

C-S-H-(2)

C_2H_5S (w) 4999

1933

Thatte V. N., Ganesan A.S.

Phil. Mag. 1933, 15, 51-64

"Raman effect in organic sulfides
and some thio compounds."

C_2SH_5

to 2

c.a., 1933, 3668

~~9032~~ BP-1555-11

1941

J (H_2O , CH_3OH , C_2H_5OH , $(CH_3)_2O$,

H_2S , C_2H_5SH , $(CH_3)_2S$, $(C_2H_5)_2S$, NH_3 , $(CH_3)_3N$,

$HCHO$, CH_3CHO , $H_2C:CHCl$, $ClCH:CHCl$)

Sugden T.M., Walsh A.D., Price W.C.
Nature 1941, 148, 372-3

"Ionization ...

40 C_4SH_{10}

C.A., 1942, 336⁴

EST. P. K.

92

мисциско-
бутан

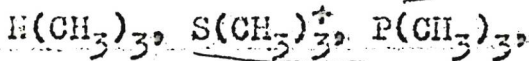
Scott D.W. и др.

1953

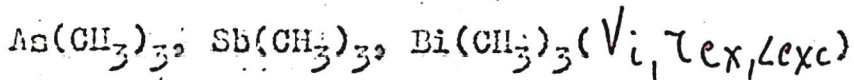
У. Амер. Chem. Soc., 75, 2795

Обсуждаются спектры,
дано ΔH° , рассчитаны
т.-д. ф-ции до $1000^\circ K$

1712 - 14 BP



1953



Siebert H.

Z. anorgan. und allgem. Chemie,
1953, 273, H 3-5, 161-169 /
Kraftkonstanten von Methyl-
verbindungen ...

PX., 1954, H 12, 30224

10



C_3SHg^+

C₃H₈S

пропантисол

J. P. Mc. Culough
H. L. Finke, D. W. Scott
и др.

1954

685

т. г. гр.

т. г. св-ва

спектр. данные

Rep. "J. Amer. Chem. Soc."

76, 4796, 1954

$C_2H_4S_2$ (Di)

5014

1956

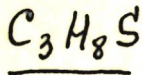
Mecke R., Spiesscke H.

Chem. Ber., 1956, 89, 15, 1110-1116 (chem).

Das Infrarotspectrum der Dithioessigsäure

Pre Xuv, 1958, 13, 6938 | 10

2



R. E. Penington.

D. W. Scott, H. L. Finke

1956

684

т. г. св-ва

Т. г. ср.

мош. структ

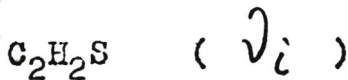
Rep. "J. Am. Chem. Soc."

78, 3266, 1956.

HI

1958

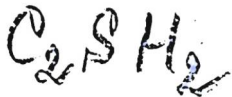
4997



Devis R.E.

J. Organ. Chem., 1958, 23, N2, 216-218

Циклические сульфиды...



J

J

8892

1958

CH_3S , $\text{C}_2\text{H}_5\text{S}$ (1)

Scott D.W., McCullough J.P.,

J. Amer. Chem. Soc., 1958, 80, N 14,
3554-3558

Характеристические колебательные...

J

C-H-S

~~Mr~~ C. A. Frenzel, D. W. Scott, 1960
Mc. Cullough . . . 687

(U. K. Cherp) "Bureau of mines
report of investigations"
5658

2034

1962

C_2H_2 , CH_3F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3J , CH_3OH ,

CH_3SH , CH_3SiH_3 , CH_3GeH_3 , C_2H_4HD , C_2H_4O ,

C_2H_4S , CH_3NH_2 , CH_3Li (A), C_2H_6 (AD)

Bykow G.W.

J. Prakt. Chem., 1962, 16,

II 1-283-112

Die Bindung ...

J, II

C_2SH_4

B99 - 1489-II; 1561

H_2O , CH_3OH (A.)

1962

S_2 , CH_3S_2 (J.)

Hobrock B.G., Alcor R.W.

J. Phys. Chem., 1962, 66, 119.

1540-1650 (cm⁻¹)

Electron impact spectroscopy of
sulfur compounds. 1.2 - thiobutane,
2-thiopentane, and 2,3 - dithiobutane

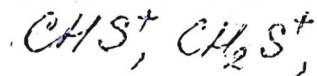
1963, 146 44



CS_2/H_2

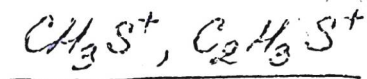
cm⁻¹
open

W



BP-9672-IV

1962



Hobrock B. G.,
Kiser R. W.

(A. P.)

J. Phys. Chem., 1962,
66 (8), 1551-2

1962

5003

CH_3SCH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{SCH}_3$ (Do), HSC_2H_5 (Do)

Mackle H., Mayrick R.G.

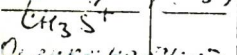
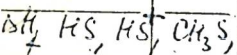
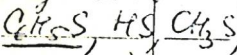
Trans. Faraday Soc., 1962, 58, 121, 33-9

Studies in the ...

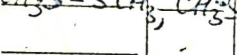
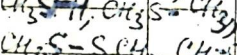
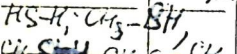
M, J

C_3SH_8

Потенциал
кислотности
различия



Диссоциация
связи диссоциирует



1962.

Palmer T.F., Hossing F.P.

J. Amer. Chem. Soc. 84, n24, 4661

измерение скорости разложения
молочной кислоты метилсульфидом.

XXVIII Потенциал окисления и

температура кипения.

$\text{C}_6\text{H}_5(\text{SH})\text{I}$

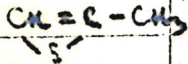
IB409 Scott D.W., Good W.D., 1962
Todd S.S. и др.

3,3-диметил-2-тиобутан. Химико-термодинамические св-ва и барьеры внутреннего вращения.

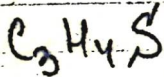
" J. Chem. Phys. ", 1962, 36, №2, 406

(См. $C_5H_{12}S$) II

Ф-1963-I



мт спектры



12 Д154. Микроволновой спектр сульфида пропилена. Butcher Samuel S. Microwave spectrum of propylene sulfide. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 9, 2310—2311 (англ.)

Из микроволн. спектра сульфида пропилена определена высота потенц. барьера внутреннего вращения метильной группы. Полученное значение 3240 кал/моль находится в хорошем согласии со значением, вычисленным другими авторами из спектров поглощения в далекой ИК-области.

ф. 1963. 127

$(C_2H_5S)_2$

BP-1865-II | 1963

(A.P.)

Cowenlock B.G.,
Kay J., Majer J.R.

Trans Faraday Soc., 1963,
59 (11), 2463-8

$(C_2H_5)_2S$

BD-1865-II | 1963

(A.P.)

Cowenlock B.G.,
Kay J., ...

Trans. Faraday Soc., 1963,
59 (11), 2463-8

CH₃SCD₃

B.D. - 1865 - II

1963

(A.P.)

Gowenlock B.G.,
Kay J., ...

Trans. Farad. Soc., 1963,
59(11), 2463-8

1963'

7987

C_2H_6S , CH_3SSSCH_3 (I), C_2H_5SH , CH_2S_2H (J)

Hobrock B.G., Kiser R.W.

J. Phys. Chem., 1963, 67, N 6,
1283-1286

Electron impact ...

J

$C_2S_3H_6$

1964

Me₂S

Et₂S

Me₂S₂

u gp.

микроволн.

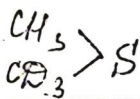
спектр

C.A. 1965

63.5

51376

Microwave spectra of organosulfur compounds. N. M. Pozdeev, L. I. Panikovskaya, R. S. Nasibullin, I. M. Evdokimov, and L. A. Tikhomirov. *Khim. Seraorgan. Soedin., Soderzhashch. v Neft. i Nefteprod., Akad. Nauk SSSR, Bashkirsk. Filial* 7, 237-42(1964)(Russ). Spectra of Me₂S, Et₂S, Me₂S₂, iso-PrSMe, MeSPh, thiophene, thiophane, 3-methylthiophene, thiacyclohexane, and PrSH were scanned, 15,000-40,300 Mc., on a spectrograph with modulation of the Stark voltage at 62.5 kc. and max. sensitivity of 10^{-9} cm.⁻¹ and provided with an elec. oscillograph. The no. of lines depends on the spectrum intensity. Lighter mols. and the mols. with higher dipole moments had the more intensive spectra. Mols. contg. the Me group gave lines with fine structure, which was caused by Me group vibration. For Me₂S, the following transitions were identified: $1_{-1} \rightarrow 1_1$, $2_{-2} \rightarrow 2_0$, $3_{-3} \rightarrow 3_{-1}$, and $1_{-1} \rightarrow 2_{-1}$; vibration consts. calcd. were $A = 17,809.4$ Mc., $B = 7621.19$ Mc., $C = 5717.9$ Mc., and $x = 0.685185$. These consts. corresponded to a fixed model of the mol. without internal vibration according to the spectra which possessed the transitions with small magnetic no. J : Microwave spectra were used for qual. analysis of complex mixts. of organosulfur compds. J. Vachek

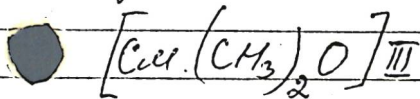


Perchard J.-P.

1968

These doct.-ingr. Fac. sci
Univ. Paris, 1963, L'uisant-
Chartres, 1965, 36p.

Исследование ИК-спектров
некоторых галетирован-
ных молекул.



1966

S(CH₃)₂
(V₀)

Microwave spectrum, vibration-rotation interaction, and potential function for the ring-puckering vibration of trimethylene sulfide. David O. Harris, Howard W. Harrington, Alan C. Luntz, and William D. Gwinn (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 44(9); 3467-80(1966)(Eng). The microwave spectrum of the ground and first 4 excited states of the ring-puckering mode of trimethylene sulfide has been observed and assigned. From an analysis of the perturbations to the rotational spectrum arising from the coupling of the internal angular momentum with the overall rotation of the mol., the sepn. between the lowest 2 vibrational levels was detd. to be 8229 Mc./sec. Three mixed vibration-rotation transitions have been observed, and give the more accurate value of 8232.5 ± 0.4 Mc./sec. (0.27461 cm.^{-1}) for this sepn. From the vibration-rotation interaction and the relative intensities of certain lines, the potential function governing the vibration has been detd. to be $7.0207Q^4 - 87.7581Q^4 \text{ cm.}^{-1}$, where Q is the coordinate describing

C.A. 1966.65.1
191 49

the vibration. The height of the barrier to the planar configuration is $274.2 \pm 2 \text{ cm.}^{-1}$ The agreement between the far-ir spectrum that was calcd. by using this potential function derived from microwave data, and that which was recently observed by Borgers and Strauss, is very good. On the basis of a dynamic model for the ring-puckering motion in which the atoms move along curvilinear paths with no bond stretching, the coupling const. between the overall rotation and the internal angular momentum was calcd. It was 170 Mc./sec. compared to the exptl. value of 176 Mc./sec. The importance of treating the vibrational dependence of the off-diagonal elements of the inertial tensor as being equiv. to vibrational angular momentum is stressed.

RCJO

$S(CH_2)_3$

210

Микроволн
спектр

12 Д300. Микроволновый спектр, колебательно-вращательные взаимодействия и потенциальная функция колебания, сморщивающего кольцо молекулы триметиленсульфида. Harris David O., Harrington Howard W., Luntz Alan C., Gwin William D. Microwave spectrum, vibration-rotation interaction, and potential function for the ring-puckering vibration of trimethylene sulfide. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 9, 3467—3480 (англ.)

В области 8—36 см^{-1} при т-ре сухого льда исследованы микроволн. спектры основного и первых четырех возбужденных состояний молекулы триметиленсульфида. Наблюдаемые полосы интерпретированы как переходы, связанные с неплоскими деформационными колебаниями, сморщивающими кольцо молекулы. Показано, что спектру для рассматриваемых колебаний соответствует потенц. ф-ция с двойным минимумом: $V(\text{см}^{-1}) = = 7,0207 Q^4 - 87,7581 Q^2$, где Q — соответствующая колебательная координата. Высота центрального барьера,

ф. 1966. 128

отвечающего плоской конфигурации кольца, равна $274,2 \pm 2 \text{ см}^{-1}$. Предложенный вид потенц. ф-ции хорошо соответствует эксперим. данным по ИК- и микроволн. спектрам, полученным ранее.

1966

S(CH₂)₃

7 Б196. Микроволновой спектр, колебательно-вращательное взаимодействие и потенциальная функция неплоского колебания кольца триметиленсульфида. Harris David O., Harrington Howard W., Luntz Alan C., Gwinn William D. Microwave spectrum, vibration-rotation interaction, and potential function for the ring-puckering vibration of trimethylene sulfide. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 9, 3467—3480 (англ.)

Исследован микроволновой спектр триметиленсульфида (I) в области 8—36 кМгц. Получены данные как для основного, так и для первых 4 возбужденных состояний, соответствующих неплоскому колебанию кольца I. Из анализа возмущения вращательного спектра определено расщепление между двумя нижними колебательными уровнями: 8229 Мгц. На основе данных о наблюдавшихся смешанных колебательно-вращательных переходах

α. 1967. 7

для того же расщепления получено более точное значение $8232,5 \pm 0,4$ Мгц. В соответствии с величиной колебательно-вращательного взаимодействия и с интенсивностью некоторых линий определена потенциальная функция для неплоского колебания I: $7,0207 Q^4 - 87,7581 Q^2$ см⁻¹, где Q — координата, описывающая неплоское колебание. Высота барьера при прохождении плоской конфигурации цикла I: $274,2 \pm 2$ см⁻¹. В соответствии с полученной потенциальной функцией был рассчитан спектр I в дальней ИК-области, который полностью совпал с соответствующим эксперим. спектром. Проведено сравнительное обсуждение конфигураций, высот барьеров и других данных для молекул I и триметиленоксида.

Г. Кузьянц

(CH₂)₃S

Вращат.
спектр

1966

12 Д299. Частоты неплоских ножничных колебаний триметиленсульфида из измерений интенсивностей в микроволновой области. Harrington Howard W. Out-of-plane bending frequencies in trimethylene sulfide from microwave intensity measurements. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 9, 3481—3485 (англ.)

По измерениям интенсивностей вращательных переходов полосы X: $0_{00}—1_{01}$, $6_{34}—6_{33}$ и $4_{23}—4_{22}$ определены разности энергий колебательных уровней неплоских ножничных колебаний кольца триметиленсульфида, равные соответственно 0, 141, 15 и 85 см^{-1} для переходов 0—1, 1—2, 2—3 и 3—4. Ошибки определения составляют $\pm 3 \text{ см}^{-1}$. Попарное сближение уровней свидетельствует о наличии барьера для плоского строения кольца, причем еще уровень $\nu=3$ лежит ниже барьера. Для триметиленсульфида барьер значительно выше, чем для триметиленоксида. Э. Броун

ф. 1966. 12.28

1966

 $S(CH_2)_3$

10 Б252. Определение частот неплоских колебаний триметиленсульфида из измерений интенсивности в микроволновом спектре. Harrington Howard W. Out-of-plane bending frequencies in trimethylene sulfide from microwave intensity measurements. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 9, 3481—3485 (англ.)

g-m
На основании измерений интенсивностей вращательных переходов $0_{00}-1_{01}$, $6_{34}-6_{33}$ и $4_{23}-4_{24}$ в микроволновом спектре триметиленсульфида найдены расстояния между четырьмя уровнями энергии, соответствующие неплоским колебаниям кольца. Эти расстояния равны 0, 141, 15 и 85 см^{-1} соотв. для переходов $0-1$, $1-2$, $2-3$ и $3-4$, что указывает на неплоскую конфигурацию кольца. Попарное сближение уровней обусловлено влиянием барьера, отвечающего плоской конфигурации кольца. Этот барьер достаточно высок. И. Милевская

x. 1967. 10

M-1459

1966

$\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{SH}$, $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$, $\text{BrCH}_2\text{CH}_2\text{Br}$

($\checkmark$ *propyl*)

Hayashi M., Shiro Y., Murata H.,

Bull. Chem. Soc. Japan, 1966, 39(1),

112-17

Vibrational assignment and rotational
isomerism of propylmercaptan

J

CA., 1966, 64, N11, 15185f

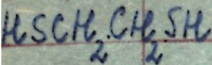
1966

$S(CH_2)_3$
(12:1)
Out-of-plane bending frequencies in trimethylene sulfide from microwave intensity measurements. Howard W. Harrington (Microwave Div., Hewlett-Packard, Palo Alto, Calif.). *J. Chem. Phys.* 44(9), 3481-5(1966)(Eng). The first four out-of-plane ring-bending energy separations in trimethylene sulfide have been detd. from microwave intensity measurements on the $0_{00}-1_{01}$, $6_{34}-6_{33}$, and $4_{23}-4_{22}$ rotational transitions in the X band. These sepns. are 0, 141, 15, and 85 cm^{-1} for the 0-1, 1-2, 2-3, and 3-4 transitions, resp., indicating a bent configuration for the ring. The uncertainty in these numbers is $\sim \pm 3 cm^{-1}$

RCJQ

C.A. 1966. 65.1
191h-192a

1966



(P:)

Vibrational assignment and rotational isomerism of propyl mercaptan. Michiro Hayashi, Yuji Shiro, and Hiromu Murata (Univ. Hiroshima). *Bull. Chem. Soc. Japan* 39(1), 112-17 (1966)(Eng); cf. following abstr. The ir and Raman spectra of *n*-PrSH have been measured. Vibrational assignments, made by comparison with the spectra of $\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{SH}$ (I) and β -haloethyl mercaptan, are tabulated; and *G* and *T* refer to gauche and trans forms about the C-C bond. Normal vibration calcs. were carried out in a modified Urey-Bradley force field. The force consts. required were transferred from the sets obtained for I and propane. The av. difference between observed and calcd. values for 41 frequencies was only 1.9%. Two rotational isomers were observed in the gaseous and liquid states: the *TT* form, trans about both C-C and C-S bonds, and the higher-energy *GT* form, gauche about the C-C bond and trans about the C-S bond. The CH_2 H deformation frequencies of a no. of $\text{XCH}_2\text{CH}_2\text{Y}$ mols. (X and Y are SH, MeS, Cl, Br, or CN) are listed and discussed.

A. Foxton

C.A. 1966. 64.11
15185 fg

CS(SCH₃)₂

1966

23 Б176. Спектроскопические исследования соединений с (S_{II})₂CS_I-группировкой. XI. Инфракрасный спектр диметилового эфира тритиоугольной кислоты. Krebs B., Müller A. Spektroskopische Untersuchungen an Verbindungen mit einer (S_{II})₂CS_I — Gruppierung. XI. Das Infrarotspektrum des Trithiokohlensäuredimethylesters. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1966, 348, № 1—2, 107—112 (нем.; рез. англ.)

Исследован ИК-спектр CS(SCH₃)₂ в области 4000—420 см⁻¹ для чистого в-ва, р-ров в CCl₄ и суспензии в базелиновом масле. Проведено отнесение основных колебаний молекулы. Низкая симметрия молекулы и взаимодействие двух групп CH₃S не приводит, по-видимому,

х. 1964. 23

к расщеплению вырожденных колебаний метильных групп. К вал. кол. группы $C=S$ отнесена полоса 1065 см^{-1} . Присутствием в молекуле связи $C=S$ объясняют высокие значения частот вал. кол. связей $C-S$: 810 и 855 см^{-1} . К пульсац. колебаниям тритиокарбонатной группы отнесена полоса в области 500 см^{-1} . Пред. сообщ. см. РЖХим, 1966, 14Б130. Я. Кимельфельд

CS(SCH₃)₂

1966

80583t Spectroscopy of compounds with a (S_{II})₂CS_I group.
XI. Infrared spectra of dimethyl trithiocarbonate. B. Krebs
and A. Mueller (Univ. Goettingen, Ger.). *Z. Anorg. Allg.
Chem.* 348(1-2), 107-12(1966)(Ger); cf. *CA* 65, 10475b; 66,
23932g, 50479w. The ir spectrum of CS(SMe)₂ was measured
between 4000 and 420 cm.⁻¹ The strong bands at 1420 and 1410
cm.⁻¹ were assigned to the Me asym. bending vibration (δ), and
the band at 1310 cm.⁻¹ to the Me sym. bending vibration. The
band at 955 cm.⁻¹ was assigned to the Me rocking vibration (ρ).
No evidence was found for suppression of the vibrational degener-
ation as expected for the transition from the C_{3v} symmetry to C_s
symmetry for a MeS group. The band 1065 cm.⁻¹ was assigned
to the stretching vibration ν (C:S) and the bands 810 and 855
cm.⁻¹ to ν (C-S).

BTJG

C.A. 1967. 66. 18

C-S-H

сч. на об.

Do

Кечч у. А.

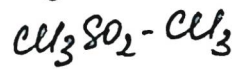
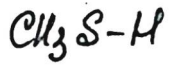
1966

Chem. Revs., 1966,
66, стр 465

Обзор.



(Ссч. C-N-H) III



C6H5SH

1966

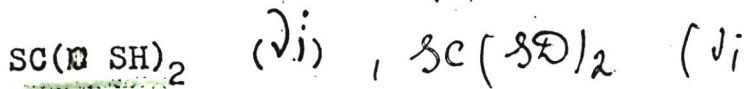
thiophenol

59182x Microwave spectrum of thiophenol. Kjeil I. Johansson, Hans Oldeberg, and Hans Selen (Univ. Stockholm). *Ark. Fys.* 33(19), 313-15(1966)(Eng). The absorption spectrum of thiophenol in the vapor state is studied at room temp. in the microwave region 18.0-26.7 Gc. by using a Stark-effect-modulated spectrometer. A no. of *R*-lines connected with the *a*-component of the dipole moment are identified. The consts. obtained are: $A = 5.5888$ Gc., $B = 1.5777$ Gc., $C = 1.2311$ Gc., $I_a = 90.47$ at. mass units $A.^2$, $I_b = 320.42$ at. mass units $A.^2$, $I_c = 410.63$ at mass units $A.^2$, $\chi = -0.8409$. The inertia defect is within the limits of error, assuming a planar structure of the mol. G. S. Singhal

C.A. 1967. 07. 12

M2087

1966



Mueller A., Krebs B., Gattow G.,

Z. anorgan. und allgem. Chem., 1966, 349(1-2)

74-81.

Spectroscopy of compounds with a $(\text{S}_{\text{II}})_2\text{CS}_{\text{I}}$

group. XII. Ir spectra and Hueckel M.O.- calculation of $\text{SC}(\text{SH})_2$ and $\text{SC}(\text{SD})_2$ J CA, 1967

1966

CH_3SH
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{\text{Hgr.}}$
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}_2$
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}_3$
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}_4$

7 Б83. Электронные спектры и структура соединений серы. Thompson S. D., Carroll D. G., Watson F., O'Donnell M., McGlynn S. P. Electronic spectra and structure of sulfur compounds. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 5, 1367—1379 (англ.)

Исследованы электронные спектры поглощения сероводорода, метилмеркаптана, диметилсульфида, а также диметилдисульфида, диметилтрисульфида и диметилтетрасульфида в парообразном состоянии и в р-рах (область 1800—3700 Å). Сравнение эксперим. данных с расчетами энергетич. уровней методом Вольфсберга и Гельмгольца (Wolfsberg M., Helmholtz L., «J. Chem. Phys.», 1952, 20, 837) показало, что длинноволновая полоса соответствует переходу в состояние с участием 4s- или 3d-орбит атома серы. Увеличение числа атомов серы вызывает батохромное смещение длинноволновой полосы. Характер сдвигов полос под действием р-рителя дает основание считать, что дипольный момент молекул при возбуждении уменьшается. О. Свердлова

БФ-1000Н-69
II-1000Н-IV



20. 1967. 7

1967

C_4H_3S

(2)

22 Б203. Расчет и интерпретация колебательных спектров серусодержащих соединений. IV. Моноалкилзамещенные тиафена. Болотина Э. Н., Свердлов Л. М. «Ж. прикл. спектроскопии», 1967, 7, № 6, 870—873.

Проведен расчет частот и нормированных форм нормальных колебаний 2- и 3-метилтиафена. Дана интерпретация их колебательных спектров и установлены характеристические частоты для моноалкилзамещенных тиафена. Сообщ. III см. РЖХим, 1967, 17Б166.

Резюме

2. 1968. 22

$\text{HC}\equiv\text{C}-\text{S}-\text{CH}_3$

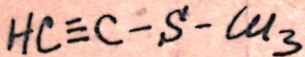
1967

12 Д170. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и барьер внутреннего вращения метилмеркаптоацетилен. Engelsen D. den. Microwave spectrum, structure, dipole moment, and barrier to internal rotation of methylthioethyne. «J. Molec. Spectrosc.», 1967, 22, № 4, 426—434 (англ.)

Исследованы микроволн. спектры молекул $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{S}^{32}\text{CH}_3$ (I) и $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{S}^{34}\text{CH}_3$ (II) в области 17,3—40,5 Гц. Идентифицированы вращательные линии со значениями J вплоть до 15. Определены значения вращательных постоянных и пяти независимых постоянных центробежного растяжения. При определенных предположениях относительно длин связей $\text{C}-\text{H}$ и $\text{C}\equiv\text{C}$ найдены длины связей $\text{C}-\text{S}$ ($r_{\text{C}-\text{S}}=1,680 \text{ \AA}$) и $\text{S}-\text{C}$ ($r_{\text{S}-\text{C}}=1,815 \text{ \AA}$) и величина валентного угла $\text{C}-\text{S}-\text{C}$ (101°). Отмечено, что величина угла в I на 12° меньше велич

09. 1967. 12

ны угла $C-O-C$ в метоксинацетилене. Путем измерений
штарковского расщепления линий $1_{01}-2_{12}$, $2_{02}-3_{13}$ и
 $3_{03}-4_{14}$ определены значения компонентов дипольного
момента I ($\mu_a=1,00\pm0,03$ и $\mu_b=1,36\pm0,005$ ед. Дебай).
Измерены расщепления линий в возбужденном состоя-
нии крутильного колебания и найдена величина барьера
внутреннего вращения $V_3=1740$ кал/моль, которая на
300 кал/моль выше величины барьера в метоксинацети-
лене. М. Р. Алиев



1967

V₀
copying

120535n Microwave spectrum, structure, dipole moment, and barrier to internal rotation of methylthioethyne. D. den Engelsen (State Univ., Utrecht, Neth.). *J. Mol. Spectrosc.* 22(4), 426-34(1967)(Eng). The microwave absorption spectrum is reported as well as rotational consts., dipole moment components, and centrifugal distortion consts. of methylthioethyne. The spectra of two isotopic species of methylthioethyne were measured, namely, $\text{HC}\equiv\text{C}^{32}\text{SMe}$ and $\text{HC}\equiv\text{C}^{34}\text{SMe}$; the detn. of the mol. structure therefore implies some assumptions about certain bond lengths and bond angles. The potential barrier to the internal rotation of the Me group is derived from the observed doublet splittings. RCKP

C, A 1967 66. 26

CH_2DSCH_3

Каяси М.

1967

У. Япон Chem., 21, n 10,
799.

Исследование строения
молекулы с неподелен-
ной парой электронов
метил-гидрокси-м. в. - спек-
троскопическим.
(см. $(\text{CH}_3)_2\text{S}$) III

1967

M 2320

CH₃CH₂SH (спирт. мер. ное.)

Imanov L.M., Gajar Ch.O., Abbasov A.A.

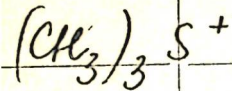
Phys., Letters, 1967, A24, N9, 485-456

Microwave Spectri, of ethyl mercaptan.

PJF., 1967, 9D317

J

C₂H₆S



Koeppe G. W., et al.

1947

J. Amer. Chem. Soc., 89, 14,
3396.

Барьеры универсальности
модельных молекул
иона XCH_3 и родствен-
ных молекул молекул
ион, со  группами
ион XCH_3 (или CH_3^-)

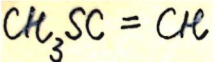
CS₃<

1967

112547y Electronic absorption spectra of compounds containing a CS₃-group. A. Mueller and B. Krebs (Univ. Goettingen, Ger.). ~~Monatsh. Chem.~~ 98(4), 1540-4(1967)(Ger). The electron absorption spectra of Me₂CS₃, Et₂CS₃, ethylenic trithiocarbonate, H₂CS₃, (CF₃)₂CS₃, C₃O₂S₃, and CS₃²⁻ were compared and the observed absorption bands assigned. The comparison of the spectra with those of thioketones R₂CS shows characteristic differences which can be used to identify the CS₃ group.

CTIG

C.A. 1967-67-24

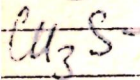
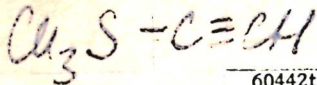


18 Б221. Инфракрасные спектры метилэтинилсульфида и метилэтинил-*d*-сульфида. Moritz A. G. The infra-red spectra of methyl ethynyl sulphide and methyl ethynyl-*d* sulphide. «Spectrochim. acta», 1967, A23, № 1, 167—173 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения ($3000-300 \text{ см}^{-1}$) газообразных $\text{CH}_3\text{SC}=\text{CH}$ и $\text{CH}_3\text{SC}=\text{CD}$. Сравнение со спектрами изоэлектронных им соединений $\text{CH}_3-\text{SC}\equiv\text{N}$ и $\text{CD}_3-\text{SC}\equiv\text{N}$ позволило провести отнесение ряда частот. Найдена линейная зависимость между частотами неплоских колебаний связей $\equiv\text{C}-\text{H}$ и $=\text{CH}_2$ групп для производных ацетилена и этилена строения $\text{R}-\text{C}\equiv\text{CH}$ и $\text{R}-\text{CH}=\text{CH}_2$, где $\text{R}=\text{CHO}$, CN , CH_2Cl , CH_2Br , CH_2J , CH_3 , J , Br , CH_2OH , C_6H_5 , Cl , F , CH_3S и CH_3O (расположены в порядке уменьшения частоты $\equiv\text{CH}$ от 680 до 520 см^{-1} и CH_2 от 970 до 820 см^{-1}).

Н. С. Спасокукоцкий

20. 1967. 18



60442t The infrared spectra of methyl ethynyl sulfide and methyl ethynyl-d sulfide. A. G. Moritz (Defence Stds. Labs., Melbourne). *Spectrochim. Acta* 23A(1), 167-73(1967)(Eng). The ir spectra of gaseous $\text{MeSC}\equiv\text{CH}$ and $\text{MeSC}\equiv\text{CD}$ have been examd. between 3500 and 300 cm^{-1} . The vibrational assignments are discussed and compared with the iso-electronic species MeSCN and CD_3SCN . All the fundamental vibrations assocd. with the $\text{Me}-[\text{S}]$ group, with the exception of the torsion vibration, have been observed at (species a') 3012, 2944, 1447, 1322, 982; (species a'') 3017, 1431 and 961 cm^{-1} . A linear correlation is shown to exist between the frequencies of the out-of-plane :C-H

C. A. 1967. 66. 14

deformation vibration of monosubstituted acetylenes, $R-C\equiv C-H$ (or degenerate vibration in the case where R is axially sym.) and the CH_2 wagging frequency of the corresponding vinyl mol. $R-CH=CH_2$. The wide range of $\equiv C-H$ deformation frequencies in these cases ($520-680\text{ cm.}^{-1}$) appears to be related to the mesomeric effect of the substituents. 18 references.

RCSQ

SC(SH)₂

11

1967

8 Б158. Спектроскопические исследования соединений с группировкой CS'S''₂. XII. Инфракрасные спектры и расчеты по методу молекулярных орбит SC(SH)₂ и SC(SD)₂. Müller A., Krebs B., Gattow G. Spektroskopische Untersuchungen an Verbindungen mit einer CS'S''₂-Gruppierung. XII. Infrarotspektren und HMO-Rechnung von SC(SH₂) und SC(SD)₂. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1967, 349, № 1—2, 74—81 (нем.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры жидкой и кристаллич. тритиоугольной к-ты SC(SH)₂ (I) и SC(SD)₂ (II) в области 4000—400 см⁻¹ и проведено отнесение полос на основании расчета нормальных колебаний. Снижение частоты ν_{CS} с 1115 см⁻¹ в II до 1080 см⁻¹ в I указы-

Л. 1968. 8

вае на меньшее взаимодействие вал. кол. ν_{CS} и σ_{CSH} .
В ИК-спектрах кристаллич. I наблюдается расширение
полос SH и CS при одновременном смещении в длинно-
волновую область (2400 см^{-1} и 1085 см^{-1}) за счет уси-
ления водородных связей. С помощью метода МО в
приближении Хюккеля для I рассчитаны порядки π -свя-
зей и плотности π -электронов, которые показали частич-
ное выравнивание π -связей. Сообщ. XI см. РЖХим,
1967, 23Б176. М. Дейчмейстер

SC(SH)₂

1987

9 Д105. Спектроскопическое изучение связи в соединениях с $\text{CS}^{\text{I}}\text{S}_2^{\text{II}}$ -группами. XII. ИК-спектры и расчеты методом МО Хюккеля молекул $\text{SC}(\text{SH})_2$ и $\text{SC}(\text{SD})_2$. Müller A., Krebs B., Gattow G. Spektroskopische Untersuchungen an Verbindungen mit einer $\text{CS}^{\text{I}}\text{S}_2^{\text{II}}$ -Gruppierung. XII. Infrarotspektren und HMO-Rechnung von $\text{SC}(\text{SH})_2$ und $\text{SC}(\text{SD})_2$. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1967, 349, № 1—2, 74—81 (нем.; рез. англ.)

