

Ca SHp

Ca SDp

BP - 1555-II 9032

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 ...

10 C₂H₆

C.A., 1942, 336⁴

ЕСТЬ Ф. Н. 92

4315

1948

C_2H_5OH , C_2H_5SH (non-cryst.)

Ronault M., Gallagher G.

Phys. Rev., 1948, 75, 1319

Electron diffraction by gas ...

C_2SH_6

B9-5485-III

8671

1950

$H_2S, CH_3SH, H_2Se, H_2Te, H_2Po, HF(I),$
 $CH_3SH, (CH_3)_2S \quad (i)$

Price W.C., Teegan J.P., Walsh A.D.

Proc. Roy. Soc. (London), 1950, 20IA, 600-9

Far-ultraviolet absorption spectra of the
hydrides and deuterides of sulfur, selenium,
and tellurium and of the methyl derivatives
of hydrogen sulfide.

Ch.A., 195I, 446c

10

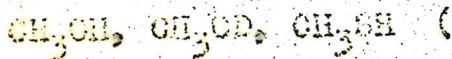
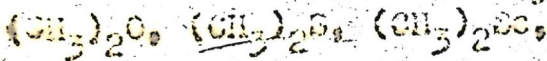


C_2SH_6

but sp. r.

1952

4318



Siebert H.

Z. anorg. u. allg. Chem. 1952; 271, 62

75

The force constants for ...

C₂S-116

$(CH_3)_2S$ (Vi)

5009

1957

Хаяси

Hayasi

J. Chem. Soc. Japan, Pure Chem. Sec., 1957,
78, n1, 101-103 (англ.)

Строение молекул диметилсульфида.

2

Рис. 1, 1958, n 8, 238-6

10

1964

(CH₂)₂S
м.в.

(24Б207. Микроволновый спектрограф с обратной волной в качестве источника радиации. Микроволновый спектр, структура и заторможенное внутреннее вращение в диметилсульфиде. Dreizler H., Maier W., Rudolph H. D. A microwave spectrograph with backwardwave oscillators as radiation sources. Microwave spectrum, structure and hindered internal rotation of dimethyl sulfide. «Arch. sci.», 1960, 13, Fasc. spéc., 137 (англ.).—Штарковский спектрограф с обратной волной в качестве источника излучения позволяет вести измерения в диапазоне 8—37,5 кМгц. В этой области исследован спектр (CH₂)₂S. Идентифицировано 29 линий из большого числа наблюдаемых, в частности линии с $J \leq 2$. Определена структура молекулы; по расщеплению линий найден барьер внутреннего вращения $V_3 = 2090$ кал/моль. Т. Бирштейн

2.1961.24.

1960

4346

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ (сил.пост.,)

Mirone P., Chiorboli P.

Ann. chimica, 1960, 50, N 8-9
1095-1107

Приближенный метод расчета ...

J

C_2SH_6

$(\text{CH}_3)_2\text{S}$ (раствор в CH_2Cl_2)

5008

1960

Оболенцев Р.Д., Котлов Ю.И., Усолов Е.Н.

Химия сера- и азотсодержащих соединений, содержащихся в нефти и нефтепродуктах, т.3, Уфа, 1960, лос. 114.

О колебательных спектрах сульфидов.

Рис. 1, 1951, 18634

10

2

(CH₃)₂S

8Б129. Микроволновый спектр, структура и тормозящий потенциал диметилсульфида. Rudolph H. D., Dreizler H., Maier W. Mikrowellenspektrum, Struktur und Hinderungspotential des Dimethylsulfids. «Z. Naturforsch.», 1960, 15a, № 8, 742 (нем.).—С помощью спектрометра со штарковской модуляцией в диапазоне 12—36 кМгц исследован спектр (CH₃)₂S. Произведено отнесение частот семи линий. Для перехода $2_{12} \rightarrow 2_{21}$ (36274,51 Мгц) разрешенная обусловленная внутренним вращением тонкая структура, в других случаях она проявлялась в виде крыльев. Найдено (в Мгц): А 17809,39; В 7621,00; С 5717,80; κ —0,6852. Полагая углы в метильных группах тетраэдрическими, авторы находят $\angle \text{CSC } 98^{\circ}58' \pm 0,3^{\circ}$; $d(\text{CS}) 1,809 \pm 0,005 \text{ \AA}$; $d(\text{CH}) 1,083 \pm 0,01 \text{ \AA}$; барьеры внутреннего вращения вокруг связей С—S $V = 2,09 \pm 0,1 \text{ ккал/моль}$.

Т. Бирштейн

1960

$(CH_3)_2S$

Microwave spectrum, structure, and hindrance potential of $(CH_3)_2S$. H. D. Rudolf, H. Dreizler, and W. Maier (Univ. Freiburg/Br., Ger.). *Z. Naturforsch.* 15a, 742 (1960).—The following frequencies of the absorption lines of $(C^{12}H_3)_2S^{32}$ were observed up to a frequency of 37,000 Mc. $1_{01} \rightarrow 1_{10}$ 12091.98; $2_{02} \rightarrow 2_{11}$ 14237.88; $1_{11} \rightarrow 2_{02}$ 16246.26; $0_{00} \rightarrow 1_{11}$ 23527.52; $2_{11} \rightarrow 2_{20}$ 30807.32; $1_{01} \rightarrow 2_{12}$ 34963.20, and $2_{12} \rightarrow 2_{21}$ 36274.51 Mc. The rotation consts. are $A = 17809.39$, $B = 7621.00$, and $C = 5717.80$ Mc. The asymmetry parameter $\gamma = -0.6852$. The Me groups are sym. and $\angle HCH$ is the tetrahedral angle. The symmetry axis of the CH_3 group is coaxial to the SC bond. The hindrance potential was calcd. $V = 2.09 \pm 0.1$ kcal./mole.
F. Schossberger

C.A. 1961:1:1134

(CH₃)₂S

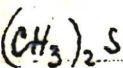
мв

1961
2 В213. Микроволновый спектр, дипольный момент и внутреннее вращение молекулы диметилсульфида. Pierce Louis, Hayashi Michiro. Microwave spectrum, dipole moment, structure, and internal rotation of dimethyl sulfide. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 2, 479—485 (англ.)

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией в области 10—25 кМгц измерены микроволн. спектры пяти изотопич. комбинаций молекулы диметилсульфида. Измерены вращательные константы и параметры молекулярной структуры: $CS = 1,082 \text{ \AA}$, $\angle CSC = 98^\circ 53'$, $CH = 1,901 \text{ \AA}$, $\angle HCH = 109^\circ 34'$, $2 \Theta = 104^\circ 22'$, где Θ — угол между осями симметрии метильных групп. Из штарк-эффекта определен дипольный момент, который оказался равным $1,50 \pm 0,01$ ед. Дебая. Проанализирована тонкая структура линий спектра, соответствующих основному вращательному состоянию молекулы $(CH_3)_2S$ и возбужденному скручивающему состоянию молекулы CH_3SCD_3 . Барьер внутреннего вращения для молекул $(CH_3)_2S$ и CH_3SCD_3 равен 2132 ± 6 и 2118 ± 3 кал/моль соответственно.

5005-1V

ф. 1962. 213



Wilhelm Maier

1961,

Angew Chem 1961 73, 3, 120
Исследование структуры и внутренней
порядковости молекулы метил-
сульфидомикроволновой спектроскопией.

Тетраэдр

расстояния

$$\text{S} - \text{C} = 1,809 \pm 0,005 \text{ \AA}$$

$$\text{C} - \text{H} = 1,083 \pm 0,01 \text{ \AA}$$

углы

$$\text{CSC} = 98^\circ 58' \pm 20'$$

углы HCS

приближенно тетраэдр.

$$V_1 = 2,09 \pm 0,1 \text{ ккал/мол.}$$

$(CH_3)_2S$
 V_0

8 Д217. Тонкая структура термов крутильных колебаний в спектре вращения диметилсульфида и потенциал торможения внутреннего вращения. Dreizler Helmut, Rudolph Heinz Dieter. Torsionsfeinstruktur im Rotationsspektrum des Dimethylsulfids und internes Hinderungspotential. «Z. Naturforsch.», 1962, 17a, № 9, 712—732 (нем.; рез. англ.)

В диапазоне $12 \cdot 10^3$ — $63 \cdot 10^3$ Мгц измерены микроволновые спектры трех изотопов диметилсульфида: $(CH_3)_2S^{32}$, $(CH_3)_2S^{34}$ и $C^{13}H_3SCH_3$ (в природной смеси изотопов). Найдено, что все линии норм. изотопа $(CH_3)_2S^{32}$ и большинство линий двух других (редких) изотопов представляют собой триплеты или квартеты. Мультиплетная структура уровней является следствием взаимодействия между заторможенным внутренним вращением CH_3 -групп и вращением всей молекулы. По теории возмущений до 4-го порядка включительно, с применением метода Ван Флека для преобразования матриц, рассчитано мультиплетное расщепление термов основного состояния крутильных колебаний. Получено совпадение с эксперим. данными для 54 переходов (вплоть до $J=12$) в $(CH_3)_2S^{32}$. Средняя ширина мультиплета равна 1,5 Мгц, погрешность ~ 12 кгц. Показано,

Д. 0295-4610-11
899-4610-11

ф. 1963. 89

см. метод.

что для больших J вклад в общее распределение от 4-го порядка теории возмущений составляет до 30%. В случае изотопа S^{34} также получено хорошее согласие с экспериментом. Определены константы вращения и проведен структурный анализ. Получены следующие значения: длина связи $C-S=1,802\pm0,002$ Å, $\angle CSC=98^{\circ}52'\pm10'$, ось симметрии CH_3 отклонена от направления связи $C-S$ на $2^{\circ}10'\pm8'$. Е. Пшеничнов



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

См. 1963. 22

22 Б152. Тонкая структура вращательного спектра диметилсульфида, обусловленная внутренним вращением, и величина барьера внутреннего вращения. Dreizler Helmut, Rudolph Heinz Dieter. Torsionsfeinstruktur im Rotationsspektrum des Dimethylsulfids und internes Hinderungspotential. «Z. Naturforsch.», 1962, 17a, № 9, 712—732 (нем.; рез. англ.)

Изучены микроволновые спектры трех изотопов диметилсульфида — $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{32}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{34}$ и $\text{C}^{13}\text{H}_3\text{SCH}_3$ — в области от 12000 до 63000 Mc . Линии вращательной структуры для всех трех молекул расщепляются на триплеты или квартеты вследствие взаимодействия вращения молекулы как целого и внутреннего вращения метильных групп относительно связей $\text{C}-\text{S}$. Получены точные ф-лы, описывающие мультиплетное расщепление вращательных линий в четвертом порядке теории возмущений для частного случая молекул с двумя вращающимися группами CH_3 . Рассчитанная ширина мультиплетных линий для 54 вращательных переходов основного изотопа очень хорошо согласуется с наблюдавшейся на опыте, хорошо согласуется

1962

ВФ - 7610-IV

х. 1963. 22

см. 1963

также ширина линий 10 разрешенных вращательных переходов молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{34}$. Из сопоставления с опытом определены параметры, входящие в расчетные ф-лы: величина барьера внутреннего вращения относительно связи $\text{C}-\text{S}$ V_3 и угол ϑ между осью симметрии метильной группы и главной осью симметрии молекулы. Параметры определены для двух значений момента инерции метильной группы I_a : $I_a = 3,204$ ат. ед. массы $\text{\AA}^2$ (вычислен по структурным параметрам) $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{32}$: $V_3 = 741,9 \text{ см}^{-1}$, $\vartheta = 38^\circ 22,8'$; $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{34}$: $V_3 = 742,1 \text{ см}^{-1}$, $\vartheta = 38^\circ 24,7'$; $I_a = 3,0985$ ат. ед. массы $\text{\AA}^2$ (дает наилучшее совпадение с опытом) $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{32}$: $V_3 = 760,9 \text{ см}^{-1}$, $\vartheta = 38^\circ 24,5'$; $(\text{CH}_3)_2\text{S}^{34}$: $V_3 = 760,8 \text{ см}^{-1}$, $\vartheta = 38^\circ 23,2'$. Определенное из опыта значение I_a несколько отличается от вычисленного по структурным параметрам. Отчасти это можно объяснить некоторым искажением структуры метильной группы вследствие того, что ось внутреннего вращения не совсем перпендикулярна к плоскости, в которой лежат три атома водорода.

