

CR 43

CH₃D (J ; τ_{C-H} ; τ_{H-H}) R-966 1935

CH₂D₂ (J)

Ginsburg H., Barker E.F.

J. Chem. Physics 1935, 3, 668-74.

"Infrared absorption spectrum of ...



C.A., 1936, 381⁹

H0

CD/H3

CH_3D (w) 11-967

1935

MacWood G. E., Urey H. C.

J. Chem. Physics 1935, 3, 650-1

"Raman spectrum of methyl
deuteride [methane-d.]"

to 2

C. A., 1935, 77996

CH_3D (2C-H)

965-IV

1939

Childs W.H.J., Yahn H.A.

Proc. Roy. Soc. (London) 1939, A169, 428-37.

The spectrum of monodeuterio-methane [methane-d^1] in the photograph infrared. Preparation of the gas, and

10

2

C.A., 1939, 3693 5

measurements of a simple band
at 9021 cm^{-1} ."

CH_3D

$\text{C}^3\text{H}_2\text{D}_2$

$\text{C}^3\text{H}_2\text{D}_3$

958-63

(min)

Kuma Shimanouchi 1943
лето и зимы

Shimanouchi T.

Bull. Inst. Phys. Chem.
Res. Tokyo, 1943, 22 (11)
958-63

CH_3D
 CH_2D_2

Li
суд. акт

6511-11

kurara Shimanoichi 1949
суд. у. упр. в. у. у.

Shimanoichi T.

J. Chem Phys, 1949
17 (3), 245-48

W-954

J (CD_4 , CH_3D , CH_2D_2 , CHD_3)

1952

Lossing F.P., Tickner A.W., Bryce W.A.

J.Chem.Phys. 1952, 20, 537

"Erratum: Ionization potentials ...

G.A., 1952, 5429a

CDH_3

10

CH_3D (ν_i , β' , $\mathcal{D}'_y$, $\mathcal{D}'_{yk}$, β'' , $\mathcal{D}''_y$, $\mathcal{D}''_{yk}$ 1953
 $\text{A}'-\text{A}''$, $\tau_{\text{C-D}}$)
 CH_3F ($\mathcal{D}''_J$)

Boyd D.R.J., Thompson H.W.

Trans. Faraday Soc., 1953, 49, N 11,
 1281-1284 (*ann.*)

PX., 1954, N 12, 30236

10

CDH_3

CH₃D (Ze, De, Be) IV-963

1953

Boyd D. R. J., Thompson H. W.

Proc. Roy. Soc., 1953, A216, N 1125, 143-152 (aniz.)

A vibration-rotation band of monodeuteromethane.

P. M. X., 1953, N1, 75.

10

2

9281

-IV

1957

 $\text{CH}_4, \text{CH}_3\text{D}, \text{CH}_2\text{D}_2, \text{CD}_3\text{H}, \text{CD}_4$ (Di)

Wilshurst J.K., Bernstein H.J.
 Canad. J. Chem., 1957, 35, N 3,
 226-235

The infrared spectra ...

J

Ч.С. Allen, E.K. Ryle

1959

J. Res. NBS, 63A, 145-52

Качеб. вращ. полосы в спектре
дейтерированных метанов.

$\nu_0 = 3,880 \text{ см}^{-1}$ CH_3D

$\nu_0 = 3,278 \text{ см}^{-1}$ CH_2D_2

Brodersen S., Richardson S.H., ¹⁹⁵⁹ ~~Chemical~~

CH_3D

Spectrochim. acta, 1959, 763

центр координат. расщ. излучения CH_3D
кр. координ.

612-11

CH_3D (СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ, ω_i, ν_i ; 1959

вращ. пост., $\frac{F^0 - E^0}{T}$, $\frac{F^1 - E^0}{T}$, S^0, C_p)

Jones L.H., McDowell R.S.

J. Molec. Spectrosc., 1959, 3, N 6,

632-653

СИЛОВЫЕ ...

РХ., 1960, N 16, 64266

CH₃D

1960

The degenerate C—H stretching fundamental of CH₃D. Llewellyn H. Jones (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *J. Mol. Spectroscopy* 4, 84-91(1960); cf. CA 55, 10064a.—The absorption spectrum of the perpendicular CH stretching vibration-rotation band of MeD was studied from the standpoint of ζ value and other rotational consts. Previously detd. ζ values (Ginsburg and Barker, CA 30, 381⁸) in the range of 0.2 were found to be high; the value obtained in this study was approx. 0.086 (in good agreement with the value calcd. from the force consts.). The spectrum of MeD obtained on a medium-resolution double-pass grating spectrometer is illustrated, 2990-3120 cm.⁻¹, and observed and calcd. frequencies and calcd. intensities for a portion of the spectrum are tabulated. Results are interpreted theoretically.

Robert A. Bleidt

C.A. 1961.55.14.13053i

14-639

CH₃D (CINCINNATI POST., O., 21j) 1960

Mills T.M.

Spectrochim. Acta, 1960, 16, B 1-2,

35-48

Спектроскопические данные ...

EX., 1960, 21, 8370

10

1960

CH₃D
CH₂D
CHD₃

► Vibrational intensities and bond moments in deuteriated methanes. Robert E. Hiller, Jr., and Joseph W. Straley (Univ. of North Carolina, Chapel Hill). *J. Mol. Spectroscopy* 5, 24-34(1960).—The intensities of infrared absorption bands in MeD, CH₂D₂, and CHD₃ were measured by the method of Wilson and Wells (CA 41, 1556h). These data yield alternate solutions for bond moment and bond deriv., one of which appears to lie outside exptl. error. The favored solution is $\mu_{CH} = \pm 0.33$ D. and $(\partial\mu/\partial r)_{CH} = \mp 0.61$ D./Å. The conclusion of Coulson (CA 37, 559²) that the CH bond moment has a polarity of C⁺H⁻ favors the upper combination of signs. P. M. B.

C.A. 1961.55.23

23048 i-23049a

CH_3D

Kuchitsu K

Bartell L.S. 1962

J. Phys. Soc. Japan, 1962, 17, Suppl. B-II

23-7

(II) CH_4

CH₃D

B9-IV-8251

1962

Spence
Heg

The absorption spectrum of monodeuteromethane at 3000 cm.⁻¹ E. C. Leisegang (Univ. Cape Town, S. Africa). *J. S. African Chem. Inst.* 15, 70-7(1962). The *P* and *R* sub-bands are clearly resolved for a perpendicular infrared band of CH₃D. The following consts. in cm.⁻¹ were detd.: $\nu_0 = 3016.7_5$, $A' = 5.24_2$, $A'' = 5.22_2$, $B' = 3.86_4$, $D'' = D'_J = 5 \times 10^{-5}$, $D''_{JK} = D'_{JK} = 3 \times 10^{-4}$, $D''_K = -0.9 \times 10^{-4}$, $D'_K = -1.5 \times 10^{-4}$, $L = 0.0726_3$. Quantum mech. calcns. of band intensity and position showed agreement with observed values.

P. H. Lewis

C.A. 1963-58.11

10872 f

CH₃D

Спектр

ВЗ-IV-8251

1962

22 Б132. Спектр поглощения монодейтерометана при 3000 см⁻¹. Leisegang E. C. The absorption spectrum of monodeuteromethane at 3000 cm⁻¹. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1962, 15, № 2, 70—77 (англ.; рез. африк.)

Измерена тонкая структура перпендикулярной полосы 3016,7₅ см⁻¹ в спектре поглощения CH₃D, полученном с высоким разрешением в области 2920—3114 см⁻¹, в газообразном состоянии и вычислены следующие значения постоянных для этой полосы (в см⁻¹): $A'' = 5,24_2$, $A' = 5,22_2$, $B'' = 3,87_6$, $B' = 3,86_4$, $D''_J - D'_J = 5 \cdot 10^{-5}$, $D''_{JK} = D'_{JK} = 3 \cdot 10^{-4}$, $D''_K = -0,9 \cdot 10^{-4}$, $D'_K = -1,5 \cdot 10^{-4}$. Постоянная кориолисова взаимодействия для этой полосы $\zeta = 0,0726_3$. Найденное значение B'' соответствует величине $r(\text{C}-\text{H}) = 1,09_4$ А, что хорошо согласуется с результатами измерений, полученных ранее.

В. Юнгман

x. 1963.22

ВФД-8251-IV

1962

C₁H₃D

ИК спектр

7 Д246. Спектры поглощения монодейтерометана около 3000 см^{-1} . Leisegang E. C. The absorption spectrum of monodeuteromethane at 3000 см^{-1} . «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1962, 15, № 2, 70—77 (англ.; рез. африк.)

Получена и интерпретирована перпендикулярная полоса монодейтерометана, расположенная около 3016,7 см^{-1} . Полученный спектр представляет, вероятно, единственный случай хорошего разрешения *P*- и *R*-субполос, позволяющего дать детальную интерпретацию спектроскопич. констант, включая коэф. кориолисовой связи. Квантовомеханич. теория находится в хорошем согласии с измеренными значениями интенсивностей и положений полос.

Ф. 1963.4

CH₃D

спектр 4
структура

ВФ-9840-IV

1 Д151. Спектр комбинационного рассеяния монодеу-
терометана. Richardson E. H., Brodersen S.,
Krause L., Welsh H. L. The Raman spectrum of mo-
nodeuteromethane. «J. Molec. Spectrosc.», 1962, 8, № 5,
406—425 (англ.)

Спектр комб. рас. CH₃D сфотографирован в газе при
давл. 1 атм при помощи спектрографа с решеткой. Ли-
нейная дисперсия прибора изменяется от 6 см⁻¹/мм
в области 4358 Å до 3 см⁻¹/мм при 5100 Å. Наблюдается
обширная вращательная структура для полос ν₂ и ν₄.
Частично разрешаются Q-ветви для ν₁ (2970 см⁻¹), 2 ν₃
и 2 ν₆; два последних перехода возникают вследствие
резонанса Ферми с ν₁ и ν₂ соответственно. Анализ вра-
щательной структуры полос ν₂ и ν₄ произведен при по-
мощи электронной машины по методу наименьших
квадратов. Предварительный расчет контура полосы ν₄
произведен на основе приближенных значений молекуляр-
ных констант. Основные константы, полученные из ана-
лиза спектра: A₀=5,243, B₀=3,878 см⁻¹, ξ₄=0,0775,
r₀(C—H)=1,0937±0,0002. r₀(C—D)=1,0928±0,0002 Å

1962

ВФ-9840-IV

ф. 1963. 1А

См. табл.

(принимая угол CHD тетраэдрическим). Начала полос ν_2 и ν_4 приходятся на 2200,0 и 3016,59 см^{-1} соответственно. Сильная линия, наблюдаемая вблизи начала полосы ν_4 , указывает, по-видимому, на нарушение правила отбора $\Delta K=0$.

1962

CH₃D

Raman spectrum of monodeuteromethane. E. H. Richardson, S. Brodersen, L. Krause, and H. L. Welsh (Univ. Toronto, Can.). *J. Mol. Spectry.* 8, 406-25(1962); cf. Allen and Plyler, *CA* 54, 9493c. MeD was studied by means of a multiple reflection type Raman tube, 115 cm. long, with a vol. of 1.6 l. and illuminated with 3 helical H₂O-cooled Hg lamps. Spectra photographed with a grating spectrograph gave a reciprocal linear dispersion ranging from 6 cm.⁻¹ (at 4358 Å.) to 3 cm.⁻¹ (at 5100 Å.); microphotometer tracings of the spectra are illustrated. Extensive rotational structure observed for the ν_2 and ν_4 bands was analyzed by a least sqs. method with a computer and assignments of the ν_4 band in both the 1968-2399 and 2804-3273 cm.⁻¹ regions are tabulated. Mol. consts. obtained from the ν_2 infrared and Raman bands are given. Partially resolved Q branches were recorded for ν_1 , $2\nu_5$, and $2\nu_6$, but ν_3 , ν_5 , and ν_6 were not observed. Robert A. Bleidt

11-0486-12
899-9840-12

C.A. 1962.57.6

6766cd

CH₃D

18900 THE RAMAN SPECTRUM OF MONODEUTERO-METHANE. E. H. Richardson, S. Brodersen, L. Krause, and H. L. Welsh (Univ. of Toronto). J. Mol. Spectroscopy, 8: 406-25(May 1962).

The Raman spectrum of CH₃D was photographed at a gas pressure of ~1 atm. with a reciprocal linear dispersion of 3 to 5 cm⁻¹ per mm. Extensive rotational structure was observed for the ν_2 and ν_4 bands and analyzed by a least squares method with an electronic computer. Assignment of the lines of the ν_4 band was facilitated by intensity profiles of the band electronically computed from approximate values of the molecular constants. Essential constants obtained from these analyses are: $A_0 = 5.243$, $B_0 = 3.878$ cm⁻¹, $\zeta_4 = 0.0775$, $r_0(\text{C-H}) = 1.0937 \pm 0.0002$, $r_0(\text{C-D}) = 1.0928 \pm 0.0002$ Å (assuming a tetrahedral HCD angle). The band origins of the ν_2 and ν_4 bands are at 2200.00 and 3016.59 cm⁻¹, respectively. A strong line observed near the band origin of the ν_4 band appears to indicate a breakdown of the $\Delta K = 0$ selection rule. The ν_1 , $2\nu_5$, and $2\nu_6$ bands were also observed. (auth)

NSA-1962.

16.15

1962
B92-9840-11

CH₃D

1962

12 Б110. Спектр комбинационного рассеяния монодейтерометана. Richardson E. H., Brodersen S., Krause L., Welsh H. L. The Raman spectrum of monodeuteromethane. «J. Molec. Spectrosc.», 1962, 8, № 5, 406—425 (англ.)

Снят спектр комб. расс. CH₃D при давл. ~1 атм с обратной линейной дисперсией 3—5 см⁻¹/мм. Обнаружена богатая линиями вращательная структура полос ν_2 и ν_4 , которая подвергнута анализу методом наименьших квадратов с помощью электронной вычислительной машины. При отнесении линий полосы ν_4 использовались данные предварительного расчета распределения интенсивности, основанного на приближенных значениях молекулярных постоянных. Получены следующие значения постоянных: $A_0 = 5,243$; $B_0 = 3,878$ см⁻¹, $\xi_4 = 0,0775$; $r_0(\text{CH}) = 1,0937 \pm 0,0002$; $r_0(\text{CD}) = 1,0928 \pm 0,0002$ А. Все углы при вычислениях предполагались тетраэдрическими. Значения ν_2 и ν_4 равны соответственно 2200,00 и 3016,59 см⁻¹. Наличие сильной линии около начала полосы ν_2 указывает на нарушение правила отбора $\Delta K = 0$. В спектре обнаружены также полосы ν_1 , $2\nu_5$ и $2\nu_6$.

Резюме авторов

Ж. 1964. 12

CH₃ D

cu. noem.

11-683-14
BQ-14683-14

Venkateswarlu K.,
Thanalakshmi M.R.

1962

Acta. phys. polon,
1962, 22, N5, 423.

(cu. SiHCl₃)_{II}

CH₃D

IV-9523

1963

W.K. Clegg

Infrared spectrum of CH₃D. Flemming. Allan Andersen.
Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat.-Fys. Medd. 33(12), 35
pp.(1963)(in English). The infrared spectrum of MeD was
measured, 400-6000 cm.⁻¹ Band-center frequencies were de-
rived by rotational analysis of the fundamentals and a revised
set of normal vibrational frequencies is given. The rotational
const. A''(A₀), the Coriolis coupling consts. for the 3 doubly
degenerate fundamentals, and possible assignments of observed
combination bands are given. C. R. Ward

C.A. 1964 C/N 2 13894

CH_3D

IV-9523

1963.