Проведен анализ норм. колебаний молекул типа $\text{WX}(\text{YZ})_2$ с симметрией C_{2v} . Выполнено отнесение полос поглощения в ИК-спектре молекулы $\text{SC}(\text{SH})_2$. Главные полосы поглощения отнесены к основным колебаниям молекулы. Спектры жидкой (при -10°C) и твердой фаз (при -100°C) снимались в области $400\text{—}4000\text{ см}^{-1}$. Обращается внимание на тот факт, что $\text{SC}(\text{SH})_2$ медленно разлагается на H_2S и CS_2 , и все спектры имеют полосу поглощения CS_2 около 1510 см^{-1} . Обсуждается измене-

оп. 1987. 92

ние спектров при переходе от жидкого к твердому состоянию и в зависимости от растворителей. Для надежности отнесения были использованы также спектры поглощения $SC(SD)_2$. Методом МО Хюккеля рассчитаны π -порядки связей и π -электронные плотности для $SC(SH)_2$. Даны приближенные средние амплитуды колебаний SH. Ч. XI см. Krebs B., Müller A. «Z. anorg allg. Chem.», 1966, 348, 107. В. А. Морозов

C_6H_5SH

V.

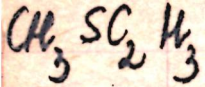
1967
Simpson K. O., Beynon E.

J. Phys. Chem., 71, 2796.

Определение барьера
препятствующего враще-
рению вращению, из
микрохимических
данных.  мей мемори-
кости.

[сек. $C_6H_5(CH_3)_3$] III

1967

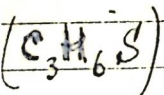


6 Д477. Микроволновый спектр метилвинилсульфида.
Penn R. E., Curl R. F., Jr. Microwave spectrum of
methyl vinyl sulfide. «J. Molec. Spectrosc.», 1967, 24, № 2,
235—243 (англ.)

Исследован микроволн. спектр (8—40 Гц) молекулы
 $\text{CH}_3\text{SC}_2\text{H}_3$ (I). Проведено отнесение дипольных перехо-
дов b -типа в основном (0,0) и возбужденных (1,0) и
(0,1) состояниях. Получены значения вращательных по-
стоянных A , B и C и моментов инерции для трех иссле-
дованных состояний. Исследовано штарковское расщеп-
ление и получены значения штарковских коэф. для пяти
значений $|M|$ четырех переходов основного состояния, а

ср. 1968. 68

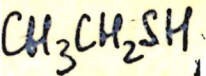
также следующие средние значения компонент дипольного момента $\mu_a^2 = 0,0044$ (ед. Дебая)², $\mu_b^2 = 1,29$ (ед. Дебая)² и значение $\mu = 1,14$ ед. Дебая. Сделан вывод, что I существует в виде *цис*-изомера. На основании А—Е-расщепления, наблюдаемого для заторможенного вращения метильной группы ($\nu=1$), получена величина барьера для внутреннего вращения 3230 ± 100 кал/моль. Библ. 14. Э. В. Б.



V₀

7892e Microwave spectrum of methyl vinyl sulfide. R. E. Penn and R. F. Curl, Jr. (Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Mol. Spectrosc.*, 24(2), 235-43(1967)(Eng). The microwave spectrum of MeSCH:CH₂ has been studied in the region 8-40 GHz. and *b*-type dipole transitions of the ground and two excited vibrational states have been assigned. The rotational consts. of the ground state are consistent with the planar *cis* conformation. The Stark effects of four transitions in the ground state give av. dipole moment components of $\mu_a^2 = 0.0044 \pm 0.0003$ (D.)², $\mu_b^2 = 1.286 \pm 0.010$ (D.)², and $\mu = 1.14 \pm 0.010$ D. Internal rotation *A-E* splittings observed for the $\nu = 1$ methyl torsional state correspond to a barrier of 3230 ± 100 cal./mole. RCKP

C.A. 1968: 68-2



1967

М. В.
спектр

9 Д317. Микроволновый спектр этилмеркаптана.
Иманов Л. М., Qajar Ch. O., Abbasov A. A. Microwave spectrum of ethyl mercaptan. «Phys. Letters», 1967, A 24, № 9, 485—486 (англ.)

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией при -45°C исследован микроволн. спектр (18—33 Гц) молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$. Отождествлены вращательные переходы P -, Q - и R -ветвей в основном колебательном состоянии. Из измерений эффекта Штарка на переходах $2_{02}-2_{11}$ ($M=2$) и $3_{03}-3_{12}$ ($M=2, 3$) определены общий дипольный момент μ и его составляющие μ_a и μ_b , равные 1,52; 0,93; и 1,20 ед. Дебая соответственно; μ составляет угол $8^\circ 40'$ с главной осью a . Найдены вращательные постоянные.

И. И. Брисова

фр. 1967. 9 Д

C_6H_5SH

отмечен 24
в банке Stockholm. univ. 1967

мин.

Selen H.

гана
свиз

Acad. Dissertation,
Stockholm, 1967.

Some spectroscopic inves-
tigations in the microwave
region

$\text{CH}_3\text{-S}$

Becher H. Z.

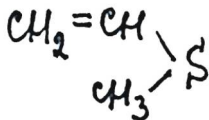
1968

Fortschr. Chem. Forsch.,
10, N1, 156

Сил. пост.

Расчеты силовых постоянных из колебательных спектров простых органических мол-л.

(Сил. $\text{CH}_3\text{-O}$) III



1968

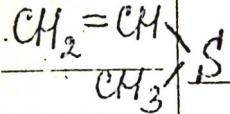
14316u Vibrational spectroscopic studies on vinyl methyl sulfide. Fabian, I.; Kroeber, H.; Mayer, R. (Tech. Univ. Dresden, Dresden, E. Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1968, 24(6), 727-36 (Ger). Ir spectra of methyl vinyl sulfide (I) was studied at 400-3300 cm^{-1} for vapor, liq., soln., and solid phases. The Raman spectrum and the polarization properties were also measured. A vibrational assignment is suggested. By measurement of the temp. dependence of ir absorption, I is shown to exist in 2 conformers. The s-cis-form is the more stable one.

RCSO

ν_2

C.A. 1968. 69. 4

1968



11 Д294. Исследование колебательных спектров метилвинилсульфида. Fabian J., Kröber H., Mayer R. Schwingungsspektroskopische Untersuchungen an Methylvinylsulfid. «Spectrochim. acta», 1968, A24, № 6, 727—736 (нем.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры газообразного, жидкого, растворенного и твердого метилвинилсульфида (I) в области 400—3300 см^{-1} . Получены спектры комб. рас. и измерены поляризационные свойства. Дано отнесение колебаний. При исследовании температурной зависимости ИК-поглощения установлено, что I существует в виде двух изомеров с более стабильной *s-цис*-формой.

99. 1968. 11Д.

S-H-C.

606

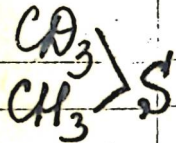
1968

Donald W. Scott,
M. Zaki El-Sabban.

(Cul.
necur.)

"American Petroleum
Institute Research Project 62"

1968

 ν_i

3 Д161. Групповые колебания и анализ колебаний молекул, содержащих группу CD_3 . Freeman J. M., Henshall T. Group vibrations and the vibrational analysis of molecules containing the CD_3 group. «Canad. J. Chem.», 1968, 46, № 12, 2175—2178 (англ.)

Составлена программа для расчета норм. колебаний молекул методом групповых колебаний. Этим методом вычислены частоты групповых и скелетных колебаний CD_3Cl , диметилселенида- d_6 , $\alpha\alpha\alpha$ - d_3 -диметилсульфида и исправлено отнесение ряда полос этих молекул. Дано приближенное отнесение колебаний по их форме.

М. Р. Алиев

+2

ф. 1969.38

X

$\text{CH}_3-\text{S}-\text{CH}_3$

$\text{CH}_3-\text{S}-\text{CH}_2\text{CH}_3$

и др.

см. на

обороте

(г.)

л. 1968. 14

1968
14 Б76. Потенциалы ионизации сульфидов. Хвос-
тенко В. И., Фурлей И. И. «Ж. физ. химии», 1968,
42, № 1, 13—16

Методом электронного удара определены потенциалы ионизации 8 алифатических сульфидов. Для монокинетизации электронов использовался метод разностей задерживающих потенциалов, что позволило сузить разброс электронов по энергиям до 0,1 эв. Применением простого метода МО были вычислены потенциалы ионизации исследованных молекул. Кроме этого, потенциалы ионизации были рассчитаны на основе электростатической поляризационной модели. Сравнение экспериментальных данных с расчетными показало, что электростатическая поляризационная модель лучше отражает изменение ионизационных потенциалов в гомологическом ряду алифатических сульфидов, чем простой метод МО. Резюме

C-S-C

C-S-C-C

C-C-S-C-C

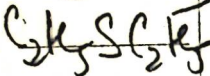
C-C-C-S-C-C-C

C-C-C-C-S-C-C-C-C

C-C-C-S-C-C-C-

C-C-C-S-C-C-C
| |
C C

C-C-S-C-C
| |
C C



(17)

гидрохлорид

1968

108044

Ionization potentials for sulfides. V. I. Khvostenko

and I. I. Furlei (Bashkir. Gos. Univ., Ufa, USSR). Zh.

Fiz. Khim. 42(1), 13-16(1968)(Russ). The ionization poten-

tials for 8 aliphatic sulfides were detd. exptl. by the electron

impact method, and were calcd. both by a semiempirical M.O.

method and by considering electrostatic polarization models.

The 2nd method of calcn. mentioned corresponds more closely

to exptl. results than does the 1st. For RSR': R, R', and three

values are, resp.: Me, Me, 8.77, 8.78, 8.77; Et, Et, 8.56, 8.56,

8.56; Et, Pr, 8.50, 8.545, 8.495; Pr, Pr, 8.45, 8.54, 8.43; Bu,

Bu, 8.40, 8.536, 8.38; Pr, iso-Bu, 8.40, 8.516, 8.365; iso-Bu,

iso-Bu, 8.36, 8.514, 8.30; iso-Pr, iso-Pr, 8.38, 8.354, 8.35.

J. P. Danehy

n gp.

C.A. 1968. 68. 24

90321.1053

Ch

CH₃S +

1969

(alg)

30731

B94-8139-XIV

Amos D., Gillis R.G., Occolowicz J.L.,
 Pisani J.F. The ions $[\text{CH}_3\text{S}]^+$, $[\text{C}_2\text{H}_5\text{S}]^+$
 and $[\text{CH}_3\text{S}]^+$ formed by electron-impact.
 "Org. Mass Spectrom.", 1969, 2, N2, 209-212

(англ.)

100511

986

987

993

ВИНИТИ

1969

$(CeCl_3)_2S_3$

Cullen W.R. 48p.

Inorgan. Chem,

1969, 8, n8, 1803

 $[Ce.(CeCl_3)_2S]^{III}$

$\text{HC} \equiv \text{CS} \text{CH}_3$

XIV-1324

1969

3 Б232. Молекулярная структура и центробежное растяжение для метилтиоэтина. Engelsen D. den. Molecular structure and centrifugal distortion in methylthioethyne. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 30, № 3, 474—484 (англ.)

В области 17 000—40 000 Мгц исследованы вращательные спектры изотопозамещенных молекул метилтиоацетилена $\text{DC} \equiv \text{CSCH}_3$ (I), $\text{HC} \equiv \text{CSC}^{13}\text{H}_3$ (II), *сим*- $\text{HC} \equiv \text{CSCDH}_2$ (III) и *асим.* — $\text{HC} \equiv \text{CSCDH}_2$ (IV). Приведены значения вращательных постоянных и постоянных центробежного растяжения I—IV, а также молекул $\text{HC} \equiv \text{CSCH}_3$ (V) и $\text{HC} \equiv \text{CS}^{34}\text{CH}_3$ (VI), вращательные спектры к-рых исследованы ранее. Уточнено значение дипольного момента $\mu = 1,59 \pm 0,05$ D молекулы метилтио-

Сыр-ра
мол-м

X. 1970. 3

ацетилен. Приведены определенные межатомные расстояния и углы в молекуле метилтиоацетилен: r_{HC_1} (при тройной связи) $= 1,061 \pm 0,006$, $r_{\text{C}_1 \equiv \text{C}_2} = 1,205 \pm 0,007$, r_{CS} (при тройной связи) $= 1,685 \pm 0,005$, $r_{\text{SC}_{\text{мет}}} = 1,813 \pm 0,002$, $r_{\text{C}_{\text{мет}}\text{H}_1} = 1,079 \pm 0,007$, $r_{\text{C}_{\text{мет}}\text{H}_{(2)\text{мет}}} = 1,090 \pm 0,005 \text{ \AA}$, $\angle \text{H}_{(1)\text{мет}}\text{C}_{\text{мет}}\text{H}_{(2)\text{мет}} = 109^\circ 52' \pm 20'$, $\angle \text{C}_{\text{мет}}\text{SC}_2 = 99^\circ 55' \pm 10'$, $\angle \text{C}_{(1)}\text{C}_{(2)}\text{S} = 182^\circ \pm 20'$, принято, что $\angle \text{HC}_{(1)}\text{C}_{(2)} = 180^\circ$. Из проведенного анализа следует, что ось симметрии метильной группы имеет «наклон» в $2-3^\circ$ в направлении неподеленной пары электронов атома S.

А. Александров

XIV-1324

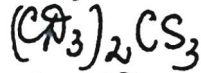
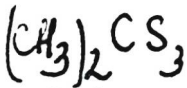
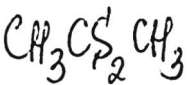
1969

HC:CSCH₃

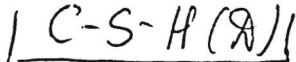
8227r Molecular structure and centrifugal distortion in methylthioethyne. Den Engelsen, D. (State Univ. Utrecht, Utrecht, Neth.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 30(3), 474-84 (Eng). The microwave spectra of 5 isotopic species of methylthioethyne, HC:CSMe enabled a fairly reliable calcn. to be made of bond lengths and angles. The centrifugal distortion parameters are related to mol. vibrations. RCKP

M.B. Chinnip

C.A. 1969. H. 2



(спектр)



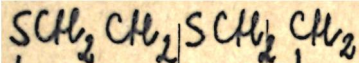
1969

12 Д358. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния метилового эфира дитиоуксусной кислоты и диметилтритиокарбоната. Herzog K., Steger E., Rosmus P., Scheithauer S., Mayer R. Die IR- und Raman-Spektren des Dithioessigsäure-methylesters und des Dimethyltrithiocarbonats. «J. Molec. Struct.», 1969, 3, № 4—5, 339—350 (нем.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры и спектры комб. рас. $\text{CH}_3\text{CS}_2\text{CH}_3$ (I) $(\text{CH}_3)_2\text{CS}_3$ (II) и $(\text{CD}_3)_2\text{CS}_3$ (III). Проведено отнесение частот на основании предположения о возможном сосуществовании двух или трех конформаций исследованных соединений. Так, I предположительно существует в виде *s-цис*-конформации. Результаты исследования влияния растворителя на ИК-спектры II и III, измерений спектров твердой фазы и значений

ор. 1969. 12 Д

дипольных моментов показали, что оба вращательных изомера, как I, так и II, существуют при комнатной т-ре. Найдено, что наиболее стабильной являются *s-цис*-, *s-цис*-конформации. Сделан вывод, что при рассмотрении частоты ν ($C(sp^2)-S$) необходимо учитывать, что она подвержена довольно сильному возмущению в четырех-атомном скелете групп CS_3 или CS_2C . Библ. 33. Резюме



C-H-S

1969

2 Д367. Колебательные спектры 1,4-дитиана и 1,3,5-трितिана. Klaboe P. The vibrational spectra of 1,4-dithiane and 1,3,5-trithiane. «Spectrochim. acta», 1969, A 25, № 8, 1437—1447 (англ.)

Исследованы ИК-спектры 1,4-дитиана (I) в области 5000—200 см⁻¹ в парообразном состоянии при 150°, в твердом состоянии и в различных растворителях. Также изучены поляризованные спектры комб. рас. I (в твердом состоянии и в растворе). Получены ИК-спектры и спектры комб. рас. 1,3,5-трितिана (II) в кристаллич. состоянии и в виде расплава при 220°. Вычислены факторы деполяризации для сильных полос комб. рас. для случая расплава. Наиболее сильные ИК-полосы наблюдались для парообразного состояния при 230°, а также в случае раствора. Дано отнесение основных колебаний молекул I и II. Библ. 25.

Резюме

Колебат.
спектр

09.1970. 22

1969

S(CH₂)₅

NK - CUKP

Vi

(26168b) Infrared spectra of 1,3- and 1,4-dithane and pentamethylene sulfide. Hitch, M. J.; Ross, Sidney David (Chelsea Coll. Sci. Technol., London, Engl.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1969, 25(6), 1041-6 (Eng). The ir spectra of these compds. have been studied in the region 4000-40 cm.⁻¹, and vibrational assignments made. For 1,4-dithiane, a factor group anal., and a normal coordinate anal. of the ring vibrations, has been carried out. RCSQ

C.A. 1969. 71. 6

C₄SH₈

C-S-H

1969

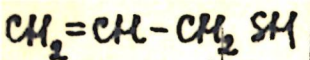


M. H.

16 Б79. Исследования молекул с пятичленными кольцами. IV. Расчет конформационных энергий и электронографическое исследование газообразного тетрагидротиафена. Náhlovská Z., Náhlovský B., Seip H. M. Studies on molecules with five-membered rings. IV. Calculation of conformational energies and electron diffraction investigation of gaseous tetrahydrothiophene. «Acta chem. scand.», 1969, 23, № 110, 3534—3540 (англ.)

Электронографическим методом изучена молекула тетрагидротиафена в газообразной фазе и при помощи метода Вестхеймера—Гендриксона рассчитаны энергии ее конформаций. Расчет показал, что конформация симметрии C_2 на 1,96—3,03 ккал/моль стабильнее конформации

симметрии C_s . Электронографич. данные подтвердили этот вывод. Найдены след. значения межъядерных расстояний (A), среднеквадратичных амплитуд колебаний (в скобках, A), валентных и торзионных (Φ) углов: $r(S-C) = 1,839 \pm 0,002$ ($0,058 \pm 0,002$), $r(C-C) = 1,536 \pm 0,002$ ($0,053 \pm 0,002$), $r(C-H) = 1,120 \pm 0,005$ ($0,079 \pm 0,004$), $SCS = 93,4 \pm 0,5^\circ$, $SCC = 106,1 \pm 0,4^\circ$, $CCC = 105,0 \pm 0,5^\circ$, $HCH = 107,5 \pm 2,6^\circ$, $\Phi(S_1-C_2) = 14,8 \pm 0,5^\circ$, $\Phi(C_2-C_3) = -40,4 \pm 1,2^\circ$, $\Phi(C_3-C_4) = 52,5 \pm 1,6^\circ$. Найденные значения углов хорошо согласуются с вычисленными. Сообщ. III см. пред. реферат. В. Спиридонов



1969

44138w Microwave spectrum, dipole moment, and molecular structure of allyl mercaptan. Sastry, K. V. L. N.; Dass, S. C.; Brooks, Wendell V. F.; Bhaumik, A. (Univ. New Brunswick, Fredericton, New Brunswick). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 31(1), 54-65 (Eng). The microwave spectra of normal and deuterated allyl mercaptan ($\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{SH}$ and $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{SD}$) were studied in the region from 8 to 33 GHz. About 160 lines have been assigned to the ground and the excited vibrational states of the gauche form of the mol. The rotational consts. of the ground vibrational state of the normal species are $A = 20041.68$, $B = 2795.72$, $C = 2701.10$ and those of deuterated species are $A = 18540.30$, $B = 2774.35$, $C = 2662.71$ MHz. The Stark effect measurements gave the components of the mol. dipole moment of the normal mol. as $\mu_a = 1.24$, $\mu_b = 0.21$, $\mu_c = 0.42$, and total moment $\mu_t = 1.33$; and $\mu_a = 1.27$, $\mu_b = 0.19$, $\mu_c = 0.40$, and $\mu_t = 1.34$ D. for the deuterated species. Kraitchman's equations were used to calc. the position of the thiol H atom. RCKP

u.b.чехр

C.A. 1969. 71.10

1969

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

S

23 Б172. Электронный спектр триметиленсульфида. Whiteside J. A. B., Warsop P. A. The electronic spectrum of trimethylene sulfide. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 1, 1—12 (англ.)

Получен электронный спектр триметиленсульфида в ближней и вакуумной УФ-области. Колебательный анализ электронного перехода при 2260 Å показывает, что основное состояние является нелинейным, а возбужденное — линейным. За исключением перехода при 1818 Å, все другие электронные переходы приводят к нелинейным возбужденным состояниям. Две ридберговские серии приводят к потенциалу ионизации, равному 8,65 эв. Т. к. ридберговские состояния нелинейны, основное состояние иона $(\text{CH}_2)_3\text{S}^+$ также нелинейно. Построена диаграмма корреляции для H_2S и по ней предсказаны формы состояний $(\text{CH}_2)_3\text{S}$. Предсказанные и наблюдаемые формы согласуются.

Н. Кузьменко

X. 1969. 23

C-H-S

Donald W. Scott,
M. Zaki El-Sabban

690

curr.
no. |

"Bartlesville Petroleum
Research Center, Bureau of
Mines, United States ...

... Oklahoma 74003.

"For publication in J. Mol. Spectroscopy."

1970

C_2H_5S

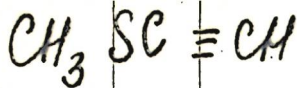
Атомов М.Е. и др

Химия в союзах

журнал, № 13, 1970,
13 сир

у

(Al_2S_3)III



XIV-1240

1970

2Д409. ИК-спектры и силовое поле метилтиоэтина.
Christensen D. H., Engelsen D. den. Infrared
spectrum and force field of methylthioethyne. «Spectro-
chim. acta», 1970, A 26, № 8, 1747—1751 (англ.)

см. пост

Получены спектры в далекой ИК-области (400—
50 cm^{-1}) метилтиоэтина ($\text{CH}_3\text{SC} \equiv \text{CH}$) (I) в парообраз-
ном состоянии и в растворе. Также получены ИК-спек-
тры I в кристаллич. состоянии при т-ре жидкого азота
в области 4000—400 cm^{-1} . При помощи упрощенного си-
лового поля вычислены силовые постоянные молекулы I.
Дано отнесение колебаний. Библ. 13. Резюме

09. 1971. 29

CH₃SC≡CH

XIV-1240

1970

Vi

93073w Infrared spectrum and force field of (methylthio)ethyne. Christensen, Daniel H.; Den Engelsen, D. (Chem. Lab. V, Univ. Copenhagen, Copenhagen, Den.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1970, 26(8), 1747-51 (Eng). The far-ir spectrum (400-50 cm⁻¹) of (methylthio)ethyne, (MeSC:CH), was recorded in both the vapor phase and in solns.; 2 absorption bands were found in this frequency range. Also, the ir spectrum of the cryst. compd. at liq. N temp. was recorded from 4000 to 400 cm⁻¹. The assignment of the fundamental frequencies made by Moritz could be completed and a simplified force field was proposed.

RCSQ

C.A. 1970. 13.18

CH₃CSS⁻

XIV - 1054

1971

2 Б302. Предварительное отнесение фундаментальных колебаний тио- и селенокарбоксилатов. I. Дитиоацетат-ион. Jensen K. A., Mygind H., Nielsen P. H., Borch G. Tentative assignment of fundamental vibrations of thio- and Selenocarboxylates. I. The dithioacetate ion. «Acta chem. scand.», 1970, 24, № 4, 1492—1495 (англ.)

ν_i

Измерены ИК-спектры дитиоацетата свинца и его тридейтеропроизводного в тв. состоянии в области 4000—40 см⁻¹ и спектры КР водн. р-ра дитиоацетата натрия. Предложено отнесение колебаний для иона дитиоацетата, исходя из симметрии C_{2v}, и произведен анализ нормальных колебаний, включая неплоское деф. кол. CSS. К веерным, деформационным и маятниковым группам CSS отнесены полосы: 464, 372 и 348 см⁻¹ для CH₃CSS⁻ и 421, 368 и 314 см⁻¹ для CD₃CSS⁻ соответственно.

Е. Разумова

X. 1971. 2

CH₃ CSS⁻

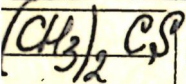
XIV-1654

1970

Vi

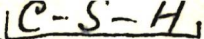
93068y) Tentative assignment of fundamental vibrations of thio- and selenocarboxylates. I. Dithioacetate ion. Jensen, Kai A.; Mygind, H.; Nielsen, P. H.; Borch, G. (Chem. Lab. II, Univ. Copenhagen, Copenhagen, Den.). *Acta Chem. Scand.* 1970, 24(4), 1492-5 (Eng). Assignments of the fundamental vibrations of MeCSS⁻ were made on the basis of a generalized valence force field normal coordinate anal. of the ir and Raman spectra (40-4000 cm⁻¹) of Pb(MeCSS)₂ and Pb(CD₃CSS)₂. Force consts. are tabulated. NaMeCSS and Pb(MeCSS)₂ are probably both ionic since the ir spectra 700-4000 cm⁻¹ of the solids are identical. The wagging, deformation, and rocking frequencies of the CSS group are at 464, 372, and 348 cm⁻¹, resp., in MeCSS⁻ and at 421, 368, and 314 cm⁻¹, resp., in CD₃CSS⁻. FBIN

C.A. 1970 13. 18



ал.

сир-ре

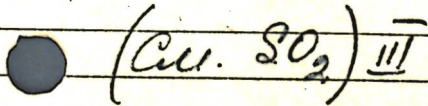


1970

Julg H., et al.

Theor. Chim. Acta,

1970, 17, 1, 49.



1970

C-S-H

8 Б156. Определение молекулярной структуры с использованием инфракрасной спектроскопии и вычислительных машин (на примере диалкилсульфидов). Ho-
rák M., Pitrová J., Reřicha R., Horák V. Molecular-structure diagnosis with the use of infrared spectroscopy and computer applied to dialkyl sulphides. «Collect. Czech. Chem. Commun», 1970, 35, № 11, 3223—3229 (англ.)

сёр-ра

Рассмотрены вопросы эмпирич. определения структуры орг. соединений на основе данных по их ИК-спектрам с использованием ЭВМ для обработки данных. На примере диалкилсульфидов рассмотрены принципы построения программы и выбора величин дисперсий для частот. Применимость метода продемонстрирована на примере машинного анализа спектра изобутил-трет-бутилсульфида.
Ю. В. Киссин

X. 1971. 8

CH₂DSH

1970

CH₂DSH

М. П.

5 Д356. Влияние колебания и молекулярной структуры на внутреннее вращение CH₂DSH и CHD₂SH. Кнорр John V., Daniel Donald D., Quade C. R. Some effects of vibration and molecular structure on internal rotation in CH₂DSH and CHD₂SH. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 11, 4352—4355 (англ.)

Отождествлены линии $J=1 \leftarrow 0$, $\Delta K=0$ в микроволн. вращательных спектрах частично дейтерированных меркаптанов. Анализ тонкой структуры переходов для основного крутильного состояния дан на основе исследования внутреннего вращения и молекулярной структуры. Получены границы значения V_1 , равные $1,5 \text{ см}^{-1} \leq |V_1| \leq 10 \text{ см}^{-1}$. Получено значение наклона C—S к метильной оси. $\theta = 3^\circ 5'$.

Ф 1971. 5 D

CH₂DSH

1975

CH₂DSH

8 Б184. Проявление некоторых эффектов колебаний и молекулярной структуры на внутреннем вращении в CH₂DSH и CHD₂SH. Кнорр John V., Daniel Donald D., Quade C. R. Some effects of vibration and molecular structure on internal rotation in CH₂DSH and CHD₂SH. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 11, 4352—4355 (англ.)

структура

Отнесены линии вращательного перехода $J=1 \leftarrow 0$, $\Delta K=0$ в основном $n=0$ и нескольких возбужденных ($1 \leq n \leq 3$) крутильных состояниях молекул CH₂DSH и CHD₂SH в области 21 876—23 600 Мгц. Проведен анализ

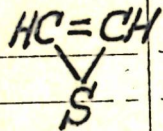
М. П.

X. 1974. 8

тонкой структуры переходов крутильного основного состояния с учетом внутреннего вращения и молек. структуры. Для учета относит. расщеплений в результате взаимодействия внутреннего вращения с колебаниями в выражение эффективной потенциальной энергии оказалось необходимым ввести член $V_1 \cos \alpha$. Для V_1 удалось определить только верхнюю и нижнюю границу значений $1,5 \text{ см}^{-1} \leq |V_1| \leq 10 \text{ см}^{-1}$. Из дублетного расщепления МВ-линий удалось определить уточненное значение угла наклона связи C—S $3,5^\circ$ к оси метильной группы, к-рое может быть сопоставлено с лит. значением $2^\circ \pm 30'$ (РЖХим, 1958, № 9, 27637). Найдено, что минимум потенциальной энергии $V = \frac{1}{2} V_3 (1 - \cos 3\alpha)$ соответствует шахматной конфигурации для ориентации метил-тиол.

По резюме

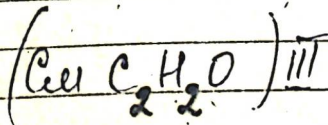
1970

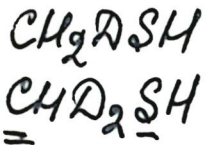


Le Breemant Jacques

C. r. Acad. sci, 1970,

UK-chemp 270, n 12, B 801





Walker G. Z.,
Quade C. R.

1970

nomeris.
 merus
 temp. bp.

J. Chem. Phys., 1970,
52, ~ 12, 6427



$[\text{Cu e-2(H)-O}]_{III}$

C-S-H-соед

1970

12 Д346. Определение основности некоторых виниловых эфиров и винилсульфидов методом инфракрасной спектроскопии. Шергина Н. И., Косицына Э. И., Атавин А. С., Гусаров А. В., Трофимов Б. А. «Ж. прикл. спектроскопии», 1970, 13, № 1, 170—173

При помощи ИК-спектров проведено сравнительное исследование основности атомов кислорода и серы в виниловых эфирах и сульфидах общего строения $\text{CH}_2=\text{CHXR}$ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}$) в зависимости от природы заместителя R. На примере 14 соединений показано, что атом кислорода, как правило, обладает более основными свойствами, чем сера.

Автореферат

ИК-спектр

09.1970.129



1971

CH_3SCD_3 (2) Ipenburg Y.W.,

Gerding H.

D_1

Rec. treat. chim.,

1941, 90, ~8,885

● $[\text{Cu}(\text{CH}_3)_2\text{S}]_{\text{II}}$

$(CH_2)_3S_2$

$(CH_2)_4S_2$

XIV-417

1971

18 Б32. Электронное строение соединений, содержащих неподеленные электронные пары. II. Дисульфиды и ацилтиол. Yamabe Hiroko, Kato Hiroshi, Yonezawa Teijiro. Electronic structure of lone pairs. II. Disulfides and acyl thiol. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1971, 44, № 3, 604—610 (англ.)