И. Милевская

1962

M 1090

Vi, U. $(\text{CH}_3)\text{SiH}_2$, $(\text{CH}_3)_3\text{SiH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$,
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, $(\text{CH}_3)_3\text{N}$

Fateley W.G., Miller F.A.,

Spectrochim. acta, 1962, 18, N 7, 977-993
 Torsional frequencies in the far
 infrared. II. Molecules with two or three
 methyl rotors

PX., 1966, 175172

J

 $\text{C}_2\text{H}_6\text{S}$

F

5003 - IV - 139

1962

CH₃SCH₃, C₂H₅SCH₃ (Do), HSC₂H₅ (Do)

Mackle H., Mayrick R.G.

Trans. Faraday Soc., 1962, 58, No 1, 33-9

Studies in the ...

M, J

C₂SH₆

1962

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

20 Б69. Теория крутильных колебаний молекул типа $(\text{CH}_3)_2\text{X}$. Möller K. D., Andresen H. G. Theory of torsion vibrations of $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ -type molecules. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 8, 1800—1807 (англ.)

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

БФ-8450-

Оператор энергии молекулы с двумя волчками представлен в виде суммы операторов своих волчков и оператора их взаимодействия, являющегося оператором возмущения. Операции симметрии, относительно которых полный оператор энергии инвариантен, образуют группы из 36 и 48 элементов, если вся молекула принадлежит соответственно к группам C_{2v} или C_s . Ур-ние Шредингера с невозмущенным оператором имеет вид ур-ния Матье. Из его решений составлены правильные линейные комбинации, с которыми вычислены элементы матрицы оператора возмущения. Эта матрица распадается на субматрицы, соответствующие значениям сумм колебательных квантовых чисел обоих волчков, равным 0, 1 и 2. Простые ф-лы для значений энергии получаются в случае достаточно высоких потенциальных барьеров внутреннего вращения. Уровни энергии классифицированы по непрерывным представлениям групп симметрии. На основании этой клас-

Ж. 1963. 20

сис. м.р.об

сификации выведены правила отбора для переходов между уровнями. Дана диаграмма уровней энергии и переходов между ними. Численные значения параметров, входящих в ф-лы для энергии, определены из спектра $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. Высота барьера равна 739 см^{-1} . Дано схематич. представление спектра крутильных колебаний этой молекулы. М. Ковнер



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

М. В. Смирнов

№ 14 Б179. Центробежные поправки во вращательном спектре молекул с внутренним вращением, исследованном на $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. Rudolph Heinz Dieter. Die Zentrifugalkorrektur im Rotationsspektrum eines Moleküls mit interner Rotation, untersucht am $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. «Z. Naturforsch.», 1962, 17a, № 4, 288—297 (нем.; рез. англ.)

На приборе с высоким разрешением в области 12 000—63 000 Mгц измерены частоты 55 переходов вращательного спектра молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, представляющих собой триплеты или квартеты линий. Определены положения центров тяжести мультиплетов и величины коэф. поправочных членов в ф-ле для вращательной энергии асимметричного волчка по сравнению с энергией жесткого волчка по методу наименьших квадратов на электронной вычислительной машине. Измеренные значения совпадают с вычисленными с точностью 15 кгц . Средняя величина центробежных поправок составляет $\sim 15 \text{ Mгц}$, средняя ширина мультиплетов 1,5 Mгц . Найдены также положения центров тяжести мультиплетов двух переходов со значением вращательного квантового числа больше 12, хотя величины центробежных поправок для них велики (87 и 126 Mгц), с найденными ранее параметрами дает значения частот центров тяжести мультиплетов с удовлетворительной точностью. Р. Ф.

1962

9843-14

Ж. 1964.14

(CH3)2S
(No. Gausar. nos.)

IV-76 10 a 1265

Dreizler H., Schirdehahn H.-G., Starck B.

Z. naturforsch., 1963, 18a, 55, 670-671 (nem.)

numerische Werte einiger Störsummen zur
Analyse der Torsionskonstruktion von
Rotationspektren.

ЕСТЬ ОРИГИН.

10
Mg 9/11, 1264, 50139 + 2

1963

3-определения

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

3 Б57. Исследования некоторых сульфидов и дисульфидов методом электронного удара. Gowenlock B. G., Kay J., Majer J. R. Electron impact studies of some sulphides and disulphides. «Trans. Faraday Soc.», 1963, 59, № 11, 2463—2468 (англ.)

На масс-спектрометре измерены потенциалы ионизации (ПИ) ряда сульфидов и дисульфидов и потенциалы появления осколочных ионов. В $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ обнаружены процессы образования осколочных ионов путем перегруппировки (ионы SH_3^+ , C_2H_3^+). Сравнение масс-спектров CH_3SCH_3 и CH_3SCD_3 показало, что водород мигрирует к атому S одновременно от обоих атомов C. Получены следующие значения ПИ (в эв): $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ 9,0, CH_3SCD_3 8,7, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{S}$ 8,6, $(\text{C}_3\text{H}_7)_2\text{S}$ 8,95, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SCH}_3$ 8,9, $\text{C}_6\text{H}_5\text{SC}_2\text{H}_5$ 8,8, $(\text{CH}_3\text{S})_2$ 9,05, $(\text{C}_2\text{H}_5\text{S})_2$ 8,85. Обсуждены механизмы диссоциации мол. ионов и возможности оценки энергий диссоциации в исследованных молекулах. Е. Франкевич

44-11-68
39-11-964

20.1965.3

1963

C-S-H-coeg. $(C_2H_5)_2S$ $(C_2H_5)_2S_2$ $(CH_3)_2S_2$ $(CH_3)_2S$ (A.P.) ^{ugp.}

Electron impact studies of some sulfides and some disulfides. B. G. Gowenlock, J. Kay, and J. R. Majer (Univ. Birmingham, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 59(491), 2463-8(1963). A Metropolitan Vickers M.S.2 mass spectrometer enabled study of appearance potentials of a series of org. S compds. Comparison of dimethyl sulfide-1,1,1- d_3 (prepd. from CD_3I and Na_2S) with Me_2S showed that the most favored process for SH_3^+ formation involved the migration of H atoms from both carbon atoms. It is concluded that processes following ionization of aliphatic thio-ethers by electron impact are complex. The frequency of rupture of the C-D bond is one half that of the C-H bond and the S- CD_3 rupture rate is 12 times that of the S- CH_3 bond. The compds. studied were Et₂S, Pr₂S, MeSPh, EtSPh, Me₂S₂, Et₂S₂, and Me₂S. S. Goldwasser

B91-11-1647

C.A. 1964. 60. 4
3583 bc

7988

BP-5031-II

1963

H_2S_2 (J), C_2H_5SH (J), H_3S^+ (CH_3),

H_2S (A), CH_5S^+ (CH_3), CH_3SH (A)

Hobrock E.C., Kiser R.W.

J. Phys. Chem., 1963, 67, K 3;
648-650 (Ann.)

Electron impact investigations of
sulfur compounds. II. 3-methyl-2,2-
thiabutane, 4-thia-1-pentene, and
3,4-dithiahexane

PX., 1964, 7B 85

C₂SH₆

Есть оригинал

М.Ю

1963

BP-7987 - IV

C₂H₆S, CH₃SSSCH₃ (I), C₂H₅SH, CH₂S₂H(J)

Hobrock B.G., Kiser R.W.

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

Electron impact ...

C₂SH₆

J

1963

9748 SH; SCH₃; SC₂H₅; SO₂CH₃; CH₃-SH;
 CH₃SCH₃; CS; S₂; C₂H₅-SH; CH₃-S; C₂H₅-S;
~~OH~~ CH₃-SO₂; C₂H₅-SO₂ (Δ H_f, D₀)

Mackle H.

Tetrahedron, 1963, 19, N 7, 1159-70

The thermochemistry ...

M

C₂H₆S

1963

M 1242

M, P. $(CH_3)_2O$, $(CH_3)_2S$, $(CH_3)_2NH$,
 $(CH_3)_2ND$, CH_3OCD_3 , CH_3SCD_3)

Perchard J.-P.

These doct-ingr. Fac. sci. Univ. Paris, 1963,
Luisant-Chartres, 1965, 36p

Contribution a l'etude par spectroscopie
infrarouge de quelques molecules gem-
dimethyles $(CH_3)_2O$, $(CH_3)_2S$, $(CH_3)_2NH$,

PF., 1967, 1D231D

J

C2463

$(CH_3)_2S$ Jortley W. G., Matrubara 1964

Shuo, Witkowski R. E.

Spectrochim. Acta, 20, N 9, 1461-
1463.

Сильнейшая острая вращающаяся
линейная ИК-область спектра
при прохождении пара к
жидкости.

(или CH_3Se). II

1964

9670

$(\text{CH}_3)_2\text{S}$, CH_3SH , $(\text{CH}_3)_2\text{O}$,
 CH_3OH , CH_3NH_2 , CH_2NOH , $(\text{CH}_3)_2\text{CNOH}$
 (str., $\angle xyz$)

Hirshfeld F.L.

Israel J.Chem., 1964, 2, N 3,
 87-90

Structural ...

 $\text{C}_2\text{H}_6\text{S}$

J

(CH₃)₂S (А, В, С.
кач. пог.)

1964
М 140

Тоздеев Н. М., Тамиковская Л. Ч.

Насыбуллин Р. С., Звдокимов
Ч. М., Мисомиров Л. А.,

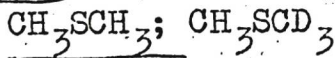
Илим. сер. орган. соедин., содер-
жащих в нефти и нефтепро-
дуктах, АН СССР, Башкирский
фронт, 1964, 7, 237-42

10

C₂H₆S

BP 9817 - IV

1964



(ν_i , ν_o)

Perchard J.P., Forel M.T.,
Josien M.L.

J.Chem.phys.et phys.-chim.biol.,
1964, 61, N 5, 645-651

Etude par spectroscopie ...

J

ЕСТЬ ОПТИКА

М 854-IV

1965

(CH₃)₂S

2 Д166. Результаты анализа центробежного растяжения во вращательных спектрах. II. Диметилсульфид. Dreizler H., Rudolph H. D. Erfahrungen bei der Analyse der Zentrifugalaufweitung in Rotationsspektren. II. Dimethylsulfid. «Z. Naturforsch.», 1965, 20a, № 5, 749—751 (нем.)

Предложенная в первой части (РЖФиз, 1965, 10Д207) вычислительная программа (варианты 1, 2 и 8) применена к анализу вращательного спектра диметилсульфида. С учетом центробежного растяжения из анализа 55 линий получены следующие значения молекулярных постоянных: $(A+C)/2 = (11\,763,694 \pm 0,227) \text{ Мгц}$, $(A - C)/2 = (6046,017 \pm 0,155) \text{ Мгц}$, $H = (-0,6815 \pm 0,00013)$.

ф. 1966. 27

Если же использовать приближение жесткого волчка, то с учетом 8 линий ($J \leq 2$) получены (менее точные) значения: $(A+C)/2 = 11.763,517$ МГц, $(A-C)/2 = 6045,759$ МГц, $H = -0,685189$. Отмечается, что опыт анализа вращательных спектров молекул приводит к выводу о необходимости тщательного учета всех погрешностей, связанных и с экспериментом, и с обработкой эксперим. данных. При этом хорошее согласие измеренного и вычисленного вращательного спектра, вообще говоря, не гарантирует точности расчета молекулярных постоянных.