2 Д193. ИК-спектр CH_3D . Andersen Flemming
Allan. The infrared spectrum of CH_3D . Mat.-fys. medd.
Kgl. danske vid. selskab», 1963, 33, № 12, 35 pp., ill.
(англ.)

спектр

ф. 1964. 2Д

СН₂В

1963

расчет
расчет
колебаний

✓ 3 Д100. Анализ колебаний монодейтерометана и плоских колебаний этилена по методу возмущений. Лившиц Б. Л., Чумаевский Н. А. «Оптика и спектроскопия», 1963, 15, № 5, 609—616

Изложен метод расчета колебаний молекул по теории возмущений. Показано, что распространенная в литературе точка зрения о сугубо качеств. роли метода возмущений в теории колебаний многоатомных молекул фактически ни на чем не основана. На примере молекулы монодейтерометана показано, что точность расчета по методу возмущений совпадает с точностью, даваемой итерационным методом. Сформулированная на примере монодейтерометана методика применена далее к этилену. Расчет плоских колебаний этилена дает результаты, совпадающие с данными итерационного метода.

ф. 1964. 3Д

CH₃D (91) *mol noy.*, 70 ¹¹⁻⁹⁸⁴⁰ 1963

Richardson E.H., Brodersen S.,
Krause L., Welsh H.L.

The Raman spectrum of monodeuterome-
thane.

"J.Molec.Spectrosc.", 1962, 8, N 5,
406-425 (*англ.*)

Рф ., 1963, 1 D151

Есть оригинал.

10

M-358

-12

1964

CH₃D; CH₃T; CHD₃; CHT₃;

CH₄; CD₄; CT₄; (визначено)

Curtis E.C.

The anharmonicity correction for
polyatomic molecules. Part II.

J.Molec.Spectrosc., 1964, 14, N 3,
292-307

J

PX, 1965, 17 44

1965

1 E280. Молекулярные энергетические состояния и термодинамические свойства твердых изотопозамещенных метанов. Colwell J. H., Gill E. K., Morrison J. A. Molecular energy states and the thermodynamic properties of solid isotopic methanes. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 9, 3144—3155 (англ.)

В интервале 2,5—27° К измерена теплоемкость C_p изотопозамещенных метанов CH_3D (I), CH_2D_2 (II) и CHD_3 (III). Образцы (чистота около 92%, остальное — примеси других изотопозамещенных) были подвергнуты масс-спектрографич. анализу, на основании которого вычислены теплоемкости чистых I, II, III. В дополнение к двум, ранее известным превращениям, обнаружено ниже 8° К третье аномальное поведение теплоемкости. Вычислена остаточная энтропия $S_{\text{практ}} - S_{\text{калор}}$, составляющая соответственно $R \ln 4$ у I и III и $R \ln 6$ у II. Предпринята попытка объяснить термодинамич. свойства I, II, III при низких т-рах в предположении слабого взаимодействия молекул в решетке типа метана, что позволяет вычислять отдельно вклады колебательных уров-

CH_3 A
 CH_2 A₂
 CH A₃

C_p

ф. 1966. 18

ней решетки и возмущенных ротационных уровней. Сделанное предположение подтверждено литературными данными по протонному резонансу и оптич. спектрам CH_4 , CD_4 . На основании схемы молекулярных уровней в поле кристаллич. решетки и вычисления их весов (с учетом стабильных спинмодификаций) объяснено аномальное поведение теплоемкостей I, II, III и рассчитана нулевая энтропия $S_0 = (S_{\text{стат}} - S_{\text{калор}})$ CH_4 , CD_4 , I, II, III, в основном согласующаяся с опытными данными. Последнее указывает на возможность обойтись без гипотезы о заторможенной дезориентации молекул в решетке.

И. Годнев



CH₃D

(ν_3)

IV-54-1051

1966

Analysis of the ν_3 band of monodeuteriomethane. A. G. Moritz (Defence Stds. Labs., Maribyrnong, Australia). *Spectrochim. Acta* 22(3), 385-8(1966)(Eng). The fundamental parallel band ν_3 of CH₃D near 1307 cm.⁻¹ was examd. with a small grating spectrometer and the K fine structure resolved. Analysis of the data gives ν_0 1306.71 cm.⁻¹, $B' - B''$ 0.0915, $(A' - B') - (A'' - B'')$ 0.115, B'' 3.880 cm.⁻¹ (with values assumed for D_J and D_{JK}). RCSQ

C. A. 1966. 64.9

12038 cd

CH₃D

вращат.
пост.

IV-M-1051

1966

9 Д225. Анализ полосы ν_3 монодейтерометана:
Moritz A. G. Analysis of the ν_3 band of monodeute-
romethane. «Spectrochim. Acta», 1966, 22, № 3, 385—
388 (англ.)

Проведен анализ вращательной структуры полосы
 ν_3 ($\nu_3^0 = 1306,71 \text{ см}^{-1}$) симметричного деф., кол. CH₃-
группы монодейтерометана. Наблюдаются все линии
K-расщепления, за исключением линий с $K=0$ и 1. Най-
дены следующие значения для вращательных постоян-
ных: $B' - B'' = -0,0915$, $(A' - B') - (A'' - B'') = 0,115$ и
 $B'' = 3,880 \text{ см}^{-1}$. М. Алиев

ф. 1966. 92

CDH₃

CD₃Cl

Вар-м 2081-1V

1966

8 Д295. Исследование при высоком разрешении ИК-спектров монодейтерометана и хлористого тридейтерометила. Mears G. E. F., Leisegang E. C. High resolution infra-red studies of monodeuteromethane and tri-deuteromethyl chloride. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1966, 19, № 2, 130—132 (англ.; рез. африк.).

Исследованы вращательные структуры полос ν_5 ($1473,32 \text{ см}^{-1}$) и ν_6 ($1157,68 \text{ см}^{-1}$) монодейтерометана, ν_1 ($2159,557$), ν_2 ($1029,637$), ν_3 ($700,709$), ν_4 ($2283,22$), ν_5 ($1061,31$), ν_6 ($768,55$), $2\nu_5$ ($2104,27$) CD₃Cl³⁵ и полос ν_2 ($1028,40$), ν_3 ($694,8$) CD₃Cl³⁷. По регрессивной программе на электронно-счетной машине определены значения спектроскопич. констант исследованных молекул.
В. Байков

ф. 1917. 70

☒

CH₃D

CD₃Cl

ν_i

ВОР-2081-1V

1966

21 Б215. Исследование монодейтерометана и тридейтерометилхлорида методом инфракрасной спектроскопии высокого разрешения. Mears G. E. F., Leisegang E. C. High resolution infra-red studies of monodeuteromethane and trideuteromethyl chloride. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1966, 19, № 2, 130—132 (англ., рез. африк.)

Приведены результаты расчета спектральных констант молекул монодейтерометана (по полосам колебаний ν_5 и ν_6) и тридейтерометилхлорида (по полосам 6 нормальных колебаний), полученные при расчете вращательной структуры полос в ИК-спектрах этих соединений. Для монодейтерометана измерены следующие величины (см^{-1}):

х. 1967. 21

18

приводятся последовательно для полос ν_5 и ν_6): ν_0 1473,3 и 1157,6; A'' 5,242 и 5,24; A' 5,22 и 5,18; B'' 3,876 и 3,87; B' 3,856 и 3,81; D_J'' 5 и $8 \cdot 10^{-5}$; D_J' 5 и $8 \cdot 10^{-5}$; D_{JK}'' $3 \cdot 10^{-4}$; D_{JK}' $3 \cdot 10^{-4}$; $D_K'' - D_K'$ $2,1 \cdot 10^{-5}$; ζ' $-0,28$ и $-0,01$. Проведено сопоставление этих величин с спектральными константами, рассчитанными для полос ν_2 , ν_3 и ν_4 . В случае тридейтерометилхлорида ν_1 2159,55; ν_2 1029,63; ν_3 700,70; ν_4 2283,2; ν_5 1061,3; ν_6 768,5. Величины спектральных констант для этих полос (за исключением ν_5) находятся в следующих диапазонах: A'' 2,53—2,571; A' 2,484—2,553; B'' 0,3619—0,3662; B' 0,3604—0,363.

Ю. В. Киссин

CH₃D

B90-M2081-IV

1966

99850z High resolution infrared studies of monodeuterio-
methane and trideuteriomethyl chloride. G. E. F. Mears and
E. C. Leisegang (Univ. Cape Town, Rondebosch). *J. S. Afr.
Chem. Inst.* 19(2), 130-2(1966)(Eng). The rotational fine
structures of 2 perpendicular bands of CH₃D ($\nu_5 = 1473.3$
cm.⁻¹ and $\nu_6 = 1157.6$ cm.⁻¹ and 6 fundamentals of CD₃Cl
($\nu_1 = 2159.55$ cm.⁻¹, $\nu_2 = 1029.63$, $\nu_3 = 700.70$, $\nu_4 = 2283.2$,
 $\nu_5 = 1061.3$, $\nu_6 = 768.5$) have been measured under high resolu-
tion. Regression analysis of the data yielded spectroscopic
consts. for the 2 mols. and evidence of some perturbation of
CD₃Cl. Herbert Schumann

Vi
u.M.

+1

C.A. 1967. 66. 22

(2)

ВФ-М2066-IV

1966

8 Д293. Вращательная тонкая структура ИК-параллельной полосы ν_2 монодейтерометана. Mears G. E. F., Parkyn D. G., Leisegang E. C. The rotational fine structure of the parallel infrared band of monodeuteromethane. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1966, 19, № 2, 93—97 (англ.; рез. африк.)

Выполнен анализ вращательной структуры полосы ν_2 монодейтерометана, записанной с разрешением $0,2 \text{ см}^{-1}$ в области $1200—1400 \text{ см}^{-1}$. По регрессивной программе на электронно-счетной машине определены следующие значения констант (в см^{-1}): $\nu_0 = 1306,81$, $B'' = 3,8786$, $D_J'' = 4,4 \cdot 10^{-5}$, $D_{JK}'' = 1,1 \cdot 10^{-4}$, $B' = 3,7823$, $D_J' = -2,6 \cdot 10^{-5}$, $D_{JK}' = 2,8 \cdot 10^{-4}$, $A' - A'' = 0,01865$ и $D_K'' - D_K' = 1,5 \cdot 10^{-4}$.

В. Байков

СДН₃

м. и.

ВФ. 1967. 89

CH₃ D

1961
/ 21 Б214. Вращательная тонкая структура параллельной инфракрасной полосы ν_2 в спектре монодейтерометана. Mears G. E. F., Parkyn D. G., Leisegang E. C. The rotational line structure of the parallel infrared band of monodeuteromethane. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1966, 19, № 2, 93—97 (англ., рез. африк.)

Измерена вращательная структура параллельной полосы ν_2 в ИК-спектре монодейтерометана при разрешении спектрометра $0,2 \text{ см}^{-1}$. Приведены величины $\Delta\nu$ для P - и R -ветвей полосы $1306, 811 \text{ см}^{-1}$. Приведены следующие величины спектральных констант, полученных при обсчете экспериментальных данных (см^{-1}): ν_0 1306,81; $A' - A''$ 0,0186 $D_K'' - D_K'$ $1,5 \cdot 10^{-4}$; B' 3,782; B'' 3,878; D_J' $-2,6 \cdot 10^{-5}$; D_J'' $4,4 \cdot 10^{-5}$; D_{JK}' $2,8 \cdot 10^{-4}$; D_{JK}'' $1,1 \cdot 10^{-4}$. Величины B и D для основного состояния находятся в хорошем соответствии с величинами, полученными при анализе полос ν_3 и ν_4 . Момент инерции относительно оси $C-D$ для возбужденного состояния меньше, чем для основного состояния.

Ю. В. Киссин

м.ч.

Х. 1967. 21

CH₃D

1966

M. M.

99849f The rotational fine structure of the ν_2 parallel infrared band of monodeuteriomethane. G. E. F. Mears, D. G. Parkyn, and E. C. Leisegang (Univ. Cape Town, Rondebosch). *J. S. Afr. Chem. Inst.* 19(2), 93-7(1966)(Eng). The rotational fine structure of the γ_2 parallel ir band of CH₃D at 1306.811 cm.⁻¹ has been measured and analyzed. The ground state consts. $B'' = 3.8786$ cm.⁻¹, $D_J'' = 4.4 \times 10^{-5}$, $D_{JK}'' = 1.1 \times 10^{-4}$ were in good agreement with those of the parallel band γ_3 and the perpendicular band γ_4 . The moment of inertia of the excited state about the figure axis of the mol. was smaller than that of the ground state.

Herbert Schumann

C. A. 1967. 66. 22

$\text{CH}_3\text{D}(\downarrow;)$

Behrencourt-Schizne mann C.,
Alamichel C., Brauer G.,
C.R. Acad.-Sci., Paris, Ser AB, 1977,
265 B, (9) 549-52.

Original, ч.к. 2V, Москва
Масан-д.

2 ν_4 CH₃D

(исслед.)
(исслед.)

XIV - 97 97

1967

4 Д298. Исследование полосы $2\nu_4$ CH₃D в близкой ИК-области. Betrencourt-Stirnemann Claudine, Alamichel Claude, Graner Georges. Etude de la bande $2\nu_4$ de CH₃D dans l'infrarouge proche. «C. r. Acad. sci.», 1967, 265, № 9, В 549—В 552 (франц.)

Исследованы ИК-спектры CH₃D (5900—6100 см⁻¹), полученные с высоким разрешением. Идентифицировано примерно 80 линий ^RR-ветви и больше 100 линий ^OP-ветви перпендикулярной полосы $2\nu_4$. Определены вращательные моменты кол-ва движения ζ_4 в невозмущенной части этой полосы. В области высоких частот принят во внимание сильный резонанс. Идентифицировано 15 линий парал. полосы $2\nu_4$ с центром около 5880,4 см⁻¹.

М. В. Дедюлина

9. 1968. 4

CH₃D

(ν_1)

XIV - 9797

1967

64112z Near infrared $2\nu_1$ band of methane-d. Claudine Betrencourt-Stirneimann, Claude Alamichel, and Georges Graner (Fac. Sci. Paris, Orsay, France). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A,B* 265B(9), 549-52(1967)(Fr). The vibrational-rotational spectrum of MeD, in the region 5900-6100 cm^{-1} was recorded with high resolu. at 30-60 torr. The observed spectrum allowed the identification of ~ 200 lines in the perpendicular component of the $2\nu_1$ band. From the measured frequencies, the rotational consts. were derived by using the least sqs. method. The existence of a strong resonance is revealed. BGJF

C. A. 1968. 68. 14

CH₃ D

U₀

Δ S

Sp

18 Б60. Заторможенное вращение в твердых дейтерометанах. Hopkins Harry P., Jr, Kasper Jerome V. V., Pitzer Kenneth S. Restricted rotation in solid deuteromethanes. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 1, 218—220 (англ.)