ж.
стр-ие

С целью изучения взаимодействия неподеленных электронных пар группы S—S в связи с исследованием восстановительного разрыва связи S—S полуэмпирич. методом ССП МО ЛКАО с учетом всех валентных электронов в приближении НДП рассчитаны триметилендисульфид $(CH_2)_3S_2$, тетраметилендисульфид $(CH_2)_4S_2$ и диметилдисульфид $(CH_3)_2S_2$. В соответствии с экспериментом, минимуму энергии $(CH_3)_2S_2$ отвечает диэдрич. угол 90° . Рассчитанные характеристики электронных

X. 1971. 18

+3



переходов согласуются с экспериментом. Наблюдаемое поглощение в области 250—300 нм согласно расчетным данным следует отнести за счет $n \rightarrow \sigma^*$ -переходов. Парциальный порядок S—S-связи для низшей вакантной орбитали имеет большую и отрицат. величину, его абс. величина увеличивается с возрастанием диэдрич. угла от 0 до 90°, что в соответствии с экспериментом, предсказывает увеличение легкости раскрытия кольца под действием нуклеофильных реагентов в ряду: пятичленное кольцо > шестичленное кольцо > семичленное кольцо. Расширенным методом Хюккеля рассчитаны также диметилдисульфид, метилдисульфид CH_3SSH , $\text{CH}_3\text{SCOCN}_3$. Установлена возможность взаимодействия между двумя молекулами R_2S_2 , при образовании связи используется высшая занятая орбиталь одной молекулы и нижняя вакантная орбиталь другой. Обсуждается реакц. способность арилгидросульфида ArSSH по отношению к действию различных анионов. Показано, что атака катионами $\text{CH}_3\text{SCOCN}_3$ должна протекать по неподеленной паре атома S, анионная атака должна протекать по атому C(2). Ч. I см. РЖХим, 1969, 15Б44. Е. Борисов



XIV -572

1974

$(CH_3)_2 SH, B(SCH_3)_3, (CH_3)_2 BSB (CH_3)_2,$
 $(CH_3)_2 B(SCH_3)_2, (CH_3)_2 BS (CH_3)_2$
(Y_i , см. текст.)

Vahrenkamp H.,
J. Organometallic Chem., 1974,
28, n2, 181-192. Есть ф. н.
Ю

CH_3SD_3

1971

Ypenburg, J. W.;
Gerding, H.;

(Vi)

"Reel. Trav. Chim. Pays-Bas."
1971, 90, N 8, 885-95.

● $[\text{cm.}(\text{CH}_3)_2\text{S}; \text{III}]$

C-H-S

13 Б90. Неподеленная пара электронов в органических сульфидах и дисульфидах. Bock Hans, Wagner Gerhard. «Einsame» Elektronenpaare in organischen Sulfiden und Disulfiden. «Angew. Chem.», 1972, 84, № 3, 119—120 (нем.)

1972

Обсуждены факторы, влияющие на изменения в рядах орг. сульфидов и дисульфидов первых вертикальных потенциалов ионизации (ПИ), связанных с отщеплением несвязывающего электрона из неподеленной пары у атома S. Введение любого заместителя в молекулу H_2S должно приводить к делокализации неподеленной пары электронов n_S и, следовательно, понижению ПИ. В сульфидах RSR ($R=Me, Et, Pr, CHMe_2, CMe_3$) алкильные группы понижают ПИ по сравнению с H_2S и $MeSH$ из-за их индуктивного донорного действия и смешивания n_S -МО с разрыхляющей МО $\sigma(CH)$. ПИ RSR уменьшается с ростом длины алкильной цепи R или степени ее разветвления. В дитиаалканах про-

X. 1972. 13

пространственное обменное взаимодействие электронов
 неподеленных пар в атомах S приводит к расщеплению
 полосы $n_S = MO$ в фотоэлектронном спектре. При по-
 стоянстве расстояния $S \dots S$ в $RSSR$ ($R = Me, Et, Pr,$
 $CHMe_2$ или CMe_3) и в $S-S-(CH_2)_4$ величина расщеп-
 ления определяется копланарностью $n_S = MO$ для обоих
 атомов S. При их копланарности ($\omega = 0^\circ$) расщепление
 по оценке должно превышать 2 эв, а при $\omega = 84,7^\circ$
 ($R = Me$) оно составляет 0,24 эв. При введении между
 атомами S алкильных групп вместо пространственного
 обменного взаимодействия играет роль взаимодействие
 через хим. связи с участием σ -МО той же симметрии.
 Расщепление достигает при этом в $MeSCH_2SMe$, $MeS-$
 $(CH_2)_2SMe$, $-SCH_2S(CH_2)_3-$, $-S(CH_2)_2S(CH_2)_2-$, $SC-$
 Cl_2SCCl_2 0,25—0,49 эв. Сопряжение n_S -электронов
 заместителя в метилтиопр-ных соединений с двойными
 связями и ароматич. группами также приводит к пони-
 жению ПИ.

$C_2F_4S_2$

1973

CF_2



CF_2

спектры

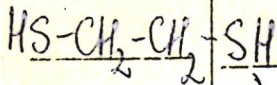
18 Б172. Колебательные спектры и структура соединений с малыми циклами: колебательный анализ газообразного и поликристаллического тетрафтор-1,3-дитиэтана. Harris W. C., Nuernberg A. Vibrational spectra and structure of small ring compounds: vibrational analysis of gaseous and polycrystalline tetrafluoro-1,3-dithietane. «Appl. Spectrosc.», 1973, 27, № 1, 44—46 (англ.)

Исследованы ИК- и КР-спектры тетрафтор-1,3-дитиэтана в крист. фазе при различных T -рах, а также КР-спектр газа. Табулированы данные по положению, относит. интенсивности и отнесению полос в спектрах. Полосы колебаний скелета расположены: a_g 664 и 513 cm^{-1} (КР), b_{1g} 833 cm^{-1} (ЭКР), b_{1u} 89 cm^{-1} (ИК), b_{2u} 849 cm^{-1} (ИК), b_{3u} 964 cm^{-1} (ИК). Полоса 290 cm^{-1} в спектре-КР кристалла отнесена к асим. крут. кол. CF_2 .

Ю. В. К.

Х. 1973 № 18

1972



16 Б102. Структура и поворотная изомерия этан-1,2-дитиола; электронографическое исследование. Hargittai Istvan, Schultz György. Structure and rotational isomerism of ethane-1,2-dithiol: an electron diffraction study. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1972, № 6, 323—324 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура этан-1,2-дитиола $\text{HS}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{SH}$ (I). Найдено, что при $t = 70^\circ$ в парах I присутствуют два конформера: анти- и гаус- с относит. содержанием 62 ± 3 и $38 \pm 3\%$ соотв., что отвечает разнице энергий в 0,8 ккал/моль, причем анти-форма более стабильна. Найдены след. значения межъядерных расстояний r (А), среднеквадратич.

всич.

стр-ра

X. 1972.

16

ных амплитуд колебаний l (А) и углов: r (C—H) = 1,120 (0,009), l (C—H) = 0,076 (0,010), r (S—H) = 1,40 (0,02), l (S—H) = 0,07 (0,04), r (C—C) = 1,53 (0,02), l (C—C) = 0,06 (0,03), r (S—C) = 1,819 (0,002), l (S—C) = 0,061 (0,005), $\text{CCS} = 112,0$ (0,9°), $\text{SCH} = 107,0$ (2,2°), $\text{HCH} = 108$ (4°), $\text{CSH} = 90,5$ (3,2°), τ (SCCS) = 106,3 (3,5°), l (S...C) = 0,074 (0,005), l (S...C)_{гош} = 0,15 (0,02), l (S...S)_{анти} = 0,122 (0,009).

В. Спиридонов

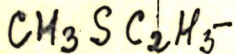


1972

170707t Molecular vibrations, conformational analyses, and force fields of normal and monodeuterated (methylthio)-methanethiol. Ohsaku, Masaru; Shiro, Yuji; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1972, 45(10), 3035-48 (Eng). $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SH}$, and $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SD}$, were prepared, and their ir spectra were obtained in the gaseous, liq., and solid states. The spectra were assigned. The frequency shifts by D-substitution, gaseous-liq. transition, and liq.-solid transition are also discussed. The normal co-

ordinates of these thiols were treated by a modified Urey-Bradley force field. The force consts. used in the computation were transferred from those previously reported, but were adjusted to produce the exptl. wave nos. The calcd. wave nos. correspond well with those obsd. The stable mol. conformations of the normal and deuterated species were detd. by the aid of the normal coordinate treatment. In the gaseous and liq. states, at least 3 or 4 forms from among TT, TG, GT, GG, and GG' were confirmed to exist. In the solid state, though, $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SH}$ or $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SD}$ exists in only 1 form: GG.

C. A. 1972, 77, N26.



1942

(vi)

11720a Molecular vibrations and force fields of alkyl sulfides.
III. Infrared spectra of methyl ethyl sulfide. Ohsaku, Masaru;
Shiro, Yuji; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ.,
Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1972, 45(3), 954-6
(Eng). The ir spectra of solid, liq., and gaseous MeSEt are
presented. Some previous assignments are revised. The existence of 2 rotational conformations in liq. phase is discussed.

C. A. 1942. 44. 2

$(C_2H_5)_2S$

(Vi)

u.k.

снеліп

C.A.

11710x Molecular vibrations and force fields of alkyl sulfides.

IV. Infrared spectra of ethyl sulfide. Ohsaku, Masaru; Shiro, Yuji; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1972, 45(3), 956-9 (Eng). The ir spectra of solid, liq., soln., and gaseous Et_2S are presented. Literature data are discussed. Three rotational isomers C_{2v} , C_1 , and C_2 are considered. The stable form in the solid is the C_{2v} conformation. The presence of the C_2 conformation in the liq. cannot be ruled out on the basis of the ir spectra.

1972

1972. 77. 2

$(CH_3)_2S_2CH_2$ (cas)

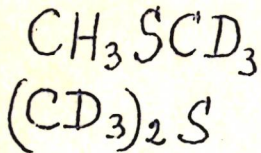
1972

78922r Molecular vibrations and force fields of alkyl sulfides.
II. Infrared spectra of $CH_3S(CH_2S)_nCH_3$ ($n = 0-3$). Ohsaku,
Masaru; Shiro, Yuji; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima
Univ., Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1972, 45(1),
113-21 (Eng). Infrared spectra recorded in the liq. and solid
states of Me_2S , $(MeS)_2CH_2$, $(MeSCH_2)_2S$, and $(MeSCH_2S)_2CH_2$,
are reported. For $(MeS)_2CH_2$, gaseous spectra were also
recorded. For these mols., the obsd. bands were assigned to
the fundamental modes of the vibrations with ref. to those of
reported analogous-structure mols. The existence of the rota-
tional isomers of the last 3 compds. was postulated. Regularity
of the waveno. of the fundamentals obtained and the intensity
change in some of the bands for this series of compds. are dis-
cussed. The frequency shift in the liq.-solid phase transition
is also described for a few bands.

ν_i
W. c. c. c. p.

C.A. 1972. 76. 14

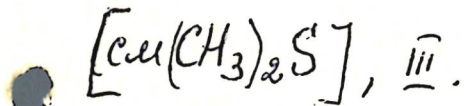
1972



Ypenburg J. W.

"Ree. trav. chim.", 1972,
91, n 5, 671-80.

(C.n.; Vi)



$(CH_3)_3CSH$

| 1973

cryst.

J. R. Durig,
S. M. Graven, ...

J. Chem. Phys., 1973,
58(4), 1281-91

"Low frequency modes in
molec. crystals. XIX...."

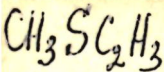
H_2CS_3

1973

Электрон.
связи

Perkins Peter G.,
Rev. Roum. Chim., 1973,
18, No 9, 1501-1512.

(см. CS_2 ; III)



1973

20 Б83. Исследование строения молекул метилалленилсульфида и метилвинилсульфида с помощью газовой электронографии и их связь с другими органическими сульфидами. Derissen J. L., Bijen J. M. J. M. A gas electron diffraction study of the molecular structures of methyl allenyl sulphide and methyl vinyl sulphide and their relation to other organic sulphides. «J. Mol. Struct.», 1973, 16, № 2, 289—297 (англ.)

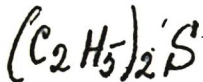
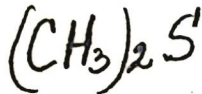
С помощью газовой электронографии исследовано строение метилалленил (I) и метилвинилсульфидов (II). Для I длины связей найдены равными (в Å, в скобках — средние отклонения), $\text{C}=\text{C}$ 1,282 (0,010) и 1,327 (0,010), $\text{C}-\text{S}$ 1,745 (0,010) и 1,800 (0,010), валентные углы (в град.) $\text{C}=\text{C}-\text{S}$ 125,4 (0,6), $\text{C}-\text{S}-\text{C}$ 98,1 (0,8); для II: $\text{C}=\text{C}$ 1,342 (0,007), $\text{C}-\text{S}$ 1,752 (0,010) и 1,794 (0,012), валентные углы $\text{C}=\text{C}-\text{S}$ 127,0 (1,5), $\text{C}-\text{S}-\text{C}$ 102,5 (2,0). Для обоих соединений модель с учетом только одной плоской син-конформации скелета тяжелых атомов не дает возможности интерпретировать эксперим. данные. Учет неплоской конформации улучшает согласие рассчитанных и эксперим. интенсивностей, но для одной или большего числа других конформаций без доп. эксперим. данных не может быть получено однозначного решения. Полученные

Строение

X. 1973
№ 20

результаты сопоставлены с данными для др. орг. суль-
фидов. Резюме

1973



(2)

19800j Experimental determination of the ionization potentials of sulfides and disulfides. Khvostenko, V. I.; Furlei, I. I. (USSR). *Khim. Sverg. Soedin., Soderzh. Nefi. Nefteprod.* 1972, 9, 99-101 (Russ). From *Ref. Zh. Khim.* 1973, Abstr. No. 12B96. By means of a quasi-monochromatic electron beam, the ionization potentials (IP) of dimethyl-, diethyl-, propylethyl-, dipropyl-, dibutyl-, di-isopropyl-, propylisobutyl-, di-isobutyl-, dimethyldi-, dipropyldi-, and dibutyldisulfide were detd. to be 8.77, 8.56, 8.50, 8.45, 8.40, 8.38, 8.40, 8.36, 8.65, 8.59, and 8.45 eV, resp. The IP of the sulfides and disulfides decreases with increasing no. of atoms in the mol.; the decrease is faster for the sulfides.

C.A. 1974. 80. N4

30726.7238
Ch, Ph, TE

$\text{CH}_3\text{SCD}_2\text{CD}_3$

92073

25-1321

Ohsaku Masaru, Shiro Yuji, Murata Hiromu.

Molecular vibrations and force fields of alkyl sulfides. VI. Methyl ethyl sulfide and its deuterated compounds, diethyl sulfide.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1973, 46, N 5,
1399-1407

(англ.)

907 907

917

0924

мик

ВИНИТИ

30726.7238
Ch, Ph, TE

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_3$
92073

4-1321

Ohsaku Masaru, Shiro. Yuji, Murata
Hiromu.

Molecular vibrations and force fields
of alkyl sulfides. VI. Methyl ethyl
sulfide and its deuterated compounds,
diethyl sulfide.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1973, 46, N 5,
1399-1407

(англ.)

907 907 917

0924 ПИК

ВИНИТИ

30726.7238
Ch, Ph, TE

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

92073

25-1321

Ohsaku Masaru, Shiro. Yuji, Murata
Hiromu.

Molecular vibrations and force fields
of alkyl sulfides. VI. Methyl ethyl
sulfide and its deuterated compounds,
diethyl sulfide.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1973, 46, N 5,
1399-1407

(англ.)

907 907

917

0924

НИИ

ВИНИТИ

S₂CH XIV-5130; Dec. 12/5 1973

2 Д210. Нормальные колебания дитиоформатного иона. Randhawa H. S., Sharma D. K. Normal vibrations of dithioformate Ion. «Z. Phys. Chem.» (BRD), 1973, 86, № 1—2, 108—111 (англ.)

Выполнен анализ норм. координат иона S₂CH. Из литературных данных о значениях частот основных колебаний вычислены силовые постоянные поля Юри—Бредли, распределение потенц. энергии колебаний по внутренним координатам симметрии, среднеквадратичные амплитуды колебаний и термодинамич. ф-ции этого иона.

М. Р. Алиев

(41)

IV

Ф 1974 N 2

S_2CH

XIV-5130; OM. 1245

1973

3 Б82. Нормальные колебания дитиоформатного иона. R a n d h a w a H. S., S h a r m a D. K. Normal vibrations of dithioformate Ion. «Z. Phys. Chem.» (BRD), 1973, 86, № 1—2, 108—111 (англ.)

Выполнен анализ нормальных координат иона дитиоформата (S_2CH). Из лит. данных по значениям частот основных колебаний вычислены силовые постоянные поля Юри—Бредли, распределение потенциальной энергии колебаний по внутренним координатам симметрии, средне-квадратичные амплитуды колебаний и термодинамич. функции этого иона.

М. Р. Алиев

α 1974

1/3

(+1)

IV



($\nu_{\text{top3. Uo}}$);

1973

89179n Study of the internal rotation in propargyl mercaptan by microwave spectrum analysis. Scappini, F.; Maeder, H.; Sheridan, J. (Inst. Phys. Chem., Univ. Kiel, Kiel, Ger.). *Z. Naturforsch., Teil A* 1973, 28(1), 77-81 (Eng). The internal rotation of the SH group in $\text{HC}:\text{CCH}_2\text{SH}$ was examd. by radio frequency microwave double resonance measurements at 5-40 GHz. A Hamiltonian for the over-all rotation and the torsion of the top was proposed and a potential function for the SH torsion with barriers of 470 ± 10 or $2000 \pm 500 \text{ cm}^{-1}$ at the cis or trans position, resp., was obtained.

C.A. 1974 80: N16

4 0125.8721

TE, Ch

$(CH_3)_2CH_2S$ 92073

1973

2 3248

Sugeta Hiromu, Go  Atsikatsu, Miyazawa
Tatsuo.

Vibrational spectra and molecular conformations of dialkyl disulfides.

"Bull. Chem. Soc. Jap.", 1973, 46, N 11,
3407-3411

(англ.)

3408-3411

0031

нет

017 017

ВИНИТИ

4 0125.8721

TE, Ch

$(CH_3)_2CS$ 292073

1973

XJ-3242

Sugeta Hiromu, Go Akikatsu, Miyazawa
Tatsuo.

Vibrational spectra and molecular conformations of dialkyl disulfides.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1973, 46, N 11,

3407-3411

(англ.)

3408-3411

0031

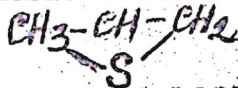
нет файла

017 017

ВИНИТИ

3II30.75312

TE, Ph, Ch



92073

1973

1376

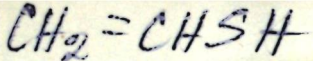
Сибирь продукция

■ Sugata Hiromu, Miyazawa Tatsuo. Infrared
absorption intensities of torsion-rotation
transitions of molecules with symmetric
internal rotor." Bull. Chem. Soc.
Jap.", 1973, 46, N9, 2752-2755

(англ.) 1015 мк

1002 1002

ВИНИТИ



1974

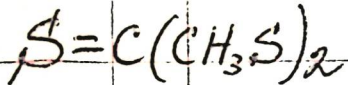
3 Б242. Этентиол. Исследование инфракрасных и микроволновых спектров. Almond Veronica, Charles Stuart W., Macdonald John N., Owen Noel L. Ethenethiol: an infrared and microwave spectroscopic study. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1974, № 14, 483—484 (англ.)

Рассмотрен синтез и очистка этентиола $\text{CH}_2=\text{CHSH}$ (I). Измерены ИК-спектры поглощения I ~~в газовой фазе~~ и в матрице. Проведен анализ структуры Q-ветвей полос неплоских колебаний 957 и 872 cm^{-1} с контуром типа C. Путем сопоставления с данными расчета для двух возможных плоских конформаций с приближенны-

И, зам.
1

х, 1978, №3

ми геометрич. параметрами показано, что расстояние между компонентами этих ветвей соответствует плоской S-цис-форме молекулы. Получен МВ-спектр I и определены значения вращательных постоянных A , B и C . Интерпретация спектра проведена на базе результатов расчета значений компонент дипольного момента вдоль главных осей молекулы. Выполнены расчеты значений вращательных постоянных двух плоских конформаций с той же самой геометрией, чем показана близость данных МВ-спектра плоскому цис-изомеру. Сделан вывод о преимущественной реализации плоской или почти плоской цис-конформации молекулы I. Ю. Н. Панченко



* 4-8246

1974

Структ.
молекулы

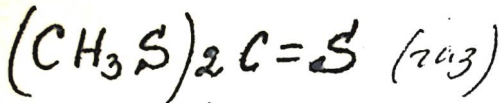
(15 Б115). Структура газообразного диметилтритиокарбоната, изученная электронографически. Almén-ningen A., Fernholt L., Seip H. M., Henriksen L. Structure of gaseous dimethyltrithiocarbonate studied by electron diffraction. «Acta chem. scand.», 1974, A 28, № 9, 1037—1040 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы диметилтритиокарбоната $S=C(SCH_3)_2$ (I). Установлено, что с полученными данными наилучшим образом согласуется син-син-форма I с плоским скелетом. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов: $S=C$ 1,634(5), C_2-C_5 1,752(4), C_3-C_5 1,800(6), $C-H$ 1,090(10), $\angle S_1C_2S_5$ 126,2(2)°, $\angle CSC$ 103,3(4)°, $\angle SCH$ 111,2(8)°.

В. Спиридонов

2. 1975 г 15

④ Емкву ☒



#4-8246 1974

Summary:

163436d Structure of gaseous dimethyltrithiocarbonate studied by electron diffraction. Almendingen, A.; Fernholt, L.; Seip, H. M.; Henriksen, L. (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Acta Chem. Scand., Ser. A* 1974, A28(9), 1037-40 (Eng). The structure of the gaseous mols. of dimethyl trithiocarbonate was detd. in order to study the conformational properties of mols. with $C(sp^2)-S$ bonds. The electron diffraction data was recorded and the exptl. radial distribution (RD) function was obtained by Fourier inversion of the intensity curves. By comparing theor. and exptl. RD functions, the mols. were found to have syn-syn conformation. The bond angles and bond lengths are given.

эмфакт.
намер.

C.A. 1975, 82 N 24

40515.3752

Ph, TE, Ch

96601 02

1974

 $(C_2H_5)_2S_2$ 966025.04
ссылка

X-5-4679

Baker A.D., Brisk M., Gellender M.
 Photoelectron spectra and dihedral angles
 of disulfides. "J. Electron Spectrosc.
 and Relat. Phenom.", 1974, 3, N 3,
 227-228

(англ.) (см. $(CH_3)_2S_2$) III
 0.102 см

080 083 - 008

ВИНИТИ

$C_2H_3S^+$

1974

12 Б32. Квантовохимическое исследование относительной термодинамической стабильности двух изомерных структур $C_2H_3S^+$. Csizmadia Imre G., Duke A. Jonathan, Lucchini Vittorio, Modena Giorgio. A quantum chemical study on the relative thermodynamic stabilities of the two isomeric species of $C_2H_3S^+$. «J. Chem. Soc. Perkin Trans.» 1974, Part 2, № 15, 1808—1812 (англ.)

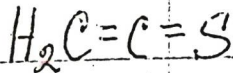
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в 3 базисах гауссовских функций (в том числе с включением 3d-АО атома S, с полной оптимизацией геометрии исследовано электронное строение 2 изомеров $C_2H_3S^+$ — циклич. (тирений нон, I) и ациклич. (β-тиовинильный

Уолл; 110

X. 1975. № 12

катион, II). Обнаружено, что обе структуры стабильны и I на 1—14 ккал/моль (в зависимости от базиса) энергетически выгоднее, чем II. Угол между связью S—H и плоскостью цикла в I оценен в $79,6^\circ$ с барьером инверсии 72,9 ккал/моль, причем барьер, в основном, обусловлен напряженностью цикла, а отталкивание неподеленных пар атома S вносит лишь небольшой вклад. Барьер для изомеризации II→I оценен в 12,8 ккал/моль (при расчете переходного состояния оптимизация геометрии не проводилась), что качественно согласуется с имеющимися опытными данными.

В. Л. Лебедев



(м.п.)

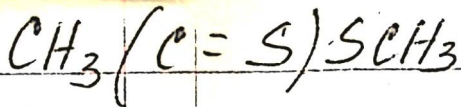
Х. 1975. №6

X 11 - 6103

1974

6 Б376. Микроволновый спектр тиокетена $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. Georgiou Krini, Kroto Harold W., Landsberg Barry M. Microwave spectrum of thioketen, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1974, № 18, 739—740 (англ.)

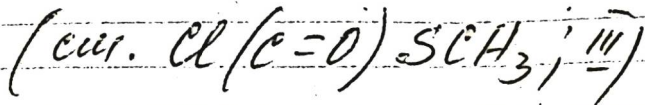
Получен МВ-спектр тиокетена в области частот от 26,5 до 40 ГГц как результат радиоспектроскопич. анализа продуктов пиролиза гексаметилтритиана при $t=900^\circ$. Наблюдаются четыре линии между 33,4 и 33,8 ГГц, идентифицированных с переходом $J=3 \leftarrow 2$. Используя для вращательной постоянной A величину 282 081 МГц, взятую из данных для кетена, определены остальные вращательные постоянные в МГц: $B=5659,45 \pm 0,03$; $C=5544,50 \pm 0,03$ и постоянная центробежного искажения $D_{JK}=0,170 \pm 0,004$. Предполагая для группы $\text{H}_2\text{C}=\text{C}$ структурные параметры, равные параметрам кетена, для длины связи $\text{C}=\text{S}$ получено значение 1,56 Å, к-рое хорошо согласуется с данными для родственных молекул. Число линий в спектре, их относит. интенсивности и определенные значения вращательных постоянных B и C подтверждают принятую идентификацию. Отклонение вычисленных частот от эксперим. значений находится в пределах точности измерений. С. Н. Мурзин



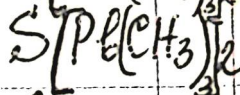
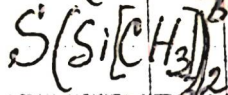
1974

Grundler H.V., Steger G.,
Z. Phys. Chem., 1974, 255, (6),
1029-38.

Ji; cur. no. 1.



1974



(фотоэлектронный спектр)

ж. 1975. №4

4 Б151. Исследование с помощью фотоэлектронной спектроскопии связи серы с элементами IV группы. Distefano G., Ricci A., Colonna F. P., Pietropaolo D., Pignataro S. Bonding between sulfur and the elements of group IV studied by UV photoelectron spectroscopy. «J. Organometal. Chem.», 1974, 78, № 1, 93—99 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры соединений $S(XMe_3)_2$ и $Me-S-XMe_3$, $Me=CH_3$, $X=C, Si, Ge, Sn$ и Pb . Полученные результаты интерпретированы в рамках качеств. модели полулокализованных групповых орбиталей (неподеленные пары атома S, d-орбитали атомов X, группы SX_2 , $S-X$, $S-C$, XC_3 , CH_3). Подробно обсуждена относит. роль сверхсопряжения, $p\pi-d\pi$ -связи и электростатич. взаимодействий в связывании $S-XMe_3$.

По резюме

+4





1974

5 Д611. Микроволновый спектр трансэтилметилсульфида. Imaishi Hisae, Hayashi Michiro. The microwave spectrum of trans-ethylmethyisulfide. «J. Sci. Hiroshima Univ.», 1974, A38, № 1, 21—31 (англ.)

В диапазоне 8,5—34 Гц измерены микроволн. спектры молекулы этилметилсульфида ($\text{CH}_3\text{SC}_2\text{H}_5$) и четырех ее монодейтерозамещенных. Идентифицированы линии 16 вращательных переходов основного состояния, 17 переходов 1-го и 13-го переходов 2-го возбужденного колебательного состояния трансизомера этилметилсульфида и по 9 переходов основных колебательных состояний дейтерированных молекул. Определены значения вращательных постоянных, по которым оценены структурные параметры этилметилсульфида: $\text{CH}_2\text{—S=}$ = 1,82 Å, $\text{CSC}=99^\circ$, $\text{CCS}=108^\circ$, $\text{HCH}=109^\circ$, $\text{HCS}=109^\circ$, $\text{HCC}=110^\circ$ (значения остальных параметров заимствованы из родственных молекул). По величине туннельного А—Е-расщепления линий оценен барьер внутреннего вращения метильной группы $\nu_3 \approx 2070$ кал/моль.

М. Р. Алиев

М. И.

Геом.

Уо

Ф. 1975
№ 5

CH₂DS.

C₂H₅

(C-H-S)

(м. н. ?
геометр)

21975 N10

1974

10 B257. Микроволновый спектр транс-этилметил-
сульфида. Imaishi Hisae, Hayashi Michiro.
The microwave spectrum of trans-ethylmethylsulfide. «J.
Sci. Hiroshima Univ.»; 1974, A38, № 1, 21—31 (англ.)

Измерены МВ-спектры транс-этилметилсульфида и
его дейтеропр-ных сим-CH₂DSE, асим-CH₂DSE, сим-
CH₂DCH₂SMe и асим-CH₂DCH₂SMe в области частот от
8,5 до 34 ГГц при т-ре сухого льда. Для всех образцов
определены вращательные постоянные, для нормального
образца вращательные постоянные в Мгц: A=16017,65,
B=3186,59, C=2799,31 и постоянная центробежного ис-
кажения в Мгц: D_J=3,89·10⁻⁴. При ряде предположе-
ний определены структурные параметры молекулы и
сопоставлены с данными для родственных молекул. В
кач-ве возможных приводятся след. значения структур-
ных параметров: r(CH₂—S)=1,822 Å, ∠CSC=99°22',
∠CCS=109°04', в группе CH₂: ∠HCH=108°24',
∠HCS=110°45', ∠HCC=109°05'. По расщеплению линий
из-за тунельного эффекта определена высота потенци-
ального барьера внутреннего вращения SCH₃ группы:
2070 кал/моль. Для нормального образца измерены
спектры в первых трех колебательных состояниях, свя-
занных с крутильными колебаниями скелета молекулы.
Обсуждается эффект взаимодействия между колебания-
ми.

С. Н. Мурзин

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

оттиски 1951 1974

15 Б109. Молекулярная структура триметиленсульфида, изученная методом газовой электронографии. Karakida Ken-ichi, Kuchitsu Kozo, Bohn Robert K. Molecular structure of trimethylene sulfide studied by gas electron diffraction. «Chem. Lett.», 1974, № 2, 159—164 (англ.)

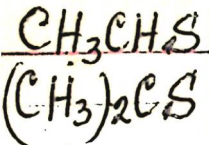
геометр.

Электронографически в газовой фазе исследовано строение молекулы триметиленсульфида $(\text{CH}_2)_3\text{S}$. Электронограммы паров сняты при комн. т-ре, ускоряющем напряжении 40 кВ, расстоянии от сопла испарителя до фотопластики 107,75 мм. Кривая молек. составляющей интенсивности рассеяния получена от 6,9 до 34,5 $\text{\AA}^{-1}$. При расшифровке были сделаны след. предположения: атомы Н лежат в плоскости, перпендикулярной той, где находится атом С и два его ближайших соседа. Биссектрисы углов НСН и ХСХ лежат на одной прямой; все связи С—Н равны; значения углов $\text{H}-\text{C}_\alpha-\text{H}$ и

Х. 1974. № 15

$\text{H}-\text{C}_\beta-\text{H}$ равны соотв-щим углам в триметиленоксиде: 110,3 и 110,7°. При этих предположениях расшифровка строения молекулы проведена по кривой радиального распределения, уточнение по кривой молек. составляющей интенсивности МИК. В результате найдены следующие значения расстояний и среднеквадратичных амплитуд колебания атомов $\text{C}-\text{S}$ 1,847 (2), 0,056 (5), $\text{C}-\text{C}$ 1,550(3), 0,054 (5), $\text{C}-\text{H}$ 1,101(6), 0,083(8) Å, углов $\angle \text{CSC}$ 77,0(5), двугранного угла $\angle \text{C}_2\text{SC}_3-\text{C}_2\text{C}_4\text{C}_3$ 26(4)°.

И. Ронова



XIV-6194

(у, м, н, цо)

ж. 1975
№ 8

8 Б115. Фотоэлектронные и микроволновые спектры нестабильных молекул тиацетальдегида CH_3CHS и тиацетона $(\text{CH}_3)_2\text{CS}$. Kroto H. W., Landsberg B. M., Suffolk R. J., Voddan A. The photoelectron and microwave spectra of the unstable species thioacetaldehyde, CH_3CHS , and thioacetone, $(\text{CH}_3)_2\text{CS}$. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 29, № 2, 265—269 (англ.)