Т. Ребане

$(CH_3)_2S$

Perchard J. - P. 1965

UK -
manuscript

These doct. - inorg. Fac. Sci.
Univ. Paris, 1963, Yvainant
Chartres, 1965, 36 p.

Исследование УК-спектров
некомплексных гетероциклических
соединений. III [см. $(CH_3)_2O$]

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

1966

V/24 B134. Спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния диметилсульфида, диметилселенида и диметилтеллурида. Allkins J. R., Hendra P. J. The infra-red and Raman spectra of dimethyl sulphide, selenide and telluride. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 12, 2075—2081 (англ.)

Исследованы ИК-спектры диметилсульфида (I), селенида (II), теллурида (III) в области $4000-250 \text{ см}^{-1}$ в газообразном и жидком состояниях. Изучены также спектры КР этих соединений. С учетом контуров допл. ИК-спектра газа и степени деполяризации линий спектра КР проведено эксперим. отнесение основных колебаний. Спектры КР исследованных соединений имеют сущест-

х. 1967. 24

19

венные различия в области вал. кол. СН связей: в спектре I имеется 5 линий, а в спектре II и III только 3 линии. Упрощение спектра объясняется тем, что в II и III метильные группы приобретают строение, близкое к тетраэдрическому. Идентифицированы сим. и антисим. вал. кол. C—X связей ($X=S, Se, Te$). Различие частот между ними падает в ряду I, II, III, причем в III сим. и антисим. кол. связи C—X совпадают по частоте. В ИК-спектре поглощения I в твердом состоянии (-180°) найдены полосы запрещенных колебаний класса A_2 ; ряд полос расщеплен.

Я. Кимельфельд

$(CH_3)_2S$

1986

9 Д248. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния диметилсульфида, селенида и теллурида. All-
kins J. R., Hendra P. J. The infra-red and Raman
spectra of dimethyl sulphide, selenide and telluride.
«Spectrochim. acta», 1966, 22, № 12, 2075—2081 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000-250\text{ см}^{-1}$), а также
спектры комб. рас. диметилсульфида (I), диметилселени-
да (II) и диметилтеллурида (III) в жидком и парооб-
разном состояниях. Дано отнесение колебаний. Приведе-
ны таблицы и спектры. Сделан вывод, что III, как и
предполагалось, имеет симметрию C_{2v} , т. е. такую же,
как I и II. Изучение спектров I и некоторых его коорди-
национных соединений позволило улучшить сделанное
ранее отнесение. Библ. 20. Э. К.

+ 2

09.1987. 92

8

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

1966

see in Raman
assignments

23957u The infrared and Raman spectra of dimethyl sulfide, selenide, and telluride. J. R. Allkins and P. J. Hendra (Sir John Cass Coll., London). *Spectrochim. Acta* 22(12), 2075-81 (1966)(Eng). The ir spectra of Me_2S , Me_2Se , and Me_2Te in the liquid and vapor phases and also the Raman spectra are reported. It has been possible to assign most of the observed bands to the fundamental modes of all 3 mols. The spectra of Me_2Te suggest that it has similar symmetry properties to its lighter analogs. From consideration of the ir spectra of solid Me_2S and some of its coordination compds., it has been possible to clarify some of the earlier assignments. 20 references. RCSQ

+ 2

C.A. 1967. 66.6

Ⓚ

1966

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

5 Д122. Анализ центробежного растяжения во вращательном спектре диметилсульфоксида и диметилсульфида по Ватсону. Dreizler H. Analyse der Zentrifugalaufweitung in den Rotationsspektren von Dimethylsulfoxid und Dimethylsulfid nach Watson. «Z. Naturforsch.», 1966, 21a, № 10, 1719—1720 (нем.)

По спектральным данным работ (РЖФиз, 1965, 10Д207; 1966, 2Д166) с использованием ф-лы для вращательной энергии неплоских молекул типа асимметричного волчка, предложенной недавно Ватсоном (РЖФиз, 1967, 1Д124), проведен анализ вращательных спектров молекул $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$. Отмечается, что использование ф-лы Ватсона при анализе этих молекул устраняет трудности, которые возникают, если пользоваться обычно применяемой при вращательном анализе ф-лой Кивельсона и Вильсона (Kivelson D., Wilson E. B. Jr., «J. Chem. Phys.», 1952, 20, 1575). Много внимания уделено оценке ошибок анализа и границ применимости использованных приближений.

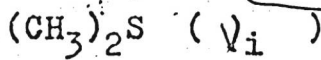
В. Морозов

ф. 1967. 58

X

(M 1434 - IV)

1966



Gerding H., Ypenburg J.W.

Recueil trav. chim., 1966, 85, N 6,
616-618

Someremarks on the vibrational
spectra of dimethyl sulfide and related
compoundes

J

F

PX., 1966, 23590

1966

1/6 Д283. Длинноволновые ИК-спектры диметилсульфида, изобутилена и ацетона, полученные на дифракционном вакуумном спектрометре в области 240—10 см^{-1} . Smith D. R., McKenna B. K., Möller K. D. Far-infrared spectra of dimethylsulfide, isobutylene, and acetone obtained with a vacuum-grating spectrometer in the 240—10 см^{-1} spectral region. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 6, 1904—1908 (англ.).

гаймонь
колебаний

Исследованы ИК-спектры (240—10 см^{-1}) диметилсульфида, изобутилена и ацетона. Наблюдены вращательные спектры, а также полосы крутильных колебаний CH_3 -группы. Частоты этих колебаний для $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CH}_2$ лежат около 200 см^{-1} , для ацетона — около 120 см^{-1} . Описан длинноволн. спектрометр со сменными эшелеттами 2, 4, 8 и 20 штрихов/мм и углом блеска $26^\circ 45'$. Фильтрация осуществляется трансмиссионными фильтрами. Образец помещался в газовую кювету длиной 1 м. Получено разрешение около 1 см^{-1} . Библ. 17.

ф. 1967. 62

1966

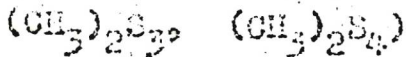
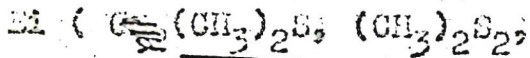
 $(CH_3)_2 S$

Far-infrared spectra of dimethyl sulfide, isobutylene, and acetone obtained with a vacuum-grating spectrometer in the 240-10-cm.⁻¹ spectral region. D. R. Smith, B. K. McKenna, and K. D. Moeller (Fairleigh Dickinson Univ., Teaneck, N.J.). *J. Chem. Phys.* 45(6), 1904-8(1966)(Eng). Absorption bands were found at 185.5, 183.5, 180.9, 176.8, 173.0, 168.2, and 162.3 cm.⁻¹ for dimethyl sulfide. For isobutylene, bands were found at 214.0, 197.3, 196.3, 186.5, 181.8, 176.0, and 165.0 cm.⁻¹. The strongest bands observed for acetone were at 124.5 and 104.5 cm.⁻¹. In addn. to these bands, strong absorption in the 45-10-cm.⁻¹ region was found for all 3 compds. RCJQ

C.A. 1966. 65. 10
14657 bc

89 H 1000 - IV

спуск. напад, 1966



Thompson S.D., Carroll D.G., Watson P.,
O'Donnell M., Mc Glynn S.P.

J.Chem.Phys., 1966, 45, 115, 1567-1579
Electronic spectra and structure of sulfur
compounds

1P., 1967, 25187

J orig

$(CH_3)_2S$

1987

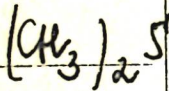
20 Б214. Об активности крутильных колебаний молекул, обладающих двумя эквивалентными метильными группами. Dreizler H. Zur Aktivität von Methyltorsionsschwingungen in Zweikreiselmolekülen. «Z. Naturforsch.», 1967, 22a, № 2, 192—194 (нем.)

Выведены правила отбора для вращательных переходов в возбужденных колебательных состояниях крутильных колебаний молекул типа $(CH_3)_2S$, обладающих двумя эквивалентными метильными группами (группа симметрии C_{2v}). Для вывода этих правил использован приближенный гамильтониан модели главных осей, состоящий из операторов энергии вращения, крутильных колебаний и взаимодействия крутильных колебаний с вращением, а также взаимодействия крутильных колебаний между собой, и использованы свойства симметрии волновых функций.

М. Р. Алиев

X. 1987. 20

1947



Freeman F. M.,
Henshall T.

F. Mol. Struct., 1(1), 31-7.

групповые колебания
и колебает. анализ мак-
рок, содержащих метиль-
ные груп-  пот. III. Диаметр
2 см, — сурьфиз, — ссе-

kurz; — messung.

[corr. $(CH_3)_2O$] III

(CH₃)₂S

1967
10 B252. Исследование строения молекул с непод-
ленной парой электронов методом микроволновой спек-
троскопии. Хаяси Митиро. «Кагаку-но рёнки, Ка-
гаку — по гyoiki, J. Japan Chem.», 1967, 21, № 10, 799—
807 (японск.)

Изучены вращательные спектры серии изотопозаме-
щенных производных диметилсульфида: (CH₃)₂S,
(CH₃)₂S³⁴, C¹³H₃SCH₃, двух поворотных изомеров
CH₂DSCH₃. Вычислены длины связей (в Å) CS 1,802±
±0,002, CH 1,091±0,005 и величины углов CSC 98°52'
±10, H_aCH_a 109°32'±20', H_aCH_a 109°36'±20', SCH_a
110°45'±20', SCH_a 106°38'±20' (атом H_a лежит в пло-
скости угла CSC). Сопоставлены величины углов при
атоме X в молекулах HXH, MeXH и MeXMe (X=
=O, S, Se), H₃X, F₃X, Me₃X, MeXH₂, MeXF₂ (X=N,
P, As, Sb) и в группах —XH₃ (X=C, Si, Ge, Sn) и
обсуждены наблюдающиеся закономерности. Б. Локшин

X · 1968 · 10

19

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

1967

22 Б288. Микроволновый спектр этилмеркаптана.
Mamonov L. M., Qajargh 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° исследован микроволновой спектр молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ в области 18—33 ГГц. 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 Д соотв. μ составляет угол $8^\circ 40'$ с главной осью «а». Определены вращательные постоянные.

И. И. Брисова

Л. 1967. 22

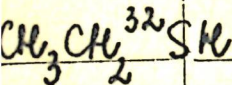
$(\text{CH}_3)_2\text{S}$

1987
10 Д183. О потенциале заторможенного внутреннего вращения метильных групп в диметилдисульфиде. Sutter D., Dreizler H., Rudolph H. D. Zum Hinderungspotential der internen Rotation der Methylgruppen in Dimethyldisulfid. «Z. Naturforsch.», 1967, 22a, № 2, 188—192 (нем.; рез. англ.)

Барьер внутреннего вращения двух метильных окончаний рассчитан из квартетных расщеплений шести вращательных переходов со значениями J вплоть до пяти. С использованием данных по F_0 -структуре получается $s = (4V_3)/(9F) = 43,4$. Если s и направляющий косинус λ_a подобраны одновременно так, чтобы соответствовать мультиплетным расщеплениям, что приводит к углу между связью S—C и осью внутреннего вращения, равному приблизительно 2° , то получается $s = 43,78$. Дается краткое описание метода, использованного для диагонализации матрицы полного гамильтониана. Резюме

00.1987:10

1968



д. в.