Вращательные уровни свободных молекул CH₃D, CHD₃ и CH₂D₂ отнесены к типам симметрии групп C_{3v} и C_{2v}. В кристаллич. состоянии вращение становится не-свободным, и вращательные уровни смещаются на расстояния, определяемые матричными элементами между волновыми функциями различных ориентаций. Эти матричные элементы различны для осей вращения 2- и 3-го порядков. Они использованы для вычисления энтропии З в-в и определении зависимостей C_p/T³ и C_p от т-ры T. Первая зависимость имеет вид возрастающей прямой линии, а вторая зависимость изображается убывающими кривыми. Эксперим. точки, полученные в области 2,5—4° К, располагаются на теоретически вычисленных кривых.

М. А. Ковнер

Х. 1967. 18



CDH₃

1967

4 Д297. Тонкая вращательная структура фундаментальных колебаний ν_5 и ν_6 монодейтерометана. Me-
ars G. E. F., Leisegang E. C. The rotational line
structures of the infra-red fundamentals ν_5 and ν_6 of
monodeuteromethane. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1967, 20,
№ 1, 16—24 (англ.; рез. африк.)

При высоком разрешении исследованы фундаменталь-
ные колебания ν_5 и ν_6 (перпендикулярные полосы 1473,3
и 1157,7 см^{-1}) в ИК-спектре поглощения монодейтеро-
метана CDH₃ при давл. 0,13 атм. Приведена интерпрета-
ция тонкой вращательной структуры ν_5 (асимметричное
деф. кол. CH₃) и ν_6 (асим. маятниковое колебание CH₃)
и значения спектроскопич. констант. Полученное значе-
ние константы кориолисова взаимодействия $\zeta_5' = -0,289$
хорошо согласуется с расчетным. Для ν_6 рассчитанная
вращательная структура не совпадает с наблюдавшейся;
 $\zeta_6' = -0,012$, тогда как вычисленное $\zeta_6' = 0,588$. Сделан
вывод о сильном возмущении полосы ν_6 . Библ. 10.
С. Ф. Б.

07. 1968. 4

CDH₃

1967

3 Б214. Тонкая вращательная структура инфракрасных фундаментальных полос ν_5 и ν_6 монодейтерометана. Mears G. E. F., Leisegang E. C. The rotational fine structures of the infra-red fundamentals ν_5 and ν_6 of monodeuteromethane. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1967, 20, № 1, 16—24 (англ.; рез. африк.)

ν_i
м.и.

Исследована вращательная структура двух перпендикулярных полос ν_5 и ν_6 монодейтерометана. Найдены следующие спектроскопич. константы: (из ν_5) $\nu_0 = 1473,3_2 \text{ см}^{-1}$, $B'' = 3,876 \text{ см}^{-1}$, $B' = 3,856 \text{ см}^{-1}$, $D_j'' = D_j' = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, $D''_{jk} = D'_{jk} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$, $A'' = 5,242 \text{ см}^{-1}$, $A' = 5,222 \text{ см}^{-1}$, $(D_k' - D_k'') = 2,1 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, $\xi_{5'}' = -0,289$; (из ν_6) $\nu_0 = 1157,6_8 \text{ см}^{-1}$, $B'' = 3,87_8 \text{ см}^{-1}$, $B' = 3,81_0 \text{ см}^{-1}$, $D_j'' = D_j = 8 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, $D_{jk}'' = D_{jk}' = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, $A'' = 5,24_2 \text{ см}^{-1}$, $A' = 5,18_4 \text{ см}^{-1}$, $\xi_{6'}' = -0,01_2$.

х. 1968. 3

Отмечается хорошее согласие экспериментально найденного значения ζ_5' — постоянной с теоретич. предсказанным значением. Напротив, эксперим. значение ζ_6' ($-0,012$) резко отличается от величины ζ_6' ($0,588$), полученной применением правила сумм к ζ_4' и ζ_5' . Имеются и другие неопределенности в наблюдавшейся вращательной структуре полосы ν_6 . А. Александров

1968

CH₃D

Чархеев О. П.
Деткина М. Е.

М. Струков. Лисин,

(7)

1968, 9, ~ 5, 86%.



(См. Ли 9,
обр. енсор.) III

1968

СДМ₃

1) 2 Б170. Определение спектроскопических постоянных основных перпендикулярных инфракрасных полос монодейтерометана. Leisegang E. C., Parkyn D. G. The determination of the spectroscopic constants of the perpendicular infrared fundamentals of monodeuteromethane. «J. S. Afric. Chem. Inst.», 1968, 21, № 1, 64—71 (англ.; рез. африк.)

Составлена программа для анализа вращательной структуры ИК-полос вырожденных колебаний и определения спектроскопич. постоянных молекул типа симметрич. волчка на ЭЦВМ. Анализ ведется при помощи комбинационных сумм и разностей волновых чисел линий P - и R -ветвей. По этой программе анализированы лит. данные по полосам ν_3 , ν_4 и ν_5 и определены значения ряда спектроскопич. постоянных монодейтерометана.

М. Р. Алиев

Л. 1969. 2

+ 1 в обм.



1968

11 Д177. Электрический дипольный момент CH_3D .
 Meunter J. S., Kaufman M., Klempner Wil-
 liam. Electric dipole moment of CH_3D . «J. Chem.
 Phys.», 1968, 48, № 7, 3338—3339 (англ.)

(дип. момент)

Метод резонансной спектроскопии в молекулярных пучках применен к исследованию дипольного момента (μ) молекулы CH_3D . Получен резонансный спектр в электрич. поле 600 в/см для перехода $J=1, K=1, M_J=1 \rightarrow M_J=0$. Т-ра источника молекулярного пучка 78°K . Длина резонансного участка 25 см. Для основного колебательного состояния величина $\mu = (0,011274 \pm \pm 0,000005)$ ед. Дебая. Эта величина находится в прекрасном соответствии с разницей дипольных моментов молекул CH_3F и CD_3F , равной 0,011, и отличается в 3 раза от величины $\mu = 4 \cdot 10^{-3}$ ед. Дебая, предсказанной теоретически. Указано, что использованный метод очень удобен для определения малых дипольных моментов.

И. С. Милевская

99. 1968. 112

CH₃D

м. н.

6 Д229. Чисто вращательный спектр и дипольный момент молекулы CH₃D. Ozier Irving, Ho W., Birnbaum George. Pure rotational spectrum and electric dipole moment of CH₃D. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 11, 4873—4880 (англ.)

На длинноволновом ИК-спектрометре с дифракционной решеткой исследован чисто вращательный спектр поглощения молекулы CH₃D. В области 40÷120 см⁻¹ идентифицировано 10 линий вращательных переходов $J \rightarrow J+1$ с $J=5 \div 14$. Методом кривой роста измерены абсолютная интенсивность и ширина линии $J=6 \rightarrow 7$. Для дипольного момента μ и параметра уширения γ_0 получены значения $\mu(6) = (5,68 \pm 0,30) \cdot 10^{-3}$ ед. Дебая и $\gamma_0(6) = (0,075 \pm \pm 0,012)$ см⁻¹/амага. Измерены также абсолютные интенсивности других линий и показано, что для линий с $5 \leq J \leq 12$ в пределах 6% μ не зависит от J . Определены также значения вращательной постоянной $B_0 = 3,882 \pm \pm 0,002$ и постоянной центробежного искажения $D_J = (7,7 \pm 0,3) \cdot 10^{-5}$ см⁻¹.

М. Р. Алиев

1969

ф. 1940. 62

1969

CH₃DB₀D_J

spray. curve

49250g Pure rotational spectrum and electric dipole moment of CH₃D. Ozier, Irving; Ho, W.; Birnbaum, George (Sci. Center, North Amer. Rockwell Corp., Thousand Oaks, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(11), 4873-80 (Eng). The pure rotational spectrum of MeD in the ground vibrational and electronic state has been observed by using a far-ir grating spectrometer. This spectrum is of particular interest because the elec. dipole moment μ arises entirely from an isotopic substitution. Ten distinct lines have been observed in the frequency range from 40 to 120 cm⁻¹, and have been identified with the ($J \rightarrow J + 1$) transitions for the rotational levels $J = 5-14$. For the (6 $\rightarrow$ 7) line, the abs. intensity and the linewidth were detd. by a curve of growth method. For this line, the dipole moment $\mu = (5.68 \pm 0.30) \times 10^{-3} \text{D}$ and the broadening parameter $\gamma_0 =$

C.A. 1970. 72.10

$(0.075 \pm 0.012) \text{ cm}^{-1}/\text{amagat}$. This measurement constitutes the 1st correct exptl. detn. of the dipole moment of MeD. By making further intensity measurements on other lines, it was shown that, to within 6%, μ is independent of J in the range $5 \leq J \leq 12$. A detailed account of the exptl. methods used to make the intensity measurements is given. The rotational const. B_0 is $(3.882 \pm 0.002) \text{ cm}^{-1}$ and the distortion constant D_0 $(7.7 \pm 0.3) \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$. RCIQ

CH₃ D

XIV - 1070

1970

11 Д579. Исследование полосы ν_6 CH₃D при 1161 см⁻¹.
Alamichel Claude, Granet Georges, Deroche Jean-Claude, Nguyen Van Thanh. Etude de la bande ν_6 de CH₃D vers 1161 cm⁻¹. «C. r. Acad. sci.», 1970, 270, № 21, B1335—B1338 (франц.)

Изучена колебательно-вращательная структура полосы ν_6 дейтерометана CH₃D с разрешением 0,13 см⁻¹ в слое 30 см при давл. 25—250 мм рт. ст. По строению Q₀-ветви уточнена величина $B' - B'' = -0,045$ см⁻¹. На строение этой ветви большое влияние оказывает l -удвоение, из-за чего ветвь имеет более тесную структуру и большую интенсивность, чем другие Q-ветви. Отмечено присутствие резонанса l -типа между подуровнями $J, K, l = -1$ и $J, K + 2, l = +1$ возбужденного уровня ν_6 , что приводит к большей интенсивности ветвей ${}^P Q_K$ по сравнению с ${}^R Q_K$. Вычислены величины вращательных постоянных в основном и возбужденном колебательных состояниях. Библ. 4.

М. В. Тонков

М. И.

ф. 1970.

119

CH₃D

XIV-1010

1970

93033h ν_6 Band of CH₃D at 1161 cm⁻¹. Alamichel, Claude; Graner, Georges; Deroche, Jean C.; Nguyen Van Thanh (Lab. Infrarouge, Fac. Sci. Paris, Orsay, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1970, 270(21), 1335-8 (Fr). The rotational structure of the ν_6 band of gaseous MeD, centered at 1161.11 cm⁻¹, is explained by 1 resonance and a splitting of type *l* with $q = -0.065$ cm⁻¹. The ir absorption spectrum of MeD at 25-250 torr was studied at high resolu. (0.13 cm⁻¹). All of the ^RQ and ^PQ branches were clearly resolved and their *J* structure was visible. Spacing of the lines in the *Q* branches was reproduced by using the term $B' - B'' = -0.045$ cm⁻¹ (rather than $B' - B'' = -0.015$ cm⁻¹ as proposed by F. A. Andersen, 1963). Mixing of sublevels is discussed. FB|F

C.A. 1970. 23. 18

CH₃D

1972.

8 БЗ15. Резонансы и удвоения в инфракрасном спектре CH₃D при 9 мк. Deroche Jean-Claude, Graner Georges, Alamichel Claude. Resonances and doublings in the infrared spectrum of CH₃D at 9 μ «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 2, 175—189 (англ.)

(м.н) В области 1040—1280 см⁻¹ с разрешением $\sim 0,1$ см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения молекулы CH₃D. Идентифицирована вращательная структура полосы дважды вырожденного колебания ν_6 . Теор. анализ спектра проведен с учетом эффектов колебательно-вращательного взаимодействия вплоть до 3-го порядка, в т. ч. l-резонанса и l- и K-удвоений. Из частот 447 линий и из значений вращательных и центробежных постоянных, найденных Олсоном (см. след. реферат) методом наи-

х. 1973. №8

меньших квадратов вычислены молекулярные константы возбужденного состояния ν_6 CH_3D (все в см^{-1}): $\nu_6 = 1161,088$, $B = 3,83423$, $A = 5,26834$, $D_J = 4,44 \cdot 10^{-5}$, $D_{JK} = 18,93 \cdot 10^{-5}$, $D_K = -11,40 \cdot 10^{-5}$, $q_6 = -0,01675$, $\eta_{6J} = 1,35166 \cdot 10^{-3}$, $\eta_{6K} = -2,71 \cdot 10^{-4}$. Для постоянной кориолисова взаимодействия $|\xi_{3,6}^x|$ получено значение $0,041 \pm 0,002$. С учетом кориолисового резонанса между ν_6 и ν_3 выполнен расчет распределения интенсивности вращательной структуры полосы ν_6 и показано, что в данном случае невозможно по контуру полосы установить знак произведения $\xi_{3,6}$ и отношения пр-ных дипольного момента.

М. Р. Алиев

CH₃D

1972

(u. n)

7 68140r Resonances and doublings in the infrared spectrum of methane-d₁ at 9 μ . Deroche, Jean Claude; Graner, Georges; Alamichel, Claude (Lab. Infrarouge, Univ. Paris VI, Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 43(2), 175-89 (Eng). The spectrum of MeD was studied between 1040 and 1280 cm⁻¹ with a Czerny-type spectrometer having a resolving power of 0.1 cm⁻¹. In the perpendicular ν_6 band, a strong l-type doubling is taking place. In addn. it is necessary to introduce a resonance of the type $l(2,2)$. Further improvement of the calcn. was obtained by using an energy expansion including the 3rd order correction $E^3 = kl[\eta_{6J}J(J+1) + \eta_{6K}K^2]$. The values were detd. of η_{6J} and η_{6K} which are surprisingly large compared to the D constns. A Coriolis interaction between ν_6 and the parallel ν_3 band (centered near 1307 cm⁻¹) was investigated. In spite of the small value of the coupling coeff. $\xi^2_{3,6}$, the existence of this resonance is unquestionable. Moreover, a K -type doubling in the $^P P_3$ and $^P Q_3$ branches was analyzed and the corresponding γ coeff. was evaluated.

CA. 1972. 77. 10

CH₃D.

1972

(M.N)

68144v Infrared spectrum of methane-d₁. Ground state constants and perturbation allowed transitions. Olson, W. Bruce (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 43(2), 190-8 (Eng). The ground state rotational consts. of MeD were detd. by a simultaneous least squares fit of combination differences obtained from 12 ir absorption bands recorded in the region of 2380-3160 cm⁻¹. The direct detn. of A_0 and D_0^K was accomplished through combination differences obtained from transitions not ordinarily allowed in the ir spectrum of a symmetric top mol. but made possible through perturbations between excited rovibronic levels.

C.A. 1972. 77. 10

CH₃D

1972.

8 Б316. Инфракрасный спектр молекулы CH₃D. Константы основного состояния и переходы, разрешенные возмущением. Olson W. Bruce. The infrared spectrum of CH₃D. Ground state constants and perturbation-allowed transitions. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 2, 190—198 (англ.)