Изучены фотоэлектронные и МВ-спектры нестабильных молекул тиацетальдегида, CH_3CHS (I) и тиацетона, $(\text{CH}_3)_2\text{CS}$ (II), полученных в результате пиролиза циклич. тримеров 1,3,5-триметил-*s*-тритиана и гексаметил-*s*-тритиана, соотв. (время жизни I составляет 10 сек., а II — несколько минут). По фотоэлектронному спектру определены вертикальные потенциалы ионизации ПИ (до 5-го) исходных тримеров, а также продуктов р-ции (в т. ч. H_2CS). Первые ПИ I и II равны 8,98 и 8,60 эв соотв. В диапазоне 8—40 Ггц идентифицированы микроволн. линии 9 вращательных переходов I и 8 переходов II и А—Е-расщепление линий, обусловленное заторможенным внутренним вращением метильных групп, в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных $A=48572,86$, и $8728,77$; $B=5750,99$ и $4390,55$; $C=5307,57$ и $3274,95$ Мгц и барьера внутреннего вращения $V_3 \approx 1545$ и 1300 кал/моль для I и II соответственно.

М. Р. Алиев

1974

11/1/74-16

41111.8903

Ch, Ph

54969 03

1974

CH₃SSCD₃ (и.п.и.ом) XIV 6120Kuhler M., Charpentier L., Sutter D.,
Dreizler H.

Eine Analyse der Methyltorsionsfeinstruktur von Rotationsspektren in angeregten Zuständen der S-S-Torsion beim Trideutero-methyl-methyldisulfid.

"Z. Naturforsch.", 1974, 29a, N 9,

1335-1344

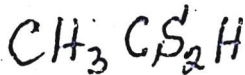
(нем., рез. англ.)

10(4)

УДК 538 ПИК

210 212

ВИНИТИ



1974

2:

7 Д164. Расчет и интерпретация колебательных спектров дитиоуксусной кислоты и ее иона. Мельникова Н. В., Пилипенко А. Т. «Укр. хим. ж.», 1974, 40, № 3, 269—274

В приближении валентно-силового поля выполнен расчет частот и форм норм. колебаний дитиоуксусной кислоты, ее иона и его дейтероаналога. Путем вычисления производных от частот по силовой постоянной связи CS найдены аналитич. полосы, чувствительные к образованию связей с металлом. Автореферат

Ф. 1974 N 7

40731.4585

Ch, TC

41125

 $(CH_2)_3 S'$

02

1974

2288

Momicchioli F., DiLonardo G., Galloni G.
Franck-Condon distribution in the 226 nm
band of trimethylene sulfide. "J. Mol.
Spectrosc.", 1974, 51, N 2, 273-276

(англ.)

0165 мкс

135 140

57

ВИНИТИ

50131.4723

Ch, Ph, TC

49587 02

 $(CH_3SH-SHCH_3)$

1974

*4-8029

и.р. спектр димера
Pecul Krzysztof, Janoschek Rudolf. Calculated vibrational spectra of weak hydrogen bonds. I. Methanethiol dimer. "Theor. chim. acta", 1974, 36, N 1, 25-36

(англ.)

266 267 285

0293 ЛИБ
ВНИИТИ

30к 8750

$\text{HC}_3\text{S}_2\text{H}$

1974

Randhawa H.S.,
Rao C.N.R.

Синтез. напр.м.
V.

J. Mol. Struct., 1974,
21(1), 123-34.

● (см. C-H-S-O; III)

40619.436

Ch, Ph, TC

 $(CH_2)_3 S$

41125

UK checkup

02

1974

xy 5515

Wieser H., Duckett J.A.

Ring puckering progressions in the infra-red CH_2 scissoring region of several deuterated analogs of trimethylene sulfide. "J. Mol. Spectrosc.", 1974, 50, N 1-3, 443-456 (англ.)

106

109

0123

~~0123-англ~~
 БИНИТИ

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

X 4-5524

1974

21 Б229. Длинноволновые инфракрасные спектры и потенциальные функции излома кольца некоторых дейтерированных аналогов триметиленсульфида. Wieser H., Duckett J. A., Kydd R. A. The far-infrared spectra and ring puckering potential functions of several deuterated analogs of trimethylene sulfide. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 51, № 1, 115—122 (англ.)

Измерены ИК-спектры триметиленсульфида и его α - d_2 , β - d_2 , α,α - d_4 и d_6 -замещенных в области 200—50 см^{-1} . Предложено отнесение колебаний излома кольца во всех соединениях. Определены потенциальные константы функции $V(Z) = A(Z^4 + BZ^2)$ (Z — координата уменьшения излома кольца). Уточнение констант A и B проводили методом наименьших квадратов. Показано, что высота барьера инверсии $AB^2/4$, вычисленная в приближении потенциала 2:4, изменяется при изотопозамещении (271,8; 265,9; 270,6; 257,9; 263,6 см^{-1} для легкой молекулы и ее дейтерозамещенных соответственно).

Е. Разумова

Уо, и.к.
спектр

х. 1974

№ 21

универсальная связь S и Se

1975

19 Б54. Теоретические аспекты органических соединений серы и селена. Fabian J. Theoretical aspects of organosulphur and organoselenium compounds. «Org. Compounds Sulphur, Selenium and Tellur. m. Vol. 3». London, 1975, 728—766 (англ.)

Обзор квантохим. исследований циклич. сопряженных соединений S и Se 1970—1974 гг. Дан анализ использованных методов расчета теор. критериев ароматичности соединений S, роли вакантных $3d$ -АО атома S. Обсуждаются результаты расчетов характеристик основного и возбужденного состояний энергии и интенсивности электронных переходов, фотоэлектронные спектры) циклич. π -систем с серосодержащими заместителями, гетероциклов содержащих в ядре атомы S и Se и их производных. В. Фаустов

C-H-S

C-H-Se

(обзор)

Х. 1978, N 19

$C_6H_4S_2C_6H_4$

1975

Структура
молекулы

Б132. Структура и потенциал инверсии тиантрена. Gallaher K. L., Bauer S. H. Structure and inversion potential of thianthren. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 2, 71, № 6, 1173—1182 (англ.)

Методом газовой электронографии исследовано строение молекулы тиантрена, $C_6H_4S_2C_6H_4$, при T -ре сопла $154—156^\circ$. Вайдено, что оба фрагмента молекулы $C_6H_4S_2$ плоские, а двугранный угол между ними равен $\theta = 131,4^\circ$. Бензольные кольца не искажены, межъядерные расстояния (r_g) и среднеквадратичные амплитуды колебания $C—C$ 1,400(2), 0,045(3), $C—H$ 1,082(22),

ж 1976 №1

0,089(21), C—S 1,770(3), 0,055(3), S—S 2,743(8),
0,112(2), А. Углы $\angle CSC$ 104,1, $\angle SCC$ 120,1°. Проведен
полный анализ нормальных колебаний молекулы для
выяснения инверсионных и крутильных колебаний мо-
лекулы тиантрена. Рассмотрен ряд моделей, обладаю-
щих барьером инверсии в виде $A(\varphi^4 - B\varphi^2)$, где $\varphi = \pi - \theta$.
Наилучшее согласие с опытом у модели с барьером ин-
версии $Y_0 > 4$ ккал/моль и углом $\theta_0 = 128 - 130^\circ$ в мини-
муме потенциальной функции.

И. Ронова

60220.7276
Ch,TC

Кб. мех. папер

1975

20850+
 $C_2H_4SH^+$

X 4-11583

Gordon James W., Schmid George H.,
Csizmadia Imre G.
Molecular orbital calculations on
the $C_2H_4SH^+$ cation.

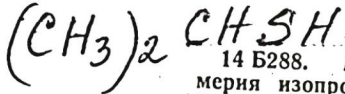
"J.Chem.Soc.Perkin Trans.", 1975, Part 2,
N 15, 1722-1726

(англ.) 0561 ПК

532 535

553

ВИНИТИ



1975

14 Б288. Микроволновый спектр и поворотная изомерия изопропилмеркаптана, Griffiths John H., Boggs James E. Microwave spectrum and rotational isomerism in isopropyl mercaptan. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 2, 257—269 (англ.)

В диапазоне 12—40 ГГц измерены МВ-спектры изопропилмеркаптана $(CH_3)_2CHSH$ (и SD) с ^{32}S ^{34}S . Идентифицированы линии вращательных переходов a и c -типа основного колебательного состояния и первого возбужденного состояния крутильного колебания SH-(SD)-связи транс- и гош-изомеров изопропилмеркаптана (транс-изомер стабильнее гош-изомера на 57 кал/моль). По относит. интенсивности линий основного и возбужденного состояний оценены частоты крутильного колебания SH- и SD-связей: 208 и 140 cm^{-1} , соотв. Для барьера внутреннего вращения SH получено значение 1,98 ккал/моль. По значениям вращательных постоянных оценены нек-рые из структурных параметров транс-изопропилмеркаптана: CS 1,849, SH 1,345 Å, CCC 113,6°, CCS 111,2°, CSH 96,5°.

М. Р. Алнев

м. в.
спектр.Ж. 1976
N14

1975

Miokawa Takeshi,

$(C_2H_5)_2S$

chem. docum.

J. Sci. Hiroshima Univ.,
1975, A39, N2, 161-181.

chem. $(C_2H_5)_2O$

60315.1230

CH, TC, MGU

92073

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

1975

* 4-11804

Nogami Morimasa, Sugeta Hiromu,

Miyazawa Tatsuo. Vibrational spectra and
molecular structure of ethyl methyl
sulfide. "Bull. Chem. Soc. Jap.", 1975, 48, N12,
3573-3575 (англ.)

0589 лиз

557 557 501

ВИНИТИ

51022.1223.

Ch, Ph, TC

31603

$(C_2H_5)_2SCH_2$

1975

#4-10402

Ohsaku Masaru. Molecular vibrations
and force fields of alkyl sulfides. IX.
Infrared spectra of the conformations of
 $rSCH_2S$ R(R=Et, Pr and Bu).

"Spectrochim. acta", 1975, A31, N9-10, 1271-
1276 (англ.)

0481 пмк

454 456 Л 7 2

ВИНИТИ

$S(CH_3)_n$.

(recompos)

Oberhammer Heinz 1975

"J. Mol Struct"

1975, 28, N2, 349-357 (and)

(an $F(CH_3)_n$; III)

C_2SH_2

1975

Reeher J. R.,

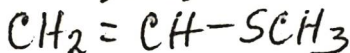
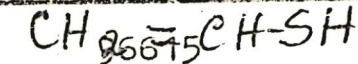
Nucl. Sci. Abstracts, 1975,

31(1), 2723.

(see. CNH_3 ; III)

51013.9165

Ph, Ch, TC, DB



1975

3397

Samdal S., Seip H.M.

Potential for rotation about $\text{C}(\text{sp}^2)\text{-O}$
 and $\text{C}(\text{sp}^2)\text{-S}$ bonds: electron diffraction
results for $\text{CH}_2=\text{CH-OCH}_3$ and
 $\text{CH}_2=\text{CH-SCH}_3$ and ab initio calculations
 on $\text{CH}_2=\text{CH-OH}$ and $\text{CH}_2=\text{CH-SH}$.

"J. Mol. Struct.", 1975, 28, N 1,
 193-203 (англ.)

51002.9045

Ch. TC. MGU

CH_3SH_2^+
96559

1975

13-10032

Solka B.H., Harrison A.G.

Bimolecular reactions of trapped ions.

Part XI. Rates and equilibria in

proton-transfer reactions of CH_3SH_2^+ .

"Int. J. Mass Spectrom. and Ion

Phys.", 1975, 17, N 4, 379-394 (англ.)

425 427

4

0481 ЛМК ВИНТИ

51127.1997

TC, Ch

 $(C_2H_5)_2S$
31603

1975

*4-10388

Sugeta Hironu. Normal vibrations and molecular conformations of dialkyl disulfides.

"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 11,
1729-1737

(англ.)

0437 пик

480 482

ВИНИТИ

51127.1997

TC, Ch

 $(CH_3)S_2(C_2H_5)$
31603

1975

X 4-10388

Sugeta Hiromu. Normal vibrations and molecular conformations of dialkyl disulfides.

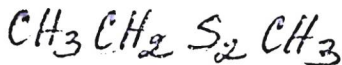
"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 11,
1729-1737

(англ.)

0437 пик

480 482

ВИНИТИ



1976

по
геометрии

15 Б63. Конформационный анализ CXVII. Метил-этилдисульфид. Расчеты [методами] молекулярной механики и молекулярных орбиталей. Allinger N. L., Kao J., Chang F.-M., Boyd D. B. Conformational analysis — CXVII. Methyl ethyl disulfide. Molecular mechanics and molecular orbital calculations. «Tetrahedron», 1976, 32, № 23, 2867—2873. (англ.)

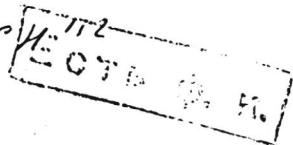
С использованием эмпирич. силового поля (упругих постоянных валентных связей и углов, параметров потенциалов невалентных взаимодействий и торсионного потенциала), найденного в результате конформац. расчетов серусодержащих алканов, изучена потенциальная поверхность внутреннего вращения молекулы метил-этилдисульфида (I), $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{—S—S—CH}_3$. Для вращения вокруг связи S—S найдено 3 минимума энергии, соотв-щие гош (двугранный угол C—S—S—C равен 84°), гош' (угол 72°) и транс-конформеру (угол 179°).

х. 1977N15

причем 2 из них одинаковы по глубине (гош и транс), а 3-й (гош') проигрывает им 0,68 ккал/моль. К аналогичному результату привел и расчет, проведенный неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в базисе ОСТ-3Г (энергия транс-конформера 0,06 и гош' 0,58 ккал/моль). Цис-конформер I отвечает максим. энергии (11,67 ккал/моль согласно эмпирич. и 9,02 ккал/моль согласно неэмпирич. расчету). Метильные группы во всех случаях находятся в скрещенных положениях по отношению к соседним связям, а двугранный угол S—S—C—C близок к 300°. Расчетные данные по структуре и энергетике конформеров удовлетворительно согласуются с имеющимися эксперим. данными (ИК-, КР- и ЯМР-спектрами, электронографией и рентгеноструктурным анализом). Валентное приближение ПДП/2 метода ССП МО ЛКАО не приводит, однако, к согласию с опытом, предсказывая слишком высокую стабильность транс-конформера по сравнению с гош-конформером связи S—S (на 0,68 и 0,91 ккал/моль соотв. в базисах *sp* и *spd*). Пред. сообщ. см. РЖХим, 1977, 7Е90.

В. Г. Дашевский

u. n. (HC(:O)SD, ^{XIV}-7663, DC(:O)SH) 1976
Hocking W. H., Winnemisser G.,
Z. Naturforsch., 1976, 31a, n5, 438-453 (aw)
The rotational spectrum of monothio-
formic acid. π cis and trans-HC(:O)SD,
DC(:O)SH, HC(:O)³⁴S



J. Xu, 1976, 245262



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

1976

Corbeau D., et al.

J. Chim. phys. et
phys.-chim. biol., 1976,

73, 17-8, 787-94

(непр.
спис.
нов. парам.)

• (all. H_2CS ; II)

14 Б249. Микроволновый спектр деутеропропагил-
HCCCH2SH-меркаптана HCCCH2SD. Исследование внутреннего вра-
щения в —SH и —SD изотопических образцах. Mir-
ri A. M., Scappini F., Cervellati R., Fave-
ro P. G. Microwave spectrum of deutero propargyl mer-
captan HCCCH2SD. Investigation of the internal rotation
in the —SH and —SD isotopic species. «J. Mol. Spect-
rosc.», 1976, 63, № 3, 509—520 (англ.)

1976

Измерены МВ-спектры HCCCH2SH (I) и HCCCH2SD
(II), в торсионных состояниях $0^\pm$ и $1^\pm$ в области частот
от 8 до 40 ГГц. При идентификации вращательных пе-
реходов использован метод МВ двойного резонанса.
При анализе эксперим. данных применяли модель полу-
жесткой молекулы с одной внутренней степенью сво-
боды. Определены вращательные постоянные (в МГц)
для изотопич. образцов I и II, соотв.: $A^+ = 22350,46 \pm$
 $\pm 0,33$, и $20534,28 \pm 0,11$, $B^+ = 3045,98 \pm 0,04$ и $3005,67 \pm$
 $\pm 0,02$, $C^+ = 2757,32 \pm 0,04$ и $2725,02 \pm 0,03$, $A^- = 22342,15 \pm$
 $\pm 0,30$ и $20533,28 \pm 0,10$, $B^- = 3045,43 \pm 0,05$ и $3005,64 \pm$
 $\pm 0,03$, $C^- = 2757,44 \pm 0,04$ и $2725,05 \pm 0,03$. Наилучшее
согласие расчетных молек. постоянных с эксперим. по-
лучено при использовании r_0 -структуры с параметрами:
 $r(\text{SH}) = 1,301 \pm 0,015$ А, $\angle \text{SCC} = 113,02 \pm 0,01^\circ$, $\angle \text{CSH} =$
 $= 104,3 \pm 2^\circ$, и угол внутреннего вращения к гош-конфи-
гурации от транс-конфигурации $119,8 \pm 3^\circ$.

М. В. Савицкий

М. И. К.

Х. 1977. № 14

3 Б106. Определение вращательных изомеров при помощи фотоэлектронной спектроскопии с варьируемой температурой. Новый метод в области молекулярного конформационного анализа. Muller Claus, Schaffer Werner, Schweig Armin, Thon Nikolaus, Vermeer Hans. Detection of rotational isomers by variable temperature photoelectron spectroscopy. A new technique in the realm of molecular conformational analysis. «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, № 18, 5440—5443 (англ.)

Исследован фотоэлектронный спектр (ФС) метилвинилсульфида (I) в диапазоне т-р 20—600°С. Отнесение орбитальных потенциалов ионизации (ПИ) проведено на основе орбитальных энергий I, рассчитанных методом ССП МО ЛКАО в приближении ПДП/С с учетом 3d-АО атома S. Расчет проводился для значений диэдр. угла (ДУ) CCSC от 0° до 180° (ДУ 0° отвечает цис-конформеру I). Четыре первых ПИ отнесены к ионизации орбиталей (в порядке возрастания энергии) n_{π} , $\pi_{\text{C}=\text{C}}$, n_{σ} , $\sigma_{\text{C}=\text{C}}$, причем орбиталь $\pi_{\text{C}=\text{C}}$, взаимодействующая по типу $n-\pi$ сопряжена с неподеленной парой атома S и по типу сверхсопряжения с орбиталью $\sigma_{\text{C}=\text{C}}$, наиболее чувствительна к изме-

протвд,
спектр,
геометрия

26.1977
N 3

нению ДУ. Отношения интенсивностей полос ионизации, отвечающих цис- и гош-изомерам I, определены численной аппроксимацией ФС линейной комбинацией гауссовых кривых. В предположении равенства сечений ионизации одной и той же МО в различных изомерах по отношению интенсивностей полос ионизации различных изомеров определены константы равновесия цис- и гош-изомеров при различных t -рах. По t -рной зависимости константы равновесия определена разность ΔE энергий цис- и гош-I. Полученное значение $\Delta E = 2,3 \pm 0,2$ ккал/моль (цис-форма наиболее стабильна) качественно согласуется со значением ΔE , найденным ИК-спектроскопией, однако противоречит результатам электронной дифракции, согласно к-рым разность энергий конформеров практически равна нулю. В. Фаустов

гий,
ния

$\text{CH}_3\text{S}_2\text{H}$
 $\text{CH}_3\text{S}_2\text{CH}_3$
 CH_3SH
 CH_3S^-

A_H^+ , No.

Pappas Jan A.

1976

"Chem Phys" 1976, 12,
N4, 397-405 (over)

(on H_2S_2 ; iii)

60422.1900

Ph, TC, MGU, Ch

 $(CH_3)(C_2H_5)S_2$
41197

1976

#13-12638

Van Wart H.E., Cardinaux F., Scheraga H.A. Low frequency Raman spectra of dimethyl, methyl ethyl, and diethyl disulfides, and rotational isomerism about their carbon-sulfur bonds.

"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 6, 625-630
(англ.)

0608

 $CC(CH_3)_2S_2$

578 582

600

ВИНИТИ

60422.1900

Ph, TC, MGU, Ch

 $(C_2H_5)_2S_2$
41197

pg 76

*43-12638

Van Wart H.E., Cardinaux F., Scheraga H.A. Low frequency Raman spectra of dimethyl, methyl ethyl, and diethyl disulfides, and rotational isomerism about their carbon-sulfur bonds. $cu (CH_3)_2S$

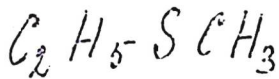
"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 6, 625-630
(АНГЛ.)

~~0608-1111~~

578 582

600

ВИНИТИ



Vokoxeki A.

1976

сложные
соединения

"J. Phys Chem" 1976, 80,

№6, 618-625 (англ)

(содержит $(CH_3)_2S$; III)



C_3H_6S

1976

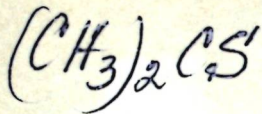
6 Д470. Линии неплоских деформационных колебаний кольца в спектрах комбинационного рассеяния C_3H_6S и его дейтерированных аналогов. Wieser H., Kydd R. A Ring puckering Raman transitions of trimethylene sulfide and several deuterated analogs. «J. Raman Spectrosc.», 1976, 4, № 4, 401—407 (англ.)

Изучены спектры комб. рас. ($50-250\text{ см}^{-1}$) газообразных C_3H_6S (I) и ряда дейтерозамещенных ($\alpha-d_2$, $\beta-d_2$, $\alpha,\alpha'-d_4$ и d_6) I при возбуждении лазерной линией $514,5\text{ нм}$ мощностью $3-9\text{ вт}$. При сопоставлении спектров ИК-поглощения и комб. рас. I и его дейтерированных аналогов идентифицированы полосы неплоских деформационных колебаний 4-членного кольца I. Вычислены значения констант A ($17,522 \pm 0,126\text{ см}^{-1}$), B ($-7,641 \pm 0,050$) и барьера инверсии I ($255,7 \pm 1,8\text{ см}^{-1}$). Показано, что величина барьера инверсии значительно изменяется при дейтерировании I. Библи. 9.

И. В. А.

(м.и.)

ф. 1974
№ 6



1974

электр.
спектр

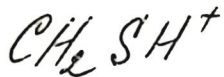
12 Д127. Теоретическое предсказание электронного спектра тиацетона и сравнение с родственными системами. Bruna Pablo J., Buenker R. J., Peyerimhoff S. D. Theoretical prediction of the electronic spectrum of thioacetone and comparison with related systems. «Chem. Phys.», 1977, 22, № 3, 375—381 (англ.)

Выполнены неэмпирич. расчеты электронной структуры основного и ряда возбужденных состояний молекулы тиацетона. Расчеты проводились методом наложения конфигураций в базе молекулярных орбиталей, вычисленных в приближении Хартри—Фока—Рутана. Для состояний с заданной симметрией отбирались «ведущие»

Р. 1974 N12

определители разложения и рассматривались одно- и двухкратные возбуждения по отношению к выбранным определителям. Вычислены энергии вертикальных переходов для ряда возбужденных состояний. Первая полоса в спектре молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{CS}$ связана с переходом $^1A_2 \rightarrow X^1A_1$. Рассчитанная энергия этого перехода, равная 2,53 эв, хорошо согласуется с эксперим. значением (2,48 эв). Результаты расчетов сравниваются с данными для родственных систем, таких, как ацетон, формальдегид и тиоформальдегид.

А. И. Панин



1977

Dewar. M. J. S. et al.

publ. J. Amer. Chem. Soc., 1977, 99,
vol. N23, 7432-7439 (am.)

coll. $\text{CH}_2^+ - \text{III}$

1977

CH_3^+

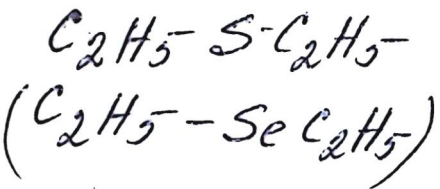
Devoor M. J. S. et al.

publ.
reac

J. Amer. Chem. Soc., 1977, 99,
N23, 7432-7439 (anal.)



as CH_3^+ - IV

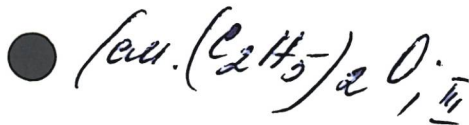


1977

Hamada K.
et al.

Chenette
K. P.

Spectrosc. Lett.,
1977, 10, 357-65



$(CH_3)_2S$ (reocr. emp.)

1977

Iijima T., Tsuchiya S.

Kimura M. XIV²-9657

Bull. Chem. Soc. Jap., 1977, 50, n 10,
2564-2567 (amer.)

The molecular structure of
dimethyl sulfide.

pre Xues, 1948, 5 5 94 10 (9)

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

оттиски 99.34

1977

центробежное
искажение

5 Д442. Центробежное искажение триметиленсульфида. Nielsen C. J. Centrifugal distortion in thietane. «Acta chem. scand.», 1977, A31, № 9, 791—792 (англ.)

В области частот 8—40 Гц измерен микроволн. спектр молекулы триметиленсульфида для состояний $v=0,1$ сжимающего колебания кольца. Отождествлены новые переходы Q-ветви для высоких значений J . Спектр интерпретирован с помощью колебательно-вращательного гамильтониана, включающего квартичные и секстичные постоянные центробежного искажения.

Ф, 1948, 15

H_2CCS^+

1977

1 Б121. Основное и возбужденные состояния радикал-катиона тиокетена H_2CCS^+ . Rosmus P., Solonki B., Bock H. Ground and excited states of thioketene radical cation, H_2CCS^+ . «Chem. Phys.», 1977, 22, № 3, 453—458 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры (ФС) продуктов пиролиза эфира дитиоуксусной к-ты и 1,2,3-тиадиазола. Оба спектра содержат пики, к-рые можно приписать ионизации тиокетена (I), но не обнаруживают следов ионизации его изомеров этинил меркаптана (II) и тиирена (III). Для подтверждения такой интерпретации ФС неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в расширенном базисе, включающем поляризац. ф-ции на атомах H, C и S и с учетом корреляц. эффектов методом парных натуральных орбиталей (ПНО) в приближении связанных электронных пар (СЭП) были рассчитаны I—III. Для I и II использована стандартная, а для III оптимизированная методом МЧПДП/3 геометрии. Наиболее стабильным является I; далее следуют II (0,028) и III (0,210) (в скобках приведены энергии

$\gamma, \epsilon_i, \nu_i$

2. 1978
12-1

относительно I в ат. ед.). Сделано след. отнесение состояний катион радикала I (после характера состояния приведены экспериментальная и, в скобках, рассчитанная методом ПНО—СЭП энергия в эв, относительно I): $\tilde{X}(^2B_1)$ 8,89 (8,85); $A(^2B_2)$ 11,32 (11,28); $\tilde{B}(^2B_1)$ 12,14 (12,44); $\tilde{C}(^2A_1)$ 14,55 (14,75); $\tilde{D}(^2B_2)$ 15,5 (15,31); $\tilde{E}(^2A_1)$ 17,2 (17,65). Четыре первых орбитальных потенциала ионизации (ПИ) имеют разрешенную колебательную структуру отвечающую антисимм. вал. кол. СС. [1450 см^{-1} в $\tilde{X}(^2B_1)$ и 1600 см^{-1} в $\tilde{A}(^2B_2)$ -состояниях], серии с частотами $< 1000 \text{ см}^{-1}$, по-видимому, связаны с симм. вал. и деф. кол. СС. Структура ПИ I напоминает исследованный ранее ФС кетена, единственным отличием является сдвиг ПИ I в область более высоких значений. Обсуждены основные ПИ I и роль определенных типов возбужденных конфигураций в определении ПИ I.

В. Фаустов

H_2CCS^+

1977

12 Д318. Основное и возбужденные состояния катион-радикала тиокетена H_2CCS^+ . Rosmus P., Solouki B., Book H. Ground and excited states of thioketene radical cation, H_2CCS^+ . «Chem. Phys.», 1977, 22, № 3, 453—458 (англ.)

фотомол.
спектр.

Исследован HeI-фотоэлектронный спектр тиокетена H_2CCS (I). I получали пиролизом дитиоуксусной кислоты и 1,2,3-тиадназола. Вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) I равны (в эв): 8,89; 11,32; 12,14; 14,55; 17,2. В 1-й полосе фотоэлектронного спектра обнаружена колебательная структура с частотами 1450 и 700 cm^{-1} , во 2-й полосе — с частотами 1660 и 680 cm^{-1} , в 3-й и 4-й полосах с частотами 710 и 950 cm^{-1} соответственно. Предложенная интерпретация фотоэлектронного спектра I основана на сравнении экспериментальных ПИ с рассчитанными в рамках неэмпирич. метода ПИ I. Отмечено прекрасное совпадение (в пределах 0,3 эв) экспериментальных и теоретич. ПИ I. Библ. 24. Ю. В. Чижев

Ф. 1977, № 12

$(C_6H_5)_2S$

Витиш 9393

1974

13 Б95. Электронографическое исследование строения молекулы дифенилсульфида. Rozsondai B., Moore J. H., Gregory D. C., Hargittai I. Electron diffraction investigation of the molecular structure of diphenyl sulfide. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1977, 94, № 4, 321—331 (англ.; рез. рус.)

структура
молекулы

Методом газовой электронографии изучались сложные серии дифенилсульфида SX_2 (I), сульфоксида SOX_2 (II) и сульфона SO_2X_2 (III), где $X=F, Cl, CH_3$ или $(CH_3)_2N$. Для I определены длины связей $S-C$ $1,771 \pm 0,005$, $C-C$ $1,399 \pm 0,003$, $C-H$ $1,089 \pm 0,008$ А и угол CSC $103,7 \pm 1,3^\circ$. На основании этих данных рассмотрены возможные модели структуры, отличающиеся углами поворота фенильных колец вокруг связей $S-C$. Только две из них отвечают эксперим. данным. Проведено сравнение полученных длин связей $S-X$ и углов XSX в I и III в зависимости от X. Связи $S-X$ короче в III, чем в I, когда $X=F, CH_3$ или $(CH_3)_2N$ и почти не различаются в случае Cl и C_6H_5 . Для III значения углов XSX к таковым в I, а угол NSN принимает самое большое значение.

К. С. Мищенко

2. 1978, N 13

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

(ж, крист.)

ХУ-17796

1977

ВФ-ХIV-В784

Д.и.с.и.
пост.

16 Б236. Колебательные спектры и поворотная изомерия цепочечных молекул. Часть III. Этилметилсульфид и его дейтеропроизводные. Sakakibara Masaaki, Matsuura Hiroatsu, Harada Issei, Shimanouchi Takehiko. Vibration spectra and rotational isomerism of chain molecules. III. Ethyl methyl sulfide and deuterium compounds. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1977, 50, № 1, 111—115 (англ.)

Измерены спектры КР $\text{CH}_3\text{SC}_2\text{H}_5$ (I), $\text{CD}_3\text{SC}_2\text{H}_5$, $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{CD}_3$, $\text{CH}_3\text{SC}_2\text{D}_5$ в жидк. и крист. состояниях,

Х. 1977. №16

а также спектр КР газ. I при t -рах от 21 до 112°. Используя силовые постоянные, полученные по методу самосогласованного поля для алифатич. сульфидов, а также данные по изотопозамещению, выполнен расчет нормальных колебаний I, с помощью которого проведено отнесение основных колебаний. I. Показано, что в жидкости и газе I существует в виде смеси двух поворотных изомеров — транс (T) и гаус (G). Линия КР 725 см^{-1} отнесена к вал. кол. $\text{CH}_3\text{—S}$ как T , так и G -конформеров, 678 см^{-1} — вал. кол. $\text{CH}_2\text{—S}$ T -конформера, линия 658 см^{-1} — к вал. кол. $\text{CH}_2\text{—S}$ G -конформера. В кристалле I существует в виде G -формы. Анализ t -рной зависимости относит. интенсивности линий 678 и 653 см^{-1} в газе дал для значения разности энтальпий поворотных изомеров величину $-30 \pm 50\text{ см}^{-1}$.

С. Б.

TSC

(Oum 5314) 1977

Sathyanarayana S.N., et al.

Spectrochim. Acta, 1977, 33A,
517-22.

(см. уоми.)

$(SCH)_x$

[X-13-18889]

1977

Yamabe T., et al

Bull. Chem. Soc. Japan,
1974, 50, N4, 798-801

(Ei)

HCSSH.

B-P-XIV-9594

1978

u. b.
cneup

88: 160900p Production and microwave spectra of dithioformic acid, HCSSH. Bak, B.; Nielsen, O. J.; Svanholt, H. (H. C. Oersted Inst., Univ. Copenhagen, Copenhagen, Den.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 69(3), 401-8 (Eng). Hitherto unknown HCSSH was produced by pyrolysis (300°) of $\text{HC}(\text{SH})_3$ and identified by the microwave spectrum (18-40 GHz) of its most abundant species $\text{H}^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{32}\text{SH}$. Rotational transitions of this species in its ground state were assigned to a trans and a cis rotamer. Both rotamers are planar, the trans conformer being the more stable by $\sim 350 \text{ cm}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. For each rotamer spectra of mols. in 2 vibrationally excited states were assigned. Frequencies of transitions of importance for a search for HCSSH in interstellar space are reported.