10 Д330. Микроволновый спектр и структура молекулы этилмеркаптана. Каджар Ч. О., Абба-сов А. А., Иманов Л. М. «Оптика и спектроскопия», 1968, 24, № 4, 629—631

Идентифицированы переходы bQ -ветви молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2^{32}\text{SH}$ (I). По частотам линий $1_{01}-1_{10}$ и $2_{02}-2_{11}$ определены значения разности вращательных постоянных $A-C=23534,8$ Мгц и параметра асимметрии $x=-0,948682$ для I. Обнаружено пять линий bQ -ветви молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2^{34}\text{SH}$ (II). Для II $A-C$ оказалась равной $23545,0$ Мгц, а параметр асимметрии $x=-0,950575$. Приведены частоты экспериментально обнаруженных переходов и частоты тех же переходов, рассчитанных по найденным вращательным постоянным. Даны структурные параметры молекулы этилмеркаптана.

111 - 2413

9. 1968.

108

C₂H₅SH
(u.b.)

1968

~~23445n~~ Microwave spectrum and structure of the ethylmercaptan molecule. Kadzhar, Ch. O.; Abbasov, A. A.; Imanov, L. M. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1968, 24(4), 629-31 (Russ). Microwave spectrum of EtSH was recorded at $\sim -50^\circ$ at 18.0-33.0 kHz. The transitions of ^bQ group in the case of EtSH contg. ³²S were identified, and, by using the frequencies of the bands 1₀₁-1₁₀ and 2₀₂-2₁₁, the difference of vibration consts. $A - C = 23534.8$ MHz. and asymmetry parameter $\kappa = -0.948682$ were detd. Anal. of the ^bQ group made possible detn. of transitions corresponding to R and P groups of lines. In the case of ³⁴S, there was found: $A - C = 23545.0$ MHz., $\kappa = -0.950575$. The structure parameters of the mol., calcd. by using the anal. of the spectrum, are given. By using empirical relations, frequencies of transitions in the 1st excited deformation vibration states were detd. The dipole moment of EtSH was 1.52 ± 0.04 D., its angle with the C-C bond was $8^\circ 40'$; its components were $\mu_a = 0.93 \pm 0.03$, $\mu_b = 1.20 \pm 0.03$ D., and $\mu_c = 0$.
M. Tichy

C.A. 1968. 69. 6

XIV-3413

1968

 $\text{CH}_3\text{CH}_2^{32}\text{SH}$

Л. В. Сидор,

М. И.,

Сидорова,

физ. мол.

6 Д364. Исследование микроволнового спектра молекулы этилмеркаптана. Каджар, Ч. О., Аббасов, А. А., Иманов, Л. М. «АзербССР Елмләр Акад. хәбәрләри. Физ.-техн. və рижәзијјат елмләри сер., Изв. АН АзербССР. Сер. физ.-техн. и матем. н.», 1968, № 5, 71—77 (рез. азерб.)

В диапазоне частот 18—33 кМгц исследован микроволн. спектр молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2^{32}\text{SH}$ (I) и $\text{CH}_3\text{CH}_2^{34}\text{SH}$ (II). Использован радиоспектрометр с электрнч. молекулярной модуляцией. Идентифицирован ряд переходов молекулы I и обнаружено пять линий "Q-ветви II. Наблюдаемые в окрестностях линий "Q-ветви спутники, при -50°C оказавшиеся приблизительно в 4 раза слабее их по интенсивности при такой же ширине, отнесены к первому возбужденному деф. кол. состоянию. Частота

ф. 1969. 6Д

деф. кол. равна 215 см^{-1} . Дипольный момент молекулы определяется по смещению частот штарковских компонент переходов $2_{02}-2_{11}$ ($M=2$) и $3_{03}-3_{12}$ ($M=2,3$), $\mu_a = 0,93 \pm 0,03$; $\mu_b = 1,20 \pm 0,03$; $\mu_c = 0$; $\mu_{\text{общ}} = 1,52 \pm 0,04$ ед. Дебая и составляет угол $8^\circ 40'$ с направлением связи С—С. Указаны величины вращательных постоянных и структурные параметры молекул.

Г. П.

1968

 C_2H_5SH

м. б. черт.

110302c Microwave spectrum of ethyl mercaptan. Kadzhar, Ch. O.; Abbasov, A. A.; Imanov, L. M. (USSR). *Izv. Akad. Nauk Azerb. SSR, Ser. Fiz.-Tekh. Mat. Nauk* 1968, (5), 71-7 (Russ). By using a modulated radiospectrometer, rotational consts., moments of inertia, and parameters of asymmetry of EtSH were detd., at -50° . The results are tabulated. EtSH is oriented in plane, $\mu_a = 0.93 \pm 0.03$, $\mu_b = 1.20 \pm 0.03$ D., $c = 0.00$. The dipole moment (D) for EtSH = 1.52 ± 0.04 D., at an angle of $8^\circ 40'$, with regard to C-C. Michael Dymicky

C. A. 1969. 70. 24

CH_3SH_3

omnuec 4879

1968

Smith &
Devlin J. J.

managing
conflict.

J. Mol. Spectrosc.,

1968, 25 W2, 174-

1968

$(CH_3)_2$ S

Trinkaus A.
Dreizler H.
Rudolph H. D.

curvobae
usqueus.

Z. Naturforsch., 23a,
N 12, 2123.

 $(C_3H_8)_{III}$

1968

 $(CH_3)_2S$ $(CH_3)_2SO$ $(C_2H_5)_2SO$

20 Б63. Определение коэффициентов центробежного искажения молекул типа асимметричного волчка. II. Результаты Драйзлера, Дендла и Рудольфа. Watson James K. G. Determination of centrifugal-distortion coefficients of asymmetric-top molecules. II. Dreizler, Dendl, and Rudolph's results. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 11, 181—185 (англ.)

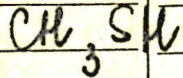
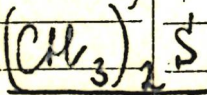
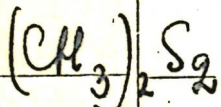
Проанализированы неопределенности, связанные с процедурой определения постоянных центробежного искажения $\tau_{a\beta\gamma\delta}$ из вращательных спектров молекул типа асимметричного волчка. Показано, что если для вращательных уровней используется ф-ла Кайвелсона и Вильсона, содержащая 6 линейных комбинаций постоянных $\tau_{a\beta\gamma\delta}$, то вследствие наличия связи между средними

X. 1968 - 20

[X]

значениями операторов $\langle P_z^2 \rangle$, $\langle P_z^4 \rangle$ и т. д., входящих в эту ф-лу, решение нормальных уравнений метода наименьших квадратов, воспроизводящее частоты вращательных переходов, может быть не единственным. Выведены ф-лы, позволяющие определить возможные интервалы значений $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ методом наименьших квадратов. Выполнен численный расчет производных вращательных и центробежных постоянных по числу степеней свободы для молекул $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. Отмечено, что 5 комбинаций постоянных $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ и 3 вращательные постоянные могут быть определены из опытных значений частот переходов при помощи правил сумм. Сообщ. I см. РЖХим, 1967, 21Б71. М. Р. Алиев

1969



Free radicals
chemistry

C.A. 1969. 71. 4

17319z Electronic spectra of thioformaldehyde and the methyl thiyl radical. Callear, Anthony B.; Connor, I.; Dickson, D. R. (Phys. Chem. Lab., Cambridge, Engl.). *Nature* 1969, 221(5187), 1238 (Eng). The electronic absorption spectra obtained by the flash photolysis of Me_2S_2 , Me_2S , $MeSH$, a mixt. of COS with CH_4 , and mixts. of CH_2N_2 with COS , H_2S , or CS_2 were examd. The band at 218.5 nm. is attributed to the Me thiyl radical (MeS), and the bands at 211.75 nm. and 208 nm. are attributed to thioformaldehyde (CH_2S). CNJN



(+1) (adus.)

(+2) (IV)



XIV-1243

1969

7 Б103. Потенциалы ионизации некоторых соединений серы. Cullen W. R., Frost D. C., Vroom D. A. Ionization potentials of some sulfur compounds. «Inorgan. Chem.», 1969, 8, № 8, 1803—1805 (англ.)

Спектроскопическим методом Фроста измерены адиабатич. потенциалы ионизации (ПИ) соединений типа

$(\text{CH}_3)_2\text{S}_n$ (I), где $n=1-3$, $(\text{CF}_3)_2\text{S}_n$ (II), где $n=1-4$ и $\text{CH}_3\text{S}_n\text{CF}_3$ (III), где $n=1$ и 2. В группе соединений I первые ПИ близки между собой и незначительно возрастают в ряду от $n=1$ до $n=3$, их значения найдены равными 8,68; 8,71; 8,73 соответственно. Замена метильной группы на перфторметильную в случае II приводит к общему повышению ПИ, однако при этом в ряду $n=1-4$ значения ПИ убывают от 11,11 до 9,75 эв. В

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

$n=1$

(7)

+3

X. 1970. 7



смешанных соединений III величина ПИ ниже, чем для H_2S . Полученные данные указывают, по-видимому, на делокализацию формально не связанной пары электронов атома серы на 3 *d*-орбитали соседнего атома серы в соединениях, имеющих сульфидную цепочку.

М. Туркина

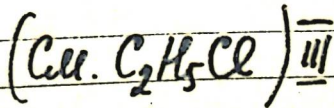
1969



Картар Ч.О. и др

Изв. АН Азерб ССР,
Сер. госн. - техн. и
матем. н., 1969, N3, 18

структ.
анализ (ком.
исполн. - Ч, Л)



1969

 $(CH_2)_3S$

Спектр

Д. Сосина

C.A. 1969. 40. 4

15606w Electronic spectrum of trimethylene sulfide. White-
 side, James A. B.; Warsop, P. A. (Univ. Dundee, Dundee,
 Scot.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(1), 1-12 (Eng). The elec-
 tronic spectrum of trimethylene sulfide was observed in the near
 and the vacuum uv. A vibrational anal. of an electronic transi-
 tion at 2260 Å. shows that the ground state is nonplanar but the
 excited state is planar. Apart from a transition at 1818 Å. all
 other electronic transitions lead to nonplanar excited states.
 Two Rydberg series lead to an ionization potential of 8.65 ev.
 Since the Rydberg states are nonplanar the ground state of the
 ion $(CH_2)_3S^+$ is also nonplanar. A correlation diagram for H_2S
 is drawn and from it the shapes of the states of trimethylene
 sulfide are predicted. The predicted and observed shapes agree.

RCKP

1969

 $(CH_3)_2S$

x

x = 1, 2, 3

(y)

C.A. 1969. 4. 14

[64263n] Ionization potentials of some sulfur compounds. Cullen, William R.; Frost, D. C.; Vroom, D. A. (Univ. British Columbia, Vancouver, British Columbia). *Inorg. Chem.* 1969, 8(8), 1803-5 (Eng). The adiabatic ionization potentials of R_2S_x ($R = Me$, $x = 1-3$; $R = CF_3$, $x = 1-4$), $MeSCF_3$, and $Me-S_2CF_3$ are reported. The 1st ionization potentials of the compd. $(CF_3)_2S_x$ are lowered dramatically as x increases, while the change in Me_2S_x is more gradual. The series of compds. R_2S_2 show a variation in ionization potential similar to that of the R_2S compd. CJJN

$(CH_3)_2S$

1970

$(C_2H_5)_2S$

(y)

17952n Photoionization in aliphatic sulfide vapors. I. Methyl mercaptan, dimethyl and diethyl sulfides. Akopyan, M. E.; Sergeev, Yu. L.; Vilesov, F. I. (Nauch.-Issled. Fiz. Inst., Leningrad, USSR). *Khim. Vys. Energ.* 1970, 4(4), 305-10 (Russ). Effective photoionization of Me mercaptan, Me_2S , and Et_2S in vapor form at up to 14 eV was studied. Effective photoionization curves are shown. Ionization potential for Me mercaptan was 9.44 ± 0.01 eV. Intensive MeS^+ is noted. Ionization of Me_2S occurs at 8.69 ± 0.01 eV, with a broad max. at 10-11 eV. Products are CH_2S^+ , MeS^+ , and $MeSCH_2^+$ ions. Ionization occurs for Et_2S at 8.42 ± 0.01 eV, with formation of mol. ions at 9.1-10.7 eV. B. J. Ikeler

C.A. 1971 74.4

1970

$(CH_3)_2S$

Benson R.C.,
Flygare W.H.