(м.н) В области 2380—3160 см⁻¹ с разрешением 0,03—0,05 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения молекулы CH₃D. Идентифицирована вращательная структура 12 полос. Впервые обнаружены и интерпретированы запрещенные переходы с $\Delta K > 0$; 1, активизированные колебательно-вращательным взаимодействием. Из частот запрещенных и разрешенных переходов составлено около 125 комбинац. разностей, содержащих вращатель-

х. 1973. № 8

ные (A, B) и центробежные (D_J, D_{JK}, D_K) постоянные основного колебательного состояния. Из этих разностей методом наименьших квадратов вычислены след. значения постоянных (в см^{-1}): $A = 5,250703 \pm 0,000056$, $B = 3,880088 \pm 0,000016$, $D_J = (5,1739 \pm 0,0051) \cdot 10^{-5}$, $D_{JK} = (1,2375 \pm 0,0023) \cdot 10^{-4}$, $D_K = -(7,680 \pm 0,037) \cdot 10^{-5}$. Из полученных значений A, B вместе с $B_0 = 5,24059 \text{ см}^{-1}$ метана вычислены структурные параметры CH_3D : $\text{CH} = 1,094030 \pm 0,000007 \text{ \AA}$, $\text{CD} = 1,091722 \pm 0,000022 \text{ \AA}$, $\text{HCD} = 109^\circ 37' 36'' \pm 6''$.

М. Р. Алиев,

CH_3D

1972

Sarka kamil.

(u.n.) "J. Mol. Spectrosc."

1972, 41, 2, 233-239.

● (cm. AsH_3 ; III);

40430.6613

CH₃D

1973

Ph, TE, Ch

54969

02

2137

Bigeleisen Jacob, Lee M.W. Relationship
between the zero point energy of a poly-
atomic molecule and its molecular
structure. "Z. Naturforsch.", 1973,
28a, N 2, 123-128
(англ.)

0102 ББК

078 079 v 94

ВИНИТИ

CH₃D

1973

17 Б246. Вращательная диффузия сжатого газооб-
разного монодейтерометана. Lévi G., Chалауе M.
Rotational diffusion of compressed gaseous monodeute-
romethane. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 19, № 2, 263—
267 (англ.)

и.к. спектр

Исследован ИК-спектр поглощения ~~CH₃D~~ (I) в обла-
сти полосы $\nu_2(A_1)$ при парц. давлении I $p=1000$ мм.

х. 1973 N 17

сжатого до $p=150$ атм при добавлении газов He, Ne, Ar, N_2 , O_2 и CH_4 . С использованием Фурье-преобразования контуров полос $\nu_2(A_1)$ вычислены вращательные корреляц. функции (ВКФ) I. Определенные ВКФ I сопоставлены с соотв-щими ВКФ I, вычисленными для моделей M и J Гордона (РЖХим, 1966, 20Б1). Лучшее согласие наблюдалось в случае модели J, в к-рой величина углового момента J молекул усредняется после каждого столкновения с использованием больцмановского распределения, а также рандомизируется направление J. Можно принять, что в промежутках между столкновениями молекула I совершает один или два поворота.

А. П. Александров

31219.1973

Ph, TE, Ch

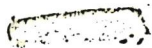
CH₃D 35247

1973

1471

Morillon-Chapey Mireille, Alamichel Claude. Etude des bandes ν_4 et ν_7 de CH₂D₂ vers 9.5 μ .

"Can. J. Phys.", 1973, 51, N 20, 2189-2196



(франц., рез.англ.)

1026 мм

1011 1013

1019

ВИНИТИ

1974

CH₃Dbyans.
чекір

54144r Forbidden rotational spectra of axially symmetric polar molecules. Aliev, M. R.; Mikhailkov, V. M. (Inst. Spectros., Moscow, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 49(1), 18-25 (Eng). Rotational transitions induced by centrifugal distortion are considered in polar or quasipolar sym. top mols. belonging to the point groups C_n and C_{nv} ($n \geq 3$). In this series only the mols. of point groups C_1 , C_1 , C_4 , and C_4 may possess rotational spectra induced by 1st-order centrifugal distortion. A general expression is given for the effective dipole moment operator and for its matrix elements. The peak absorption coeffs. for some of the strongest $\Delta K = 3$ transitions of MeD were calcd. and compared with the peak absorption coeffs. of allowed transitions.

C.A. 1974. 80. N10

CH₃D

1974

6 Д205. Запрещенные вращательные спектры аксиально-симметричных полярных молекул. Aliev M. R., Mikhaylov V. M. Forbidden rotational spectra of axially symmetric polar molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 49, № 1, 18—26 (англ.)

Показано, что центробежное искажение l -го порядка приводит к снятию запрета с вращательных переходов, подчиняющихся правилам отбора $\Delta K = \pm 3$, полярных молекул, принадлежащих к точечным группам симметрии C_3 и C_{3v} , и переходов с $\Delta K = \pm 4$ молекул, принадлежащих к точечным группам C_4 и C_{4v} : в первом приближении молекулы, принадлежащие к точечным группам C_n и C_{nv} с $n > 4$ не имеют вращательного спектра. Получены общие выражения матричных элементов дипольного момента переходов с $\Delta K = \pm 3, \pm 4$.

запрещ.
вращ.
спектры

ф. 1974 № 6

через молекулярные параметры и квантовые числа J , K : интенсивности переходов с $\Delta K = \pm 3$ зависят от постоянного дипольного момента μ_0 , производных $\partial \mu / \partial Q$ дипольного момента по норм. координатам, производных $dI_{\alpha\beta} / \partial Q$ тензора инерции по Q , центробежных τ -постоянных, частот колебаний и моментов инерции, а интенсивности переходов с $\Delta K = \pm 4$ зависят только от μ_0 и τ -постоянных. Выполнен расчет коэф. поглощения в максимуме линий наиболее сильных запрещенных переходов с $\Delta K = 3$ и разрешенных переходов с $\Delta K = 0$ молекулы CH_3D . Показано, что на частотах ~ 6000 ГГц интенсивность запрещенных переходов выше интенсивности разрешенных переходов.

М. Р. Алнев

CH₃D

omni 2918

1974.

Rukolich E.G.

ℓ^{2g} , K, Mol. Phys., 1975, 29,
N1, 249-55.

ℓ^{2g}/κ Deuterium quadru-
pole coupling in the
gas phase.

CH_3D

1974

9 Д216. Октупольный момент CH_3D . Tejwa-
ni G. D. T., Fox K. Octopole moment of CH_3D . «Chem.
Phys. Lett.», 1974, 25, № 3, 372—374 (англ.)

Сравниваются вычисленное и эксперим. значения уши-
рения линий во вращательном спектре молекулы CH_3D ,
соответствующие переходу $J=6 \rightarrow 7$. На основе такого
сравнения определяется величина эффективного окту-
польного момента. Э. Р. А.

ф. 1974. № 9

CH₃D

1974

19 Б326. Октупольный момент CH₃D. Tejwani G. D. T., Fox K. Octopole moment of CH₃D. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 3, 372—374 (англ.)

Из сравнения измеренного (J. Chem. Phys., 1969, 51, 4873) и рассчитанного самоуширения вращательных линий переходов $J=6 \rightarrow 7$ при изменении давления определена эффективная величина октупольного момента

$\text{CH}_3\text{D}\Omega = 5,6 \cdot 10^{-34}$ ед. СГС·см³. Показано, что разделение между индивидуальными K компонентами в мультиплете $J=6 \rightarrow 7$ пренебрежимо мало в сравнении с уширением их линий, зависящим от давления. Поэтому рассчитывали ширину линии только для $K=0 \rightarrow 0$ перехода $J=6 \rightarrow 7$. Расчет проводился по теории Андерсона.

И. Г. Городецкий

2. 1974 № 19

60223.9390

Ph, TC

35247

CH₃D

(CP)

1975

* 45-11554

Jones E.P., Morrison J.A., Richards E.L. Investigation of the thermal properties of solid CH₃D at very low temperatures. "Can. J. Phys.", 1975, 53, N 22, 2546-2548 (англ., рез. франц.)

0566 нмк

540 544

ВИНИТИ

CH₃D

Оттиск 4396

1976

Дунсан Г. Л.

Конец.
Центр. б.
расшир.

У. Мол. Spectrosc

(и.п.)

1976, 60 N 1-3

225-38

CH₃D

X-13160

1976

(A₀)

584: 1137751 Determination of A₀ for methoxy-d₁ from the ν_1 Raman band. Kattenberg, H. W.; Brodersen, Svend (Dep. Chem., Aarhus Univ., Aarhus, Den.). *J. Raman Spectrosc.* 1976, 4(3), 323-7 (Eng). The ν_1 Raman band of MeD was analyzed by means of ground state combination differences. The results are in good agreement with those obtained by W. B. Olson (1972) from perturbation-allowed Ir transitions. The present work removes a previous discrepancy between Ir and Raman results, and shows that the Raman method may yield A₀ values with low systematic errors.

C.E. 1976. 84 v.16

8602-11X-68

7-13-13160

1976

CH₃D

10 Д291. Определение A_0 CH₃D по полосе ν_4 комбинационного рассеяния. Kattenberg H. W., Brodersen Svend. Determination of A_0 for CH₃D from the ν_4 Raman band. «J. Raman Spectrosc.», 1976, 4, № 3, 323—327 (англ.)

Для установления причин расхождения значений вращательной постоянной A_0 молекулы CH₃D, определенной из анализа структуры полосы ν_4 в спектрах ИК-поглощения и комб. рас., эта полоса исследована методами спектроскопии комб. рас. высокого разрешения. Спектр возбужден лазером Ar⁺, регистрация фотографическая, полученное разрешение $\sim 0,3$ см⁻¹. Из ~ 400 линий полосы ν_4 для анализа выбраны 86 неперекрывающихся линий с практически симметричными контурами. Полученное значение $A_0 = 5,2508 \pm \pm 5 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹ в пределах погрешности не отличается от определенного ранее по спектру ИК-поглощения. Библ. 7. М. Тонков

вращ.
пост.

8605-111-2098

ф. 1976 N10

CH₃D

* 13-13160

1976

✓ 18 Б269. Определение A_0 для CH₃D из полосы ν_4 спектра КР. Kattenberg H. W., Brodersen Svend. Determination of A_0 for CH₃D from the ν_4 Raman band. «J. Raman Spectrosc.», 1976, 4, № 3, 323—327 (англ.).

Измерено около 400 линий полосы ν_4 в спектре КР молекулы CH₃D в области частот от 2650 до 3430 см⁻¹ с разрешением 0,28 см⁻¹ при возбуждении спектра с помощью лазерных линий 4880 и 5145 А. Определены значения след. молек. постоянных (в см⁻¹) $A_0 = 5,2516(15)$, $B_0 = 3,8804(7)$, $D_0^J \times 10^5 = 4,5(6)$, $D_0^J K \times 10^5 = 16(3)$, $D_0^K \times 10^5 = -1,1(3)$. Полученные значения уточняют ранее выполненные измерения спектра КР CH₃D и хорошо согласуются с ИК-данными.

С. Н. Мурзин

8605-11X-69

Х. 1976 ~ 18

70218.4203
Ph, Ch, TC, MGU

30526GR

1976

CH_3D (vi)

* 4-17064

Montero S., Barrojo D. Electro-
optical parameters and Raman intensiti-
es of CH_4 , CH_3D , CH_2D_2 , CHD_3 and CD_4 .
"Mol. Phys.", 1976, 32, N 5, -1229-1232.

(англ.)

(см. CH_4 ; III)

0815 ммк

775 778 8 0 7

ВИНИТИ

CDH₃

* 9-17356

1976

Thirugnanasambandam

p., et al.

Indian J. Phys., 1976

50 N5, 527-43

(prerum
cl. N.
cl. uoell.)



(cl. CM₄; III)

60423.7408
Ch, Ph, TC

наим. статьи
41125

1976

C_2HD (Ei)

X 4-12675

Baldacci A., Ghergetti S.,
Hurlock S.C., Narahari Rao K.

Infrared bands of $^{12}C_2HD$.

"J.Mol.Spectrosc.", 1976, 59, N 1, 116-125
(англ.)

0610 ББК

584 587

60 21

ВИНИТИ

CH₃D

Х-9-14177

1976

12 Д153. Структурные постоянные основного состояния монодейтерометана ¹²CH₃D. Valentin A., Cardinet P. Structure constants for the ground state of monodeuteromethane ¹²CH₃D. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 60, № 1—3, 429—432 (англ.)

Выполнен детальный анализ спектра высокого разрешения полос ν_2 и $2\nu_6$ монодейтерометана. Идентифицированы более 450 линий и определены 155 разностей энергий вращательных уровней. По этим данным с помощью метода наименьших квадратов определены следующие значения молекулярных постоянных в основном состоянии молекулы монодейтерометана (см⁻¹): $B_0 = 3,880159$; $D_0^J = 5,2446 \cdot 10^{-5}$; $D_0^{JK} = 1,2610 \cdot 10^{-4}$; $H_0^{JJJ} = 1,172 \cdot 10^{-6}$; $H_0^{JJK} = 1,200 \cdot 10^{-6}$; $H_0^{JKK} = 1,042 \cdot 10^{-6}$.
М. А. Ковнер

Х-9-14177

ф 1976 N12

CH_3D (M, unimolecular)

1977

Addipalli V et al.

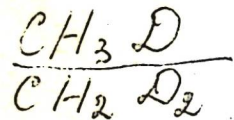
J. Pure Appl. Phys 1977

Infrared intensity analysis of molecules: Part II.

CH_3D and their isotopic invariants ● and MX_3 -type molecules.

C. A. 1977, 87 118

143616n



цитенив.

встреча 5454 1977

Bermajo D.

J. Mol. Spectrosc.

— 1977, 65(3) 345-53 (eng)

(см CH₄; III)

CH_3D

оттиск 5096

1977

✓ 10 Д496. Спектр поглощения монодейтерометана (CH_3D) в спектральной области 6000—12 000 Å. Danehy Robert G., Lutz Barry L., Owen Tobias, Scattergood Thomas W., Goetz Werner. The absorption spectrum of monodeuterated methane (CH_3D) in the 6000—12 000 Å spectral region. «Astrophys. J.», 1977, 213, № 3, Part 2, L139—L141 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного ме-

тана (CH_3D) в области 0,6—1,2 мк в слоях ~500 м при давл. ~1 атм. Приведены спектры и частоты колебательно-вращательных линий, определенные с точностью лучше $0,1 \text{ см}^{-1}$, полос, расположенных вблизи 0,83, 0,96; 1,06 и 1,1 мк. Справедливость отнесения линий проверена сравнением вторых разностей с полученными ранее величинами. Результаты работы использованы для уточнения интерпретации спектров атмосфер планет-гигантов.

М. Тонков

ф. 1977 № 10

CH₃D

Ortaca 5096

1977

(creep)

186: 197760c The absorption spectrum of monodeuterated methane (CH₃D) in the 6000-12000 Å spectral region. Danchy, Robert G.; Jantz, Barry L.; Owen, Tobias; Scattergood, Thomas W.; Goetz, Werner (Lab. Planet. Atmos. Res., State Univ. New York, Stony Brook, N. Y.). *Astrophys. J.* 1977, 213(3; Pt. 2), L139-L141 (Eng). Preliminary results of a new lab. study of the absorption spectrum of CH₃D are presented. Three new parallel-type bands are reported at 8379 Å, 9613 Å, and 1.065 μm. The application of this work to the search for CH₃D in the atms. of the outer planets is discussed.