P.A., 1978, 22, N22

1091 - XIV - 4594

1948

HCSSH

22 Б260. Получение и микроволновые спектры дитиоугарной кислоты, HCSSH. Bak B., Nielsen O. J., Svanholt H. Production and Microwave spectra of dithioformic acid, HCSSH. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 3, 401—408 (англ.)

Измерены в области частот 18—40 ГГц МВ-спектры двух конформеров, транс(Т) и цис(Ц), дитиоугарной к-ты, $H^{12}C^{32}S^{32}SH$ (I), в основном и первых двух возбужденных колебательных состояниях. I получен как продукт пиролиза паров $HC(SH)_3$ при прокачке паров через ячейку при t -ре 300—350° и давл. от 10 до 30 мм. Для обоих конформеров и всех состояний определены вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения. Для Т и Ц соответственно, в основном состоянии получены значения вращательных постоянных (Мгц) $A=49226,804$ (86,0) и $48947,359$ (380,0), $B=3447,5312$ (89) и $3498,7192$ (240), $C=3219,4954$ (96) и $3261,4335$ (300) и постоянных центробежного искажения (кгц) $\Delta_J=1,100$ (100) и $1,022$ (420), $\Delta_{JK}=-39,049$ (240) и $-48,380$ (1,2). Измерены

м. 17.
м. в. в. в. в.

2.1948, N22

величины компонент дипольного момента для Т и Ц соотв., $\mu_a = 1,53$ и $2,10 D$. Из измерений относит. интенсивностей линий определена разность энергий $E(\text{цис}) - E(\text{транс}) = 350 \text{ см}^{-1}$. Установлено, что оба конформера имеют плоскую форму. Вычислены возможные структурные параметры Т и Ц. Вычислены частоты вращательных переходов с низкими значениями J в области частот 6—14 Гц для Т и Ц, к-рые могут представить астрофиз. интерес.

С. Н. Мурзин

HCSSH

ВР-ХIV-9594

1978

10 Д395. Синтез и микроволновый спектр дитио-
муравьиной кислоты (HCSSH). Bak B., Niel-
sen O. J., Svanholt H. Production and microwave
spectra of dithioformic acid, HCSSH. «J. Mol. Spect-
rosc.», 1978, 69, № 3, 401—408 (англ.)

Впервые синтезирована молекула HCSSH при пиро-
лизе метантритиола и идентифицирована по микровол-
новому спектру в диапазоне 18—40 ГГц. Наблюдаемый
спектр соответствует транс- и цис-изомерам HCSSH.
Идентифицированы линии вращательных переходов
с $J \leq 6$ обоих изомеров в основном и двух возбужден-
ных колебательных состояниях. Определены значения
вращательных и двух квартичных центробежных по-
стоянных и дипольного момента (μ_a (транс)=1,53,
 μ_a (цис)=2,10 ед. Дебая). Показано, что транс-изомер
на 350 см^{-1} стабильнее цис-изомера. Обсуждается воз-
можность обнаружения молекулы HCSSH в межзвезд-
ной среде.

М. Р. Алиев

система,
М. В. Скинор

ср: 1978, №10

C-H-S-
соедин.

структура
молекул

Сев. Петру Hargittai 1978
9 БЗ1. Структура сульфоновых молекул. II. Изменения в структуре. Hargittai István. Szulfonmolekulák szerkezete. II. Szerkezeti változások. «Kém. közl.», 1978, 50, № 4, 457—488 (венг.; рез. англ.)

Статья обзорного характера. Проведен сравнительный анализ газофазного молек. строения ряда сульфоновых соединений (ряд А) SO_2X_2 , RSO_2X и R_2SO_2 , где $\text{X}=\text{F}$, Cl , $\text{R}=\text{CH}_3$, $\text{CH}_2=\text{CH}$, C_6H_5 , CH_3O , $(\text{CH}_3)_2\text{N}$, $\text{O}=\text{C}=\text{N}$. В соответствии с эксперим. данными в ряду А преобладают структуры с заторможенной формой, кроме молекул с син-ориентацией двойной связи в R относительно одной из связей $\text{S}=\text{O}$, характеризующихся заслоненной формой. Обсуждается влияние электроотри-

$\text{CH}_3\text{SO}_2\text{F}$
 $\text{C}_6\text{H}_5\text{SO}_2\text{Cl}$ и др.

ВОС1

2.1979, 19

цательности X , строения R и различных внутримолек. взаимодействий на длины связей и валентные углы. В атоме S . Структурные изменения, наблюдаемые в ряду A , обусловлены гл. обр. отталкиванием электронных пар и невалентными взаимодействиями. Сделан вывод, что расчеты в рамках модели отталкивания электронных пар валентных оболочек не объясняют наблюдаемых структурных отличий. Анализ кристаллографич. данных для большого числа соединений типа $R'SO_2$ и $R'SO_3R''$, где R — цикл, включающий атом S , R' и R'' — ароматич. и др. радикалы, указывает на более слабые структурные отличия между соединениями в кристалле по сравнению с газ. фазой. Путем сравнения данных о строении дизамещ. сульфидов, сульфоксидов [заместители F , Cl , CH_3 и $(CH_3)_2N$] и родственных соединений ряда A изучено влияние валентного состояния серы на длины связей и валентные углы. Исследованы закономерности изменения молек. строения в рядах кремний-, фосфор- и серосодержащих соединений и отмечено, что в случае небольших молекул наблюдаемые закономерности правильно воспроизводятся данными неэмпирич. квантовохим. расчетов.

А. Устенко

CH_2CHSH omuch 6620 1978

$\text{CH}_2\text{C}_2\text{HSH}$ Kao J.,

ugr. J. Amer. Chem. Soc.;
1978, 100 (15), 4695-93

Ab Initio Study of the ...

C₂H₅-S CH₃

Масса,
структура

1978
3 Б105. Молекулярная структура и конформация этилметилсульфида, изученная методом газовой электронографии. Kazuko Oyanagi, Kozo Kuchitsu. Molecular structure and conformation of ethyl methyl sulfide as studied by gas electron diffraction. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1978, 51, № 8, 2243—2248 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы этилметилсульфида (I). Установлено, что в газовой фазе I присутствуют транс-гош-конформеры с относит. содержанием $0,25 \pm 15$ транс при 20° . Двугранный угол гош-конформера $66 \pm 9^\circ$. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_g , Å) и углов ($\angle_a$): средн. расстояние C—S (метил) и C—S (метилен) $1,813 \pm 0,004$, C—C $1,536 \pm 0,008$, C—H $1,111 \pm 0,008$, $\angle CSC$ $97,1 \pm 1,1^\circ$, $\angle SCC$ $114,0 \pm 0,5^\circ$, $\angle HCH$ $109,6 \pm 1,4^\circ$. Путем совместной обработки электронографич. и микроволновых (см. «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, 8338) данных разрешены два расстояния C—S: C—S (метил) $1,806 \pm 0,027$ Å и C—S (метилен) $1,818 \pm 0,027$ Å. В. Спиридонов

Х. 1979, №3

1978

 $(CH_3)_3S$ $(CH_3)_2SO_2$ Nb. acc.
factor

89: 169398j Theoretical study of the electron structure and spectra of dimethyl sulfide, sulfoxide, and sulfone. Khaustova, V. I. (Sib. Fiz.-Tekh. Inst., Tomsk, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fiz.* 1978, 21(5), 19-22 (Russ). The electronic structures of the title compds. was calcd. by the multiconfigurational approxn. and spectroscopic parametrization within the CNDO method. The HOMO values and the lower singlet-singlet transition energies are given. The increase in ionization potential in the series $Me_2S < Me_2SO < Me_2SO_2$ and the obsd. hypsochromic shift of the long-wave absorption band are related to delocalization of electron d. from S to O atom. The population of 3d AO of S atom increases with increasing valency of the latter. In Me_2SO_2 , 3d AO are already populated in the ground state. M. Kalfus

(+1) 

C. A. 1978, LG, N20

$C_2H_2SH^+$

C_2H_2SH

расчёт
эксперимент
и др. условий

[номер 6675]

1978

Hollman Peter et al
J. Phys. Chem. 1978, 22,
N12, 1403-1406

2-1978, N22

см. $C_2H_2F^+ - III$

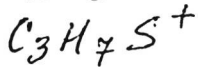
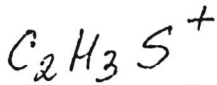
CH₃SCS₂

1978

89: 206686z Vibrational spectra and force constants of potassium methylthioxanthate-d₀ and -d₃. IR spectra of methylthioxanthate complexes with nickel(II), palladium(II) and platinum(II). Mattes, R.; Scholten, K. (Anorg. Chem. Inst., Univ. Muenster, Muenster, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1978, 34A(2), 181-4 (Ger). The IR and Raman spectra of K[MeSCS₂], and the IR spectra of square-planar M(MeSCS₂)₂ (M = Ni, Pd, Pt) were detd. and assigned. Force consts. were calcd. for the in plane vibrations of [MeSCS₂]⁻. Frequency shifts between the free and complexed ligand show a significant contribution of the canonical form MeS⁺:CS₂²⁻ to the structure of the complexes.

Chem. Rev.
J.

C. A. 1978, 89, N24



обзор

(структура
ионизирующей)

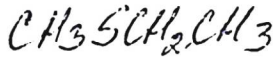
1978

8 B104. Определение структуры ионов из спектров, полученных методом активирующих столкновений. McLafferty F. W., Wachs Timothy, Köppel Claus, Dymerski P. P., Bockhoff F. M. Ion structure determination from collisional activation spectra. «Adv. Mass Spectrom. Vol. 7B. Proc. 7th Int. Mass Spectrom. Conf., Florence, 1976». London, 1978, 1231—1233 (англ.)

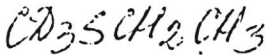
Обзор работ, посвященных установлению структуры газофазных орг. ионов методом спектроскопии активирующих столкновений. Обсуждены вопросы технич. оформления метода, его соотношение с традиц. масс-спектральными методиками изучения структуры ионов. Приводятся данные исследования строения ионов $C_3H_5O^+$, $C_2H_5S^+$, $C_3H_7S^+$, $C_7H_7^+$, $C_8H_9^+$, C_4H^+ и $C_3H_7^+$. Библ. 15. ————— Д. В. Загоревский

Х. 1980. № 8

1978.



Shimadzu T.
et al.



^u _{JP}
(CH-S equiv.)

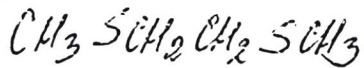
J. Phys. and Chem.
Ref. Data, 1978, 7 (4)

(i)

1323-1443

Методы измерения
проводимости. Часть 9.

(см. Методы; ii)



1978

Shimanochi T.,
et al.

4 JP

J. Phys. and Chem. Ref.

(vi) Data, 1978, 7(4), 1323-1433

Маданов масмон соҳиб.
Қосбонни ● Ҳисб 9.

(см. маданов; и)

C_2H_2S

ув. мех.
расчет
по метр. E_i

19.78

10 Б53. Неэмпирические молекулярно-орбитальные расчеты тиирена: термодинамическая устойчивость пяти изомеров C_2H_2S . Bernardi F., Strausz O. P., ~~Gosavi R. K.~~, Mezey P. G., Goddard J. D., Csizmadia I. G. Ab initio molecular orbital calculations on thirene: the thermodynamic stability of five C_2H_2S isomers. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 53, № 2, 211—214 (англ.)

Выполнены неэмпирич. расчеты с полной оптимизацией геометрии низших синглетных и триплетных состояний молекул тиирена (I) и его изомеров тиоформилметилена (II), этинилтиола (III), тиокетена (IV) и тириллдена (V), а также ацетилен (VI) и его изомера винилдена (VII) в гауссовом базисе типа ОСТ-4ГФ. Расчет синглетных состояний производился ограниченным, а триплетных — неограниченным методом Харт-

х. 1978, N10

ри — Фока. Приведены оптимизированные геометрии и полные энергии молекул указанных соединений. Из 10 исследованных состояний молекул состава C_2H_2S семь, включая синглетный I, лежат ниже границы диссоциации на VI и $S(^3P_2)$ и все, кроме триплетного III — ниже границы диссоциации на VI и $S(^1D_2)$. Найдено, что у всех изученных молекул, кроме V, углерод-углеродные связи в триплетном состоянии длиннее, чем в синглетном. Расчеты дают след. энергетич. разности для изомеров C_2H_2S (относительно наиболее стабильного из 10 состояний — синглетного III, ккал/моль):
а) синглеты 1,0 (IV), 15,1 (II), 30,4 (V), 30,6 (I);
б) триплеты 6,3 (II), 23,8 (IV), 38,4 (V), 48,4 (I), 122,7 (III). Полученные результаты качественно хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными.

В. Я. Беспалов

C₂H₂S

1978

Электронное
состояние.

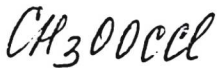
5 Д166. Расчеты тиireна неэмпирическим методом молекулярных орбиталей: термодинамическая стабильность пяти изомеров C₂H₂S. Strausz O. P., Gosa vi R. K., Bernafdi F., Mezey P. G., Goddard J. D., Csizmadia I. G. Ab initio molecular orbital calculations on thirene: the thermodynamic stability of five C₂H₂S isomers. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 53, № 2, 211—214 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовских ф-ций ОСТ-4ГФ исследовано электронное строение тиireна (I) и 4 его изомеров: тиоформилметилена (II), этинилтиола (III), тиокетена (IV) и циклич. изомера I, содержащего карбеновый атом C (V). Рассмотрены синглетные и триплетные состояния и проведена полная оптимизация геометрии. Обнаружено, что относит. стабильность убывает в ряду $III(S_0) \approx IV(S_0) > II(T_0) > II(S_1) > IV(T_1) V(S_0) \approx I(S_0) > > V(T_1) > I(T_1) \approx III(T_1)$. 5 наиболее стабильных систем, включая I, по энергии расположены ниже диссоциационного предела (на ацетилен и S(³P₂)) и, за исклю-

ф. 1978, 15

чением III (T_1), ниже предела диссоциационного распада на ацетилен и $S(^1D_2)$. Приведена равновесная геометрия. Для сравнения проведены расчеты ацетилена (VI) и винилиденкарбена (VII). Отмечено, что для I—IV, VI и VII длины связей C—C в триплетном состоянии больше, чем в синглетном. Отмечено, что различия в энергиях синглетных состояний I и V составляют только 0,3 ккал/моль, тогда как для изомеров оксирена это различие достигает 11,3 ккал/моль. В то же время в случае триплетных состояний I менее стабилен, чем II на 42,1 ккал/моль и менее стабилен, чем V, на 10 ккал/моль. Полученные результаты качественно согласуются с имеющимися эксперим. данными.

В. Л. Лебедев



М. П. И.
Сил. пост.

(+2) ☒

Ф. 1949, N4

Оттиск 7033 1978

Д 177. Анализ нормальных координат, термодинамические функции и расчеты методом ППДП/2 для некоторых алкилформатов. R a n d h a w a H. S. Normal coordinate analysis, thermodynamic functions and CNDO/2 calculations on some alkylformates. «Z. Phys. Chem.» (BRD), 1978, 109, Teil 1, 1—7 (англ.; рез. нем.)

Выполнен анализ нормальных координат плоскостных колебаний молекулы метилтионформата CH_3OSCH . По литературным данным для частот колебаний вычислены силовые постоянные поля Юри — Бредли и распределение потенц. энергии колебаний по внутренним колебательным координатам, дано отнесение частот по форме колебаний. Вычислены значения термодинамич. функций для метилхлорформата, метилтиоформата и метилтионформата — при т-рах 100—1500° К. Методом ППДП/2 вычислена частота валентных колебаний связи $\text{C}=\text{O}$ этих молекул и получено хорошее согласие с экспериментом.

М. Р. Алиев

$(CH_3)_2S_4$

DM 36 491

1979

1 Б178. Анализ силового поля тетрасульфидов: H_2S_4 и $(CH_3)_2S_4$. Askari M. Force field analysis of acyclic tetrasulfides: H_2S_4 and $(CH_3)_2S_4$. «Tetrahedron Lett.», 1979, № 34, 3173—3174 (англ.)

С использованием силового поля Аллингера с сотр., найденного ранее, проведены с использованием про-

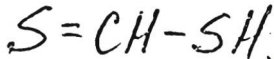
сил. мет.
геометр.
параметры

граммы минимизации энергии расчеты конформаций тетрасульфидов. Определены относит. энергии ротамеров H_2S_4 (I) и $(CH_3)_2S_4$ (II). Наиболее стабильными являются гош-конформеры I и II. Для этих конформеров найдены оптимизированные геометрич. параметры: $r_{SS}=2,024$ А, $r_{SC}=1,860$ А, $LSSS=105,9^\circ$, $LSSC=102,9^\circ$, $SSSC=180,2^\circ$, $LSCH=100,1^\circ$. Эти параметры согласуются с эксперим. данными по диметилдисульфиду и диметилтрисульфиду (эксперим. сведения о геометрич. параметрах I и II в лит-ре отсутствуют). Исследовано изменение энергии в зависимости от антидвухгранного угла от 180 до 0° с шагом в 20° . Максимумы получены для 3-х форм, аналогичных н-бутану: гош, анти и за-
слоненного конформера.

Е. Разумова

☐

х. 1980. № 2



1979

6 Б93. Потенциал вращения вокруг связей $C(sp^2)-S$: электронографические результаты для $O=C(SCH_3)_2$ и неэмпирические расчеты $O=CH-SH$ и $S=CH-SH$. Auberg E., Samdal S., Scip H. M. Potential for rotation about $C(sp^2)-S$ bonds: electron-diffraction results for $O=C(SCH_3)_2$ and ab initio calculations on $O=CH-SH$ and $S=CH-SH$. «J. Mol. Struct.», 1979, 57, 95—104 (англ.)

молекула
гетероатом

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы $O=C(SCH_3)_2$ (I). Полученные данные согласуются с предположением о существовании син-син-конформера I. Найдены след. значения для наиболее важных межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов: $C=O$ 1,206(4), $C_{карб}-S$ 1,777(3), $C_{Me}-S$ 1,802(4), $\angle OCS$ 124,9(2), $\angle CSC$ 99,3(4)°. В результате неэмпирич. расчетов методом МО ССП молекул $O=CH-SH$ и $S=CH-SH$ установлено, что минимумы энергии отвечают син- и анти-конформерам, соответственно.

В. Спиридоно

☑

№ 1980. № 6

SCCH_2

стт. 4446

1979

8 Д342. Микроволновые спектры тиокетена и четырех его изотопических разновидностей. Bak Borge, Nielsen Ole J., Svanholt Henrik, Holm Arne, Toubro Nils H., Krantz A., Lauren J. Microwave spectra of thioketene and four of its isotopic species. «Acta chem. scand.», 1979, A33, № 2, 161—165 (англ.)

м. в. спектр

В диапазонах 10—15 и 18,6—40 Гц исследованы микроволн. спектры молекул SCCH_2 , SCCHD , $\text{S}^{13}\text{CCH}_2$, $^{34}\text{SCCH}_2$ и $\text{SC}^{13}\text{CH}_2$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 26$ в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных. Для SCCH_2 получено $A=272\,964$, $B=5659,456$, $C=5544,500$ Мгц.

М. Р. Алиев

9.1979, N 8

H₂C₂S

О.М. 7446

14 Б239. Микроволновые спектры тиокетена и четырех его изотопических образцов. Bak Borge, Nielsen Ole J., Svanholt Henrik, Holm Arne, Toubro Nils H., Krantz A., Laureni J. Microwave Spectra of Thioketene and Four of Its Isotopic Species. «Acta. chem. scand.», 1979, A33, № 2, 161—165. (англ.)

Измерены в области частот от 18,6 до 40,0 ГГц МВ-спектры пяти изотопич. образцов тиокетена $\text{H}_2^{12}\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (I), $\text{H}_2^{13}\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (II), $\text{H}_2^{12}\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (III), $\text{H}_2^{12}\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (IV) и $\text{H(D)}^{12}\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (V) в основном колебательном состоянии. Исследованные образцы получены в результате пиролиза тиадиазола при $t \approx 1100^\circ \text{K}$. Для I, II, III, IV и V, соотв., определены вращательные постоянные (в МГц) $B = 5659,4560(73)$, $5456,6996(70)$, $5642,6160(65)$, $5531,5592(86)$ и $5323,0717(130)$, $C = 5544,5000(71)$, $5349,7653(68)$, $5528,3412(63)$, $5421,6836(83)$ и $5176,9949(120)$. Для различных предполагаемых значений дефекта инерции вычислены вращательная постоянная A и постоянные центробежного искажения.

С. Н. Мурзин

М. Н.

20.10.79 N14

HCS_2H

Оттиск 8127

1979

11 Д578. Вращательные спектры изотопических дитиоуравьиных кислот со структурой транс- HCSSH . Расчеты ab initio цис/трансструктур, энергий, дипольных моментов и торзионного барьера. Bak B., Nielsen O., Svanholt H., Christiansen J. J. Rotational spectra of isotopic di-thioformic acids with a structure of TRANS HCSSH . Ab initio estimates of cis/trans structures, energies, dipole moments and torsional Barrier. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 1, 134—143 (англ.)

Получены микроволн. спектры паров дитиоуравьиных кислот $\text{HCS}^{34}\text{S}^{32}\text{H}$, $\text{HCS}^{32}\text{S}^{34}\text{H}$, $\text{HCS}^{32}\text{S}^{32}\text{D}$ в транс-конформации и $\text{HCS}^{32}\text{S}^{32}\text{D}$ в цисконформации в области 18,6—40 Гц. Приведены частоты наблюдаемых линий и их отнесение к вращательным переходам молекул в



Р. 1379, VII

основном колебательном состоянии. Определены вращательные постоянные, константы центробежного растяжения и моменты инерции. По моментам инерции изотопич. молекул с использованием литературных данных о структуре молекул найдены длины связей. Эти же величины рассчитаны методом ЛКАО — МО самосогласованного поля, при этом определены энергии изомеров и барьер для внутреннего вращения, равный $\sim 4000 \text{ см}^{-1}$. Найдены дипольные моменты молекул.

Библ. 13.

М. Тонков

HCSSH

Оттиски

8127

1979

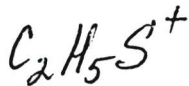
20 Б220. Вращательные спектры изотопических производных дитиоуглеводной кислоты со структурой транс-HCSSH. Оценки геометрий цис/транс структур, энергий, дипольных моментов и торсионного барьера неэмпирическим. Bak B., Nielsen O., Svaneholt H., Christiansen J. J. Rotational spectra of isotopic di-thioformic acids with a structure of TRANS HCSSH. Ab initio estimates of cis/trans structures, energies, dipole moments, and torsional barrier. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 1, 134—143 (англ.)

Измерены в области частот от 18,6 до 40 ГГц МВ-спектры транс-HCSSH, $\text{HC}^{32}\text{S}^{32}\text{SH}$ (I), $\text{HC}^{34}\text{S}^{32}\text{SH}$ (II), $\text{HC}^{32}\text{S}^{34}\text{SH}$ (III), $\text{HC}^{32}\text{S}^{32}\text{SD}$ (IV) и цис- $\text{HC}^{32}\text{S}^{32}\text{SD}$ (V) в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом эффекта центробежного искажения. Для I, II, III, IV и V, соотв., вращательные постоянные равны (МГц) $A=49\,226, 804(86,0); 49\,130,328 (110,0); 49\,572,301 (170,0); 41\,649,500 (84,0)$ и $45\,263,816 (310,0)$.

№ 1979/20

$B = 3447,5312$ (89); $3346,230$ (100); $3346,9168$ (180);
 $3422,1357$ (130) и $3382,9189$ (300); $C = 3219,4954$ (96);
 $3130,2542$ (100); $3131,2455$ (160); $3160,0450$ (120) и
 $3144,9742$ (300). При ряде допущений с использованием
 итерационного подхода определена структура $Ir[S_{(1)}-H_{(1)}] = 1,357(2)$ Å, $r[S_{(1)} \dots S_{(2)}] = 3,015(1)$ Å, $r[S_{(1)}-C] = 1,733(5)$ Å, $r[S_{(2)}=C] = 1,625(4)$ Å, углы $H_{(1)}S_{(1)}C$
 $94,3(2)$, $S_{(1)}CS_{(2)} = 127,8(3)$; $S_{(2)}S_{(1)}H_{(1)} 69,2(5)^\circ$. Неэмпи-
 рич. методом получены оценки геометрич. параметров
 моделей цис- и транс-изомеров HCSSH, разности энер-
 гий $E(\text{цис}) - E(\text{транс}) \sim 685 \text{ см}^{-1}$, барьеров транс→цис
 торсионной конверсии 4090 см^{-1} и цис→транс конвер-
 сии 3540 см^{-1} и дипольного момента $I \mu_a = 1,47 D$, $\mu_b =$
 $= 0,25 D$.
 С. Н. Мурзин





перегруппировки
и распада
Е появ. ищ.
изомеров.

1573
5 Б99. Перегруппировки и распад ионов $[C_2H_5S]^+$.
Broer W. J., Weringa W. D., Nieuwpoort W. C.
Rearrangements and fragmentations of $[C_2H_5S]^+$ ions.
«Org. Mass Spectrom.», 1979, 14, № 10, 543—549 (англ.)
Изучение масс-спектров дейтероаналогов EtSMe по-
казало, что распад молек. иона этого соединения
в бесполовой области масс-спектрометра с потерей CH_3
приводит к ионам $C_2H_5S^+$ в двух изомерных формах —
 $(MeS=CH_2)^+$ (I) и $(MeCH=SH)^+$ (II). Дальнейший
распад образовавшихся ионов включает потерю C_2H_2 ,
 H_2S или CH_4 , причем этим процессам предшествует ква-
зистатистич. перераспределение атомов водорода. Пред-
положено, что распад ионов I и II проходит через ста-
дию образования циклич. иона — протонированного по-
атому S тиациклопропана. Легкость такой изомеризации
подтверждается близостью величин энергий атомизации
(рассчитаны методом MO) и энергий появления всех
трех изомеров.
Д. В. Загоревский

Х.1980.Н5

$C_2H_5-CH_3S$

ommu 7659

1949

($\frac{1}{2}V_6$)
no more
p-1548

90: 1123-11b Analysis of torsional spectra of molecules with two internal C_2 rotors. 11. Low frequency vibrational spectra, methyl torsional potential functions, and internal rotation of ethyl methyl sulfide. Durig, J. R.; Compton, D. A. C.; Jalilian, M. R. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S. C.). *J. Phys. Chem.* 1979, 83(4), 511-15 (Eng). The IR and Raman spectra of gaseous EtMeS were investigated below 500 cm^{-1} . A no. of torsional transitions were obsd. and were assigned on the basis of an equil. between the gauche and high energy s-trans conformers. The asym. potential function for the CH_2-S torsion was calcd. from obsd. transitions which leads to a value for the enthalpy difference between s-trans and gauche conformers of 46 ± 14 cal/mol. The values of the potential coeffs. were: $V_1 = -44.7 \pm 5.7$ cm^{-1} (-128 cal/mol); $V_2 = 23.7 \pm 5.9$ cm^{-1} (68 cal/mol); $V_3 = 1230 \pm 8$ cm^{-1} (3517 cal/mol); $V_6 = -124.7 \pm 2.8$ cm^{-1} (-357 cal/mol). One series of torsional transitions in the Raman spectrum and another in the IR spectrum were assigned to the coupled Me torsions of gauche-EtMeS which lead to barrier heights for the C-Me and S-Me sym. torsions of 3.33 and 2.05 kcal/mol, resp.

C.A. 1949, 20, 114

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

оттиски 7669

1979

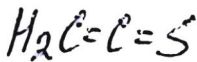
7 Д460. Анализ полос крутильных колебаний в спектрах молекул с двумя внутренними группами вращения с симметрией C_{3v} . Ч. 11. Низкочастотные колебательные спектры, потенциальные функции крутильного колебания метильных групп и внутреннее вращение в этилметилсульфиде. Durig J. R., Compton D. A. C., Jallian M. R. Analysis of torsional spectra of molecules with two internal C_{3v} rotors. 11. Low frequency vibrational spectra, methyl torsional potential functions, and internal rotation of ethyl methyl sulfide. «J. Phys. Chem.», 1979, 83, № 4, 511—515 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($500\text{--}40\text{ см}^{-1}$) газообразного этилметилсульфида (I) и спектры комб. рас. I при давл. 160 мм рт. ст. и возбуждении лазерной линией 514,5 нм мощностью 1,5 Вт. Зарегистрированные полосы крутильных колебаний сопоставлены движениям фрагментов I в гош- и s-трансконформациях. Вычислены асимметрич. потенц. ф-ции вращения групп $\text{CH}_2\text{--S}$ и определена разность энтальпий между s-транс- и гош-конформациями I, равная 46 ± 14 кал/моль. Значения

спектры, 1979, № 4

потенц. коэф. V_1 , V_2 , V_3 и V_6 I составляют —128, 68, 3517 и —357 кал/моль соответственно. Идентифицированы полосы крутильных колебаний метильных групп в спектре гошконформации I. Определены величины барьеров симметричных крутильных колебаний групп $C-CH_3$ и $S-CH_3$, равные 3,33 и 2,05 ккал/моль соответственно. Ч. 10. См. Durig J. R. et al. «Indian J. Pure Appl. Phys». 1978, 16, 385. Библ. 11. И. В. А.





8576

1973

3 Д429. Микроволновый спектр, r_s -структура и дипольный момент тиокетена $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. The microwave spectrum, substitution structure, and dipole moment of thioketen, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. Georgiou K., Kroto H. W., Landsberg B. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 3, 365—373 (англ.)

м.ф. спектр

В диапазоне 26,5—40 ГГц исследованы микроволн. спектры нестабильных молекул $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$ и 5 ее изотопзамещенных, полученных в реакциях пиролиза в потоке. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 4$ в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных, из которых методом замещения вычислены структурные параметры $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$: $\text{C}=\text{S}=1,554$; $\text{C}=\text{C}=1,314$; $\text{C}-\text{H}=1,090 \text{ \AA}$, $\text{HCH}=120,3^\circ$. Найдена величина дипольного момента: $\mu=1,02$ ед. Дебая. Обнаружен и идентифицирован также ряд линий первых возбужденных состояний колебаний ν_9 (320 см^{-1}), ν_8 (650), ν_6 (410) и ν_5 (680).

М. Р. Алиев

ВФ-ХИ-9486

Ф.1980.13

C-H-S (соединения)

1979

Обзор.
фотоэл.
спектр.

10 Б113. Некоторые аспекты фотоэлектронной спектроскопии сераорганических соединений. Gleite Rolf, Spang et. Larsen Jens. Some aspects of the photoelectron spectroscopy of organic sulfur compounds. «Top. Curr. Chem.», 1979, 86, 139—195 (англ.)

Обзор, посвященный исследованию с помощью фотоэлектронной спектроскопии орг. молекул, содержащих серу (в основном рассмотрены соединения двухвалентной серы). Кратко изложены основы метода и критерии, используемые для интерпретации спектров. Проведено обсуждение для алкилсульфидов, спиросоединений, дисульфидов, арилалкилсульфидов, тиокарбониллов и нек-рых соединений поливалентной серы. Обсуждены взаимодействия через пространство и наблюдаемые в рядах родственных соединений тенденции. Табулированы эксперим. потенциалы ионизации более 100 молекул. Библ. 132.

М. Гофман

X-1980.110

1979

 $C_2H_4S_2$

2 Д424. Матричная изоляция и конформация кольца 1,3-дитиэтана. Matrix-isolation studies and ring conformation of 1,3-dithietane. Kalasinsky V. F., Block E., Powers D. E., Harris W. C. «Appl. Spectrosc.», 1979, 33. № 4, 361—364 (англ.)

Изучены спектры ИК-поглощения ($4000-200\text{ см}^{-1}$) и комб. рас. твердого 1,3-дитиэтана (I) и молекул I, изолированных в Ag-матрице при $t\text{-ре } 18^\circ\text{ K}$ и возбуждении рассеяния лазерной линией $488,0\text{ нм}$. Проведено сопоставление частот колебаний в спектрах комб. рас. и ИК-спектрах I. Предположено, что совпадение частот ряда полос в спектрах ИК-поглощения и комб. рас. матрично-изолированных I согласуется с искажением кольца I и симметрией молекул I типа C_{2v} . Отмечено соблюдение правила альтернативного запрета в спектрах твердого I после отжига. Сделан вывод, что спектры I при матричной изоляции соответствуют колебаниям свободных молекул, тогда как повышение симметрии I до

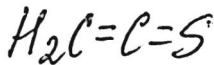
спектр
в матрице

Ф. 1980. №2

D_{2h} в твердом состоянии после отжига образцов обусловлено плоскостным строением I и соответствует упорядоченному расположению I в кристаллич. решетке.