м.в.
спектр

J. Chem. Phys., 52 (10),
5291.

$[C_{60}(CH_3)_2O]$

C_2H_5SH

1970

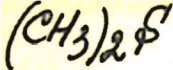
Callear A.B.,
Dickson D.R.

un.
pomerus

Trans. Faraday Soc.,
1970, 66, ~ 8, 1984.



$[Cu. (CH_3)_2S_2]^{III}$



1970

Callar A.B.,
Dickson D.R.

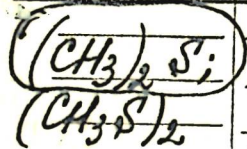
un.
protons

Trans. Faraday Soc.,
1970, 66, ~ 8, 1987.



C-S-H-coeq

Cullen W. R., et al. ¹⁹⁷⁰



Inorg. Chem.,

1970, 9, ~9, 1976

A.P.;
черные
вези

1970-1976

(Cu. C-S-H) I

(CH₃)₂

S

XIV-2183

1970

20 Б233. Молекулярные колебания и силовые поля алкилсульфидов. I. Диметилсульфид и его дейтерированные соединения. Shiro Yuji, Ohsaku Masaru, Hayashi Michiro, Murata Hiromu. Molecular vibrations and force fields of alkyl sulfides. I. Dimethyl sulfide and its deuterated compounds. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1970, 43, № 3, 609—618 (англ.)

Исследованы ИК-спектры в газовой и жидк. фазах и спектр КР в жидк. фазе диметилсульфида (ДМС) и ДМС-d₁. Дано отнесение полос по типам симметрии и по форме колебаний. Выполнен анализ нормальных координат ДМС и вычислены силовые постоянные модифицированного силового поля Юри-Бредли и силового поля

chem. n.

X. 1970. 20

в приближении локальной симметрии C_{3v} для метильных групп. Найденные наборы силовых постоянных удовлетворительно воспроизводят частоты колебаний ДМС, ДМС- d_1 и ДМС- d_3 . Вычислены также постоянные центростремительного искажения $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ и производные τ -постоянных по силовым постоянным для молекулы ДМС. Оценены вклады отдельных естественных координат в τ -постоянные. Вычисленные τ -постоянные согласуются с экспериментальными по МВ-спектру ДМС. М. Р. Алиев

$(CH_3)_2S$

$(CD_3)_2S$

UK. chem. p.
V₁

Chem. n.

C.A. 1970. 72. 24

XIV-2183

1970

126872r Molecular vibrations and force fields of alkyl sulfides. I. Dimethyl sulfide and its deuterated compounds. Shiro, Yuji; Ohsaku, Masaru; Hayashi, Michiro; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ.; Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1970, 43(3), 609-18 (Eng). Me_2S and Me_2S-d_1 were prepd., and their ir spectra were measured in the gaseous and liq. states and the Raman spectra in the liq. state. The assignments of their spectra were made. Two sets of modified Urey-Bradley force consts. and a set of local symmetry force consts. were detd. by a least-squares technique. The obtained force consts. were then transferred for the anal. of the vibrational frequencies of Me_2S-d_3 . The centrifugal distortion consts. obtained from the vibrational data were compared with those from spectra to confirm the reasonableness of the force consts. obtained.
RCQC

1970

BP - XIV - 634

 $(CD_3)_2S$

50353v Synthesis and vibrational spectra of [dimethyl-d₆] sulfide. Tranquille, Michel; Fouassier, Monique; Lautie-Mouneyrac, Marie F.; Dizabo, Pierre; Forel, Marie T. (Lab. Rech. Spectrochim. Mol., Fac. Sci., Paris, Fr.). C. R. Acad. Sci., Ser. C 1970, 270(12), 1085-8 (Fr). Pure $(CD_3)_2S$ was prepd. by refluxing $(CD_3)_2SO$ with NH_4Br (yield 45%) followed by vacuum distn. Most of the fundamental vibrational frequencies in the ir have been measured and interpreted. The principal moments of inertia are: $I_A = 36.96$, $I_B = 86.69$, and $I_C = 110.97$ UM Å².
T. A. Claxton

1.
y y y
A B C.

C.D. 1970-73 10

1970

8 Д472. Синтез и колебательные спектры диметилсеры $(\text{CD}_3)_2\text{S}$. Tranquille Michel, Fouassier Monique, Lautie-Mouneyrac Marie-Françoise, Dizabo Pierre, Forel Marie-Thérèse. Synthèse et spectres de vibration du diméthylsulfure $(\text{CD}_3)_2\text{S}$. «C. r. Acad. sci.», 1970, C270, № 12, 1085—1088 (франц.)

Впервые получены колебательные спектры диметилсеры $(\text{CD}_3)_2\text{S}$ (I), синтезированной из диметилсульфоксида- d_6 . Получены ИК-спектры $(2300—500 \text{ см}^{-1})$ I в газообразном, жидком и твердом ($T=60^\circ \text{K}$) состояниях, а также спектры комб. рас. $(2300—200 \text{ см}^{-1})$ жидкого I. Определена деполяризация линий комб. рас. Проведен анализ

норм. колебаний молекулы I и полная интерпретация колебательного спектра. С использованием литературных данных о геометрии молекул $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и CH_3SCD_3 вычислены главные моменты инерции молекулы I. Библ. 6. В. Н.

ф. 1970. 8 А

ВФ-ХIV-634

$(CH_3)_2S$

XIV-912

1981

(55591x) Vibrational behavior of dimethyl sulfide, dimethyl sulfoxide, dimethyl sulfone, and the corresponding perdeuterated compounds. 2. Normal coordinate treatment. Geiseler, C.; Hanschmann, G. (Sekt. Chem., Univ. Leipzig, Leipzig, E. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1971, 8(3), 293-306 (Ger). Normal coordinate calcns. on Me_2S , Me_2SO , Me_2SO_2 , and their perdeuterated derivs. have been carried out. The GF -matrix method of Wilson was applied by using the general harmonic valence force field. The calcd. frequencies of the normal vibrations agree satisfactorily with the corresponding values obtained from the spectra. In addn. the potential energy distributions were calcd. and are discussed. The potential energy of the sym. SO valence vibration of Me_2SO_2 is located only partly in the SO bond, like in Me_2SO .

+2

C.A. 1981. 75. 8

X

$(CH_3)_2S$

XIV-912

1971

21 Б75. Расчет колебаний диметилсульфида, диметилсульфоксида, диметилсульфона и их полностью дейтерированных соединений. 2. Анализ нормальных колебаний. Geiseler G., Hanschmann G. Schwingungsverhalten von Dimethylsulfid, Dimethylsulfoxid, Dimethylsulfon und den entsprechenden perdeuterierten Verbindungen. 2. Mitt. Normalkoordinatenbehandlung. «J. Mol. Struct.», 1971, 8, № 3, 293—306 (нем.; рез. англ.)

См. п.

Выполнен анализ нормальных координат молекул диметилсульфида, диметилсульфоксида, диметилсульфона и их полностью дейтерированных аналогов. Приведены

[См. также $(CH_3)_2SO$] III

X. 1971.21

(X)

аналитич. выражения координат симметрии. Из лит. данных для структурных параметров и частот колебаний вычислены силовые постоянные наиболее общего силового поля этих молекул. Найденные наборы силовых постоянных воспроизводят частоты с ошибкой, не превышающей 5%. Вычислены также формы колебаний и распределение потенциальной энергии по внутренним колебательным координатам симметрии и дано отнесение частот по форме колебаний.

М. Р. Алнев

C₂H₅SH

XIV-332

1971

Структ.

bp. нод.

(28003a) Structure of ethyl mercaptan. Hayashi, Michiro; Imaishi, Hisae; Ohno, Keiichi; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1971, 44(3), 872 (Eng). Rotational consts. for the trans and gauche forms of EtSH, EtSD, Et¹³SH, MeCD₂SH, and CH₂DCH₂SH were calcd. and NMR splittings discussed.

C.I. 184.454



XIV-332

1971

19 Б241. О структуре этилмеркаптана. Hayashi Michiro, Imaishi Hisae, Ohno Keiichi, Murata Hiroshi. On the structure of ethyl mercaptan. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1971, 44, № 3, 872 (англ.)

Исследованы МВ-спектры 5 изотопич. разновидностей молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ (I). Идентифицированы линии вращательных переходов с малыми J транс- и гом-изомеров всех изотопозамещ. I в основном колебательном состоянии. Определены значения вращательных постоянных, из к-рых вычислены структурные параметры $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$.

М. Р. Алиев

М. Р.

моменты
структ.

X. 1971. 19

$(CH_3)_2S$

1971

2 Б146. Колебательные спектры $(CH_3)_2S$, CH_3SCD_3 , $(CD_3)_2S$. Y renburg J. W., Gerding H. Vibrational spectra of $(CH_3)_2S$, CH_3SCD_3 , and $(CD_3)_2S$. «Rec. trav. chim.», 1971, 90, № 8, 885—895 (англ.)

Исследованы ИК-спектры Me_2S , $MeSCD_3$ и $(CD_3)_2S$ в жидк. ($60-4000\text{ см}^{-1}$) и газ. состоянии. Исследованы также спектры КР этих соединений, причем измерялась

степень деполяризации линий. Предложено отнесение основных колебаний молекул на основе данных о контурах полос в ИК-спектре и поляризации линий спектра КР. На основе величины изотопич. сдвига у частот 180 и 281 см^{-1} первая отнесена к крутильному колебанию CH_3 группы, а вторая — к деформационному колебанию CSC фрагмента.

Я. М. Кимельфельд

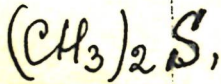
2 Б147

Исследования спектров

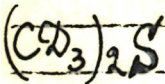
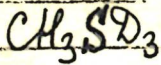
12

X. 1972.2





1941



103289d Vibrational spectra of dimethyl sulfide, dimethyl-d₃ sulfide, and dimethyl-d₆ sulfide. Ypenburg, J. W.; Gerding, H. (Inorg. Chem. Lab., Univ. Amsterdam, Amsterdam, Neth.). *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas* 1971, 90(8), 885-95 (Eng). Infrared absorption and Raman spectra of $(CH_3)_2S$, CH_3SCD_3 , and $(CD_3)_2S$ have been recorded and assigned.

(V_i)

$(+2)$ ☒

C.A. 1941. 75. 16

$(CH_3)_2S$

1971

21 Б260. Определение валентных силовых полей нормальных колебаний молекул $(CH_3)_2S$ и $(CH_3)_2SO$.
Tranquille M., Labarbe P., Fourassier M., Fournier M. T. Détermination des champs de forces de valence et des modes normaux de vibration des molécules $(CH_3)_2S$ et $(CH_3)_2SO$. «J. Mol. Struct.», 1971, 8, № 3, 273—291 (франц., рез. англ.)