C. A. 1977, 26 N26

CH₃D

1974

(ν_6)

87: 191549q Analysis of the ν_6 band of methane-d₁ (carbon-12) at 8.6 μm . Pinkley, Lary W.; Rao, K. Narahari; Tarrago, G.; Poussigue, G.; Dang Nhu Mai (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 68(2), 195-222 (Eng). The $\nu_6(E)$ fundamental vibration-rotation band of ¹²CH₃D was recorded in the spectral range 1033-1270 cm^{-1} with a resolu. of approx. 0.04 cm^{-1} . Of the 669 transitions with $J' \leq 17$ identified, 633 were retained for the detn. of the rotational levels in the upper state $\nu_6 = 1$. The Coriolis interaction between the $\nu_6 = 1(E)$ and $\nu_3 = 1(A)$ vibrational states of ¹²CH₃D results in large A_1A_2 splittings of levels with $\nu_6 = 1$ and $|K-l_6| = 0$ or 3; the mixing in K and l_6 also gives rise to some 10 forbidden transitions obsd. in the spectra. These effects are well explained within the formulation based on the contact transformation method. Values of 15 mol. structure consts. of the $\nu_6 = 1$ state were detd. from a least-squares anal. of the 633 retained transitions. These consts. can be used to est. values of the upper-state energies up to fourth order, and through them the spectral positions of the 633 retained transitions are reproduced with an overall std. deviation of 0.013 cm^{-1} , which is within exptl. uncertainties.

C.A. 1974, 81 N 24

СН₃D

1977

7 Д515. Анализ полосы ν_6 . C¹²H₃D около 8,6 мк.
Pinkley Larry W., Rao Narahari K., Tagga-
go G., Poussigue G., Dang-Nhu M. Analysis of
the ν_6 band of ¹²CH₃D at 8,6 μm. «J. Mol. Spectrosc.»,
1977, 68, № 2, 195—222 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного дей-
терометана ¹²CH₃D в области 1033—1270 см⁻¹ с разре-
шением 0,04 см⁻¹ при давл. 18 и 30 мм рт. ст. 669 на-
блюдаемых линий отнесены к колебательно-вращатель-
ным переходам с $J' \leq 17$ полосы ν_6 типа E. Приведены
полученные спектры, частоты наблюдаемых линий и рас-
считаны значения их интенсивностей. При анализе час-
тот использован дважды преобразованный гамильтони-
ан H_e^+ , включающий все члены до h_4^+ . Учтено корно-
лисово взаимодействие колебания ν_6 с колебанием ν_3
типа A₁, которое приводит к расщеплению компонент
A₁ и A₂ вращательных уровней и появлению запрещен-
ных линий. По частотам определены 15 молекулярных
постоянных, величины которых позволяют рассчитывать
частоты линий со средним отклонением 0,013 см⁻¹.
Библ. 12.

Di

М. П. 1

ор. 1978 N 7

CH_3D

1977

1) 13 Б235. Анализ полосы $\nu_6\text{C}^{12}\text{H}_3\text{D}$ в области 8,6 мкм. Pinkley Larry W., Narahari Rao K., Tagga-go G., Poussigue G., Dang-Nhu M. Analysis of the ν_6 Band of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ at 8,6 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 68, № 2, 195—222 (англ.)

(Di)

В интервале $1033\text{--}1270\text{ см}^{-1}$ с разрешением $\sim 0,04\text{ см}^{-1}$ измерен спектр поглощения газ. монодейтерометана. Из 689 наблюдавшихся в спектре линий 510 отнесены к вращательно-колебательным переходам полосы $\nu_6\text{C}^{12}\text{H}_3\text{D}$ (I) с $I' \leq 17$, в том числе запрещенным с $\Delta|K - l_6| = 3$. Часть линий отнесена к ν_3 I, примесям воды и метана, а 88 линий не идентифицированы. Обработка эксперим. данных выполнена методом контактных преобразований. Изложена общая процедура расчета энергий колебательно-вращательных переходов и относительной интенсивности линий. Табулированы полученные значения молек. постоянных I и сопоставлены с лит. данными.

В. М. Ковба

2-1977, N/13

оттис 6802

1978

CH₃D

4 Д339. Анализ вращательной структуры полосы 9613 Å в спектре поглощения молекул CH₃D. Lutz Barry L., Ramsay Donald A., ~~Danchy~~ Robert G. Rotational analysis of the 9613 Å band of CH₃D. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 1, 128—134 (англ.)

спектр
поглощ.

С высоким разрешением получен спектр поглощения газообразных молекул CH₃D в области ~9613 Å. Давление паров CH₃D в экспериментах составляло 593 мм рт. ст. Анализ вращательной структуры обнаруженной полосы позволил определить молекулярные постоянные верхнего состояния (в см⁻¹): $I_0 = 10404,770 \pm \pm 0,15$ и $B = 3,68941 \pm 0,00048$. Показано, что несмотря на отсутствие надежной идентификации колебательной структуры полученного спектра, полоса ~9613 Å может служить чувствительным индикатором присутствия CH₃D в атмосфере удаленных планет Солнечной системы. Отмечено, что высокая разрешающая способность спектрального прибора необходима для отделения вклада молекул CH₄ в полное поглощение вблизи 9613 Å. Библи. 20. М. Т.

Ф.1979, N4

CH₃D

cmma 6802

1978

89: 97443v Rotational analysis of the 9613 Å band of methyl deuteride. Lutz, Barry L.; Danehy, Robert G.; Ramsay, Donald A. (Lowell Obs., Flagstaff, Ariz.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 72(1), 128-34 (Eng). The 9613 Å band of MeD was photographed under high resolu. using a path length of 640 m and a pressure of 593 Torr. The band is parallel in type

and a rotational anal. was carried out. The principal mol. consts. for the upper state are: $T_0 = 10404.770$ (15) cm^{-1} , $B = 3.68941$ (48) cm^{-1} . A few small ($< 0.2 \text{ cm}^{-1}$) rotational perturbations were found in the excited state levels with $K' = 0$ to 4. No transitions have yet been identified to levels with $K' > 4$. The possibility of using the 9613 Å band as a means of measuring the D/H ratio in planetary atms. is discussed.

M.N.

C.A. 1978, 20, N12

оттиск 6802

1978

CH₃D

3 Б263. Анализ вращательной структуры полосы 9613 А CH₃D. Lutr Barry L., Danehy Robert G., Ramsay Donald A. Rotational analysis of the 9613 А band of CH₃D. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 1, 128—134 (англ.)

M, N

На дифракц. спектрометре высокого разрешения в области длин волн ~ 9613 А с разрешением $\sim 0,12$ см⁻¹ при точности измерения положения линий не хуже 0,01 см⁻¹ сфотографирован спектр CH₃D. Вращательная структура полосы 9613 А соответствует по характеру параллельной полосе вытянутого симм. волчка. Анализ спектра выполнен с использованием вращательного гамильтониана, включающего квартичные и секстичные члены центробежного искажения. Определены нулевая частота полосы 10404,770(15) см⁻¹, вращательная постоянная в верхнем состоянии $B = 3,68941(48)$ см⁻¹ и постоянные центробежного искажения в верхнем состоянии $D_{JK} = -0,86(35) \cdot 10^{-4}$, $D_J = 6,22(34) \cdot 10^{-5}$ см⁻¹. Обсуждена возможность использования полосы 9613 А для измерения изотопич. отношения D/H в планетарных атмосферах.

С. Н. Мурзин

2.1979, N3

CH_3D

[Dunn 8519]

1979

Takami M., Takeshi Ono

(M) J. Chem. Phys., 1979, 70 (12)
5376 - 5380

Rotational dependence of the
dipole moment of CH_3D .

CH₃D

(μ , ν_6)

а. 1980, № 1

1979

1 Б307. Вращательная зависимость дипольного момента CH₃D. Watson James K. G., Takami Michio, ~~Ok~~ Takeshi. Rotational dependence of the dipole moment of CH₃D. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 12, 5376—5380 (англ.)

Методом двойного ИК-резонанса измерен постоянный дипольный момент вращательного уровня $(J, K) = (10, 1)$ основного состояния CH₃D, равный $\mu_0 = (1,03 \pm 0,1) \cdot 10^{-3}$ D. Кювета с CH₃D при давл. $\sim 4 \cdot 10^{-3}$ м, в к-рой создавалось электрич. поле напряженностью до 90 кв/см, облучалась поляризованным излучением лазерной линии $^{18}\text{O}_2\text{P}(18)$, модулированной РЧ-полем. Из полученных результатов и данных (Wofsy S. C., Muetner J. C., Klempereger W. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, 4005) по электрич. резонансу в молек. пучках для вращательных уровней $(1, 1)$ и $(2, 2)$ получено выражение $\mu(J, K) = \pm [(5,657 \pm 0,004) - (0,0427 \pm 0,009)J(J+1) + (0,0696 \pm 0,0026)K^2] \cdot 10^{-3}$ D. Проведен теор. анализ вращательной зависимости дипольного момента CH₃D, позволяющий рассчитать коэф. полученной эмпирич. зависимости. Определен дипольный момент состояния ν_6 $(9, 2)$, равный $\mu_6 = (3,75 \pm 0,05) \cdot 10^{-3}$ D. Н. И. Бутковская

CH_3D

спектры
и к-резонансы
М

01980.12

2 Д405. Вращательная зависимость дипольного момента CH_3D . Rotational dependence of the dipole moment of CH_3D . Watson James K. G., Takami Michio, Oka Takeshi. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 12, 5376—5380 (англ.)

1979

С помощью модулированного радиочастотой излучения лазера C^{18}O_2 , содержащего после прохождения через нелинейный кристалл суммарную и разностную частоты лазерного излучения с радиочастотой, получены спектры двойного ИК-ИК-резонанса метана в электрич. поле при давл. $\sim 4 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. Резонансные условия выполняются для линии Р (18) лазера и линии Р (10,1) полосы ν_6 молекулы CH_3D . По штарковскому расщеплению определены дипольные моменты основного и возбужденного колебательных состояний. Результаты сравнены с данными, полученными при исследовании интенсивности вращательных линий. Различия в результатах объясняются различиями в матричных элементах дипольного момента, ответственных за эффект. Выполнены расчеты зависимости величины дипольного момента от вращательного состояния молекулы, обсуждается выбор знаков производных дипольных моментов. Найденная зависимость дипольного момента от вращательного состояния согласуется с результатами расчетов ab initio. Библ. 22. М. Тонков.

1980

CH₃D

17 Б305. Вращательные постоянные ¹²CH₃D в основном состоянии. Chackerian C. Jr., Guelachvili G. Ground-state rotational constants of ¹²CH₃D. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 447—456 (англ.)

На вакуумном фурье-интерферометре в области частот 1800—2700 см⁻¹ измерены частоты и интенсивности колебательно-вращательного спектра полосы $\nu_2(A_1)$ ¹²CH₃D. Условия эксперимента и обработка данных аналогичны примененным ранее при исследовании спектра ¹³CH₃D (Chackerian Jr. C., Guelachvili G., «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, 244). Из комбинационных разностей переходов в основном колебательном состоянии определены вращательная постоянная $B_0 = 3,88019841(61)$ см⁻¹ и постоянные центробежного искажения (в см⁻¹): $D_0^J = 5,26416(49) \cdot 10^{-5}$, $D_0^{JK} = 1,26429(31) \cdot 10^{-4}$, $H_0^{JJJ} = 1,471(15) \cdot 10^{-5}$, $H_0^{JJK} = 1,220(10) \cdot 10^{-8}$, $H_0^{JKK} = -6,52(42) \cdot 10^{-9}$, $L_0^{JJJJ} = 7,1(1,5) \cdot 10^{-14}$, $L_0^{JJJK} = 1,15(12) \cdot 10^{-12}$, $L_0^{JJKK} = 0,7(7,8) \cdot 10^{-13}$, $L_0^{JKKK} = 0,5(1,6) \cdot 10^{-12}$. В спектрах для ν_2 переходов наблюдается слабое A_1A_2 -расщепление около $5,5 \cdot 10^{-11}$ см⁻¹ в основном состоянии и около $4,4 \cdot 10^{-10}$ см⁻¹ в возбужденном состоянии. С. Н. Мурзин

М.М.

X. 1981 № 17

CH₃D

1980

✓ 9-1: 55247g. Ground state rotational constants of methane-d₁ (carbon-12). Chackerian, C., Jr.; Guelachvili, G. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 84(2), 447-56 (Eng). An anal. of ground-state combination in the $\nu_2(A_1)$ fundamental band of ¹²CH₃D ($\nu_0 = 2200.03895$ cm⁻¹) was made to yield values for the rotational consts. B_0 , B_0^J , D_0^{JK} , H_0^{JJJ} , H_0^{JJK} , H_0^{JKK} , L_0^{JJJ} , L_0^{JJK} , and order of magnitude values for L_0^{JJKK} and L_0^{JKKK} . These consts. should be useful in assisting radio searches for this mol. in astrophys. sources. In addn., splittings of A_1/A_2 levels ($J \geq 17$, $K = 3$) were measured in both the ground and excited vibrational states of this band.

M.N.

C. A. 1981. 94, 18

CH₃D

оптиск 10038

1980

2 Б197. Вращательные постоянные $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ в основном состоянии. Chackerian C., Jr., Guelachvili G. Ground-state rotational constants of $^{13}\text{CH}_3\text{D}$. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 244—248 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения высокого разрешения ($0,005\text{--}0,006\text{ см}^{-1}$) монодейтерометана в области $1800\text{--}2500\text{ см}^{-1}$ с помощью вакуумного фурье-спектрометра. Приведены волновые числа измеренных линий. Проведен анализ вращательной структуры полосы $\nu_2(A_1)$ молекулы $^{13}\text{CH}_3\text{D}$. По комбинационным соотношениям для P - и R -ветвей определены вращательные постоянные $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ (см^{-1}): $B_0 = 3,8768844 \pm 0,0000022$, $D_0^I = (5,2416 \pm 0,0017) \times 10^{-5}$, $D_0^{IK} = (1,2773 \pm 0,0014) \times 10^{-4}$, $H_0^{III} = (1,414 \pm 0,040) \times 10^{-9}$, $H_0^{IKK} = (1,179 \pm 0,039) \times 10^{-8}$, $H_0^{IKK} = (-5,68 \pm 1,77) \times 10^{-8}$. Отмечено, что полученные данные очень хорошо согласуются с соотв. значениями для $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Надежность вычисленных постоянных проверена сопостав-

лением расчетных и эксперим. положений лн. в
Q-ветви. С. Б. Осин

X. 1981/2

CH₃D

[ommuok10038]

1980

93:34196d Ground state rotational constants of methane-D₁ (carbon-13). Chackerian, C., Jr.; Guelachvili, G. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(2), 244-8 (Eng). An anal. of the ground-state combination differences in the $\nu_2(A_1)$ band of ¹³CH₃D ($\nu_0 = 2190.085$ cm⁻¹) yielded accurate values for 6 ground-state rotational consts., B_0 , D_0^J , D_0^{JK} , H_0^{JJJ} , H_0^{JJK} , and H_0^{KKK} .

4.17.

CA 1980 93 N 4

CH₃ D

Оттиск 11279

1980

8 Д512. Вращательные постоянные основного состояния молекулы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Ground-state rotational constants of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Chackerian C., Jr., Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 447—456 (англ.)

Выполнен анализ полосы $\nu(A_1)$ молекулы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ ($\nu_0 = 2200, 0,3896 \text{ см}^{-1}$) и определены вращательные постоянные молекулы в основном состоянии: $B_0, D_0^J, D_0^{JK}, H_0^{JJJ}, H_0^{JJK}, H_0^{JKK}, L_0^{JJJJ}, L_0^{JJJK}$. Оценены значения постоянных L_0^{JJJK} и L_0^{JKKK} . Определено расщепление уровней A_1A_2 ($J \geq 17, K=3$) в основном и возбужденном колебательных состояниях. Отмечено, что результаты представляют интерес с точки зрения исследований этих молекул в астрофизич. источниках. В. С. Иванов

М. И.