И. В. А.





Оттиск 8576

1979

5 Б235. Микроволновый спектр, структура замещения и дипольный момент тиокетена, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. Georgiou K., Kroto H. W., Landsberg B. M. The microwave spectrum, substitution structure, and dipole moment of thioketen, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 3, 365-373 (англ.).

м.в. спектр

м, м.п.

Измерены в области частот от 26,5 до 40,0 ГГц МВ-спектры тиокетена, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (I), и пяти его изотопозамещенных $\text{HDC}=\text{C}=\text{S}$ (II), $\text{D}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (III), $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{}^{34}\text{S}$ (IV), $\text{H}_2\text{C}=\text{}^{13}\text{C}=\text{S}$ (V), $\text{H}_2\text{}^{13}\text{C}=\text{C}=\text{S}$ (VI), в основном колебательном состоянии и I в четырех возбужденных колебательных состояниях. Образцы тиокетена получены из $[(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{S}]_3$ в результате пиролиза при $t_{\text{ре}} 1000^\circ$. С учетом эффекта центробежного искажения для I, II, III, IV, V и VI соотв. определены вращательные постоянные (Мгц) $B=5659,450(19)$, $5323,082(45)$, $5039,7599(27)$, $5531,555(18)$, $5642,620(19)$ и $5456,715(14)$; $C=5544,497(19)$, $5176,999(45)$, $4863,1018(27)$, $5421,675(18)$, $5528,357(19)$ и $5349,778(14)$. Из из-

8576-111-281
8576-111-281

21980.115

мерений относит. интенсивностей МВ-линий определены
 частоты колебательных возбужденных состояний (см^{-1})
 $\nu_9(b_2) = 320(50)$, $\nu_8(b_2) = 650(100)$, $\nu_6(b_1) = 410(50)$,
 $\nu_5(b_1) = 680(100)$. По эффекту Штарка для двух пере-
 ходов определены дипольный момент $\mu = 1,02(1)D$. По-
 лученные МВ-данные использованы для расчета струк-
 турных параметров $r_5(\text{C}=\text{S}) = 1,554(3) \text{ \AA}$, $r_s(\text{C}=\text{C}) =$
 $= 1,314(3) \text{ \AA}$, $r_s(\text{C}=\text{H}) = 1,090(6) \text{ \AA}$, угол $\angle \text{HCH} =$
 $= 120,3(5)^\circ$. С. Н. Мурзин

$C_2H_4S_2$

4 Б223. Матричные исследования и конформация цикла 1,3-дитиэтана. Kalasinsky V. F., Block E., Powers D. E., Harris W. C. Matrix-isolation studies and ring conformation of 1,3-dithietane. «Appl. Spectrosc.», 1979, 33, № 4, 361—364 (англ.)

Исследованы спектры ИК-поглощения и КР-аморфного твердого, кристаллического и изолированного в матрице Ar при -255° 1,3-дитиэтана (I). Использован ИК-спектрофотометр Perkin-Elmer 580 и спектрометр КР Jarrell-Ash 500 с Ar^+ -лазером CRL-52 (линия 4880 Å) в качестве источника возбуждения. Данные брабатывали на миникомпьютере Interdata 6/16. Тв. I осаждали на

Спектр

И. И. И. И. И.

2. 1930. N° 4

пластине из CsI, охлажденной до -255° с помощью Криостата СТГ-21 с замкнутым циклом. Тв. матрицу готовили соосаждением I и Ag на охлажд. подложке. Для получения спектров КР I запаивали под вакуумом в пирексовый капилляр, к-рый охлаждали в СТГ-криостате. Анализом ИК- и КР-спектров выделенных в матрице образцов показано, что в крист. состоянии I, по-видимому, обладает молек. симметрией C_{2v} и конформация 4-членного цикла неплоская. В тв. аморфном состоянии молекула I приобретает симметрию типа D_{2h} , а цикл становится планарным.

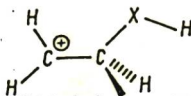
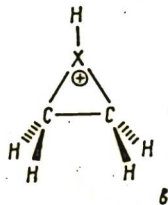
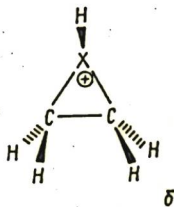
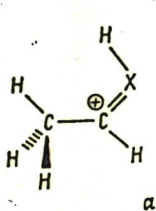
С. Г. Жемчужин

$C_2H_5S^+$

18 Б58. Теоретическое изучение систем $C_2H_5O^+$ и $C_2H_5S^+$. Lischka Hans, Köhler Hans-Joachim. A theoretical investigation on the systems $C_2H_5O^+$ and $C_2H_5S^+$. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 63, № 2, 326—331 (англ.)

Теоретически изучена стабильность ряда структур катионов $C_2H_5O^+$ (Ia—Ir) и $C_2H_5S^+$ (IIa—IIr). С этой

структ.
Рейнгольд



2. 1949/18

Кв. лек. расчет

1971

Винни 2078

$(CH_3SH)_2$ | Samuel 8456 | 1979

Odutola J. et al.

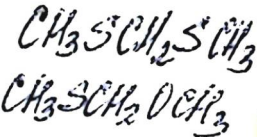
модель.

супергрупп

J. Amer. Chem. Soc.

1979, 101 (17), 4787-92

1979



УФ-спектр

19 Б194. Спектры $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SCH}_3$ и $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{COCH}_3$ в дальней ультрафиолетовой области. Olivato P. R., Viertler H., Wladislaw B., Sauvageau P., Sandorfy C. The far-ultraviolet spectra of $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SCH}_3$ and $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{COCH}_3$. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 4, 1677—1680 (англ.)

Измерены УФ-спектры поглощения в области $40\text{--}61 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{SCH}_3$ (I) и $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{COCH}_3$ (II) в газ. состоянии при давл. $0,1\text{--}0,5 \text{ мм}$. Спектры сопоставлены с результатами измерений для $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COCH}_3$, и $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{COCH}_3$. Для I и II в области $41\text{--}46 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ найдены две четко разделенных полосы переходов типа валентной оболочки $\sigma^* \leftarrow \bar{S}$ и ридберговского перехода $4S \leftarrow \bar{S}$. В случае I из-за диффузного характера спектра не наблюдалось расщепления полос, обусловленного расщеплением основного уровня $\bar{S}$. Новые полосы в спектре I в области $47\text{--}55 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ объяснены расщеплением уровня $4p$.

С. С. Букалов

X. 1979, N 19

Оттиск 8543 1979

2 Б74. Расчеты методом ППДП/2 частот тиокарбонильных валентных колебаний в тиоформальдегиде и его производных. Randhawa H. S. CNDO/2 calculations on the thiocarbonyl stretching frequencies in thioformaldehyde and its derivatives. «J. Mol. Struct.», 1979, 56, № 1, 143—146 (англ.)

Полуэмпирический метод МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2 использован для расчета частот вал. кол. тиокарбонильной группы в H_2CS , $(CH_3)_2CS$, $(HO)(CH_3)CS$, $(HO)(C_2H_5)CS$, Cl_2CS , $ClFCS$, F_2CS , $(H)(NH_2)CS$, $(NH_2)_2CS$, $(CH_3)(NH_2)CS$. Получено хорошее согласие с эксперим. значениями (максим. отклонение 74 cm^{-1}).
А. Устенко

$(CH_3)_2CS$

и др.

исл. сек.
расчет
В.

В

X-1680.112



omni 8047

1979



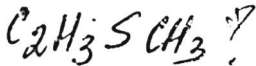
Sauvageur P., et al

U. R. Chetani,

P, and J.

J. Chem. Phys., 1979,

70 (4), 1677-80



равновес.
геометрии

См. № 9005

1948

6 Б92. Равновесие син-гош метилвинилсульфида, изученное совместным использованием микроволновых и КР-спектров, электронографии, молекулярного силового поля и неэмпирических расчетов. Samdal S., Seip H. M., Torggrimsen T. Syn-gauche Equilibrium of methyl vinyl sulphide studied by the combined use of microwave and Raman spectroscopy, electron diffraction, and molecular force field and ab initio calculations. «J. Mol. Struct.», 1979, 57, 105—121 (англ.)

Проведена повторная интерпретация электронографич. данных для метилвинилсульфида, полученных ранее (см. «Acta Chem. Scand.», 1971, 25, 1903; J. Mol. Struct.», 1973, 16, 289), с применением в анализе результатов исследования микроволновых и КР-спектров, неэмпирич. расчетов методом МО ССП и молек. силового поля. В интерпретации данных использованы статич. (малые гармонич. кол.) и динамич. (ангармонич. кол. большой амплитуды для внутреннего вращения) модели. Установлено, что наиболее вероятное значение разности энергий ΔE_0 .

2. 1980. № 6

между син- и гош- (или квази-плоским анти)конформерами
 лежит в интервале 1,0—2,0 ккал/моль. Торсионные
 углы для син- и гош-конформеров составляют 0
 и 135,8 (6,5)° соотв. В приближении динамич. модели
 найдены след. значения наиболее важных межъядер-
 ных расстояний (r_a , Å) и углов (α) для син-конфор-
 мера: C=C 1,343 (1), C_{sp²}—S 1,759 (8), C_{sp²}—S 1,795 (8),
 C_{sp²}—H 1,088 (9), C_{sp²}—H 1,106 (8), $\angle$ CCS 127,5 (0,7),
 $\angle$ CSC 102,1 (0,5)°.

В. Спиридонов

ons.
 ugle

Соединения С-Н-S

1979

13 Б88. Масс-спектроскопия, ядерный магнитный резонанс и КР-спектроскопия октадецилсульфида, дисульфида и тетрасульфида. Schwab A. W., Rohwedder W. K., Arnd J. S. Mass, nuclear magnetic resonance, and raman spectroscopy of octadecyl sulfide, disulfide, and tetrasulfide. «Phosph. and Sulfur», 1979, 7, № 3, 315—319 (англ.)

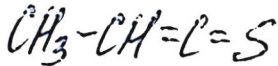
масс-
спектр.
спектр К.Р.

Методами масс-спектрометрии, ядерного магнитного резонанса и КР-спектроскопии исследованы модельные соединения, приготовленные для оценки в качестве добавок к смазочным маслам при экстремальных давлениях. В масс-спектрах электронного удара октадецилсульфида (I) и дисульфида (II) присутствуют интенсивные молекулы. Для II и тетрасульфида (III) отмечены расщепления связей S—S и C—S. Молекулы нон III, по-видимому,

Х 1980 № 13

теряет серу даже при 15 эВ; такое отщепление серы не было обнаружено для I и II. Из спектров ядерного магнитного резонанса следует, что с увеличением длины сульфидной цепочки имеет место сдвиг для α -метиленовых протонов в области низкого поля. В КР-спектрах обнаружены интенсивные пики, приписанные напряжению связей S—S. Для II эти пики проявляются при 510 и 526 см^{-1} (тв. состояние) и для III — при 432 и 488 см^{-1} (тв. состояние) и 437 и 488 см^{-1} (жидк. состояние, расплав при 58°). Все исследованные соединения содержат слабые пики между 625 и 800 см^{-1} , вероятно возникающие при колебаниях связей C—S.

Резюме



Оттиск 10821 1980

11 Б270. Получение, микроволновый спектр, барьер внутреннего вращения, дипольный момент и молекулярные модели метилтиокетена, $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}=\text{S}$. Bak B., Svanholt H., Holm A. Production, microwave spectrum, barrier to internal rotation, dipole moment and molecular models of methylthio ketene, $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}=\text{S}$. «Acta chem. scand.», 1980, A34, № 9, 625—630 (англ.)

В области частот 18,6—39,6 Гц измерены МВ-спектры двух изотопич. образцов метилтиокетена, $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}=\text{}^{32}\text{S}$ (I) и $\text{CH}_3-\text{CH}=\text{C}=\text{}^{34}\text{S}$ (II), в основном колебательном состоянии и I в 5 возбужденных колебательных состояниях. I и II получены в результате пиролиза 4-метил-1 и 5-метил-1,2,3-тиадиазола при т-ре 1000° К и вводились в ячейку при комн. т-ре. Анализ спектров выполнен с учетом А, Е-расщепления из-за внутреннего вращения метильной группы и кватричного центробежного искажения. Для обоих образцов и всех состояний определены вращательные постоянные и кватричные постоянные центробежного искажения. В основном состоянии I и II соотв. вращательные по-

М. П.

2.1981. N 11

стоянные равны (МГц): $A=35528(7)$ и $35449(4)$, $B=2708,362(21)$ и $2639,524(20)$, $C=2552,969(22)$ и $2491,327(20)$, а центробежные постоянные (в кГц) — $\Delta_J=0,39(14)$ и $1,08(18)$, $\Delta_{JK}=-46,55(30)$ и $-45,79(21)$. Расчет A, E -расщепления выполнен в предположении, что первые два возбужденных крутильных состояния имеют частоты $\nu(1)=140 \text{ см}^{-1}$ и $\nu(2)=256 \text{ см}^{-1}$, барьер внутреннего вращения равен 435 см^{-1} , а возможная структура I характеризуется параметрами $r(\text{C}-\text{H})=1,083 \text{ \AA}$, $\angle \text{C}(3)\text{C}(4)\text{H}=111,1^\circ$. Для 1-го возбужденного плоского деф. состояния оценена частота $\nu(1)=157 \text{ см}^{-1}$. По эффекту Штарка для переходов I во втором возбужденном крутильном состоянии измен дипольный момент $\langle \mu_a \rangle = 1,54 \text{ D}$. Для отношения компонент дипольного момента получена оценка $\mu_b/\mu_a=0,07$. Полученные данные использованы для построения трех возможных жестких структурных моделей I. Вычисленные значения длин связей $\text{C}=\text{S}$, $\text{C}=\text{C}$, $\text{C}-\text{C}$ и валентного угла связей $\text{C}-\text{C}=\text{C}$ близки к соотв-щим величинам геометрич. параметров родственных молекул.

С. Н. Мурзин

$(CH_3)_2S$

10 Б240. Микроволновый спектр диметилсульфида 1980
Определение момента инерции метильного волчка. De-
maison J., Schwach D., Tan B. T., Ru-
dolph H. D. Microwave spectrum of dimethylsulfide;
determination of the methyl top moment of inertia.
«J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 391—400 (англ.)

На основе ранее выполненных СВ-измерений для мо-
лекулы диметилсульфида, $(CH_3)_2S$, (H. Dreizler,
H. D. Dudolph «Z. Naturforsch.», 1965, A20, 749) вы-
полнен расчет момента инерции метильного волчка
молекулы. Анализ спектра выполнен при рассмотрении
взаимодействия вращения—внутреннее вращение в
приближении полужесткой модели двух эквивалент-
ных внутренних волчков. При расчетах в значения вра-
щательных постоянных внесены поправки на центро-
бежное искажение и магнитные поправки. Вращатель-

М. В. Снеков

М. П.

2. 1981. N10

ные постоянные с учетом этих поправок равны (в Мгц) $A=17\,809; 7298\ (40)$, $B=7621, 0976\ (17)$, $C=5717, 7694\ (14)$. Определенная по расщеплению МВ-переходов из-за внутреннего вращения величина момента инерции метильного волчка равна $J_a=3,242$ н. е. м. A^2 . Из величин дефекта инерции найденные моменты инерции метильного волчка, соотв., равны $J_a=3,134$ и $3,212$ ат. ед. массы A^2 . Расхождения в величинах J_a при использовании различных способов определения момента инерции связаны с влиянием центробежного искажения на внутреннее вращение метильных волчков.

С. Н. Мурзин

1980

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

6 Д431. Микроволновый спектр диметилсульфида.

Определение момента инерции метильной группы.
 Microwave spectrum of Dimethylsulfide. Determination
 of the methyl top moment of inertia. Demaison J.,
 Schwach D., Tan B. T., Rudolph H. D. «J. Mol.
 Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 391—400 (англ.)

М.П.

С использованием модели главных осей, в которой
 учитывается взаимодействие внутренних вращений с
 вращением молекулы в целом в кинетич. энергии и
 взаимодействие внутренних волчков в потенц. энергии,
 выполнен теоретич. анализ микроволн. спектра молекулы
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. По величинам триплетного и квартетного рас-
 щепления линий, обусловленного внутренним вращением
 двух CH_3 -групп, определено значение момента инерции
 CH_3 -группы ($I_\alpha = 3,242$ а.е.м. $\text{\AA}^2$). Для определения
 величины I_α использованы также эксперим. данные по
 дефекту инерции Δ ($2I_\alpha = \Delta_v - \Delta$, где Δ_v — колебатель-
 ная поправка к Δ). При этом без учета Δ_v получено
 значение $I_{\alpha 0} = 3,134$ а.е.м. $\text{\AA}^2$, а с приближенным учетом
 Δ_v — значение $I_\alpha^e = 3,212$ а.е.м. $\text{\AA}^2$: эти величины удов-
 летворяют ожидаемой закономерности $I_\alpha^0 < I_\alpha^e < I_\alpha$.

М. Р. Алиев

Ф.Р. 981. N 6



1980

4 Д424. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент транс-2-пропенетиала ($\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{S}$). Microwave spectrum, Structure, and dipole moment of trans-2-propenethial, $\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{S}$. Georgiou K., Kroto H. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 1, 94—104 (англ.)

М.И. Зом.

В диапазоне 26—40 Гц исследован микроволн. спектр молекулы $\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{S}$ (I), полученной в реакции пиролиза диаллилсульфида и гексаметил-S-триана. Идентифицированы линии вращательных переходов изотопозамещенных I (по S и C) в основном коле-



Ф. 1981 № 4

бательном состоянии, а также ряд линий основной молекулы I в 9 низколежащих колебательных состояниях. Определены значения вращательных постоянных и постоянных кватичного центробежного искажения для всех исследуемых изотопозамещенных I. Из полученных значений вращательных постоянных вычислены значения структурных Y_s -параметров I: $C=C=1,341$; $C-S=1,455$; $C=X=1,610$ Å; $CCC=122,9^\circ$; $CCS=125,5^\circ$. Для дипольного момента получено: $\mu_a=2,58$; $\mu_b=0,36$; $\mu_t=2,61$ ед. Дебая. По относит. интенсивности линий основного и возбужденных состояний оценены частоты колебаний ν_{13} (280) и ν_{18} (140 cm^{-1}). М. Р. Алиев

$(SCH)_2$

1980

Haddon R.C. et al.

J. Am. Chem. Soc. 1980,
102(22), 6687-93.

кв. чер.
расч.



сир. $(SN)_2 - III$

$S(CH_3)_2$

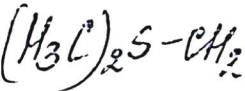
1980

Ламитов Р.Т.

взаимосвязи
полюсности
и потенци.
мониторинга

Докл. АН СССР, 1980,
254, N4, 934-8.

см. NF₃-III



20 Б29. Квантовохимическое изучение сульфоние-¹⁹⁸⁰вых илидов: строение, распределение заряда и дипольные моменты. Král V., Arnold Z., Jehlička V., Exner O. Quantum chemical study of sulfonium ylides: structure, charge distribution and dipole moments. «Collect. Czech. Chem. Commun.», 1980, 45, № 4, 1236—1250 (англ.)

Различными методами (МО ССП в базисе 4-31 ГФ, ОСТ-3 ГФ, ППДП/2 в *sp*- и *spd*-базисах и др.) изучено электронное строение сульфониевого илида, $(H_3C)_2S-CH_2$, а также др. родственных систем, включая синтезированный авторами 2-диметилсульфуранилиден-1,3-циклопентадион. Для всех рассмотренных систем приведены оптим. значения геометрич. параметров, а также значения дипольных моментов, к-рые сопоставлены с эксперим. значениями. Приведены также полученные авторами в диоксане и бензоле дипольные моменты ряда родственных аммониевых илидов, имеющих такие же структурные особенности. На основании полученных данных по дипольным моментам и распределению электронной плотности обсуждается природа связей и реакц. способность указанных соединений.

С. Долин

кв. мек.
расчет

РАХ N20

SCM = CMCM = CM

1980

9 Д65. Расчет дьюаровской структуры тиюфена неэмпирическим методом молекулярных орбиталей ССП. Ab initio SCF molecular orbital calculations of the Dewar structure of thiophene. Latajka Zdzisław, Ratajczak Henryk, Szczęśniak Małgorzata M., Orville-Thomas W. J., Ratajczak Emil. «Bull. Acad. pol. sci. Sér. sci. chim.», 1980, 28, № 11—12, 695—699 (англ.; рез. рус.)

геометрия,
структура,
ΔE

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе ОСТ-3ГФ исследовано электронное строение дьюаровской структуры тиюфена (I). Использована геометрия, полученная ранее для дьюаровской структуры фурана (II), а для длины связи C—S принято значение 1,47 Å. Варьировался угол выведения атома S из плоскости, равновесное значение которого найдено равным 115° (для дьюаровской структуры бензола ана-

Ф. 1982, 18, № 9.

логичными расчетами найдено значение 117 и 120, а для II — 109,5). Структура I найдена на 365 кДж/моль менее стабильной, чем обычный тиофен (III), что объясняет неустойчивость последнего. Дипольные моменты I и III найдены равными 0,70 и 0,10 ед. Дебая (эксперим. значение для III — 0,60). В. Л. Лебедев.

C-H-S

Соединения

Обзор,
методы
ПМР, ЯМР
ЭПР, Ч.К.
М.В. Сидор
изд.

№ 1981 N 18

18 Б68. Физическая химия 1,2-дитиоловых соединений. Вопрос об ароматичности. Pedersen Carl Th. The physical chemistry of 1,2-dithiole compounds—the question of aromaticity. «Sulfur Repts», 1980, 1, № 1, 1—96 (англ.)

Обзор результатов физ.-хим. исследований 1970—1979 гг. 1,2-дитиолилиевых солей, тритиапенталенов и их пр-ных, в том числе 1,2-дитиол-3-илиден кетонов и альдегидов. Обсуждены данные полученные методами рентгеноструктурного анализа, электронной диффракции, ПМР, ЯМР ^{13}C , ЭПР, ИК микроволновой, фото- и рентгеноэлектронной спектроскопии и масс-спектрометрии. На основании этих данных, результатов квантовохим. расчетов и электрохим. исследований сделан вывод, что 1,2-дитиолилиевая система и ее пр-ные представляют собой ароматич. системы содержащие 6 π -электронов, а 1,6,6а λ^4 -тритапенталены ароматич. системы с 10 π -электронами, во многом аналогичные нафталину. Ограниченные исследования, проведенные для систем, модифицированных заменой одного или нескольких атомов S на атомы Se, Te, O или N не позволяют сделать однозначных выводов об их электронном строении, однако в нек-рых случаях имеющиеся данные наводят на мысль об образовании структур аналогичных тритиапенталену.

В. Фаустов

1980

$\text{CH}_3\text{SCH}=\text{C}=\text{CH}_2$ Om 36496. 1980

11 Д277. Электронный спектр поглощения метилалленилсульфида. Electronic absorption spectrum of methyl allenyl sulfide. Runge Wolfgang. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 2, 319—322 (англ.)

электр.
спектр
поглощения

Исследовано влияние ридберговских орбиталей 4s- и 3d-атома серы на формирование низколежащих возбужденных синглетных состояний в ненасыщенных органич. сульфидах. Получен электронный спектр поглощения растворов метилленилсульфида ($\text{CH}_3\text{SCH}=\text{C}=\text{CH}_2$) в УФ-области спектра ($30\,000\text{--}50\,000\text{ см}^{-1}$). Методом CNDO/s—d проведен расчет энергий низколежащих возбужденных состояний (E) и приведено сопоставление полученных значений с экспериментально наблюдаемыми. Отмечено, что только этот метод расчета дает удовлетворительное согласие между расчетными и эксперим. данными. Показано, что при интерпретации низкоэнергетических возбужденных синглетных состояний ненасыщенных органич. сульфидов нельзя пренебрегать вкладом АО 3d. Учет этого обстоятельства позволяет объяснить наблюдаемую разницу в спектральных свойствах метилалленилсульфида и других алленов с гетерозаместителями. Е. Н. Викторова

Ф. 1980
н 11

1980

 CD_3SH CD_3SD

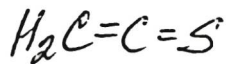
м.п.; и.

ф. 1981 N 5

5 Д419. Колебательные спектры дейтерированных метантиолов. Spectres de vibration des méthane-thiols deutériés CD_3SH et CD_3SD . Saur Odette, Travert Josette, Lavalley Jean-Claude, Chabanel Martial. «С. г. Acad. sci.», 1980, C291, № 9, 227—230 (франц.; рез. англ.)

В области $200\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ получены ИК-спектры газообразных и спектры КР жидких дейтерометантиолов CD_3SH и CD_3SD . Предложенное на основании измерения интенсивностей и поляризаций отнесение к типам симметрии A' и A'' подтверждается правилом произведений и интерпретацией некоторых обертонов и составных частот. Вследствие сильного взаимодействия колебаний A' происходит значительное расщепление частот качательных колебаний метильной группы, тогда как частоты антисимметричных вал. кол. и деф. колебаний остаются почти вырожденными.

М. А. Ковнер



XIV-9131

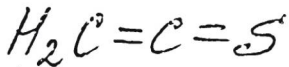
1980

10 Д404. Вращательный спектр тиокетена ($\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$) в миллиметровой области и центробежное растяжение. Millimeter wave rotational spectrum and centrifugal distortion of thioketene, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. Winnenwiser Manfred, Schäfer Eckhard. «Z. Naturforsch.», 1980, A35, № 5, 483—489 (англ.)

(М.Н.) Исследован микроволн. спектр тиокетена (I) в области 60÷230 ГГц. Исследования проводились в стеклянной кювете длиной 2 м при давлении I 20÷60 мкбар. Идентифицировано 125 вращательных переходов α -типа R-ветви для основного колебательного состояния I. Рассчитаны значения вращательных постоянных A, B, C, оценены также значения постоянных центробежного растяжения D_J , D_{JK} , d_1 , d_2 , H_{JK} , H_{KJ} , L_{KJ} и S_{KJ} . По эффекту Штарка для перехода $2_{02} \leftarrow 1_{01}$ дипольный момент I оценен в 1,01 ед. Дебая. Обсуждается возможность проявления кориолисовых взаимодействий с участием β -железного деф. кол. I (с частотой $\sim 9,5 \text{ см}^{-1}$).

В. В. Белякова

Ф 1980 №10



XIV-9131

1980

19 Б246. Миллиметровый вращательный спектр и центробежное искажение тиокетена, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. Winnewisser M., Schäfer E. Millimeter wave rotational spectrum and centrifugal distortion of thioketene, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$. «Z. Naturforsch.», 1980, A35, № 5, 483—489 (англ.)

(М.П.)

На миллиметровом спектрометре с электронно-вычислительным контролем измерен в области частот от 60 до 230 ГГц вращательный спектр тиокетена, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{S}$, в основном колебательном состоянии. Идентифицировано 125 вращательных переходов. Анализ спектра выполнен с использованием гамильтониана в представлении Уотсона. Вращательные постоянные равны (в МГц) $A=286655(82)$, $B=5659.47596(72)$, $C=$

X. 1980 N 19

$=5544,51269(75)$, кватертичные постоянные $\bar{D}_J = 1,08569$
 (4) кгц, $D_{JK} = 168,269(77)$ кгц, $d_1 = -25,46(68)$ гц, $d_2 =$
 $= -5,21(35)$ гц, секстичные постоянные $-H_{JK} = 0,716$
 (20) гц, $H_{KJ} = -408,7(73)$ гц и центробежные постоян-
 ные более высокого порядка $L_{KJ} = 0,65(24)$ гц, $S_{KJ} =$
 $= -0,0533(24)$ гц. С полученными значениями молек.
 постоянных стандартное отклонение частот от измерен-
 ных значений составляет 16,5 кгц для 125 равновзве-
 шенных линий. По эффекту Штарка для перехода
 $2_{02} - 1_{01}$ определен дипольный момент тиокетена $\mu =$
 $= 1,01(3) D$.

С. Н. Мурзин

M3C-5-

1980

Wiberg K. B.

pacrem
sl. nom.

J. Amer. Chem. Soc.,
1980, 102, N4, 1229-37

ll

See M3C-M i III

$(H_2CS)_n$

1981

20 Б121. Фотоэлектронные спектры и молекулярные свойства. 89. Системы ионизационных полос и конформации циклополитианов $(H_2CS)_n$. Bock H., Schulz W., Schmidt M. PE-Spektren und Moleküleigenschaften. 89. Ionisationsmuster und Konformation von Cyclo-Polythianen $(H_2CS)_n$. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1981, 474, № 3, 199—208 (нем., рез. англ.)

фотоэл.
спектр

Измерены фотоэлектронные спектры циклических политианов $(H_2CS)_n$, где $n=3$ (I), 4 (II) и 5 (III). Получены следующие значения вертикальных орбитальных потенциалов ионизации I 8,58, 9,13, 11,17, 11,47; II 8,37, 8,68, 8,94, 9,27, 11,4; III 8,55, 8,87 (каждый из двух ионизационных максимумов отвечает ионизации пары близких по энергии МО) 9,30, 11,0 эВ. Системы ионизационных полос с энергиями ниже 9,4 эВ отнесены к ионизации орбиталей соответствующих неподделенным паром атомов S. Модельные расчеты в приближении Хюккеля хорошо передают системы этих полос, что, по мнению авторов, свидетельствует об эквивалентности неподделенных пар атомов S. Методом

X.20.1981

ССП МО ЛКАО в приближении ЧПДП с оптимизацией геометрии рассчитаны конформации кресло и ванна II и III и профили потенциальной энергии; отвечающие конформационным переходам между этими структурами. В обоих соединениях конформация типа ванны немного (>7 кДж/моль) стабильнее конформации типа кресла, а барьер изомеризации не превышает 100 кДж/моль. Сообщение 88 см. J. Amer. Chem. Soc., 1980, 102, 4429. В. Фаустов

ГОТОВ
ЧНЯ

C_3H_6S

Lommen 12266 | 1981

Brouckere G., et al.

kv. uex.
factors

Mol. Phys., 1981, 43
(5), 1139-50.

$(CH_3)_2S$

[ommu 12525] 1981.

Chassaing G., et al.

молекула.
спектр.
ссыл. номер.
di

Spectrochim. acta,
1981, A37 (9),
721-26

HCCS'

[Отмиск 12042]

1981

12 Д118. Теоретическое исследование радикала HCCS. Theoretical study of the HCCS radical. Cooper David L. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 3, 479—480 (англ.)

М.П., теоретр,
структура

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе ОСТ-3ГФ изучено электронное строение радикала HCCS (I). Спин-орбитальное взаимодействие исследовано ограниченным методом Хартри—Фока в слэте-ровском базисе — одноэкспонентном для атома Н и 3d-АО атома S и двухэкспонентном для остальных АО. Показано, что в основном состоянии I обладает конфигурацией $(1-5)\sigma^2 1\pi^4 (6-9)\sigma^2 2\pi^4 3\pi^3$ с линейной структурой и длинами связей СН, СС и СS 1,089; 1,215 и 1,715 Å. Вращательная постоянная $B_e = 0,1833$ см⁻¹ (эксперим. значение 0,1884), константа спин-орбитального взаимодействия порядка —360 см⁻¹. Первым возбужденным должно быть состояние $2\pi^3 3\pi^4$ с близким

Ф. 1981, 18, N12.

значением B_e и константой $\approx -25 \text{ см}^{-1}$. Полученные результаты подтверждают обнаружение I в продуктах импульсного фотолиза тиофена. Высказано предположение, что I может существовать в межзвездном пространстве, и отмечено, что его вращательная постоянная близка к таковой для молекул, зарегистрированных в радиоастрономич. исследованиях. В. Л. Лебедев



Н₂C⁺S

1981

8 Д745. Резонансная флуоресценция тиоформальдегида с отдельного вращательного уровня. Single rotational level resonance fluorescence of thioformaldehyde. Clothier D. J., Kerr C. M. L., Ramsay D. A. «Chem. Phys.», 1981, 56, № 1, 73—80 (англ.)

