; Field, R. W. (Lab. Chim. Phys. Mol., Univ. Libre Bruxelles, 1050 Brussels, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 137(2), 381-95 (Eng). Eighty-six vibronic subbands of the A-X system of C₂H₂ were assigned, in the conventional high-resoln. absorption spectrum and in the jet-cooled laser fluorescence excitation spectrum, between 42200 and 47000 cm⁻¹. Transitions involving all 6 normal modes of vibration in the A state were assigned, leading to the detn. of an extensive set of vibrational parameters. Isotopic comparisons were used to predict still unknown vibrational frequencies in the A state of C₂H₂ and C₂D₂.

фоновая
по спектру.

с. А. 1989, 111, N 22

GAH

1989

transm-
no cmol

/ 110: 201852t The rotational constants of acetylene-d. Włodarczyk, G.; Demaison, J.; Burie, J.; Lasne, M. C. (Lab. Spectrosc. Herzienne, Univ. Lille I, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *Mol. Phys.* 1989, 66(3), 669-73 (Eng). The rotation spectrum of acetylene-d was measured up to 418 GHz in its visible ground state and in its degenerate excited states $v_4 = 1$ and $v_5 = 1$. These data were combined with the high resolu. IR measurements of the v_4 and v_5 bending vibrations to det. with high accuracy the rotational and centrifugal distortion consts.

C.A. 1989, 110, N 22

LiAD

[Dm. 36204]

1991

Herman M., Abouuti Timsa-
nari M., et al.,

Chem. Phys. Lett. 1991,
185, N3-4, 215-219

Near-infrared absorption

spectroscopy.
of CaH_2 .

The $n=4$ polyad

HCCD^+

[om. 36426]

1991

лаборатор. Rösslein M., Jagod Mary-
ИК спектр Frances, et al.,
М. П. Astrophys. J., 1991, 382,
основн. N1, L51 - L53.
сост.

Laboratory Infrared Spectra of
 CH_2A^+ and  HCCD^+ and

predicted microwave
transitions.

C₂H₂D

1991

115: 81190e Rotational parameters for acetylene-d(C₂HD) in the $\bar{A}^1A''$ electronic state. Vander Auwera, J.; Huet, T. R.; Tamsamani, M. Abbouti; Herman, M. (Lab. Chim. Phys. Mol., Univ. Libre Bruxelles, 1050 Brussels, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 148(1), 93-9 (Eng). The rotational anal. of the conventional absorption spectrum of C₂HD was attempted between 42,600 and 47,000 cm⁻¹. Despite a very high spectral line d., rotational parameters could be obtained for the $N\nu'_3$ ($n = 1, 2, 4$), $\nu'_2 + n\nu'_3$ ($n = 2, 3$), $\nu'_6 + N\nu'_3$ ($n = 1-3$) vibrational levels of the $\bar{A}^1A''$ electronic state.

$\bar{A}^1A''$

M.N.
C.A. 1991, 115, N 8

HCCD

1992

Forney D., Jacox M.E.,
et al.

ref. n. J. Mol. Spectrosc. 1992.
153, N 1-2. C. 680-691.

( C₂ H₂ ; III)

СМЖ

От 37191

1993

22 Б1238. Спектр поглощения C_2HD между 9000 и 13 000 cm^{-1} . The absorption spectrum of C_2HD between 9000 and 13 000 cm^{-1} /Temsamani M. A., Auwera J. V., Herman M. //Mol. Phys. .—1993 .—79 ,№ 2 .—С. 359—371 .—Англ.

С разрешением до 0,003 cm^{-1} на фурье-спектрометре измерен спектр поглощения дейтероацетилена C_2HD в области 9100—12 800 cm^{-1} . Наблюдали 29 полос. Для 25 возбужденных колебат. уровней определены вращат. параметры, а для 27 — определены абс. интенсивности переходов. Обсуждено отнесение колебаний и происхождение наблюдаемых колебательно-вращат. возмущений.

Б. В. Локшин

Спектр
поглощения

Х. 1993, N 22-24.