На основе эксперим. данных по спектрам молекул Me_2S , $MeSCD_3$ и Me_2S-d_6 рассчитано силовое поле для Me_2S . Предложено новое отнесение колебательного спектра Me_2SO и Me_2SO-d_6 и, используя это отнесение, и силовое поле для Me_2S , вычислено полное валентное силовое поле для молекулы Me_2SO . Обсуждена его зависимость от физ. состояния молекулы. Резюме

● [Сек. Таблицы $(CH_3)_2SO$] III

X. 1971.21

☒

$(CH_3)_2S$

1971

5590w Determination of valence force fields and normal vibrational modes of the molecules dimethyl sulfide and dimethyl sulfoxide. Tranquille, M.; Labarbe, P.; Fouassier, M.; Forel, M. T. (Lab. Spectrosc. Infrarouge, Fac. Sci. Bordeaux, Talence, Fr.). J. Mol. Struct. 1971, 8(3), 273-91 (Fr). A valence force field for Me_2S has been calcd. from the vibrational frequencies of the molecules Me_2S , $CMeSCD_3$, and $(CD_3)_2S$. By using a force field of the same form and the new assignments which we have proposed for the vibrational spectra of Me_2SO and $(CD_3)_2SO$, we have calcd. a complete valence force field for Me_2SO . Its dependence on the phys. state of the mol. is discussed.

chem. not

(+1)

C. A. 1971. 75 J.



CH_3SH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$ (vi) XIV 4155 1972

Barnes A. J., Hallam H. G.,

Holwells J. D. R.,

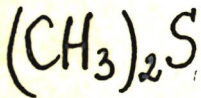
J. Chem. Soc. Faraday Trans.,

1972, part 2, 68, N5,

737

10

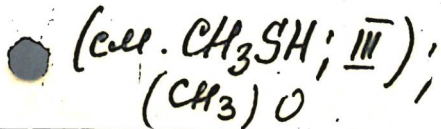
10/11/72

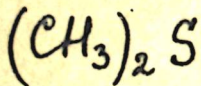


Cradock, S.;
et al.

1972

(op. 21. chemip) " J. Chem. Soc. Far. Trans, 2,
1972, 68, N2, 281-8.





1972.

 ν_i ; c.n.

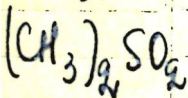
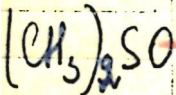
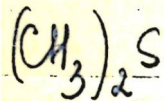
106971x Mean amplitudes of vibration for dimethyl ether, dimethyl sulfide, dimethyl selenide, and disilyl methane. Gebhardt, O.; Cyvin, S. J. (Inst. Teor. Chem., Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *J. Mol. Struct.* 1972, 12(2), 205-14 (Eng). Normal coordinate analyses are reported for Me_2O , Me_2S and Me_2Se , and for $(\text{SiH}_3)_2\text{CH}_2$. Calcd. mean amplitudes of vibration are given for the mols. with some of their deuterated compds. For $(\text{Me})_2\text{O}$ and $(\text{SiH}_3)_2\text{CH}_2$ the data are compared with values from gas electron diffraction.

C.A. 1972. 77, N16

+2



1972



Vi

UK-
Рассел-сентр

C.A. 1972. 76. 24

.) 146927y Vibrational spectra. 1. Vibrational behavior of dimethyl sulfide, dimethyl sulfoxide, dimethyl sulfone, and the corresponding perdeuterated compounds. Geiseler, G.; Hanschmann, G. (Sekt. Chem., Univ. Leipzig, Leipzig, E. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1972, 11(2), 283-96 (Ger). The ir and Raman spectra of Me_2S , Me_2SO , Me_2SO_2 and of the corresponding perdeuterated comps. were studied. On the basis of the symmetry properties it was possible to assign the normal vibrations by comparison.

$(CH_3)_2S$

$(CD_3)_2S$

(с.п.)

4 Б254. Эффект Зеемана во вращательном спектре пердеутеродиметилсульфида. Hammer E., Sutter D. H., Dreizler H. Zeeman-Effekt im Rotationsspektrum von Perdeuterodimethylsulfid. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 7, 1159—1164 (нем.; рез. англ.)

Исследован с высоким разрешением эффект Зеемана в МВ-спектрах $(CH_3)_2S$ (I) ($1 \leq j \leq 2$; $\sim 30\,800$ — $35\,000$ МГц) и $(CD_3)_2S$ (II) ($0 \leq j \leq 3$, ~ 9000 — $27\,200$ МГц) в основном кол. и крут. состояниях при силе поля ~ 24 — 33 кгс. Результаты, полученные для I, объединены с данными соотв-щего исследования для I Бенсона и Флайгера (РЖХим, 1970, 24Б209). Из анализа МВ-спектров определены диагональные элементы g -тензора (для I — $g_{aa} = -0,01921 \pm 0,00029$, $g_{bb} = -0,00002 \pm 0,00014$, $g_{cc} = -0,00786 \pm 0,00017$; для II — $g_{aa} = 0,01544 \pm 0,00024$, $g_{bb} = +0,00049 \pm 0,00023$, $g_{cc} = -0,00731 \pm 0,00028$), анизотропии магнитной восприимчивости в 10^{-6} эрг/гс²·моль) ($2\chi_{aa} - \chi_{bb} - \chi_{cc} = -4,54 \pm 0,34$ для I — $6,06 \pm 0,25$ для II, $2\chi_{bb} - \chi_{cc} - \chi_{aa} = -2,52 \pm 0,29$ для I, $-2,96 \pm 0,29$ для II)

Х. 1973. № 4

диагональные элементы электр. квадрупольного тензора для II (в 10^{-26} эл. стат. ед. см^{-2}) $Q_{aa} = 4,3 \pm 0,3$, $Q_{bb} = -1,8 \pm 0,4$, $Q_{cc} = -2,5 \pm 0,5$. С использованием данных по структурным суммам и лит. значения средней магнитной восприимчивости II (жидкость) $\chi = 1/3(\chi_{aa} + \chi_{bb} + \chi_{cc}) = (-44,9 \pm 1,0) \times 10^{-6}$ эрг/гс²моль определены для II диагональные элементы общего тензора магнитной восприимчивости, а также тензоров парамагнитной и диамагнитной восприимчивости (все в 10^{-6} эрг/гс²моль): $\chi_{aa} = -46,9 \pm 1,1$, $\chi_{bb} = -45,9 \pm 1,1$, $\chi_{cc} = -41,9 \pm 1,2$; $\chi_{aa}^p = 81,2 \pm 0,7$, $\chi_{bb}^p = 183,4 \pm 1,2$, $\chi_{cc}^p = 238,9 \pm 1,2$; $\chi_{aa}^d = -128,1 \pm 1,8$, $\chi_{bb}^d = -229,3 \pm 2,2$, $\chi_{cc}^d = -280,8 \pm 2,4$. Оценена величина компоненты дипольного момента I, II $\mu_b = (1,3 \pm 0,8) D$. Из изменения g -величины при дейтерировании заключено, что можно установить знак электрического дипольного момента I, II (отрицат. конец на атоме S).

А. П. Александров

C_2H_5SH

1972

Иманов Л.М. и т.д.

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

М.И.

● (см. C_2H_5OH ; III)

21013.3641

Ph, Ch

$$\frac{(CH_3)_2S(I)}{H_2CS(I)}$$

96201

 1972
 XIV 4329

Kroto H.W., Suffolk R.J. The photo-electron spectrum of an unstable species in the pyrolysis products of dimethyldisulphide. "Chem. Phys. Lett.", 1972, 15, N 4, 545-548

(англ.) 10

0729/10

709 710 0729

ВИНИТИ

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

1972.

8 Б83. Реакции атомов серы. XIV. Неэмпирические расчеты методом молекулярных орбиталей молекулы эписульфида этилена и пути реакции $\text{S} + \text{C}_2\text{H}_4$. Strausz O. P., Gunning H. E., Denes A. S., Csizmadia I. G. The reactions of sulfur atoms. XIV. Ab Initio molecular orbital calculations on the ethylene episulfide molecule and the $\text{S} + \text{C}_2\text{H}_4$ reaction path. «J. Amer. Chem. Soc.», 1972, 94, № 24, 8317—8321 (англ.)

У.

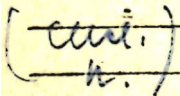
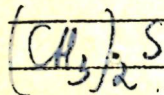
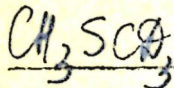
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 32 гауссовских функций s - и p -типа построены корреляционные диаграммы МО и потенциальные кривые различных путей диссоциации этиленсульфида $\text{S}-\text{CH}_2-\text{CH}_2$ для основного и нескольких низколежащих возбужденных состояний. В случае симм. диссоциации (увеличение расстояния R между атомом S и серединой связи $\text{C}-\text{C}$ этилена) пересечение уровней триплетных состояний симметрии 3B_2 и 3A_2 происходит при расстоянии $R =$

57

Х. 1973. № 8.

$= 1,86 \text{ А}$ с барьером диссоциации $7,5 \text{ ккал/моль}$. Исследование асимм. диссоциации (увеличение угла CCS) показывает, что стабильными конфигурациями для всех низлежащих возбужденных состояний является σ -комплекс с углом $\text{CCS} \geq 100^\circ$. Полученные результаты соответствуют следующему р-ционному пути $\text{C}_2\text{H}_4(^1\text{A}_1) + \text{S}(^3\text{P}) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{S}[^3\text{B}_2(4\pi \rightarrow 14\sigma^*)] \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{S}[^3\text{A}_2(4\pi \rightarrow 13\sigma^*)] \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{S}[^3\Sigma(12\sigma \rightarrow 13\sigma^*)]$. Барьеры вращения концевой метиленовой группы в σ -комплексе (угол CCS 100°) составляет 55, 23 и 7 ккал/моль для S_0 , T_1 и S_1 состояний, соотв. Высокий барьер вращения в состоянии T_1 указывает на значит. связывание между атомом S и концевым атомом C и объясняет стереоспецифичность присоединения триплетного атома S . Система $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{S}(^1\text{D}_2)$ коррелирует с основным состоянием этиленсульфида, поэтому присоединение является согласованным процессом, идущим по принципу наименьшего движения. Сообщ. XIII см. РЖХим, 1972, 16Б867. В. А. Т.

1972



40749x Eigenvalue problem of dimethyl sulfide methyl perdeuteromethyl sulfide and dimethyl-sulfide. Ypenburg, I. W. (Inorg. Chem. Lab., Univ. Amsterdam, Amsterdam, Neth.). *Recl. Trav. Chim. Pays-Bas* 1972, 91(5), 671-80 (Eng). A set of force consts. for $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ and its deuterated analogs CH_3SCD_3 and $(\text{CD}_3)_2\text{S}$ was calcd. by using a modified general valence force field. The calcd. force consts. reproduce the fundamental frequencies obsd. fairly well.

C.A. 1972. 77.6

1972

 CH_3SCD_3 ; $(\text{CH}_3)_2\text{S}$;

 $(\text{CD}_3)_2\text{S}$;

✓ 19 Б104. Расчет колебаний молекул $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, CH_3SCD_3 и $(\text{CD}_3)_2\text{S}$. Y p e n b u r g J. W. The eigenvalue problem of $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, CH_3SCD_3 and $(\text{CD}_3)_2\text{S}$. «Rec. trav. chim.», 1972, 91, № 5, 671—680 (англ.)

Выполнен анализ норм. координат молекулы диметил-сульфида (I). Из частот колебаний I, I-D₆ и I-D₃ и из структурных параметров I вычислены силовые постоянные валентного силового поля с учетом нек-рых недиагональных силовых постоянных. Полученный набор силовых постоянных удовлетворительно воспроизводит частоты колебаний рассматриваемых молекул. М. Р. А.

 I
 $\text{CH}_3\text{.H.}$

X. 1972. 19

$(CH_3)_2S$

1972

9 Д213. Расчет колебаний молекул $(CH_3)_2S$, CH_3SCD_3 и $(CD_3)_2S$. Yrenburg J. W. The eigenvalue problem of $(CH_3)_2S$, CH_3SCD_3 and $(CD_3)_2S$. «Rec. trav. chim.», 1972, 91, № 5, 671—680 (англ.)

($\tilde{\nu}_i$)
(сил. пос.)

Выполнен анализ норм. координата молекулы диметилсульфида (I). Из частот колебаний I , $I-D_6$ и $I-D_3$ и из структурных параметров I вычислены силовые постоянные валентного силового поля с учетом некоторых недиагональных силовых постоянных. Полученный набор силовых постоянных удовлетворительно воспроизводит частоты колебаний рассматриваемых молекул.