Исследованы спектры флуоресценции ($\bar{A}^1A_2 \rightarrow X^1A_1$) тиоформальдегида (I) в газовой фазе (давл. ≤ 2 мм рт. ст.) при возбуждении отдельного вращательного уровня состояния A^1A_2 с помощью перестраиваемого лазера на красителе с выходной мощностью 70—130 мВт и спектральной шириной линии излучения ~ 10 МГц. Обнаружено, что при давл. $\leq 0,1$ мм рт. ст. скорости колебательной и вращательной релаксаций I малы по сравнению со скоростью индуцированной столкновениями электронной релаксации. На этом основании сделано заключение, что наблюдаемая при

молекулярная
структура,

Ис;
спектр
флуоресценции

Ф. 1981 №8

малых давлениях флуоресценция обусловлена переходами в невозмущенных молекулах с исходного ровибронного уровня. В результате анализа спектров флуоресценции определены частоты колебаний $\nu_2''=1457,3$ (10) и $\nu_2''+\nu_3''=2511,6$ (20) см^{-1} . Сделан вывод, что в отличие от формальдегида структуры возбужденного и основного состояний I отличаются незначительно, особенно по величине внеплоскостного угла. Библ. 36.

С. Литке

HCCS

1981

23 Б66. Теоретическое исследование радикала HCCS. Cooper David L. Theoretical study of the HCCS radical. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 3, 479—480 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе, с учетом спин-орбитального взаимодействия, рассчитан радикал HCCS (I). Предв. оптимизация геометрии I дала линейную структуру с расстояниями CC и CS 1,215 и 1,715 Å соотв. Вычисленная вращательная постоянная $B_e = 0,1833 \text{ см}^{-1}$, спин-орбитальная постоянная $\alpha = -360 \text{ см}^{-1}$. Орбитальная конфигурация основного состояния ... $2\pi^4 3\pi^3$ соответствует структуре $\text{HC} \equiv \text{C} - \text{S} \cdot$. Принято, что первое возбужденное состояние I имеет конфигурацию ... $2\pi^3 3\pi^4$, $\alpha = -25 \text{ см}^{-1}$ и вращательную постоянную B_e , близкую к ее значению для основного состояния. Вычисл. значение B_e согласуется с идентификацией I в качестве нестабильного промежут. соединения, возникающего при флэш-фотолизе тиофена. В. Фаустов

И.А., Ш.М.

Х. 1981, 19, № 23.

C_3H_6S

1981

De Brouckère G, et al.

раствор
м.н. Mol. Phys., 1981, 43, NS,
1139-1150.

(см. C_3H_6O ; III)

$(CD_3)_2S$

М.А.

Отпуск 11940 1981

11 Д425. Микроволновые спектры диметилсульфида- d_6 $[(CD_3)_2S]$ в основном и возбужденных состояниях крутильных колебаний. Microwave spectra of dimethylsulfide- d_6 $(CD_3)_2S$, ground and excited torsional states. Demaison Jean, Tan B. T., Rudolph H. D. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 2, 406—419 (англ.)

В диапазоне 8—40 Гц исследованы микроволн. спектры молекул $(CD_3)_2S$ (I), ^{13}C -I и ^{34}S -I. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 20$ в основном колебательном состоянии и в первых двух возбужденных состояниях (только для I) крутильных колебаний групп CD_3 и деф. кол. группы CSC. Обнаружено и идентифицировано квартетное расщепление линий возбужденных состояний крутильных колебаний, обусловленное взаимодействием вращения молекулы с внутренним вращением групп CD_3 . Определены значения параметров потенциала внутреннего вращения, вращательных постоянных и постоянных квартичного центробежного искажения. М. Р. Алиев

ф. 1981, 18, № 11.

Омск 11940 1981

$(\text{CD}_3)_2\text{S}$
(м.п.)

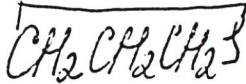
22 Б302. Микроволновые спектры диметилсульфида- d_6 , $(\text{CD}_3)_2\text{S}$, в основном и возбужденном крутильном состоянии. Demaison J., Tan B. T., Turke V., Rudolph H. D. Microwave spectra of dimethylsulfide- d_6 , $(\text{CD}_3)_2\text{S}$, ground and excited torsional states. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 2, 406—419 (англ.)

Измерены в области частот 8—40 ГГц МВ-спектры $(\text{CD}_3)_2\text{S}$ (I), $(\text{CD}_3)_2^{34}\text{S}$ (II) и $^{13}\text{CD}_3\text{SCD}_3$ (III), в основном колебательном состоянии и I в первых двух возбужденных крут. состояниях метильного волчка и первом возбужденном состоянии деф. кол. CSC. Отнесение МВ-переходов выполнено с применением эффекта Штарка. При анализе спектров использован вращательный гамильтониан в представлении Уотсона с учетом кватерного центробежного искажения и вращательно-колебательного взаимодействия. Вращательные постоянные в основном состоянии I, II и III соотв. равны (МГц): $A=13590.4972(33)$, $13287.743(37)$ и

X.1981 w 22, 19 A5

$13500,789(91)$, $B=5792,6391(12)$, $5792,828(21)$ и
 $5672,065(73)$, $C=4525,4179(12)$, $4491,255(18)$ и
 $4441,646(80)$. В результате обработки МВ-данных по
 эффекту Штарка с использованием метода прямой
 диагонализации определен дипольный момент $I \mu_b =$
 $=1,551(10)D$. Из полученных вращательных данных
 определена замещенная структура I с параметрами
 $r(SC)=1,8023(15) \text{ \AA}$ и $\angle CSC=98^\circ 49(7)'$, к-рые практи-
 чески не отличаются от соотв-щих параметров для
 нормального изотопич. образца $r(SC)=1,8024(20) \text{ \AA}$,
 $\angle CSC=98^\circ 53(10)'$. При анализе расщепления МВ-пере-
 ходов из-за внутреннего вращения метильной группы
 в возбужденных крутильных состояниях учитывали
 взаимодействие внутреннего вращения с полным вра-
 щением, а также взаимодействие между двумя внут-
 ренними волчками. Параметры барьера внутреннего
 вращения метильной группы равны $V_3=2097,3(4)$ и
 $V_{12}=32,2(5)$ кал/моль и близки к аналогичным вели-
 чинам нормального изотопич. образца $V_3=2136(2)$ и
 $V_{12}=34(4)$ кал/моль.

С. Н. Мурзин



1981

6 Б1382. Фотохимия тиетана, при возбуждении во второе электронновозбужденное синглетное состояние. Dorer F. H., Okazaki M. E., Salomon K. E. Photochemistry of thietane excited to its second excited electronic singlet state. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 18, 2671—2676 (англ.)

спектр

Изучены продукты фотохим. р-ций тиетана (триметилсульфида $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S}$, I) при возбуждении молекул во второе синглетное состояние (1B_2) в газовой фазе. Установлено, что после фотовозбуждения происходит фотофрагментация молекул с образованием этилена (II) и тиоформальдегида (III), а также протекает конкурирующая р-ция распада I на циклопропан (IV) и атом серы. Изучены спектры поглощения I в УФ-области, анализируется природа колебательных полос поглощения молекул и оценены времена жизни возбужденных электронных состояний I: $\tau(^1B_2) < 3 \cdot 10^{-12}$ с, $\tau(^1A_2) \leq 3 \cdot 10^{-9}$ с. Для идентификации механизма р-ции изучены продукты фотолиза цис- и транс-3-этил-2-про-

X. 1982, 19, № 6.

пиритетана при 23°C , а также сенсibilизованное фото-
возбуждение I по механизму триплет-триплетного пе-
реноса энергии с $\text{Mg} (^3P_1)$. На основании полученных
эксперим. результатов сделан вывод, что при возбуж-
дении I интеркомбинац. конверсия в состояние 3B_2
конкурирует с разрывом C—S-связи. Установлено, что
II и III образуются через промежут. 1,4-бирадикал в
синглетном состоянии, а распад молекулы в состоянии
 3B_2 на IV и $\text{S} (^3P)$ идёт через синглетный триметилено-
вый бирадикал. А. Дарманиян

1981

С-Н-5
6 Д460. Силовое поле сульфидной группы органических сульфидов. Дозморов С. В. «Ж. прикл. спектроскопии», 1981, 34, № 2, 357—360 (рез. англ.)

Проведен расчет силового поля сульфидной группы для 10 органич. сульфидов в приближении валентно-силового поля. На основании теории множеств показано, что между силовыми параметрами сульфидной группы и постоянными заместителей имеет место линейная зависимость. С помощью регрессионного анализа определены коэф. данной зависимости и оценены доверительные интервалы. Обсуждена роль $3d$ -орбиталей серы в образовании связи сера—углерод.

сил. пост.

ф. 1981. NB

2,5- $\text{CHCHCH}_2\text{SCH}_2$.

1981

8 Д489. Спектры и структура малых кольцевых молекул. Ч. XLII. Микроволновый спектр 2,5-дигидротиафена. Spectra and structure of small ring compounds. XLII. Microwave spectrum of 2,5-dihydrothiophene. Durig J. R., Li Y. S., Durig D. T. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 3, 1564—1567 (англ.)

м. в. спектр

В области 18,0—39,0 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы 2,5- $\text{CHCHCH}_2\text{SCH}_2$. Отождествлены линии α -типа R-ветви ~~в основном и 5~~ возбужденных состояниях сморщающего колебания кольца. Найдены вращательные постоянные. Определен дипольный момент $|\mu_a| = |\mu_{\text{общ.}}| = 1,75$ ед. Дебая.

ф. 1981 N 8



1981

17 Б316. Спектры и структура соединений с малыми циклами. XLII. Микроволновый спектр 2,5-дигидротиофена. Dung J. R., Li Y. S., Durig D. T. Spectra and structure of small ring compounds. XLII. Microwave spectrum of 2,5-dihydrothiophene. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 3, 1564—1567 (англ.)

Измерен в области частот 18,0—39,0 ГГц МВ-спектр

CH₃N.

2,5-дигидротиофена, $\overline{\text{CHCHCH}_2 \text{SCH}_2}$, в основном и 5 возбужденных колебательных состояниях деф. моды кольца. Анализ спектров выполнен в приближении жесткого волчка. Вращательные постоянные в колебательных состояниях $v=0, 1, 2, 3, 4$ и 5, соотв., равны (в МГц): $A=6621,59(12), 6628,19(7), 6633,35(6), 6637,63(7), 6641,26(5)$ и $6650,57(15)$, $B=4798,42(3), 4796,56(2), 4794,19(1), 4791,51(2), 4788,62(1)$, и $4786,44(3)$, $C=2885,27(1), 2895,74(1), 2904,35(1), 2912,02(1), 2919,07(1)$ и $2924,69(1)$. По эффекту Штарка 2-го порядка для трех МВ-переходов в предположении, что $|\mu_y|=0,00 \text{ D}$, определены компоненты дипольного момен-

X. 1981 N 17

та $|\mu_a| = 1,75(1) D$; $|\mu_c| = 0,00(0) D$ и полный дипольный момент $|\mu| = 1,75(1) D$. На основе полученных данных сделан вывод о плоской структуре остова из тяжелых атомов I в основном колебательном состоянии. При ряде допущений найдены значения структурных параметров молекулы: $r(C-H) = 1,085 \text{ \AA}$, $r(C-H_2) = 1,095 \text{ \AA}$, $r(C=C) = 1,34 \text{ \AA}$, $r(C-C) = 1,518 \text{ \AA}$, $r(C-S) = 1,816 \text{ \AA}$, $\angle HCH = 109,8^\circ$, $\angle CCC = 116,5^\circ$, $\angle CCS = 106,25^\circ$, $\angle CSC = 96,5^\circ$, $\angle (C=CH) = 121,75^\circ$. Полученные результаты согласуются с данными для родственных молекул.

С. Н. Мурзин



$(CH_3)_2S$

[Amnuck 13090] 1981

Dwrig J. R., et al.

vi, et al.

J. Chem. Phys., 1981,
75, N 10, 4833-4839.



(ver. $S(CD_3)_2$; III)

$S(CD_3)_2$

Оттиск 13090

1981

Vi, М. П.



ф. 1982, 18, №5.

5 Д395. Анализ спектра крутильных колебаний молекул с двумя внутренними волчками C_3 . Ч. 21. Анализ крутильного спектра диметилсульфида- d_0 , $-d_3$ и $-d_6$. Analysis of torsional spectra of molecules with two internal C_3 rotors. XXI. Analysis of the torsional spectra of dimethylsulfide- d_0 , $-d_3$, and $-d_6$. Durig J. R., Jalilian M. R., Sullivan J. F., Compton D. A. C. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 10, 4833—4839 (англ.)
Получены спектры ИК-поглощения и комб. рас. газообразного диметилсульфоксида $S(CD_3)_2$ с разрешением 0,25 и 2 $см^{-1}$ соответственно в области 100—300 $см^{-1}$. Приведены спектры, частоты полос и их отнесение к переходам между уровнями крутильных колебаний молекул $(CH_3)_2S$, CH_3SCD_3 и $(CD_3)_2S$. Эти величины использованы для определения констант четырехпараметрич. потенциала внутреннего вращения метильных групп. Эффективный барьер для внутреннего вращения этих групп составляет 748 $см^{-1}$, что близко к результату, полученному из микроволн. данных. Ч. 20 см. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, 426. Библ. 18.
М. В. Т.

$(CD_3)_2S$ [Cmmux 13090] 1981
Dwight J. R., et al.

ν_i , a.n. J. Chem. Phys., 1981,
75, N 10, 4833 - 4839.

●
(ccr. $S(CD_3)_2$; III)

CH_3SCD_3 | Omuck 13090 | 1981

Durig J. R., et al.

vi, et al. J. Chem. Phys., 1981,
75, N10, 4833-4839.

●
(cell. $\text{S}(\text{CD}_3)_2$; iii)

$(CD_3)_2S$

Ommuck 12090

1981

Durig J.R., et al.,

Раман.
спектр,
Vi,
м.п.

J. Chem. Phys., 1981, 75, N10,
4833-4839.

$S_2C_4H_4$

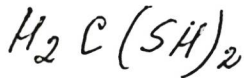
1981

5 Б77. Неэмпирическое исследование конформаций 1,4-дитиина. Galasso V. Ab initio study of the conformation of 1,4-dithiin. «J. Mol. Struct.», 1981, 85, № 1—2, («Teochem», 1981, 2, № 1—2), 159—162 (англ.)

Выполнены расчеты молекулы 1,4-дитиина ($S_2C_4H_4$) методом ССП МО в базе ОСТ-ЗГФ с оптимизацией геометрии. Построена потенциальная функция (ПФ) для перехода от одной конфигурации «лодки» к другой через плоскую циклич. конфигурацию. Сделан вывод, что конкуренция двух противоположных эффектов — стерич. и эффекта сопряжения приводит к тому, что основной оказывается конфигурация «лодки», а не плоская. Это обусловлено взаимодействием диффузных неподделенных пар атомов S. Величина барьера инверсии составляет 14,6 ккал, а дипольный момент — 0,93 D (эксперим. — 1,16 D). В. Г. Закжевский

расчет м.п.,
структурн.,
Δ E

X. 1982, 19, N5.



Comstock 11479 | 1981

Glidewell C., et al.

молекула

молекула

J. Mol. Struct., 1981.

72, 209-216.

Транс- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_3$

Сттих 11636 / 981

М. И.

М. В. Сттих
геометрия

Ф. 10. 1981

10 Д377. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение для трансизомера этилметилсульфида. Microwave spectrum, structure, dipole moment, and internal rotation of the trans isomer of ethyl methyl sulfide. Hayashi Michiro, Adachi Masao, Nakagawa Jun. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 129—135 (англ.)

Изучены микроволн. спектры (область 8000—35 000 МГц) газообразного транс- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_3$ (I) и его десяти различных изотопозамещенных (содержащих ^{13}C , D и ^{34}S) при т-ре сухого льда. Исследования проводились на спектрометре со штарковской модуляцией, что позволило оценить значение дипольного момента ($\sim 1,554 \pm 0,004$ ед. Дебая). Рассчитаны значения вращательных постоянных и моментов инерции молекул, определены длины связей и углы между ними в молекуле I. По величине расщепления линий переходов с $K_p = 1 \leftarrow 2$ и $2 \leftarrow 1$ оценена высота барьера заторможенного внутреннего вращения группы SCH_3 . Она оказалась равной 1980 ± 55 кал/моль, что на ~ 150 кал/моль меньше, чем в диметилсульфиде.

В. В. Белякова

HCCS

Om 24503

1981

check
homologues

96:171462p The 4114-Å absorption system of the thio= carbonylmethylidyne (HCCS) radical. Krishnamachari, S. L. N. G.; Ramsay, D. A. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 1981, 71 205-12, 1 plate (Eng). The transient absorption spectrum obsd. at 3770-4170 Å during the flash photolysis of thiophene is assigned to the HC:CS radical. D isotope shifts establish the presence of a single D (H) atom in the radical. Under high resolu. the bands show doublet P and R branches. The bands are tentatively assigned to a $2\Pi(b)-2\Pi(b)$ transition of a linear mol., although the possibility that the mol. is slightly nonlinear in 1 of the combining states is not excluded. Rotational assignments are given for the 2 strongest bands of HC:CS, including the 0-0 band near 4114 Å. The rotational consts. are given for this band.

C.A. 1982, 96, ~20

HCCS'

от 24503

1981

6 Д395. Система поглощения 4114 Å радикала HCCS. The 4114 Å absorption system of the HCCS radical. Krishnamachari S. L. N. G., Ramsay D. A. «Faraday Discuss. Chem. Soc», 1981, № 71, 205—212 (англ.)

При импульсном фотолизе тиофена получен спектр поглощения радикала HCCS в области 3770—4170 Å. При использовании дейтерированного тиофена зарегистрированы изотопич. сдвиги полос и показано, что спектр принадлежит соединению с одним атомом H (или D). Спектры высокого разрешения свидетельствуют о дублетной структуре полос *P*- и *R*-ветвей. Наблюдаемые полосы предположительно приписаны переходу ${}^2\Pi(b) \rightarrow {}^2\Pi(b)$ линейной молекулы, хотя не исключена возможность того, что в одном из комбинирующих состояний молекула слегка нелинейна. Выполнен вращательный анализ двух полос, включая и (0,0) полосу при $\lambda = 4114$ Å и определены вращательные постоянные $B_0'' = 0,18841(16)$ см⁻¹ и $B_0' - B_0'' = -0,014399(6)$ см⁻¹ (в скобках приведены значения тройного стандартного отклонения). В. С. Иванов,

М.П.

9.1982, 18, № 6.

HCCS

от 24503

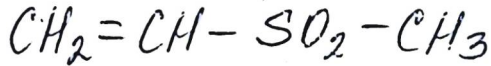
1981

11 Б184. Система поглощения 4114 Å радикала HCCS. Krishnamachari S. L. N. G., Ramsay D. A. The 4114 Å absorption system of the HCCS radical. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 205—212 (англ.)

С высоким разрешением в области 3770—4170 Å измерены спектры поглощения свободных радикалов HCCS и DCCS, образующихся при импульсном фотоллизе тиюфена и дейтерированного тиюфена, соотв. Измерены вращательные структуры двух наиболее интенсивных полос HCCS—4114 Å (0—0) и 3992 Å (0—0+вал. кол. O=S в возбужденном состоянии), в к-рых хорошо прослеживаются Р- и R-ветви и их дублетное расщепление после $N \approx 30$. С. Б. Осин

М.П;

X, 1982, 19, N11.



1981

21 Б112. Электронографическое исследование строения молекулы метилвинилсульфона. Наумов В. А., Знатдинова Р. Н., Бердников Е. А. «Ж. структур. химии», 1981, 22, № 3, 89—93

молекула.
геометрия

Методом газовой электронографии изучено строение молекулы $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{SO}_2-\text{CH}_3$ при $t_{\text{ре}} \sim 80^\circ\text{C}$. Установлено, что в газ. фазе существуют два конформера: s-цис-конформер с $\varphi=0^\circ$ и заслоненный конформер с $\varphi=100^\circ$. Соотношение конформеров близко к эквимолекулярному. Определены геометрич. параметры молекулы: длины связей $\text{C}=\text{C}$ 1,347 (16), $\text{S}-\text{CH}_2$ 1,774 (8), $\text{S}-\text{CH}_3$ 1,766 (—), $\text{S}=\text{O}$ 1,429 (4), $=\text{C}-\text{H}$ 1,093 (—), $\text{C}-\text{H}$ 1,104 (—) Å, углы $\text{C}=\text{C}-\text{S}$ 118,4 (2,1), $\text{C}-\text{S}-\text{C}$ 103,21 (1,6), $=\text{C}-\text{S}=\text{O}$ 110,0 (1,5), $\text{O}=\text{S}=\text{O}$ 120,0 (1,5), $\text{C}=\text{C}-\text{H}$ 123,0 (—), $\text{S}-\text{C}-\text{H}$ 110,0 (—)°.

X. 24. 1981

1981

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

16 Б300. Исследование внутреннего вращения в пропилмеркаптани методом микроволновой спектроскопии. Nakagawa J., Hayashi M. Internal rotation in propyl mercaptan by microwave spectroscopy. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 327—340 (англ.)
Измерены в области частот 8—45 ГГц МВ-спектры пропилмеркаптана, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SH}$ (I), и его дейтерозамещенных образцов в основном колебательном состоянии. МВ-спектры переходов α - и γ -типа отнесены к транс-гош-изомерам (ТГ) I и шести дейтерированных образцов. МВ-спектры переходов α - и β -типов отнесены к транс-транс-изомерам (ТТ) I и SD-замещенного образца. Анализ спектров ТГ-изомеров, обладающих плоскостью симметрии, выполнен с учетом туннельного эффекта между двумя эквивалентными минимумами потенциальной ф-ции внутреннего вращения тиола. Для всех образцов учитывалось влияние квартичного центробежного искажения. Вращательные постоянные ТГ-1 и ТТ-1, соответственно, равны (в МГц) $A=23907,48(9)$ и $23845,24(22)$, $B=2345,597(6)$ и $2393,469(12)$, $C=$

Но; М. В. Сидор
М. М.

2. 1981. № 16

$=2250,338(9)$ и $2269,621(16)$. Величина туннельного расщепления для ТГ-1 равна $\Delta\nu=1613,01(4)$ Мгц. Из измерений относит. интенсивностей линий при t -рах 195°K и 298°K вычислена разность энергий $E(\text{ТТ-1}) - E(\text{ТГ-1}) = 136(40) \text{ см}^{-1}$, близкая по величине соответствующей разности энергий для этилмеркаптана 142 см^{-1} . По эффекту Штарка для 7 переходов ТГ-1 и 3 переходов ТТ-1 определены, соответственно, компоненты дипольных моментов $|\mu_a| = 1,575(7)$ и $1,179(18)$, $|\mu_b| = 0,115(82)$ и $1,078(75)D$, $|\mu_c| = 0,580(9)$ и $0,0D$ и полные дипольные моменты $|\mu| = 1,683(10)$ и $1,598(54)D$. При ряде допущений оценена возможная r_s -структура изомеров.

С. Н. Мурзин.

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

1981

9 Д465. Изучение внутреннего вращения в пропил-меркаптane методом микроволновой спектроскопии. Internal rotation in propyl mercaptan by microwave spectroscopy. Nakagawa Jun, Hayashi Michio. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 327—340 (англ.)

В диапазоне 8—45 Гц исследованы микроволн. спектры молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SH}$ и шести ее дейтерозамещенных. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 15$ основного колебательного состояния транс—гош (относительно связи C—C)- и транс—транс (относительно связи C—S)-изомеров этих молекул, а также туннельное расщепление линий гошизомеров. Определены значения вращательных постоянных и дипольного момента. По величине туннельного расщепления линий определены параметры потенциала внутреннего вращения тиольной группы: $V_2 = -353$, $V_3 = 1310$ кал/моль.

М. Р. Алиев.

M, N.

ф. 1981 N 9

C-S-H-соединения

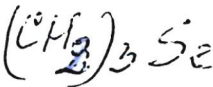
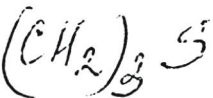
Оммуек 12517 1981

Электрон.
структу-
ра

Ohzaki M., Murata H.,

Journal of Molecular Structure
Lettre, 1981, 85, 125-131.

1981



8 Д77. Потенциальная функция неплоских колебаний триметилсульфида и триметилселенида. The ring puckering potential function of trimethylene sulfide and trimethylene selenide. Pousa Jorge L., Sorarrain Oscar M., Maranon Julio. «J. Mol. Struct.», 1981, 71, 31—38 (англ.)

потенциальная
функция

(+1)

Ф. 1981 N 8

SCH_2CH_3

HC_5OCH_3

[ommee 12091] 1981.

Randhawa H.S.

и.к., Раман
спект,
геометрия

Z. phys. Chem. Leipzig,
1981, 262, 561-66.

$(CH_3)_2S$

1981

96:171382n Determination of the barriers to internal rotation of some molecules with two C_3 rotors by far infrared Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. Rizzolo, J. J.; Guirgis, G.; Durig, J. R. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1981, 289(Int. Conf. Fourier Transform Infrared Spectrosc.), 269-72 (Eng). Far-IR spectra of Me_2S , Me_2Se , 1-chloro-2-methylpropene, *cis*- and *trans*-dimethyloxirane, and D derivs. of Me_2S and Me_2Se were recorded at a resolu. of 0.25 cm^{-1} . A large amt. of torsional data were obtained and the obsd. transitions were assigned on the basis of the ~~semi-rigid~~ method. The barriers to internal rotation were calcd., and for several of the mols., both the cosine-cosine and sine-sine coupling terms were obtained.

(lex cneckmp)

⑦ $(CH_3)_2Se$

C.A. 1982, 96, N20

HCS⁺

Ommuck 11679 1981

HOCO⁺

HOCN

(M, N;
B₀ &)

194: 217353t Three new "nonterrestrial" molecules. Thaddeus, P.; Guelin, M.; Linke, R. A. (Goddard Inst. Space Stud., New York, NY USA). *Astrophys. J.* 1981, 246(1, Pt. 2), L41-L45 (Eng). Eight new interstellar lines were detected from 3 mols. not previously obsd. spectroscopically in space or in the lab. One, HCS⁺, is a linear or nearly linear mol. with microwave consts. $B_0 = 21,337.15 \pm 0.06$ MHz, $D_0 = 21.4 \pm 1.5$ kHz, 1st identified because B_0 and D_0 are close to those calcd., and now confirmed by lab. detection. The 2nd mol., also linear or nearly so, has microwave consts. $B_0 = 10,691.406 \pm 0.043$ MHz, $D_0 = 1.84 \pm 0.91$ kHz close to those expected for the isoelectronic systems HOCO⁺ and HOCN; a choice between the 2 cannot be made on the basis of the available astronomical data. The existence of a 3rd mol. is deduced from an unidentified line at 85,338 MHz that has been found in many sources, is fairly intense in several, and may be self-absorbed in Sgr B2.

(+2)



C. J. 1981. 94 N 26

Isuc - $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{SH}$

1981

10 Д373. Микроволновый спектр цистиопропионовой кислоты. Microwave spectrum of cis-thiopropionic acid. Takahashi Yoshiko, Yamaguchi Ichiro. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 1, 43—47 (англ.)

Изучен микроволн. спектр газообразной цис- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{SH}$ (I) в области 10—35 ГГц. Исследования проводились на микроволн. спектрометре со штарковской модуляцией (частота модуляции 100 кГц) в кювете длиной 1,5 м при давлении 0,04 мм рт. ст. Анализ спектров показал, что молекула I имеет цисконформацию и находится в тиольной форме. Это подтверждается также результатами исследования ИК-спектров и спектров ЯМР. Рассчитаны значения вращательных постоянных (A, B, C) и постоянных центробежного растяжения ($d_J, d_{JK}, d_{wJ}, d_{wK}$), а также значения составляющих дипольного момента I. Величина дипольного момента I указывает на то, что связь S—H в молекуле находится в трансположении по отношению к связи $\text{C}_1\text{—C}_2$.

В. В. Белякова

М. В. Стяжко

М. П.

92.10.1981

$(CH_3)_2S$

1981

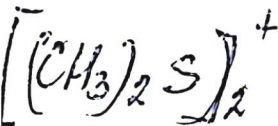
Teodorakopoulos G. et al

J Comput. Chem., 1981, 2,
N 2, 212-217.

элект.
строен.
кв. элх.
расчет
(J)

● (see H_2S) III

1981



(Di)

V 94: 129691w Resonance Raman spectrum of the transient dimethylsulfide dimer radical cation $[(CH_3)_2S]_2^+$. Wilbrandt, R.; Jensen, N. H.; Pagsberg, P.; Sillesen, A. H.; Hansen, K. B.; Hester, R. E. (Risoe Natl. Lab., Roskilde, DK-4000 Den.). *J. Raman Spectrosc.* 1981, 11(1), 24-6 (Eng). The resonance Raman spectrum of the transient thioether radical cation dimer complex $(Me_2S)_2^+$, generated by electron irradiation of an aq. soln. of Me_2S and recorded by optical multichannel detection, is reported. Vibrational bands at 276 and 139 cm^{-1} were detected and are assigned to the stretching mode of the quasi-3-electron S-S bond and a $\delta(CSS)$ deformation mode, resp.

C.A. 1981:94N16

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

Оттиск 13522 1982

14 Б243. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение гош-изомера этилметилсульфида. Adachi M., Nakagawa J., Hayashi M. Microwave spectrum, structure, dipole moment, and internal rotation of the gauche isomer of ethyl methyl sulfide. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2, 381—388 (англ.)

М.П.

Измерены в области частот 8—35 ГГц МВ-спектры гош-изомера этилметилсульфида $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_3$ (I) и 13 его изотопозамещ. образцов в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с использованием гамилтониана в представлении Уотсона с учетом квартичного центробежного искажения и внутреннего вращения группы SCH_3 . Для I вращательные постоянные равны (в МГц) $A=9668,39(7)$, $B=3919,97(1)$, $C=3199,32(1)$. Определены компоненты дипольного мо-

х. 1982, 19, № 14.

мента I: $\mu_a = 0,756(9)D$, $\mu_b = 1,239(10)D$, $\mu_c = 0,657(9)D$
и полный дипольный момент $\mu = 1,593(10)D$.
С. Н. Мурзин



$\text{CH}_3\text{SC}_2\text{H}_5$ | Омтиск 13522 | 1982

М.Л., Цо

7 Д377. ^{УМЗ 3 02 Р 03} Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение гош-изомера метилэтилсульфида. Microwave spectrum, structure, dipole moment, and internal rotation of the gauche isomer of ethyl methyl sulfide. Adachi Masao, Nakagawa Jun, Hayashi Michiro. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2, 381—388 (англ.)

Ф. 1982, 18, № 7.

C_4H_4S

Ommuck 14144

1982

Brouckère G.,

ab initio
pacem

Nieuwpoort W.C., et
al.

Mol. Phys., 1982, 45, N3,
649-661.

C_4H_6S

[Ommick 14144]

1982

ab initio
praeem

Brouckère G.,

Nieuwpoort W.C. et
al.

Col. Phys., 1982, 45,

● N3, 649-661.

CH_3CN , CD_3CN (p)

C.A. 1981, 25, N18, 156827x

C_6H_5SH

1982

16 Б124. Отнесение p -состояний бензотиола на основании данных фотоэлектронной спектроскопии. Caronovale F., Kibel M. H., Nyberg G. L., Pelel J. B. Photoelectron spectroscopic assignment of the p -states of benzenethiol. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1982, 25, № 2—3, 171—179 (англ.)

y
Измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) с возбуждением He-I и He-II C_6H_5SH . При возбуждении He-I проведены измерения углового распределения фотоэлектронов и определены параметры асимметрии β . Дано полное отнесение спектров на основе: изменений относит. интенсивностей пиков при переходе от возбуж-

X. 1982, 19, N 16

дения He-I к He-II, сопоставления измеренных β со значениями β для бензола, расчетов электронного строения C_6H_5SH методом МО ЛКАО в приближении ЧПДП. Первые три пика отвечают ионизации орбиталей b_1 ($\pi+S3p$, энергия ионизации 8,49 эВ), a_2 (π , 9,39 эВ) и b_1 ($\pi+S3p$, 10,61 эВ). Значения β для этих пиков практически одинаковы (1,14—1,16) и хорошо согласуются с β для МО e_{1g} бензола. Вклад АО серы для 3-й орбитали больше, чем для 1-й. Далее следуют орбитали b_2 ($\sigma+S$, 11,59 эВ), a_1+b_1 ($\sigma+\pi$, 12,24 эВ), и b_2 ($\sigma+S$, 13,15 эВ), причем для последней из этих орбиталей вклад АО серы наибольший, кроме того, для этого пика обнаружена значит. зависимость β от колебательного состояния. Остальные пики в ФЭС соответствуют МО кольца, что подтверждается совпадением измеренных β с данными для бензола. М. Гофман.