C₂H₂D

Om 37191

1993

119: 127323p The absorption spectrum of acetylene-d (C₂H₂D) between 9000 and 13,000 cm⁻¹. Tamsamani, M. Abbouti; Vander Auwera, J.; Herman, M. (Lab. Chim. Phys. Mol., Univ. Libre Bruxelles, 1050 Brussels, Belg.). *Mol. Phys.* 1993, 79(2), 359-71 (Eng). Twenty-nine bands of the Fourier transform spectrum of C₂H₂D between 9100 and 12,800 cm⁻¹ are obsd. at high resolu. Rotational parameters are derived for 25 excited vibrational levels and abs. intensities are detd. for 27 of the obsd. transitions. The vibrational assignments are discussed, as well as the origin of reported rovibrational perturbations.

(Vi)

C.A. 1993, 119, N12

C2H2

Tobiason J.D., Metz A.L.,
et al., 1993

Pi, We, J. Chem. Phys. 1993, 99(8),
Chem. Abstr. 5762-7.

(Cell. C2H2  ; III)

C₂H₂

1995

122: 117868t Overtone spectroscopy and dynamics in monodeuteroacetylene (C₂HD). Lievin, J.; Abbouti Temsamani, M.; Gaspard, P.; Herman, M. (Laboratoire de Chimie Physique Moléculaire CPi 160/09, Université Libre de Bruxelles, Roosevelt ave., 50, B-1050 Brussels, Belg.). *Chem. Phys.* 1995, 190(2,3), 419-45 (Eng). Complementary exptl., ab initio and dynamic studies are reported on monodeuteroacetylene, C₂HD (X ¹Σ⁺). All exptl. spectroscopic results previously reported in the literature on C₂HD, i.e. from 500 to 16000 cm⁻¹ are gathered. New results are included, which are obtained from the anal. of absorption data recorded with a Fourier transform interferometer at high resolu. between 4600 and 9000 cm⁻¹. The presence of numerous weak bands along the whole spectral range is analyzed in terms of systematic anharmonic couplings. The entire set of energy data is then used to produce thirty-five vibrational frequencies and anharmonicities from a fit of the vibrational energies to a Dunham-type expansion, and the vibrational level d. is extrapolated, up to higher energy. One- and 2-dimensional potential energy and dipole moment surfaces refined from new ab initio results are fitted to a selected set among those exptl. data, assocd. to the stretch overtones. The iterative procedure

CH₂MP 8

ORA. 500 -
- 16 000 cm⁻¹

ORA. 4600-9000
cm⁻¹

C.A. 1995, 122, N 10

involving an original package of computer programs is described. The evolution of the overtone intensities of the CH and CD stretches, up to $v = 4$, is interpreted on that basis in terms of elec. and mech. anharmonicity contributions. Eventually, dynamic aspects are studied thanks to the newly introduced vibrograms, which allow to obtain the time recurrences of the vibrational dynamics. Using the Gutzwiller and Berry-Tabor trace formulas, these vibrational recurrences are semiclassically assigned to periodic orbits of the classical Hamiltonian given by the Dunham expansion.

F: C2HD

1999

P: 3

132:56355 Ultrasensitive frequency-modulation
spectroscopy enhanced by a high-finesse optical
cavity: theory and application to overtone
transitions of C₂H₂ and C₂H_D. Ma, Long-Sheng; Ye,
Jun; Dube, Pierre; Hall, John L. JILA,
University of Colorado and National Institute of
Standards and Technology Boulder, CO 80309-0440,
USA J. Opt. Soc. Am. B, 16(12), 2255-2268
(English) 1999 The sensitivity of FM
spectroscopy can be dramatically enhanced by location
of the sample in a high-finesse cavity, for example,
~5 orders of magnitude. To avoid conversion of laser
frequency noise into amplitude noise by the cavity,
the authors choose the radiofrequency modulation
frequency to match the cavity's free spectral range.
In this way small frequency fluctuations produce no

C.A. 2000, 132

addnl. noise, and a pure FM dispersion signal is recovered in transmission. The authors present a systematic study of the detection sensitivity, signal line shape and size, and slope at the central tuning.

Exptl., using a weakly absorbing gas such as C_2H_2 or C_2HD placed inside an external high-finesse resonator, the authors obtained an integrated absorption sensitivity of 5 .times. 10^{-13} (1 .times. $10^{-14}/cm$) for the gas's weak near-IR mol. overtone transitions. As an interesting application, a Nd:YAG laser was well stabilized on the P(5) line of the C_2HD ($\nu_2 + 3\nu_3$) band by this technique. The high attainable sensitivity permitted selection of slow mols. with low power and gas pressure to give a linewidth 13 times below the room-temp. transit-time limit.