М. Р. Алиев

Ф. 1972. 92.



S-S (CH₃)₂S

1973

12 Д233. Перераспределение электронной плотности в дисульфидной связи при вращении. Boyd Donald B. Electron redistribution in disulfide bonds under torsion. «Theor. chim. acta», 1973, 30, № 2, 137—150 (англ.)

Расширенным методом Хюккеля рассчитаны контурные карты распределения электронной плотности для различных углов поворота вокруг связи S—S в дисульфиде (I) и диметилдисульфиде (II). Обнаружено, что заселенность перекрывания связи S—S для обеих молекул наибольшая при угле поворота $\alpha \approx 90^\circ$, поскольку при таком α минимально отталкивание неподеленных электронных пар атомов S. Равновесное α в II не зависит от конформации (шахматной или затменной) метильных групп. Также рассчитаны барьеры вращения и подробно обсуждена природа химич. связи I и II. В. Л. Лебедев

ф. 1973 N 12

$(CH_3)_2S$

kb. misc.
racem

Christoffersen, Ralph E. 1973
Comput Chem Res Educ,
Proc Int. Conf. 1973, 2,
4/249-4/293 (Eng)

(cu HSSH; III)

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

1973

83900q Physical interpretation of spectral parameters. Fruwert, J.; Seidel, H.; Boehlig, H.; Salzer, R. (Sekt. Chem.,

Karl-Marx-Univ., Leipzig, E. Ger.). *Wiss. Z. Karl-Marx-Univ. Leipzig, Math.-Naturwiss. Reihe* 1973, 22(6), 539-50 (Ger). Parameters discussed include frequency and intensity of ir bands, and their relations to calens. of force consts., electronic and steric influences, electron d., and H bond formation: Compds. considered are Me_2S , Me_2SO , Me_2SO_2 , $MeSO_3F$, $MeSO_3Cl$, $MeSO_3Br$, syn- and anti-acetaldoxime, alkyl sulfates and phenol and thiophenol. Arild J. Miller

cccl. no. 1.

$(CH_3)_2SO_2$

CH_3SO_3F

CH_3SO_3Cl

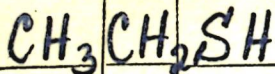
CH_3SO_3Br

(+3)

⊗

C.A. 1974. 81. N14

1973.



Кагнар Т. О

Аббасов А. А., и др.

спектр

μ.

"Изв. АН. АЗССР, сер. физ.-техн.
и мат. н." 1973, № 3, 80-84.

(см. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$; III)

$(CH_3)_2S$

1973

Labarre P, Forel M-T.

V, C. H.
van.

J. Chim. phys. et phys.-chim.
biol., 1973, 70, N1, 180-187.

• [Cec $(CH_3)_2O$] III

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

1973

2 Б217. Длинноволновый инфракрасный спектр и барьер внутреннего вращения этантиола. Maпo-cha A. S., Fateley W. G., Shimanouchi T. Far-infrared spectra and barrier to internal rotation of ethanethiol. «J. Phys. Chem.», 1973, 77, № 16, 1977—1981 (англ.)

Получен ИК-спектр в области $50-300 \text{ см}^{-1}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ (I) и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SD}$ (II) в газовой фазе. Отнесены частоты торсионных кол. SH, соотв-щие различным ротамерам. Для основных торсионных кол. I и для «горячего перехода» (переход 1—2) II в гош-конформации наблюдались дублеты. В одномерном приближении с потенциалом, разложенным в ряд Фурье по косинусам, рассчитан барьер внутреннего вращения. Наилучшее совпадение с экспериментом достигнуто при ис-

x. 1974

N2

пользовании потенциала в форме $V(\alpha) = -[43(\pm 22)/2] \cdot (1 - \cos \alpha) - [137(\pm 7)/2] (1 - \cos 2\alpha) + [474(\pm 2)/2] \cdot (1 - \cos 3\alpha) - [13(\pm 1)/2] (1 - \cos 6\alpha)$. Частоты торсионных кол. метильной группы в I наблюдались при 247,5; 233,5; 220,5 см^{-1} . Для величины барьера вращения вокруг связи С—С получено значение 1359 см^{-1} . Резюме

C_2H_5SH

1973

12 Д552. Длинноволновые ИК-спектры и барьер для внутреннего вращения в этантиоле. Мапосча А. С., Fateley W. G., Shimanouchi T. Far-infrared spectra and barrier to internal rotation of ethanethiol. «J. Phys. Chem.», 1973, 77, № 16, 1977—1981 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразных этантиолов C_2H_5SH и C_2H_5SD в области $100-300\text{ см}^{-1}$.

ν_i, ν_o

Наблюдаемые полосы связаны с крутильными колебаниями групп $SH(SD)$ и CH_3 . Для описания вращения группы SD использован потенциал $V(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_k V_k (1 - \cos k\alpha)$ и определены его параметры для $k=1, 2, 3$ и 6. Рассчитанные с этим потенциалом частоты линии SH хорошо согласуются с опытными данными. Вращение группы CH_3 описано потенциалом третьего порядка, по наблюдаемым частотам найдены параметры V_3 и V_6 . Величина барьера для вращения группы CH_3 в этантиоле больше, чем в этане и близка к величине барьера для этилхлорида. Библ. 15. М. В. Тонков

книга Шимановичи
лето у Курбана

ф. 1973 N 12

$(CH_3)_2S$

1973

8 Б100. Фотоэлектронные спектры и свойства молекул. XXI. Диметилсульфид, метилсилилсульфид и диметилсульфид. Mollère P., Bock H., Becker G., Fritz G. Photoelectron spectra and molecular properties. XXI. Dimethyl sulfide, methyl silyl sulfide, and disilyl sulfide. «J. Organometal. Chem.», 1973, 61, 127—132 (англ.)

фотоэлектронный спектр

Изучены фотоэлектронные спектры $(CH_3)_2S$, $(CH_3)(SiH_3)S$, $(SiH_3)_2S$. В спектрах этих соединений три первых максимума интерпретированы как результат ионизации уровней $2b_1$, $4a_1$ и $3b_2$. Энергии этих уровней равны соотв. 8,67; 11,17; 12,57; 9,10; 10,85; 11,94; 9,59; 10,98; 11,68 (эВ). Интерпретация спектров проведена на основе аналогии со спектрами более простых соединений и расчетов электронного строения изучаемых молекул методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП в варианте Дель Бене и Джаффе. В отличие от изоэлектронных эфиров изученные сульфиды сохраняют свою геометрич. структуру при замене метила на силил. Это объясняется гораздо меньшими эффективными зарядами атомов в сульфидах по сравнению с кислородсодержащими аналогами, что уменьшает чувствительность электронных состояний молекулы к геометрич. искажениям структуры. Сообщ. УХ см. пред. реферат. В И. Нефедов

(+2)



Х. 1974
N 8

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

(5; м.н.)

Ф. 1974
N 6

6 Д412. Вакуумные УФ-спектры поглощения диметил-сульфида, -селенида и -теллурида. Scott John D., Causley G. C., Russell B. R. Vacuum ultraviolet absorption spectra of dimethylsulfide, dimethylselenide, and dimethyltelluride. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6577—6586 (англ.)

Изучены спектры поглощения (120—260 нм) газообразных $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ (I), $(\text{CH}_3)_2\text{Se}$ (II) и $(\text{CH}_3)_2\text{Te}$ (III). Обнаружены 3 ридберговские серии, сходящиеся к значениям первых ионизационных потенциалов (ИП) 8,706; 8,400 и 7,926 эв для I—III, соответственно. Указанные переходы связаны с валентной p -орбиталью центрального атома, перпендикулярной плоскости молекулы. Рассмотрена линейная корреляция (ЛК) величин ИП $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{O}, \text{Se}, \text{S}, \text{Te}$) со значениями ИП соответствующих благородных газов: по ЛК ИП молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{Po}$ оценен равным 7,62 эв. Высокоэнергетич. полосы в спектрах II и III отнесены к переходам с несвязывающей орбитали симметрии a_1 , локализованной на центральном атоме.

Показано, что в возбужденном состоянии углы C—X—C исследованных молекул практически не меняются, а расстояния C—X изменяются на 0,04 Å по сравнению с длиной связи в основном состоянии. Библ. 12. С. Ф. Б.

1973
1827
☑
+2
оттиски

$(CH_3)_2S$

12 Б168. Спектры поглощения диметилсульфида, диметилселенида и диметилтеллурида в вакуумной

1973

ультрафиолетовой области. Scott John D., Causey G. C., Russell B. R. Vacuum ultraviolet absorption spectra of dimethylsulfide, dimethylselenide, and dimethyltelluride. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6577—6586 (англ.)

Исследованы УФ-спектры ($80\,000\text{--}40\,000\text{ см}^{-1}$) паров Me_2S (I), Me_2Se (II) и Me_2Te (III). Для каждого из исследованных в-в выделены три ридберговские серии, сходящиеся к ионизац. потенциалам (ИП) 8,706 эв для I, 8,400 эв для II и 7,926 эв для III. Эти ИП и соотв-щие серии отнесены к р-орбитам центральных атомов, перпендикулярным плоскостям молекул. Существует линейная корреляция между измеренными ИП и

(спектр)

1827
1827
1827

Ж. 1974 n 12

(+2) ☒

ИП соотв-щих инертных газов, позволяющая предска-
зать потенциал для Me_2Po — 7,62 эв. Ряд полос в спект-
рах отнесен к несвязывающим орбиталям a_1 , локализо-
ванным на центральном атоме. Проведен колебатель-
ный анализ прогрессий на основе полносимм. колеба-
ний молекул в основном состоянии. Геометрия
возбужденных состояний для рассмотренных молекул
одинакова: углы $\text{C}-\text{X}-\text{C}$ практически не изменяются,
а длины связей $\text{C}-\text{X}$ изменяются на $\sim 0,040 \text{ \AA}$, по срав-
нению с этими длинами в основном состоянии. Ю. К.

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

omnisc 1827

1973

(У, смрукт
нара.м.)

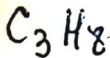
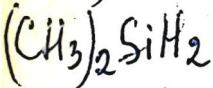
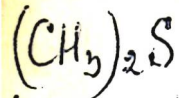
76079e. Vacuum ultraviolet absorption spectra of dimethyl sulfide, dimethyl selenide, and dimethyl telluride. Scott, John D.; Causley, G. C.; Russell, B. R. (Dep. Chem., North Texas State Univ., Denton, Tex.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(12), 6577-86 (Eng). The vapor phase absorption spectra (40,000-80,000 cm^{-1}) of Me_2S , Me_2Se , and Me_2Te are reported. Three Rydberg series for each compd. were assigned which converge on the ionization potentials of 8.706 ± 0.010 , 8.400 ± 0.010 , and 7.926 ± 0.010 eV for Me_2S , Me_2Se , and Me_2Te , resp. These ionization potentials and corresponding Rydberg series members are assigned as originating from the central atom valence p orbital, which is perpendicular to the plane of the mol. A correlation of the ionization potentials calcd. for these mols. to ionization potentials of corresponding rare gases is presented. The term

C.A. 1974.80.N14

(+2) 18

values of Rydberg members of the dimethyl chalcogens are also correlated to the term values of allowed at. Rydberg series in the rare gases, thus at. nomenclature is used in the assignment of the mol. Rydberg series. Higher energy absorptions in the spectra of Me_2Se and Me_2Te are assigned as originating from a nonbonding orbital of a_1 symmetry localized on the central atom. In the 3 spectra, vibrational progressions are analyzed with respect to ground state totally sym. vibrational frequencies. Utilizing Franck-Condon factors and harmonic oscillator potentials, the excited state geometry changes were similar, where the C-X-C (X = S, Se, or Te) bond angles are essentially unchanged and the C-X bond distances are changed approx. 0.040 Å from the ground state bond lengths for all 3 compds.