Ф. 1981 № 8

CH₃D

ссылка 10134 1980.

Орн. 7; Орн. Т.

ссылка

И

Appl. Phys., 1980, 21,
293-306.

21.10.1980

CH₃D

аттиск 10409

1980

9 Б250. Поглощение монодейтерометана ¹²CH₃D около 4,5 μM. Анализ полосы обертона 2ν₆. Poussigues G., Tarrago G., Cardinet P., Valentin A. Absorption of monodeuteromethane ¹²CH₃D at 4,5 μM. Analysis of the overtone band 2ν₆. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 82, № 1, 35—53 (англ.)

На дифракционном спектрометре в области частот 2088—2433 см⁻¹ с разрешением 0,02—0,03 см⁻¹ измерен спектр поглощения двух компонент, параллельной и перпендикулярной, обертона 2ν₆ монодейтерометана, ¹²CH₃D. Идентифицировано 612 переходов полосы 2ν₆ со значениями квантовых чисел вплоть до F'=13 и для всех переходов вычислены силы линий. Определены 17 колебательно-вращательных постоянных в колеба-

м.п. J₂-

Х. 1981 № 9

тельном состоянии $v_6=2$. Центр полосы расположен на частоте $\nu=2316,2662(13)$ см^{-1} и относится к параллельной компоненте, вращательные постоянные равны $A=5,281117(62)$ см^{-1} , $B=3,803148(52)$ см^{-1} . Полученный ряд колебательно-вращательных постоянных позволяет воспроизвести эксперим. частоты с полным стандартным отклонением 0,007 см^{-1} . С. Н. Мурзин

CH₃D

[ommic 10409]

1980

22₆

93: 57357w Absorption of monodeuteromethane ¹²CH₃D at 4.5 μ m. Analysis of the overtone band 2 ν_6 . Poussigue, G.; Tarrago, G.; Cardinet, P.; Valentin, A. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 82(1), 35-53 (Eng). The overtone band 2 ν_6 of ¹²CH₃D was analyzed in the range 2088-2433 cm⁻¹. The parallel and perpendicular components, centered at 2316.266 and 2323.297 cm⁻¹, are strongly interacting, giving rise to a no. of forbidden transitions and large A₁A₂ splittings. Six hundred twelve transitions including J' values up to 13 were assigned: the vibration-rotation consts. for the upper state $\nu_6 = 2$ were derived from these data, allowing the reprod. of the exptl. wavenumbers with a root-mean square equal to 0.007 cm⁻¹. Some intensity measurements were used to est. the overall band strength of 2 ν_6 .

CA 1980 93 n 6

CH₃D

2mmica 9077

1980

($\nu_3; \nu_6$)

92: 161820x Analysis of the ν_3 band of methane-D₁ (carbon-12) at 7.6 μm . Tarrago, Ginette; Rao, K. Narahari; Pinkley, L. W. (Lab. Infrarouge, CNRS, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 79(1), 31-46 (Eng). The previously reported (T. et al., 1977) study of the MeD spectrum occurring at 1033-1270 cm^{-1} which was mainly concerned with the ν_6 fundamental was extended to cover the region 1270-1420 cm^{-1} . In all, 342 transitions belonging to the ν_3 band are now assigned. Both the ν_3 and ν_6 bands are processed simultaneously taking into account of the Coriolis interaction between them, and the fitting of all the exptl. data led to 21 significant spectroscopic consts. for the states $\nu_6 = 1$ and $\nu_3 = 1$ of MeD.

C.A. 1980. 22N/2

CH_3D

7 Д418. Анализ полосы $\nu_3\text{CH}_3\text{D}$ в области 7,6 мк.
Analysis of the ν_3 band of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ at 7,6 μm . Tarrago
Ginette, Narahari Rao K., Pinkley L. W.
«J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 31—46 (англ.)

В продолжение работы (Pinkley L. W. et al. «J. Mol.
Spectrosc.», 1977, 68, 195—222), в которой исследовались
спектры CH_3D (I) в области 1053—1270 cm^{-1} , изучены
спектры I в области 1270—1420 cm^{-1} с разрешением
0,04 cm^{-1} . Идентифицированы 342 линии вращательной
структуры полосы ν_3 . Проведен анализ ИК-полос ν_3 и
 ν_6 I с учетом кориолисовых взаимодействий между ком-
понентами вращательной структуры этих полос. Опре-
делены 21 спектроскопич. константы для состояний
 $\nu_6=1$ и $\nu_3=1$ молекул I. Библ. 10.

М. Н.

Ф. 1980. N 4

1980

Ф. 06 м.м.ш

Эттикс 9077

1980

CH₃D

12 B235. Анализ ν_3 полосы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ около 7,6 мк.
Tarrago G., Rao K. N., Pinkley L. W. Analysis of
the ν_3 band of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ at 7.6 μm . «J. Mol. Spectrosc.»,
1980, 79, № 1, 31—46 (англ.)

Измерен в области частот 1270—1420 cm^{-1} с разреше-
нием 0,04 cm^{-1} спектр поглощения метана $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Анализ
спектра выполнен с учетом эффектов кватеричного и сек-
стичного центробежного искажения при учете кориолисо-
ва взаимодействия между $\nu_3=1$ и $\nu_6=1$ состояниями и
др. колебательных взаимодействий методом теории воз-
мущений. При анализе ν_3 полосы использованы данные
для 342 переходов. Вместе с ранее полученными данными
из ИК-спектра поглощения $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ в области частот от
1033 до 1270 cm^{-1} (Pinkley L. W. и др., «J. Mol. Spect-
rosc.», 1977, 68, 195) полученные результаты использова-
ны для расчета 21 молек. постоянной в состояниях $\nu_3=1$
и $\nu_6=1$. Для состояний $\nu_3=1$ и $\nu_6=1$, соотв., нулевые
частоты, равны $\nu_0=1306,836(2)$ и $1161,096(2)$ cm^{-1} , вра-
щательные постоянные $A=5,27208(7)$ и $5,26735(6)$ cm^{-1} ,
 $B=3,78294(6)$ и $3,83481(3)$ cm^{-1} . С. Н. Мурзин

М. П.

Q-1980.112

CH_3D

1981

Быков А. Д. и др.

и. н.

ЖС. прикл. спектроскопии,
1981, 34, N4, 735-739.

●
(см. CH_4 ; III)

1981

 CH_3D

(2)

спектр,

см.

9 Д491. Измерение спектрального пропускания в основной полосе ν_6 $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ около 8,65 мк. Spectral transmission measurements in the ν_6 -fundamental of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ at 8.65 μm . Varanasi Prasad, Kim S. J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 25, № 4, 301—305 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного CH_3D в смеси с водородом при конц-ии 13-моль% в слое 6,1 см при давлении 0,5 атм. с разрешением 0,2—0,4 cm^{-1} . Эксперим. кривые пропускания сравнены с рассчитанными на основании литературных данных о молекулярных постоянных и коэф. уширения для CH_4 водородом. Из этого сравнения определена интегр. интенсивность полосы ν_6 , равная 70 $\text{cm}^{-2}\text{atm}^{-1}$, что хорошо согласуется с литературными данными. Спектральный ход эксперим. данных для пропускания хорошо согласуется с рассчитанным, за исключением области $\sim 1135,5 \text{ cm}^{-1}$. Библ. 10. М. В. Т.

ф. 1981 N9

1981

C^2H_3D

18 Б291. CH_3D -некоторые важные особенности валентной области частот. Интерпретация Ферми дублета ν_1 и $\nu_2+\nu_{12}$; вращательные и центробежные постоянные для ν_5 , $\nu_2+\nu_3$ и ν_9 уровней. Verbist-Scieur Y., Courtois C. P., Fayt A. C_2H_3D —some important features of the valence region. Interpretation of the Fermi doublet ν_1 and $\nu_2+\nu_{12}$; rotational and centrifugal distortion parameters for the ν_5 , $\nu_2+\nu_3$ and ν_9 levels. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 480—492 (англ.)

ИК-спектр поглощения молекулы CH_3D записан в области $3270-2830\text{ см}^{-1}$ с разрешением лучше, чем $0,030\text{ см}^{-1}$. Наблюдены пять полос ν_1 , ν_5 , ν_9 , $\nu_2+\nu_{12}$, $\nu_2+\nu_3$. Дана интерпретация ряда наблюдаемых локальных возмущений в спектре. Изучен ферми-резонанс между колебаниями ν_1 и $\nu_2+\nu_{12}$. Используя известные вращательные и центробежные постоянные для основного колебательного состояния, измеренные частоты центров полос и линий дублета ν_1 , $\nu_2+\nu_{12}$, вычислены вращательные уровни энергии в колебательных состояниях ν_1 и $\nu_2+\nu_{12}$. Наблюден и качественно интерпретирован ферми-резонанс между колебаниями ν_1 и ν_5 . Определены эффективные вращательные и центробежные постоянные для ν_5 , $\nu_2+\nu_3$, ν_9 уровней энергии. Отмече-

М.Н.

Ж 1981 N 18

но, что из известных и полученных спектроскопич. постоянных для верхних колебательных состояний могут быть определены нек-рые из кубич. постоянных ангармоничности k_{ijl} и постоянных кориолисова взаимодействия ζ_{ij}^a .

В. М. Михайлов



CDH₃

1982

Mohan S., Rajaraman S.

u.n. Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, N2,
148-149.

(C₆H₅COH₂; III)

CH₃D

[Am. 18291]

1983

Chackerian C., Jr.,

спектр,
V₂,
интенсивн.

Astrophys. J., 1983,
273, N1, Pt. 2, 47-49.

CH₃D

1983

(ν_2)
numerical.

' 98: 116156h Direct retrieval of lineshape parameters: absolute line intensities for the ν_2 band of methane-D₁. Chackerian, C., Jr.; Guelachvili, G. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(2), 316-32. (Eng). A nonlinear least-squares technique was applied to the ν_2 band of MeD to obtain lineshape parameters (intensity, position, and broadening). Some self-shift parameters are also reported. For the ν_2 band of MeD, line intensities with $J'' \leq 15$ and $K' \leq 7$ are well represented with a squared vibrational transition dipole matrix element and Herman-Wallis factor equal resp. to $(8.798 \pm 0.014) \times 10^{-4}$ (debye)² and $F(m) = 1 + (0.0135 \pm 0.0004) m$. Intensity parameters are also reported for the ν_2 band of ¹³CH₃D. Rough ests. are given for Herman-Wallis factors for the P branches of the $2\nu_6$ transition of MeD.

@.A. 1983, 98, N 14

CH₃D

1983

1 Б1250. Прямое восстановление параметров формы линии. Абсолютные интенсивности линий в полосе ν_2 молекулы CH₃D. Direct retrieval of lineshape parameters: absolute line intensities for the ν_2 band of CH₃D. Chackerian C., Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 2, 316—332 (англ.)

Нелинейный МНК применен к анализу спектра полосы поглощения ν_2 молекулы CH₃D, для получения параметров формы линий (интенсивности, центра и ширины). Спектр записан на дифракц. спектрометре высокого разрешения, описание к-рого дано ранее («Nouv. Rev. Opt. Appl.», 1972, 6, 317). Основной результат работы состоит в определении абс. интенсивностей линий P - и R -ветвей. Для линий с $J'' \leq 15$ и $K'' \leq 7$ спектр хорошо воспроизводится величинами квадрата колебательного момента перехода $(8,798 \pm \pm 0,014) \cdot 10^{-4} D^2$ и фактора Германа — Уоллеса $F(m) = 1 + (0,0135 \pm 0,0004) m$. Приведены интенсивности ли-

м.п., ν_i ;

X. 1984, 19, n1

ний P - и R -ветвей и ряда линий Q -ветви. Грубые оценки факторов Германа — Уоллеса для P -ветвей полосы $2 \nu_6$ дают величины $F=1-0,0128 J$ для QR -переходов и $F=1-0,0128 J+0,01 K$ для PP -переходов. Отмечено, что полученные результаты для интенсивностей линий в полосе ν_2 могут быть использованы для более точного определения содержания CH_3D в атмосферах др. планет.

В. М. Михайлов



CH₃D

1983

10 Д467. Прямое определение параметров линий. Абсолютные интенсивности линий полосы ν_2 CH₃D. Direct retrieval of lineshape parameters. Absolute line intensities for the ν_2 band of CH₃D. Chackerian C., Jr., Guelachvili G. «J. Spectrosc.», 1983, 97, № 2, 316—332 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения газообразного метана $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ с примесью $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ в области 2070—2300 см⁻¹ при давл. ~1 мм рт. ст. в слоях от 5 см до 25 м. Разрешена структура Q-ветви. Калибровкой по линиям СО определены частоты линий. С точностью 3% измерены интенсивности линий, точность измерений проверена по линиям СО. Приведены измеренные частоты и интенсивности линий, а также рассчитанные с учетом нежесткости молекул интенсивности. Из интенсивностей линий определены матричные элементы дипольного момента и параметры фактора Германа — Уоллиса. Для некоторых линий измерены коэф. уширения и сдвига. Библ. 24. М. В. Т.

В. И. М. П.

99 1983, 18, N 10

CH₃D
CHD₃

1983

9 Б1048. Теория локальных колебаний для молекул симметрии C_{3v}: CH₃D, CHD₃, SiH₃D, SiHD₃. Local mode theory for C_{3v} molecules: CH₃D, CHD₃, SiH₃D, and SiHD₃. Halonen L., Child M. S. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 9, 4355—4362 (англ.)

Предложен трехпараметрич. модельный потенциал для описания вал. кол. в молекулах типа AH₃D и AH₃D (A=C, Si). Используемая модель связанных ангармонич. вал. кол. позволила получить хорошее согласие с известными эксперим. данными для CHD₃, SiH₃D и SiHD₃. Согласие между теор. и эксперим. данные для CH₃D несколько хуже вследствие сильного ангармонич. резонанса между вал. и деф. колебаниями. Обсуждена корреляция между колебательными состояниями, найденными в приближениях локальных и нормальных колебаний.

Б. И. Жилинский

2i;

(7) ☒

х. 1984, 12, 49



SiH₃D, SiHD₃

CH₃D

1983

5 Д79. Теория локальных колебаний для молекул симметрии C_{3v} : CH_3D , CHD_3 , SiH_3D и $SiHD_3$. Local mode theory for C_{3v} molecules: CH_3D , CHD_3 , SiH_3D , and $SiHD_3$. Halonen L., Child M. S. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 9, 4355—4362 (англ.)

Вычислены частоты валентных колебаний молекул типа AH_3D и AHD_3 ($A=C$ или Si) на основе трехпараметрич. модели потенц. энергии, в которой валентные колебания связей рассматриваются в виде локальных колебаний. Получено хорошее согласие с эксперим. данными, что дает возможность предсказать численные значения для ненаблюдаемых переходов. В частности, это полезно при отнесении частот в спектре CH_3D , как объекта, интересного для исследований в области астрофизики. Значения параметров выбранного гамильтониана, вычисленные и наблюдаемые частоты основных колебаний и обертонов представлены в виде таблиц. Построена корреляционная диаграмма, связывающая локальные и норм. колебания. Обсуждены детали расчета.