(CHS)₂

1982

Chandra Singh U,
et al.

nomeris.

Kprebire

J. Mol. Struct., 1982,

87, N2, Suppl.: Theo-

Chem, 4, N2, 125-132.

●
(see. H₂O₂; iii)

C_4H_6S

1982

de Brouckère G., Nieuw-
poot W.C., et al.

meopere.
pacruu.

Mol. Phys., 1982, 45,
N 3, 649 - 661.

( cur. C_5H_6 ; III)

$$\overline{CHCHSCH_2CH_2}$$

Om. 14433

1982

21 Б305. Спектры и структура соединений с малыми циклами XLIII. Микроволновый спектр 2,3-дигидро-тиофена. Durig J. R., Little T. S., Li Y. S. Spectra and structure of small ring compounds. XLIII. Microwave spectrum of 2,3-dihydrothiophene. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 8, 3849—3853 (англ.)

Измерен в области частот 18,0—39,0 ГГц МВ-спектр

м.п., поместр.
Структур

2,3-дигидротнифена, $\text{CHCHSCH}_2\text{CH}_2$, в основном и первом возбужденном неплоском скелетном колебательных состояниях. Анализ спектра выполнен в приближении модели жесткого волчка. В колебательных состояниях $v=0$ и $v=1$ соотв., вращательные постоянные равны (МГц) $A=6863,14(7)$ и $6862,98(9)$, $B=4707,75(1)$ и $4707,57(1)$, $C=2953,43(1)$ и $2953,45(1)$. По эффекту Штарка 2-го порядка для двух переходов определены компоненты дипольного момента $|\mu_a|=1,56(20)D$, $|\mu_b|=0,32(20)D$, $|\mu_c|=0,20(10)D$. На основе полученных МВ-данных вычислена возможная структура мо-

X. 1982, 19, N 21

лекулы, при этом наилучшее согласие расчетных и эксперим. вращательных постоянных достигается при угле изгиба кольца 33° . В результате доп. ИК-исследований в области частот $80-450$ см и $2700-2800$ см $^{-1}$ определена потенциальная функция для изгиба кольца молекулы $V(X)$ (в см $^{-1}$) $= 6,50 \cdot 10^3 X^4 - 2,92 \cdot 10^4 X^2$, где X — координата изгиба кольца в А. Результирующая величина барьера инверсии 328 см $^{-1}$. Полученные результаты согласуются с данными для родственных молекул. (Часть XLII см. Durig J. R. et al., «J. Chem. Phys.», 1981, 74, 1564). С. Н. Мурзин

CHCHSCH₂CH₂

Оттиск 14433 1982

10 Д332. Спектры и структура соединений с малыми циклами. XLIII. Микроволновый спектр 2,3-дигидротиофена. Spectra and structure of small ring compounds. XLIII. Microwave spectrum of 2,3-dihydrothiophene. Durig J. R., Little T. S., Li Y. S. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 8, 3849—3853 (англ.)

В диапазоне 18—39 ГГц исследован микроволн. спектр циклич. молекулы CHCHSCH₂CH₂ (I). Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 5$ в основном и первом возбужденном состояниях изгибного колебания тиофенового кольца. Определены значения вращательных постоянных и дипольного момента I. Исследован также ИК-спектр I в областях 80—450 и 2700—3000 см⁻¹ в газовой фазе. Идентифицированы полосы переходов между уровнями изгибного колебания вблизи 160 см⁻¹ и разностных переходов вал. кол. СН-связи и изгибного колебания вблизи 2800 см⁻¹. Определена потенц. ф-ция для изгибного колебания.

М. Р. Алиев

М. Р.

ор. 1982, 18, N 10



1982

Оттиск 14149

геометрия,
структура,
№

1) 18 Б54. Расчеты неэмпирическим методом молекулярных орбиталей молекулярных структур и электронных свойств серосодержащих соединений. III. Тиаacroлеин ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{S}$) и тиоглиоксаль ($\text{S}=\text{CH}-\text{CH}=\text{S}$). На Г.-К., Nguen M. T., Vanquickenbotté L. Ab Initio Calculations of the Molecular Structures and the Electronic Properties of Sulfur-containing Compounds: III. Thioacrolein ($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{S}$) and Thioglyoxal ($\text{S}=\text{CH}-\text{CH}=\text{S}$) «Z. Naturforsch.», 1982, A37, № 2, 125—128 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых функций ($9s, 5p/4s, 2p$) для C, ($12s, 8p/6s, 4p$) для S и ($4s/2s$) для H выполнены расчеты молекул тиаacroлеина (I) и тиоглиоксали (II).

x. 1982, 19, n18.

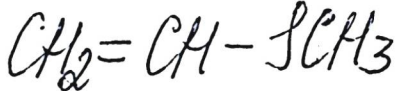
Геометрия молекул оптимизировалась с использованием метода аналитического градиента. Для транс-конформации I, за исключением C=S-связи, рассчитанные геометрич. параметры находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Длина C=S-связи в расчетах превышает на 0,04 Å. Для цис-конформации I и для II не имеется эксперим. данных. Найдено, что транс-конформеры I и II более стабильны, чем цис-конформеры на 2,06 и 4,31 ккал/моль соотв. Рассчитанные величины барьеров вращения равны 9,31 и 7,35 ккал/моль для I и II. Анализ заселенностей связей показал, что заселенность простой связи C—C в транс-конформере I значительно больше, чем в перпендикулярном и цис-конформерах. Для II наблюдается такая же тенденция, но порядок величин существенно меньше. Рассчитаны дипольные и квадрупольные моменты I и II. Рассчитанный дипольный момент для транс-конформера I (3,025 D) приблизительно на 20% больше, чем его эксперим. значение.

И. Н. Сенченя

$\text{CH}_4-\text{C}\equiv\text{S}$ (Ommuck 15209) 1982

монхон.
снуркн;
ab initio
pacem

Ma Tae-Kyu, Nguyen M.T.,
et al.,
J. Mol. Struct., 1982,
90, 1-2, 107-114.



1982

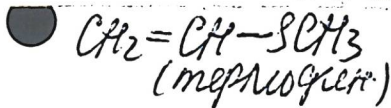
17 Б738. Потенциал внутреннего вращения и конформационная изомерия метилвинилсульфида. Кейко В. В., Синеговская Л. М., Калинин Н. А., Гусарова Н. К., Альперт М. Л., Трофимов Б. А. «Ж. общ. химии», 1982, 52, № 4, 875—880.

Из зависимости ИК-спектра от τ -ры для разности энтальпий и энтропий цис- и гош-ротамеров метилвинилсульфида получены значения $6,1 \pm 0,16$ кДж/моль и $-1,74$ э. е. На основе теор. анализа установлено, что энергетически менее выгодный конформер имеет гош-форму с диэдральным углом поворота вокруг связи $\text{C}_{sp}-\text{S}$ $132 \pm 3^\circ$. Вычисл. величины барьера перехода от цис- к гош-форме и барьера, отделяющего две гош-формы друг от друга, равны соотв. $9,8-10,6$ и $2,5-2,9$ кДж/моль.

Р. Г. Сагитов

потенциал
внутрен.
вращения.

Х. 1982, 19, (11) № 17.



$C_4H_4S^{2+}$

1982

Миняев Р. Л., Минкин
В. Л.

расчёт
структур

Ж. Орган. химии,
1982, 18, N10, 2009-2017.

●
(см. $C_4H_4N^+$; III)

Dumuck 15863

1983

Dumuck

S CH₂ CH₂ S CH₂ CH₂

Alonso J. L., Cami-
nati W, et al.,

148 camp

J. Mol. Struct.,
1983, 96, N3-4,

225 - 232.

C_2H_2S

1983

8 Б1038. Изучение тиирена и его изомерных структур неэмпирическим методом молекулярных орбиталей. Ab initio molecular orbital studies on thiirene and its isomeric structures. Gosavi Ratnakar K., Strausz Otto P. «Can. J. Chem.», 1983, 61, № 11, 2596—2610 (англ.; рез. фр.)

Неэмпирическим методом ССП МО оптимизированы геометрии 6 изомеров C_2H_2S : тиирена $HC=CH-S$ (I), тиокетена $H_2C=C=S$ (II), этинтиола $HC\equiv CSH$ (III), тиоформилметилена $S=CH-CH:$ (V), тиранилидена $H_2CSC:$ (V) и тиолвинилидена $HS-CH=C:$ (VI), а также молекул H_2S , H_3CSH , $H_2C=S$ и тиирана H_2CCH_2S . Оптимизация проведена в базисах ОСТ—3ГФ и 6—31ГФ как с учетом d -АО на атоме S, так и без него. Энергии I—VI уточнены методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом одно- и двукратных возбуждений. Найдено, что наиболее стабильный изомер C_2H_2S — II, относит. энергии I и III—VI равны соотв. 35,1; 7,8; 66,7; 56,5 и 63,7 ккал/

расчет геометр.
стр., ν_i , δ_i ,
 ω_i ;

X. 1984, 19,
N 8

/моль. Ограниченным методом Хартри—Фока в базисах ОСТ—3ГФ и 6—31ГФ* оптимизированы геометрии цис-, транс- и линейной конфигураций $^1A''$, $^1A'$, $^3A''$ и $^3A'$ -состояний бирадикальной структуры $\cdot S-CH=CH\cdot$ (VII), энергия триплетов уточнены методом КВ. Найдено, что стабильность цис- и транс-конформеров примерно одинакова и барьеры их взаимопревращения не превышают 8—9 ккал/моль. Синглет-триплетное расщепление в VII оценено в 1,5 ккал/моль. Энергия транс-VII ($^3A''$) на 19 ккал/моль ниже энергии IV, но выше энергии I, так что последний может быть назван псевдоантиароматическим. Методом ССП в базисе ОСТ—3ГФ (в нек-рых случаях — 6—31ГФ*) оптимизированы геометрии около 20 переходных состояний процессов взаимопревращения I—VII. Найдено, что барьеры перехода IV в I или II очень малы или отсутствуют. Наиболее выгодный канал изомеризации I ведет через VII к II, что согласуется с опытом. Расчет ИК-спектра I в базисе 6—31ГФ* дает частоты, хорошо согласующиеся с экспериментом.

В. Я. Беспалов

HSCH_2CH_2 [DM. 18585]

1983

Hoz T., Sprecher M.,
et al.

Israel J. Chem., 1983,

● 23, N1, 109-115.

кв. мех.
расчет
структур

CH₂DSH
CHD₂SH

Dom. 18651 / 1983

6 Л140. Микроволновые спектры молекул CH₂DSH и CHD₂SH. The microwave spectra of CH₂DSH and CHD₂SH. Su Chun Fu, Quade C. Richard. «J. Chem. Phys.», 1983. 79. № 12, 5828—5834 (англ.)

В диапазоне 12,5—48 ГГц исследованы микроволновые спектры молекул CH₂DSH и CHD₂SH. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 10$ транс- и гошизомеров этих молекул в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных и параметров потенциала внутреннего вращения. Показано, что разность энергий транс- и гошизомеров составляет всего 2—3 см⁻¹, поэтому имеет место сильное взаимодействие между вращательными уровнями транс- и гошконформаций, приводящее к сильным усложнениям спектров.

М. Р. Алиев

М.А.

ф. 1984, 18, № 6

C_2H_5NCS

1984

2 Б1167. ИК и КР-спектры, отнесение полос и расчет нормальных колебаний этилизотиоцианата- d_0 и $-d_5$. Infrared and Raman spectra, vibrational assignment and normal coordinate calculations for ethylisothiocyanate- d_0 and $-d_5$. Durig J. R., Heusel H. L., Sullivan J. F., Graddock S. «Spectrochim. acta», 1984, A40, № 8, 739—750 (англ.)

В области $3500—40\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры поглощения C_2H_5NCS (I) и C_2D_5NCS (II) в тв. при 77 К и газ. состояниях. В области $600—40\text{ см}^{-1}$ на ИК-Фурье спектрометре Nicolet 8000 спектр газ. I измерен с разрешением $0,12\text{ см}^{-1}$. КР-спектры жидк. I и II измерены в области $3200—10\text{ см}^{-1}$, тв. при 77 К — в области $3200—50\text{ см}^{-1}$. В области $3500—200\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры I, изолированного импульсным методом в N_2 -матрицах при 10 К и соотношении $I:N_2 = 1000:1$. Интерпретация спектров выполнена на основе анализа колебательно-вращательных контуров ИК-

В.М.П., Иб

Х. 1985, 19, N2.

полос, деполяризации линий КР, изотопич. сдвигов частот в предположении цис-формы I, II (симметрия C_s) в тв., жидк. и газ. состояниях. Т. к. в спектрах матрично-изолированных I наблюдались дублеты полос, относит. интенсивности к-рых не изменялись при нагревании до 30 К и послед. охлаждении до 10 К, сделан вывод о существовании двух конформеров I при 10 К. Рассмотрена их структура. По частоте крут. кол. CH_3 -группы в тв. I (270 см^{-1}) найден барьер внутреннего вращения ($4,74\text{ ккал/моль}$). На основе лит. молек. параметров и силовых констант C_2H_5CN и CH_3NCS рассчитаны нормальные колебания и распределение потенциальной энергии (РПЭ). Отклонение вычисленных частот от эксперим. составило 1,45% для I, 3,40% — для II. РПЭ свидетельствовало о сильном взаимодействии $N=C=S$ и $C-N$ колебаний.

Н. Л. Арюткина

SH_2CH_3^+

1984

Magnusson Eric.

2000mp,
pacem.

J. Comput. Chem.,
1984, 5, N 6, 612-628.

(Cer. PH₃ ; III)

DaCS

[om. 21966]

1984

Natarajan A., Rajalakshmi R.,

Indian J. Phys., 1984,

B58, N4-5, 439-445.

констан-
таны,
кул. лосм.,
м.п.,
среще
аіені-
келі-
т. ор

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

1984

3 Б1190. Вибронный анализ ридберговских и низших валентных переходов тиацетона. Vibronic analyses of the Rydberg and lower intravalence electronic transitions in thioacetone. Paone S., Moule D. C., Bruno A. E., Steer R. P. «J Mol Spectrosc.», 1984, 107, № 1, 1—11 (англ.)

Изучены спектры поглощения (область 190—700 нм) и возбуждения флуоресценции (в области перехода $\bar{a} \leftarrow x \sim 530\text{—}590$ нм) паров тиацетона $(\text{CH}_3)_2 \text{CS}$ (I). Произведено отнесение полос в спектрах к переходам $n \rightarrow \pi^*$, $A(^1A_2) \leftarrow X(^1A_1)$; $\bar{a}(^3A_2) \leftarrow x(^1A_1)$; $\pi \rightarrow \pi^* B(^1A_1) \leftarrow X(^1A_1)$; $n \rightarrow 4s$, $C(^1B_2) \leftarrow X(^1A_1)$; $n \rightarrow 4p_z$, $D(^1B_2) \leftarrow X(^1A_1)$ и $n \rightarrow 4p_y$, $E(^1A_1) \leftarrow X(^1A_1)$. Проведен вибронный анализ полос и определены частоты колебаний I в различных электронных состояниях. Выделены полосы, относящиеся к крут. кол. метильных групп ($\sim 117 \text{ см}^{-1}$) и их обертонам. Анализ вибронной структуры полос показал, что молекулы I в состояниях $\bar{a}$,

спектр
поглощен

Х. 1985, 19, № 3.

А и С являются плоскими или псевдоплоскими (отклонения от плоскости невелики). При переходе из состояния X в состояние $\tilde{a}$ происходит поворот групп CH_3 на $\sim 60^\circ$ С, в состоянии же С ориентация метильных групп не изменяется. При возбуждении происходит увеличение угла ССС и понижение частоты вал. кол. связи $\text{C}=\text{S}$.

А. В. Бобров

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

1984
3 Л242. Вибронный анализ ридберговских и нижних внутривалентных электронных переходов в тиацетоне. Vibronic analyses of the Rydberg and lower intravalence electronic transitions in thioacetone. Рао - ne S., Moule D. C., Bruno A. E., Steer R. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 1, 1—11 (англ.)

В области 700—190 нм исследован спектр поглощения тиацетона $(\text{CH}_3)_2\text{CS}$. Идентифицированы разрешенные и ~~запрещенные по спину~~ переходы $n \rightarrow \pi^*$ $\tilde{A}(^1A_1) \leftarrow \tilde{X}(^1A_1)$ и $\tilde{a}(^3A_2) \leftarrow \tilde{X}(^1A_1)$; орбитально разрешенный переход $n \rightarrow \pi^*$, $\tilde{B}(^1A_1) \leftarrow \tilde{X}(^1A_1)$; переходы $n \rightarrow 4S$, $\tilde{C}(^1B_2) \leftarrow \tilde{X}(^1A_1)$, $n \rightarrow 4p_z$, $\tilde{D}(^1B_2) \leftarrow \tilde{X}(^1A_1)$ и $n \rightarrow 4p_y$, $\tilde{E}(^1A_1) \leftarrow \tilde{X}(^1A_1)$. Для всех возбужденных электронных состояний проведена частичная идентификация колебательных частот. Установлено, что состояния $\tilde{a}$, $\tilde{A}$ и $\tilde{C}$ тиацетона являются плоскими или псевдоплоскими. Группы CH_3 повернуты в состоянии $\tilde{a}$ на 60° по сравнению с их положением в состоянии $\tilde{X}$; в состоянии $\tilde{C}$ метильные группы не изменяют своей конфигурации.

Е. Н. Викторова

спектр,

М. П.

ф. 1985, 18, № 3

$(CH_3)_2S$
 $(CH_3)_2SO$

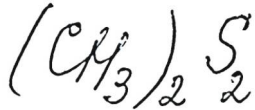
1984

4 Д114. Теоретические и экспериментальные потенциалы ионизации $(CH_3)_2S$ и $(CH_3)_2SO$. Эффекты замещения R на ЭСХА-сдвиги серы в ряду R_2S , R_2SO , R_2SO_2 . Theoretical and experimental ionization potentials of $(CH_3)_2S$ and $(CH_3)_2SO$. The effect of substituents R on the sulphur ESCA shifts in the series R_2S , R_2SO , R_2SO_2 . Theodorakopoulos G., Petsalakis I. D., Robb M. A., Csizmadia I. G. «J. Mol. Struct.», 1984, 110, № 3—4, Suppl.: «Theochem.», 19, № 3—4, 381—387 (англ.)

Теоретически и экспериментально определены ионизационные потенциалы для электронов внутренних оболочек в молекулах $(CH_3)_2S$ и $(CH_3)_2SO$. Приводятся основные сведения об эксперименте и методе расчета. Из полученных результатов в совокупности с другими данными сделан вывод, что при метильном замещении R в ряду молекул R_2S , R_2SO и R_2SO_2 ионизационные потенциалы $2P$ серы меняются мало, а при фенильном замещении — меняются значительно, что объяснено смещением электронной плотности от фенильной группы к сере.

В. А. Морозов

ф. 1985, 18, №4

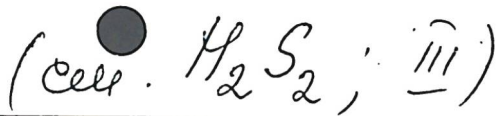


1984.

Rauk Arvi.

сверхкрит.,
но не пер.,
то;

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N22, 6517-
- 6524.



CD₃S

1984

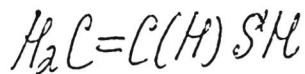
Suzuki Makoto,
Inoue Gen, et al.

Vi, u.n.

J. Chem. Phys., 1984,
81, N12, Pt 1, 5405-
-5412.

(see CH₃S; III)

1985



21 Б1079. Внутреннее вращение и релаксация остова этентиола. Internal rotation and framework relaxation in ethene thiol. Almond V., Permanand R. R., Macdonald J. N. «J. Mol. Struct.», 1985, 128, № 4, 337—352 (англ.)

На основе данных МВ-спектроскопии получены параметры Пт ф-ции вида $V(\alpha) = \sum (V_n/2)(1 - \cos n\alpha)$ для торс. кол. относит. связи C—S в этентиоле $\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{H})\text{SH}$ (I). Приведены вращат. частоты моно- и ди-дейтериров. производных, дипольные моменты, рассчитанные для основного и возбужденных состояний син-I и анти-I. Основным изомером найден син-I, к-рый стабильнее анти-I на ~ 50 см⁻¹. Две почти плоские анти-конформации с торсионными углами $\sim 0,87\pi$ и $1,13\pi$ разделены барьером ~ 12 см⁻¹. Барьер перехода син→анти равен ~ 800 см⁻¹, при этом угол CCS уменьшается от 126,9 до 122,6°, а длина связи C—S увеличивается от 0,1761 нм до 0,1777 нм. Минимальное значение угла CCS и максимальное значение длины связи C—S достигаются при торсионном угле, несколько большем 90°.

В. Болотин

геометр., смр.,
м.п.

Х. 1985, 19, № 21

HCS

1985

8 Л198. Спектр испускания радикала HCCS. Emission spectrum of the HCCS radical. Coquart Bernard. «Can. J. Phys.», 1985, 63, № 10, 1362—1371 (англ.; рез. фр.)

Изучены эмиссионные полосы в области 3900—4500 Å, возбуждаемые РЧ-разрядом в тиофене, и отнесенные к излучению радикала HCCS. Выполнен анализ вращательной структуры для сильных полос, связанных с переходами $^2\Pi_i - ^2\Pi_i$, в которых оба состояния относятся к случаю *a* по Гунду. М. А.

М. А.

ср. 1986, 18, № 8

HCCS

1985

104: 42297y Emission spectrum of the ethynylthio (HCCS) radical. Coquart, Bernard (Fac. Sci., 51062 Reims, Fr.). *Can. J. Phys.* 1985, 63(10), 1362-71 (Eng). Emission bands obtained in the region 3900-4500 Å by radio-frequency discharge in thiophene were studied; they are assigned to the HCCS transient species whose absorption spectrum was recently obsd. A rotational anal. was carried out for the strong bands, which are assigned to a $^2\Pi_1 - ^2\Pi_1$ transition in which both states are close to Hund's case (a). Vibrational assignments are discussed.

Электрон-
спектр
и анализ.
 $^2\Pi_1 - ^2\Pi_1$

С.А. 1986, 104, № 6

CH_3SSH

Im. 22073

1985

CH_3SSCH_3

Ha Tae-Kye,

исполнял.
сформулировал,
ab initio
расчет

J. Mol. Struct., 1985,
122, N 3-4, 225-234.

C_2H_4SH

1985

Hoř Tova, Sprecher
Milon, et al.

открык-
мюра

J. Phys. Chem., 1985,
89, N 9, 1664-1670.

(cur. C_2H_4Cl ; III)

CH₂CS

1985

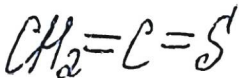
.) 8 Л168. Исследование спектра ИК-поглощения тиокетона $\text{CH}_2=\text{C}=\text{S}$ с помощью фурье-спектрометра. Fourier transform infrared spectrum of thioketene, $\text{CH}_2=\text{C}=\text{S}$. Kroto H. W., McNaughton D. «J. Mol. Spectrosc.», 1935, 114, № 2, 473—482 (англ.)

(Di) С помощью фурье-спектрометра исследованы спектры ИК-поглощения в области $800\text{—}3500\text{ см}^{-1}$ молекул тиокетона $\text{CH}_2=\text{C}=\text{S}$. Молекулы тиокетона нестабильны, поэтому их спектры регистрировались непосредственно в момент образования при пиролитич. реакции в газовой фазе. Анализ спектров позволил определить частоты шести основных колебаний. С высоким разрешением ($0,01\text{ см}^{-1}$) исследована также вращательная структура полос ν_7 и $\nu_3+\nu_8$. На основании этих измерений определены вращательные постоянные молекул тиокетона в основном и возбужденных колебат. состояниях. Библ. 29. К. Э. М.

ср. 1986, 18, № 8

Om. 23213

1985



Kroto H. W., McNaughton D.,

1st crackmp,


J. Mol. Spectrosc., 1985,
114, N2, 473-482.

[Om. 21780]

1985



FCH=CHSH Plant C., Mac Donald J. et al.,

ab initio
pacem
nomerels.
p-ucc
Brymp.
p. alper.

J. Mol. Struct., 1985,
128, 353-363.

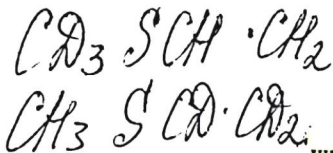
$[C_2H_3S]^+$ (Om. 22972) 1985

8 Б1103. Структура $[C_2H_3S]^+$. The structure of $[C_2H_3S]^+$. Rodriguez G. F., Hopkinson A. C. «Org. Mass Spectrom.», 1985, 20, № 11, 691 (англ.)

Рассчитаны относит. энергии 8 структур, предложенных для иона $[C_2H_3S]^+$ (I). Для I, независимо от его происхождения, энергетически наиболее выгодны структуры $CH_3\overset{+}{C}=S$, $H_2C=C=\overset{+}{S}H$, $\overset{+}{H}C=\overset{+}{C}HS$ и $\overset{+}{H}C=\overset{+}{S}CH_2$. Структура $CH_3\overset{+}{C}=S$ не согласуется с механизмом фрагментации I, в ходе которой практически не происходит потеря CH_3 . Удовлетворит. структура переходного состояния между двумя циклич. формами I не установлена. А. А. Кирюшкин

структура

х. 1986, 19, № 8



ДМ. 21783

1985

11 Л170. Расчет колебательных спектров метилвинилсульфида и его дейтерозамещенных. Сурушкин А. Н., Фролов Ю. Л., Тутурин В. В., Синеговская Л. М., Гусарова Н. К., Васильцов А. М., Калистратова Е. Ф. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1985, № 8, 1780—1784

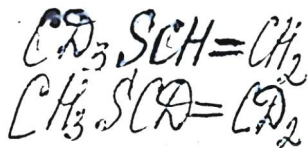
Получены ИК-спектры поглощения и комбинационного рассеяния $\text{CD}_3\text{SCH} \cdot \text{CH}_2$ и $\text{CH}_3\text{S CD} \cdot \text{CD}_2$. Выполнены расчеты норм. колебаний и уточнено отнесение полос. Получено удовлетворительное согласие рассчитанных и эксперим. частот при использовании силовых постоянных этилена и метана для соответствующих фрагментов молекулы метилвинилсульфида. Автореферат

ν_i , см⁻¹. пост.

ср. 1985, 18, № 11

DM. 21 733

1985



22 Б1237. Расчет колебательных спектров метилвинилсульфида и его дейтерозамещенных. Сурушкин А. Н., Фролов Ю. Л., Тутурин В. В., Синеговская Л. М., Гусарова П. К., Васильцов А. М., Калистратова Е. Ф. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1985, 1780—1784

Получены спектры ИК-поглощения и КР-метилвинилсульфида и его дейтерозамещенных. Предложена методика синтеза соединений $\text{CD}_3\text{SCH}=\text{CH}_2$ и $\text{CH}_3\text{SCD}=\text{CD}_2$. Для этих молекул выполнены расчеты нормальных колебаний и уточнено отнесение полос. Получено удовлетворит. согласие рассчитанных и эксперим. частот при использовании силовых постоянных C_2H_4 и CH_4 для соотв. фрагментов молекулы метилвинилсульфида. Установлено, что основные отличия колебат. спектров метилвинилового эфира и метилвинилсульфида обусловлены разницей масс атомов О и S и различием геометрич. параметров фрагментов $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ и $\text{C}-\text{S}-\text{C}$. Проведен анализ спектроскопич. проявлений поворотной изомерии метилвинилсульфида. Расчет показал, что значения частот менее стабильного конформера согласуются с величиной торсионного угла около 135° .

Автореферат

спектры

ИК-поглощен.
и КР.

Di, CCCC-PCCH

X. 1985, 19, N 22

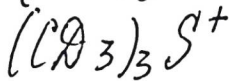
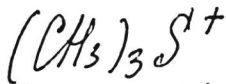
HSCS⁺ (Dm. 22381)

1985

Taylor P. R., Scarlett M.

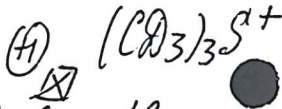
бразиль.
схем,
тектон.
сфруктура,
ab initio
paerim.

Astrophys. J., 1985;
293, N1, Pt 2, 49-51.



1986

106: 92734a Vibrational spectrum of tri(methyl-d₃)sulfonium iodide and normal coordinate calculations for trimethylsulfonium and tri(methyl-d₃)sulfonium cations. Aida, Koyo; Kusaka, Shin; Ueda, Takashi; Shibuya, Hisashi; Imai, Yoshika (Fac. Eng., Tohoku Univ., Sendai, Japan 980). *Polyhedron* 1986, 5(12), 1953-6 (Eng). The IR (30-4000 cm⁻¹) and Raman (0-4000 cm⁻¹) spectra of [(CD₃)₃S]I were obsd., together with those of (Me₃S)I. By assuming a C_{3v} mol. symmetry for Me₃S⁺ and [(CD₃)₃S]⁺, all the active fundamentals of [(CD₃)₃S]⁺ were assigned, and normal coordinate calcs. were carried out by a symmetry force field for Me₃S⁺ and [(CD₃)₃S]⁺. The strength of the S-C and C-H bonds in the compd. was compared with that in Me₂S by using their valence stretching force consts.

C.A. 1987, 106, N12

$S(CH_2)_5$

1986

20 Б1234. Постоянные центробежного искажения для молекулы тиана. The centrifugal distortion constants for the molecule of thiane. Fantoni A. C., Gómez C. H., Filgueira R. R., Sorarrain O. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 168—172. (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

В диапазоне 8—18 ГГц исследован МВ-спектр циклич. молекулы $S(CH_2)_5$. Идентифицированы линии 35 вращат. переходов с $J \leq 41$ основного колебат. состояния. Анализ спектра выполнен совместно с лит. данными для диапазона 26,5—40 ГГц. Определены значения вращат. и кватичных центробежных постоянных.

Е. В. Алнева

М.П.

X. 1986, 19, N 20

C₅H₁₀S

1986

11 Л170. Константы центробежного искажения молекул тиана. The centrifugal distortion constants for the molecule of thiane. Fantoni A. C., Gómez C. H., Sogarrain O. M., Filgueira R. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 168—172 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР.

Исследованы спектры микроволн. поглощения в области 8—18 ГГц молекул тиана C₅H₁₀S (замещенный аналог циклогексана). В спектрах поглощения обнаружено 35 новых вращательных линий, отнесенных к переходам из состояний с квантовым числом J до 41. На основании полученных данных проведено уточнение констант центробежного искажения молекул тиана. Полученные значения сопоставлены с аналогичными постоянными для изоструктурных молекул тиоморфолина и морфолина. Отмечена тенденция уменьшения постоянных центробежного искажения при увеличении полной массы молекулы.

К. Э. М.

(м.п.)

ф. 1986, 18, № 11.

CCSH
CCSD

1986

4 Б4337. Спектры поглощения радикалов CCSH и CCSD. Absorption spectra of CCSH and CCSD radicals. Krishnamachari S. L. N. G., Venkatasubramanian R. «Indian J. Phys.», 1986, В 60, № 1, 37—44 (англ.)

При импульсном Фт 1 Торр тиафена или тиазола в присутствии 100 Торр Аг при времени задержки 5 мкс наблюдали короткоживущие спектры поглощения в обл. длин волн 3300—3800 А. Опыты с дейтерированными соединениями показали, что носители этих спектров содержат по одному атому водорода. Проведен полный колебат. анализ спектральных полос. При высоком разрешении регистрируемых спектров наблюдали сложную ~~вращат.~~ структуру, характерную для оптич. переходов в молекулах с высокой симметрией. На основе этих данных носители спектров идентифицированы как свободные радикалы CCSH и CCSD, а не CCHS и CCDS. Определены наборы из восьми вращат. констант для обеих частиц.

В. Е. Скурат

И.И.

Х. 1987, 19, № 4.

CCSH
CCSD

Om. 24860

1986

104:176931j Absorption spectra of CCSH and CCSD radicals. Vishnamachari, S. L. N. G.; Venkatasubramanian, R. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *Indian J. Phys., B* 1986, 60B(1), 37-44 (Eng). A group of transient absorption bands are obsd. at 3300-3800 Å in the flash-photolysis of thiophene and thiazole. Spectra obtained with the corresponding deuterated compds. showed the presence of 1 H atom in the carrier and enabled the vibrational anal. of these bands. Spectra recorded under high resolu. showed a complex rotational structure, which is characteristic of a transition of a mol. with a large asymmetry. The carrier of these bands is identified as a new radical, viz. the CCSH radical.

(M. Chakraborty
no longer)

C.A. 1986, 104, N20