И. П. Яковлев

14;

17 (13)

ф. 1984, 18, № 5

CH₃D

1983

99: 202725v Monodeuterated methane in the outer solar system.
I. Spectroscopic analysis of the bands at 1.55 and 1.95 microns.
Lutz, Barry L.; De Bergh, C.; Maillard, J. P. (Planet. Res. Cent.,
Lowell Observ., Flagstaff, AZ 86002 USA). *Astrophys. J.* 1983,
273(1, Pt. 1), 397-409 (Eng). The anal. of the near-IR spectrum of
MeD near 6400 and 5100 cm⁻¹ is presented as the 1st of a series of
papers dealing with lab. studies of this mol. and with observational
searches for it in outer solar system objects. Three new parallel
bands which have locally perturbed upper states connecting with the
ground state are identified, and approx. rotational consts. are
derived. The band centered near 6425 cm⁻¹ and the 9613-Å band
previously analyzed by L. et al. (1978) form an apparent vibrational
progression with the ν_2 fundamental at 220 cm⁻¹, and vibrational
assignments of $3\nu_2$ and $5\nu_2$, resp., are proposed. Detailed comparison
of the rotational consts. of the states involved supports these
assignments.

UK chemistry

C.A. 1983, 99, ~24

CH₃D

1983

6 Л153. Уширенные азотом линии монодейтерометана в области 4,5 мкм при низких температурах. Nitrogen-broadened lines of monodeuterated methane in the 4.5 μm region at low temperatures. Varanasi P., Giver L. P., Valero F. P. J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1983, 30, № 6, 511—516 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения газообразного метана CH₃D в смеси с азотом при давл. $\sim 0,4$ атм и т-рах ~~100 и 200~~ K с разрешением $0,06 \text{ см}^{-1}$ в области $2100\text{—}2300 \text{ см}^{-1}$, где расположена полоса ν_2 . Сравнением рассчитанных спектров с наблюдаемыми определены ширины линий и рассчитаны коэф. самоуширения и уширения азотом. Температурные изменения этих коэф. согласуются с установленной ранее закономерностью $\gamma \sim T^{-1}$. Зависимость коэф. от номеров линий описана кубич. полиномом, параметры которого приведены в работе. Библ. 18. М. В. Т.

спектры
ИК-поглощения

сф. 1984, 18, № 6

CH₃D

1983

8 Б1221. Линии монодейтерированного метана в области 4,5 мкм при низких температурах, уширенные из-за присутствия азота. Nitrogen-broadened lines of monodeuterated methane in the 4.5 μm region at low temperatures. Varanasi P., Giver L. P., Valero F. P. J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1983, 30, № 6, 511—516 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением $0,06 \text{ см}^{-1}$ при 100 и 200 К измерены вращательные линии основной полосы ν_2 CH₃D в присутствии N₂. Установлено, что ширина исследуемых линий в 1,5 раза больше ширины линий CH₄ в аналогичных условиях и имеет такую же, как для линий CH₄, т-рную зависимость. Проведен теорет. расчет контура линий CH₃D и обсуждены причины уширения.

Н. Л. Арюткина

спектр

Х. 1984, 19, № 8

CH_3D

1984.

Bermejo D., Montero S.

J. Chem. Phys., 1984,
81, N 9, 3835-3841.

ссыл.
поиск,
Vi;

● (ссыл. CH_4 ; III)

CH₃D

1984

12 Л196. Расщепления в полосе ν_6 $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Splittings in the ν_6 band of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Boyle R. J., Jennings D. E. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 1, 199—202 (англ.)

С помощью спектрометра с перестраиваемым диодным лазером получены спектры ИК-поглощения газообразного CH_3D в области полосы ν_6 с разрешением, ограниченным доплеровским уширением. Измерены расщепления компонент A1- и A2-линий в сериях $^R R_3$, $^P R_3$, $^P Q_3$ и $^P P_3$. Приведены величины расщеплений. Для переходов $\Delta K = -1$ измеренные величины хорошо согласуются с полученными ранее и с теоретич. предсказаниями. Для переходов $\Delta K = +1$ полученные впервые эксперим. данные лежат выше предсказанных теоретически, это заставляет переопределить константу расщепления. М. В. Т.

$\nu_i, \text{см}^{-1}$;

ф. 1984, 18, N 12.

CH₃D

1984

20 Б1255. Расщепление полосы ν_6 $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Splittings in the ν_6 band of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. BouTe R. J., Jennings D. E. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 1, 199—202 (англ.)

Экспериментально исследовано расщепление на две компоненты (A1—A2) отдельных линий R-, Q- и R-ветвей в области колебат.-вращат. полосы $\nu_6 \sim 1198,54 \text{ см}^{-1}$ $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ (I), обусловленное колебат.-вращат. взаимодействиями (напр., кориолисовым взаимодействием с колебанием ν_3 I). Спектры поглощения газ. (давл. $\sim 0,12$ Торр) I зарегистрированы на спектрометре с перестраиваемым полупроводниковым лазером с разрешением $\sim 0,003 \text{ см}^{-1}$. Величина расщепления (γ) A1—A2 составляет $0,0231 \pm 0,002 \text{ см}^{-1}$. Расщепление увеличивается с ростом J. Произведено сопоставление со значениями γ ($\sim 0,0199 \pm 0,0003 \text{ см}^{-1}$), найденными др. авторами. Полученные значения γ несколько выше.

А. В. Бобров

$\nu_i, \text{ см}^{-1}$;

х. 1984, 19, № 20

CH₃D

1984

100: 111357z Splittings in the ν_6 band of methane-d₁. Hoyle, R. J.; Jennings, D. E. (Dep. Phys. Astron., Dickinson Coll., Carlisle, PA 17013 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 104(1), 199-202 (Eng). In diode laser spectra measurements on MeD, the splittings in the ν_6 are, although somewhat larger, in good agreement with those predicted by L. W. Pinkley et al. (1977) for transitions in the $k'' = 3$ subbands out to $J = 17$. A new value for the splitting coeff. was obtained as $\gamma = 0.0212 \pm 0.0002 \text{ cm}^{-1}$. The coeff γ can be considered as an effective parameter characterizing the A1-A2 splitting due to rovibration effects in the upper state of ν_6 , particularly the Coriolis interaction with ν_3 .

(X)
комб. транзит.
выявлено.

с.А. 1984, 100, N 14

CH_3D

1984

Voth Gregory A.,
Marcus R. A., et al.

cf. n.,
Vi;

J. Chem. Phys., 1984, 81,
N 12, Pt 1, 5494-5507.

●
(see CHD_3 ; III)

CH₃D

1985

1 Л206. Измерения интенсивностей полос ν_3 и ν_6 ¹²CH₃D с помощью диодного лазера. Diode laser measurements of the band strengths of ν_3 and ν_6 in ¹²CH₃D. Boyle R. J., Halsey G. W., Jennings D. E. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1985, 33, № 4, 411—414 (англ.)

С помощью перестариваемого диодного лазера получены спектры ИК-поглощения газообразного метана CH₃D в области полос ν_3 и ν_6 при давл. 0,13—0,56 мм рт. ст. с разрешением 10^{-4} см⁻¹. Контуры линий описаны доплеровским контуром, что позволило найти интегр. интенсивности линий. В эти величины введены поправки, учитывающие уширение линий давлением и конечную ширину аппаратной ф-ции. С использованием литературных данных для относительных интенсивностей линий определены абс. интенсивности полос ν_6 (62 см⁻²/атм) и ν_3 (49 см⁻²/атм). Найденные величины сравниваются с данными других авторов. М. В. Т.

ν_6 ;

ср. 1986, 18, n1.

CH₃D

1985

Ж 6 Л202 Д. Интерпретация поглощения $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ в области 6—10 ммк. Одновременное исследование полос ν_3 , ν_5 и ν_6 . Interprétation de l'absorption de $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ dans la région 6—10 μM . Etude simultanée des bandes ν_3 , ν_5 et ν_6 . Delaveau Muriel. Thèse. Doct. 3^{me} cycle. Univ. Paris-Sud. Centre Orsay, 1985. 180 p., ill. FR (англ.)

В диссертации содержится фурье-анализ ИК-спектра поглощения молекулы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ (I) в области 1029—1700 cm^{-1} , обусловленного тремя фундаментальными полосами ν_3 при 1471 cm^{-1} , ν_3 при 1305 cm^{-1} и ν_6 при 1160 cm^{-1} , с разрешением 0,005 cm^{-1} . Дано отнесение более 3000 линий, в том числе 1000 линий, соответствующих запрещенным переходам. Производные дипольных моментов полос и спектроскопич. постоянные использованы для расчета частот и абс. интенсивностей линий поглощения изученной триады полос молекулы I. Библ. 44.

А. М. М.

М.П.

СН₃Д

1985

7 Б1333 Д. Интерпретация спектра поглощения молекулы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ в области 6—10 мкм. Совместный анализ полос ν_3 , ν_5 и ν_6 . Interprétation de l'absorption de $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ dans la région 6—10 μM . Etude simultanée des bandes ν_3 , ν_4 et ν_6 . De la veau Muriel. Thèse. Doct. 3^{me} cycle. Univ. Paris-Sud. Centre Orsay, 1985. 180, ill. (фр.)

Диссертация. Изложены основы теории колебательно-вращат. взаимодействия в молекулах симметрии C_{3v} и метода контактных преобразований. Построен эфф. колебательно-вращат. гамильтониан для первых возбужденных состояний колебаний резонансной триады ν_n , ν_t , ν_i . Проведена редукция гамильтониана, факторизация матрицы гамильтониана по типам симметрии. Составлены программы для анализа ИК-спектра на ЭВМ. Выполнен анализ вращат. структуры ИК-полос ν_3 , ν_5 и ν_6 молекулы CH_3D и определены значения молек. констант.
Е. В. Алиева

М.П.

Х. 1988, 19, № 7

CH_3D

1985

Perry J. W., Moll D. J.,
et al.

Vibr. J. Chem. Phys., 1985,
82, N3, 1195-1211.

($\bullet$ CH_4 ; III)

CH₃D

от 25697 1986

5 Б1330. Определение постоянной A_0 молекулы CH₃D по частотам переходов, разрешаемых возмущениями. Determination of A_0 for CH₃D from perturbation-allowed transitions. Chackerian C., Bus E. S., Olson W. B., Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 355—360 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

На фурье-спектрометре с разрешением $0,0054 \text{ см}^{-1}$ исследован ИК-спектр поглощения молекулы CH₃D вблизи 2300 см^{-1} . Идентифицирована вращат. структура полосы $2\nu_6$ ($J \leq 16$), включая линии запрещенных переходов с $\Delta K = \pm 3$, разрешаемых за счет колебательно-вращат. взаимодействия. Из частот разрешенных и запрещенных переходов составлены комбинац. разности, зависящие только из констант основного состояния, из к-рых вычислены значения вращат. и центробежных постоянных для основного состояния CH₃D: $B_0 = 3,880196$, $A_0 - B_0 = 1,370627$, $D_J = 5,2622 \cdot 10^{-5}$, $D_K = -7,869 \cdot 10^{-5}$, $D_{JK} = 1,2634 \cdot 10^{-4}$, $H_J = 1,403 \cdot 10^{-9}$, $H_{JK} = 1,152 \cdot 10^{-8}$, $H_{KJ} = -6,26 \cdot 10^{-9} \text{ см}^{-1}$. Е. В. Алиева

(м.п.)

X. 1987, 19, №5

CH₃D

1986

Om. 25697

104: 233193w Determination of A_0 for methane-d from perturbation-allowed transitions. Chackerian, C., Jr.; Bus, E. S.; Olson, W. B.; Guelachvili, G. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(2), 355-60 (Eng). Ground state combination differences obtained from normally allowed and perturbation-allowed transitions in the $2\nu_6$ band of MeD were fit to obtain the rotational const. values: $A_0 = 5.2508231 \pm 0.0000043$ cm⁻¹, and $D_0^K = (-7.869 \pm 0.23) \times 10^{-2}$ cm⁻¹.

(D_0^K, ν_6)

C.A. 1986, 104, N26

CH₃D

om. 25697

1986

12 Л174. Определение вращательной постоянной A_0 молекулы CH₃D по переходам, разрешенным возмущениями. Determination of A_0 for CH₃D from perturbation-allowed transitions. Chackerian C., Jr., Bus E. S., Olson W. B., Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 355—360 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Для вращательных уровней с $J \leq 16$ основного колебательного состояния молекулы CH₃D вычислены комб. разности частот разрешенных и запрещенных (с $\Delta K = \pm 3$) переходов в ИК-полосе $2\nu_6$. При этом использованы ИК-данные авторов, полученные ранее с помощью фурье-спектрометра с разрешением $0,0054 \text{ см}^{-1}$. Из полученных комб. разностей вычислены значения вращательных и центробежных постоянных для основного состояния CH₃D, включая постоянные A_0 и D_k , которые не могут быть определены по одним только разрешенным переходам.

М. Р. Алиев

(м.п.)

Ф. 1986, 18, N 12.

CH₃ D

[Om. 25209]

1986

Devi V.M., Rinsland C.P.,
Benner D. Ch., Smith M.H.,
et al.,

абсолютн.
измерения,

13

Appl. Opt., 1986, 25, N 11,
1848 - 1853.

H_3CD

1986

Graner Georges,
Buerger Hans.

ноетн.
центро-
бенн.
уеконен.

J. Mol. Spectrosc. 1986,
115(2), 393-418.

(см. SiH_3Cl ; III)

CH₃D

1986

105: 161153d Triad $\nu_n(A_1)$, $\nu_t(E)$, $\nu_r(E)$ in C_{3v} molecules: energy and intensity formulation (computer programs). Tarrago, G.; Delaveau, M. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(2), 418-25 (Eng). The lower frequency IR absorption of XH₃D and XD₃H (X = C, Si, Ge, Sn) is due to the 3 bending modes $\nu_n(A_1)$, $\nu_t(E)$, $\nu_r(E)$, forming a triad with rather strong Coriolis couplings. Formulation and computer programs suitable for analyzing such a triad are presented. Wavenumbers and abs. line strengths were calcd. according to the strict selection rules on J and symmetry species, without any restriction on K , so that the perturbation allowed transitions are accounted for in a straightforward manner. Programs were developed allowing either to fit the energy parameters in the ground state (via ground state differences) and the triad upper states $\nu_n = 1$, $\nu_t = 1$, $\nu_r = 1$, or to predict frequencies and intensities for the whole absorption covered by the triad ν_n , ν_t , ν_r .

(Ogeop.)

(73) ☒

C.A. 1986, 105, n18



SiH₃D, GeH₃D,
SnH₃D

CH₃D

1987

Р 6 Л197. Вращательная структура обертоновых переходов CH₃D вблизи 13 500 см⁻¹. Rotational structure of overtone transitions of CHD₃ near 13 500 cm⁻¹. Cam-
p a r g u e A., Stoeckel F., Chenevier M., Kraiem H. Ben.
«J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 10, 5598—5605 (англ.)

Методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии изучен колебательно-вращательный спектр CH₃D, обусловленный обертоновыми переходами по валентной, ν_s и деформационной, ν_b , СН-колебательным модам. С разрешением 0,02 см⁻¹ измерены положения линий вращательной структуры 4 полос, соответствующих переходам в колебательные состояния $N_1(\nu_s=N, \nu_b=0)$, $N_2(\nu_s=N-1, \nu_b=2)$ для $N=5$. В результате анализа определены вращательные постоянные CH₃D для возбужденных колебательных состояний. С включением литер. данных представлена сводка значений вращательных постоянных вплоть до $N \leq 6$. Получены и обсуждены зависимости вращательных постоянных от ν_s и ν_b .
Библ. 21.

В. К.

М.Л.

Ф. 1988, 18, N 6

CH₃D

1987

57 J1156. Диодно-лазерные измерения интенсивностей и полуширин линий в полосе ν_6 $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Diode-laser measurements of intensities and halfwidths in the ν_6 band of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$. Devi V. Malathy, Benner D. Chris, Rinsland Curtis P., Smith Mary Ann H., Thakur K. B. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 122, № 1, 182—189 (англ.).

и.п.

При комнатной температуре с разрешением, ограниченным доплеровским пределом, измерены абс. интенсивности 22 линий P и R подполос в ИК-спектре поглощения перпендикулярной полосы ν_6 $^{12}\text{CH}_3\text{D}$, полученном с помощью перестраиваемой диодно-лазерной системы. Выявлено, что, хотя интенсивности линий определены с точностью $\approx 3\%$, найденные по ним значения квадрата колебательного момента перехода отличаются в пределах $\approx 500\%$. Предположено, что наблюдаемые отличия обусловлены взаимодействиями Корриолиса между ν_6 и ν_3 , ν_5 колебательными модами. Для 24 линий определены лорентцевские коэф. уширения воздухом и N_2 . Отмечена их практически одинаковая эффективность уширения.

В. К.

ф. 1987, 18, № 7

CH₃D

DM 28 249

1987

* 5 Л168. Поглощение $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ в области 6—10 мкм: триада $\nu_3\nu_5\nu_6$. Absorption of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ at 6—10 μm : triad ν_3 , ν_5 , ν_6 . Tarrago G., Delaveau M., Fusina L., Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 149—158 (англ.)

В области 6—10 мкм изучен ИК-спектр поглощения $^{12}\text{CH}_3\text{D}$, в газовой фазе, полученный с помощью фурье-спектрометра при комн. т-ре и давл. 0,103; 0,973 мм рт. ст. С разрешением $0,0054\text{ см}^{-1}$ измерены положения ~3500 линий, образующих колебательно-вращательную структуру возмущенных взаимодействием Кориолиса полос ν_3 , ν_5 , ν_6 . В результате колебательно-вращательного анализа, учитывающего взаимодействие Кориолиса между $(\nu_3\nu_5)$, $(\nu_3\nu_6)$ и $(\nu_5\nu_6)$ соответственно, рассчитаны молекулярные постоянные $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ для основного и возбужденных ($\nu_3=1$, $\nu_5=1$, $\nu_6=1$) колебательных состояний. Библ. 26. В. К.

М.П.

Р. 1988, 18, N5

CH₃D

[Am. 28249]

1987

107: 245557t Absorption of deuteromethane (¹²CH₃D) at 6-10 μ m: triad ν_3 , ν_5 , ν_6 . Tarrago, G.; Delaveau, M.; Fusina, L.; Guelachvili, G. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 126(1), 149-58 (Eng). The absorption of ¹²CH₃D at 6-10 μ m was recorded under vacuum with a resolu. of 0.0054 cm⁻¹. For the 1st time, the ν_5 band was assigned extensively, allowing the anal. of ν_3 , ν_5 , and ν_6 together within a triad model, including a rigorous treatment of all the Coriolis couplings involved. The assignments in the spectral range were enlarged from the original 1000 to the present 3500. The newly assigned lines essentially concerned the ν_5 band and a great no. of perturbation-allowed transitions (about 30% of all observations). Ground state energy parameters were refined from 2641 combination differences involving J up to 19 and $|\Delta K|$ up to 6; the std. deviation of the fit was 0.0003 cm⁻¹. A set of 35 triad upper state energy parameters was derived, reproducing all observations with a std. deviation of 0.0076 cm⁻¹. The 3 dipole moment derivs. involved in the intensity calcs. were estd. theor., by taking advantage of the recent detn. of the band strengths S_3 and S_4 of ¹²CH₄. Finally, about 6000 triad transitions predicted with line strengths at least equal to 4×10^{-25} cm⁻¹ were tabulated with assignments, wavenumbers, line strengths, and lower and upper energy levels.

(Pi)

C.A. 1987, 107, N 26

CH₃D

от. 28 249

1987

7 8 Б1307. Спектр поглощения молекулы ¹²CH₃D в области 6—10 мкм: триада ν_3 , ν_5 , ν_6 . Absorption of ¹²CH₃D at 6—10 μ m: triad ν_3 , ν_5 , ν_6 . Tarrago G., Delaveau M., Fusina L., Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 149—158 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением 0,005 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения молекулы CH₃D в обл. 6—10 мкм. Идентифицировано около 3500 линий вращат. структуры полос ν_3 , ν_5 и ν_6 , из к-рых около 30% относятся к «запрещенным» переходам с $\Delta(k-l) > 0$. Анализ спектра выполнен с учетом ангармонич., кориолисовых и l -резонансов. Определены значения эффективных параметров полос. Составлено 2640 комбинац. разностей частот линий для основного состояния, из к-рых вычислены значения вращат. постоянных и постоянных кватичного и секстичного центробежного искажения для основного колебат. состояния. Измерены также интегральные интенсивности полос, из к-рых определены пр-ные дипольного момента по н. координатам.

Е. В. Алиева

М.П.

х. 1988, 19, №8

¹²CH₃D

1988

1 Л246. Абсолютные интенсивности поглощения в триаде ν_3 , ν_5 , ν_6 молекулы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ в области 6—10 мкм. Absolute absorption intensities in the triad ν_3 , ν_5 , ν_6 of $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ at 6—10 μm / Tarrago G., Restelli G., Cappellani F. // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 129, № 2.— С. 326—332.— Англ.

С помощью диодно-лазерного спектрометра получен ИК-спектр газа $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ при давл. от 0,15 до 2,0 мм рт. ст., т-ре 296 К. Измерения велись в области 1062—1480 cm^{-1} . Из анализа интенсивностей 80 линий, принадлежащих полосам ν_3 , ν_5 и ν_6 молекулы $^{12}\text{CH}_3\text{D}$, определен ряд молекулярных постоянных молекулы и значения интегр. интенсивностей указанных полос, равные 40,1; 13,4; 53,2 $\text{cm}^{-2} \text{ атм}^{-1}$ при 296 К. Библ. 20. Н. И. Ф.



сп. 1989, №1

СМЗ Д

1988

Жинзков А.С.,
Макушкин Ю.С. и др.

Оптика атмосф.
и.п.
1988. 1, № 11, с. 3-9.

(св.  СН₄; III)

CH₃D

(DM 34461)

1990

Makeyshkin Yu. S.,
Ulenikov O. N. et al.

et al. J. Phys. B 1990, 23, N. 7,
1149 - 1163.

Anharmonic cubic force
field of methane.

CH₃D

(DM 35181)

1990

McC Dowell R.S.,
J. Chem. Phys. 1990, 93,
N4, 2801-2811.

Rotational partition functions
for symmetric-top molecules.

CH₃D

1996

124: 159036s Near-Infrared and Visible Spectroscopy of CH₃D in Liquid Argon Solutions. Blunt, Victor M.; Brock, Ansgar; Manzanares I., Carlos (Department of Chemistry, Baylor University, Waco, TX 76798 USA). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(11), 4413-19 (Eng). The near-IR and visible spectra of CH₃D in liq. Ar solns. were measured around 95 K. The fundamental and overtones, $\Delta v = 1, 2, 3, 4$, and 5 around the C-H stretch and $\Delta v = 1, 2$, and 3 of the C-D stretch, are reported. Combination bands between 3500 and 5000 cm⁻¹ ($\Delta v = 3/2$) and between 6500 and 7600 cm⁻¹ ($\Delta v = 5/2$) of the C-H stretching vibration were also measured. Measurements were made using a cryostat, a low-temp. cell, and a FTIR and near-IR spectrometer. Visible spectra were recorded with a photoacoustic spectrometer employing resonant continuous wave laser excitation and piezoelec. detection. Spectra in solns. are greatly simplified compared to the gas phase. This simplification is attributed to a narrowing of the rotational distribution at low temps. and partial hindering of the rotational motion of sample mols. Peak positions are systematically red shifted with respect to the gas phase, and the magnitude of the shift increases with the vibrational quantum no. Numerous transitions unobserved in the gas phase carry

(UK, Vi)

C. A. 1996, 124, N12.

oscillator strength in soln.; thus, significant intensity redistribution occurs in the soln. environment. The harmonic frequency and anharmonicity were obtained from a Birge-Sponer fit of the C-H vibrations, and the interbond coupling parameter was obtained from the obsd. splitting of the fundamental C-H stretch. These 3 parameters were used with a harmonically coupled anharmonic oscillator model to calc. frequencies and assign absorption bands.

CH₃D

1998

kon. -fp
are any
uk chelmy

129: 195061h Vibrational-rotational analysis of the high resolution IR spectrum of the $3V_2$ state CH_3D molecule. Zhou, Zeji; Zhu, Qingshi (Bond Selective Open Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Guangpuxue Yu Guangpu Fenxi* 1998, 18(3), 279-288 (Ch), Beijing Daxue Chubanshe. High-resoln. Fourier transform spectra of the band of the CH_3D mol. near 6428 cm^{-1} have been recorded on a BRUNKER IFS 120HR Fourier-transform spectrometer with multipass cell with a length of 20 m, an unapodized resoln. of 0.004 cm^{-1} was achieved. Vibration-rotation anal. in Local-mode can provide accurate enough initial values to predict the band origins. The vibration-rotation transitions of CH_3D mol. were assigned by using the ground state combination differences and least-squares fitted to yield ten vibration-rotation consts. for the band of CH_3D mol. near 6428 cm^{-1} . Vibration assignment in Normal-mode and Local-mode expressed that the band of CH_3D mol. near 6428 cm^{-1} is $3V_2$ vibration states of CH_3D mol.

CA. 1998, 128, N15

1999

F: CH3D

P: 3

131:315276 High resolution spectroscopic study
of CH3D in the region 5900 cm⁻¹. Deng, Ke;
Wang, Xiaogang; Lin, Hai; Wang, Dong; Zhu, Qingshi
Open Laboratory of Bond-Selective Chemistry,
University of Science and Technol China Anhui
230026, Peop. Rep. China Mol. Phys., 97(6),
787-795 (English) 1999 The vibrational
overtone band of MeD at 5900-6100 cm⁻¹ was recorded
by a high resolu. FTIR spectrometer. Rotational
analyses were performed sep. parallel 2.nu.4(A1)

and perpendicular $2\nu_4(E)$ bands, whose origins are at 6022.21 cm^{-1} , resp. The A_1 band displays J-resolved rotational structure while the K structure is resolved only at higher J values. A resonance Hamiltonian with the polynomial $P = 2n_1 + 2n_4 + n_5$ is derived using the 4 order Canonical Van Vleck Perturbation Theory to show that the $2\nu_4(A_1)$ and $2\nu_4(E)$ are vibrationally perturbed by Fermi and Darling-Dennison resonances. The observation of rotational l-resonance in the $2\nu_4(E)$ band is a consistent evidence of the mixing of the vibrational states with different l values.

2000

F: CH3D

P: 3

132:172702 The infrared spectrum of CH3D
between 900 and 3200 cm⁻¹: exten assignment and
modeling. Nikitin, A.; Champion, J. P.;
Tyuterev, V. G.; Brown, L. R.; Mellau, G.; Lock, M.

Laboratory of Theoretical Spectroscopy
Institute of Atmospheric Optics, Russian Academy of
Sciences Tomsk, Russia J. Mol. Struct.,
517-518, 1-24 (English) 2000 The high resolu. IR
spectrum of MeD at 900-3200 cm⁻¹ was analyzed from
FTIR spectra recorded at Kitt Peak and at Giessen.

C. A. 2000, 132

A theor. model for an effective Hamiltonian in terms of irreducible tensor operators recently adapted to sym. top mols. was used to consider simultaneously all available transitions between the lowest 3 polyads of the mol.: the Ground State (G.S.), the Triad (3 interacting fundamental bands in the 8 μm region) the Nonad (9 interacting bands in the 4 μm region). A preliminary simultaneous fit of 3467 Triad-G.S., 5208 Nonad-G.S., and 2487 Nonad-Triad (hot band) transition wavenos. was done. The std. deviations achieved were 2.1, 4.7, and 4.3 $\times 10^{-3}$ cm^{-1} , resp. A preliminary anal. of the transition intensities was undertaken at a level of precision of the order 5% or better.

2000

F: CH3D

P: 3

132:172693 Study on the Rovibrational Interactions and $\nu_3/\nu_5/\nu_6$ Triad of CH3D. Ulenikov, O. N.; Onopenko, G. A.; Tyabaeva, N. E.; Schroderus, J.; Alanko, S. Laboratory of Molecular Spectroscopy, Physics Department, Tomsk State University Tomsk 634050, Russia J. Mol. Spectrosc., 200(1), 1-15 (English) 2000 High-resoln. FTIR spectrum of MeD was recorded in the region of the fundamental bands ν_3 , ν_5 , and ν_6 between 900 and 1700 cm^{-1} . High sensitivity of the equipment used as well as high accuracy of the recorded line positions gave

C.A. 2000, 132

energies with accuracy close to the exptl. uncertainty were detd.

the possibility of assigning the 1st-time transitions with the upper state J quantum no. up to 23. In the anal. the new ground vibrational state information (U. et al., 1999) were used. Modification the Hamiltonian model of the interacting vibrational states ($v_3 = 1$), ($v_5 = 1$), and ($v_6 = 1$) allowed the theor. description of numerous effects and peculiarities in the spectrum. Sets of a_1/a_2 splittings were assigned and explained, for upper state $K = 1$ and 2 and for $K = 4$ and 5. Unusually exotic splittings were found for $K = 7$. The spectroscopic parameters reproducing the initial exptl.

F: CH3D

P: 3

2000

132:285614 Rotational Analysis of the Ground State
and the Lowest Fundamentals .nu.3, .nu.5, and .nu.6 of
13CH3D. Ulenikov, O. N.; Onopenko, G. A.; Tyabaeva, N.
E.; Anttila, R.; Alanko, S.; Schroderus, J. Laboratory
of Molecular Spectroscopy, Tomsk State University
Tomsk 634050, Russia J. Mol. Spectrosc..
201(1), 9-17 (English) 2000

C. H. 2000

The .nu.3, .nu.5, and .nu.6 fundamental bands of the 13MeD mol. were studied with FTIR spectroscopy. The spectra and results for the parent species 12MeD (O. N. Ulenikov, G. A. Onopenko, N. E. Tyabaeva, J. Schroderus, and S. Alanko, J. Mol. Spectrosc. 193, 249-259(1999)) were used to assign and analyze ~1900 lines belonging to the 13MeD isotopic species. About 850 ground state combination differences with $\Delta K = 0$ were calcd., which allowed one to det. the J- dependent ground state rotational consts. The K-dependent consts. as well as those describing the a1-a2 (K = 3) splitting were fixed to the values obtained for the 12MeD species. The ($\nu_3 = 1$), ($\nu_5 = 1$), and ($\nu_6 = 1$) states were fit simultaneously by including the intervibrational interactions in the Hamiltonian. The rotational energies, the rotational and centrifugal distortion consts., as well as the resonance parameters involving the 3 states were detd. and discussed.