1973



(Vc)

11 Д334. Об анализе вращательных спектров в возбужденных состояниях крутильных колебаний молекул, содержащих две метильные группы. Trinkaus A., Dreizler H., Rudolph H. D. Zur analyse der Rotationsspektren in torsionsangeregten Zuständen von Molekülen mit zwei methylgruppen. «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 5, 750—758 (нем.; рез. англ.)

С учетом кинематического и динамич. взаимодействий метильных групп и взаимодействия крутильных колебаний с вращением выполнен теоретич. анализ вращательных микроволн. спектров молекул пропана, диметилсилана и диметилсульфида в основном и в первых двух возбужденных состояниях крутильных колебаний. Проведена теоретико-групповая классификация крутильно-вращательных уровней по неприводимым представлениям прямого произведения $\text{C}_{3v} \otimes \text{C}_{3v}$ точечных групп C_{3v} , определены правила отбора и статистич. веса уровней.

x. 1973 № 11

(+2)

X

1821-57 *

ней. Выведены выражения для элементов матрицы крутильно-вращательной энергии в симметризованном базисе волн. ф-ций, составленных из волн. ф-ций свободных крутильных колебаний и вращения жесткого асимметричного волчка. Для диагонализации матрицы энергии использован метод контактных преобразований в численном варианте. Из эксперим. данных по микроволн. спектрам вычислены значения барьера V_3 и параметра динамич. взаимодействия V_{12}' и получено $V_3 = 3294, 1646$ и 2182 кал/моль, $V_{12}' = -158, -38$ и 36 кал/моль для пропана, диметилсидана и диметилсульфида соответственно.

М. Р. Алиев

40304 6002

TE, Ph, Ch

$(CH_3)_2S$

40777

мол. биол. науки

(E)

1974

В-3926

Bendazzoli G.L., Gottarelli G., Palmieri P. Electronic excited states of organic sulfides.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N1, 11-16

(англ.)

(см. H_2S ; III)

0056 мм

038

039

049

ВИНИТИ

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

У - 4601
XIV - 6210

1974

м.п.; Д.и.
геометр.

4 Д587. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент этантиола. I. Трансизомер. Hayashi Michiro, Imaishi Hisae, Kuwada Kazunori. Microwave spectrum, structure and dipole moment of ethanethiol. I. Trans isomer. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1974, 47, № 10, 2382—2388 (англ.)

В диапазоне 8,4—34 Гц измерены микроволн. спектры транс-этантiola $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ (I) и 8 н отоич. разновидностей I, содержащих ^{34}S , ^{13}C или D. Идентифицированы линии переходов между низкими вращательными уровнями (не более 21 линии для каждой молекулы) в основном колебательном состоянии. Определе-

ф. 1975-14

ны значения вращательных постоянных всех 9 изотопозамещенных, из которых вычислены структурные r_s -параметры *транс*-этантиола: $SH=1,322$, $SC=1,820$, $CC=1,529$ Å, $CSH=96^\circ 13'$, $CCS=108^\circ 34'$ (для метиленовой группы $CH=1,090$ Å, $SCH=109^\circ 26'$, $HCC=110^\circ 14'$, $HCH=108^\circ 54'$; для метильной группы $CH_3=1,095$, $CH_a=1,092$ Å, $CCH_3=109^\circ 40'$, $CCH_a=110^\circ 35'$, $H_3CH_a=108^\circ 53'$, $H_aCH_a=108^\circ 70'$). Полученное значение длины связи CC близко к значению CC в пропане, а значение угла SCC значительно меньше значений углов HCC в родственных молекулах. По эффекту Штарка на 8 переходах найден дипольный момент *транс*-этантиола: $\mu_a=1,058$, $\mu_b=1,146$, $\mu_t=1,560$ ед. Дебая. М. Р. Алиев

1974

оттиски 2441

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

(м.к.)

3 Б202. Определение ридберговых и валентных переходов в электронном спектре поглощения диметилсульфида. McDiarmid Ruth. Assignments of Rydberg and valence transitions in the electronic absorption spectrum of dimethyl sulfide. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 1, 274—281 (англ.)

Исследованы спектры поглощения $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ (I) и I-d_6 (II) в газовой фазе при -77° в области ~~от 2500 до 1250 Å~~ (вплоть до границы первого ионизационного потенциала), а также p-ров I в н-гептане (III), трифторэтанолe (IV) и смеси III с IV в области 2500—1800 Å. В спектрах I (и II) идентифицировано свыше 20 электронных переходов. Большинство из них, в основном, расположенных в коротковолновой области спектра, идентифицированы, как ридберговы переходы, к-рые сгруппированы в три серии. В области поглощения,

х. 1975. №3

соотв-щей этим переходам, наблюдалась четко выра-
женная колебательная структура. Исследована зави-
симость величины, характеризующей разность значений
частот основных колебаний в основном и возбужден-
ном состояниях в молекулах I и II от изменения зна-
чения эффективного квантового числа, входящего в ф-лу
Ридберга. Сделан вывод, что ридберговы переходы, рас-
положенные в более длинноволновой области спектра,
являются смешанными с переходами из других (не рид-
берговых) состояний, у к-рых значения частот основ-
ных колебаний значительно ниже, чем для ионных со-
стояний, а также, что смешивание состояний уменьшается
с продвижением в коротковолновую область. Пока-
зано, что диффузные полосы в области $>1800 \text{ \AA}$ обус-
ловлены двумя не-ридберговыми («валентными») пере-
ходами.

А. Н. Никитина

1974

 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ (диметил. сульфид)

83812n Assignments of Rydberg and valence transitions in the electronic absorption spectrum of dimethyl sulfide. McDiarmid, Ruth (Natl. Inst. Arthritis Metab. Dig. Dis., Natl. Inst. Health, Bethesda, Md.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(1), 274-81 (Eng). The electronic absorption spectra of Me_2S and $(\text{CD}_3)_2\text{S}$ were recorded at 1250-2500 Å. Twenty-four of the obsd. transitions were arranged into 3 Rydberg series originating

C.A. 1974. 81. N14

Ommuch 2441

from the b_1 nonbonding orbital. These Rydberg series were identified as $1s$, $1p$ and $1d$ series. From their isotope zero point energy shifts and obsd. vibronic structures, the Rydberg states were deduced to be contaminated by other states. Two unmistakably non-Rydberg transitions were obsd. From soln. and solvent shift data, they were proposed to arise from promotions out of the a_1 bonding orbital.

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

1974.

Schweig A; Thiel W.

"Mol. Phys"

Спектр

1974, 27, N1, 265-68

(см. CD_2 ; III)

Зак. 247

XIV-7524

1974

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

Энергия

Ридберг. сост.

7 Д145. Корреляция между энергией термов некоторых молекул и атомов инертных газов. Scott John D., Causley G. C., Russell B. R. Correlation of molecular and rare gas term values. «Chem. Spectroscopy and Photochem. Vacuum—Ultraviolet». Dordrecht—Boston, 1974, 403—406 (англ.)

Используя литературные данные о спектрах ридберговских серий молекул диметилсульфида, диметилселенида и диметилтеллурида, авторы установили корреляцию между энергией ридберговских состояний этих молекул и атомов Ar, Kr и Xe. Эти атомы в таблице Менделеева находятся в одном ряду с атомами S, Se и Te, входящими в состав молекул. Найдено, что соответствующие энергии ридберговских состояний этих молекул и атомов инертных газов близки друг к другу.

Б. Ф. Горднеев

Ф 1976 №

X (72)

C_2H_5SH

1974

спектр.
испуск.

Спектры испускания сероводорода,
сероводорода и тиолов, возбуж-
даемые контролируемым
электронным ударом.

"Bull. Chem. Soc. Jap." 1974, 47, №1,
95-98 (англ.) Toyota Minoru,
Ogawa Teichiro.

X. 1974. №16

(с H_2S) III
 CS_2

1974

(CH₃)₂S

(Di)

ф. 1975
N 1

1 Д205. Изменение частот валентных колебаний дисульфидной связи с изменением двугранного угла в дисульфидной группировке диметилдисульфида. Van Wart Harold E., Shipman Lester L., Scheraga Harold A. Variation of disulfide bond stretching frequencies with disulfide dihedral angle in dimethyl disulfide. «J. Phys. Chem.», 1974, 78, № 18, 1848—1853 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении. ППДП/2 исследовано электронное строение и равновесная геометрия диметилдисульфида (I) и зависимость частоты валентного колебания S—S от валентного угла C—S—S и двугранного угла между плоскостями C—S—S. Равновесная геометрия хорошо согласуется с опытной, исключая длину связи S—S, заниженную на 10%. Рассчитанная частота завышена сравнительно с опытом, однако найденные зависимости хорошо воспроизводят наблюдаемые. На основании полученных результатов кратко обсуждены конформационные свойства соединений, содержащих группировку C—S—S—C, в том числе белков и других биомолекул.
В. Л. Лебедев

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

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

авторизован (КФМН) 1975

Аскеров Аскербакрам Атаов.

Исследование м. в-вращат.
спектра возбужденных
состояний молекул $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{SH}$,
спектров и структур.

1975

 $(CH_3)_2S$

(2i)

18 Б203. Об использовании центробежных постоянных для получения информации о скелетных колебаниях больших молекул. Cook Robert L. On the use of

distortion constants to obtain information on the skeletal motions of large molecules. «J. Mol. Struct.», 1975, 26, № 1, 126—128 (англ.)

По эксперим. данным для постоянных центробежного искажения τ_{aaaa} при замене групп CH_3 , CH_2 и CN точечными массами вычислены силовые постоянные и частоты для скелетных колебаний молекул $(CH_3)_2S$, CH_2F_2 и $CH_2(CN)_2$. Полученные значения частот полносим. вал. и деф. кол. связей C—S в $(CH_3)_2S$ и C—F в CH_2F_2 согласуются с их эксперим. значениями (расхождение менее 40 см^{-1}).

М. Р. Алнев

X 1975 N 18



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

Страница 6567

1975

Д 21 Б1005 Деп. Колебательные спектры и термодинамические функции диметилсульфида, -сульфоксида и -сульфана. Г р и ц а е в Е. И., Д о з м о р о в С. В., С л и ж о в Ю. Г. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1975. 4 с., библиогр. 6 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 4 авг. 1975 г., № 2368—75 Деп.)

В приближении модели гармонич. осциллятора — жесткий ротатор рассчитаны термодинамич. функции при $P=760$ мм и $T=293$ К для $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_2$. Найдены значения частот торсионных колебаний метильных групп и определены барьеры вращения вокруг связей C—S. Автореферат

(75) ☒

2 1975 №21

1975

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

4 Д174. Изучение электронной структуры и спектра диметилсульфида. Хаустова В. И., Данилова В. И. «Изв. высш. учеб. заведений. Физика», 1975, № 10, 47—50

Методом ППДП в многоконфигурац. приближении со спектрометрич. параметризацией рассчитана электронная структура и синглет-синглетные спектры поглощения молекулы диметилсульфида. Расчет выполнен как с учетом, так и без учета $3d$ АО серы. Вычисленные энергии МО хорошо согласуются с экспериментом. Показано, что электронный переход с энергией 5,41 эв вызван возбуждением электрона неподеленной пары атома S. Полоса с энергией 6,45 эв связана с переходом этого электрона на антисвязывающую орбиталь a_1 хромофора C—S—C. Коротковолн. переходы (7,74 и 8,13 эв) обусловлены возбуждением электрона неподеленной пары атома S на его $3d$ -орбитали.

Электронная
структура.

Ф 1976 N4

XIV-7317

1975

$$\text{C}_3\text{H}_3\text{CH}_2\text{SH} \text{ (м.п., цис-структ.)}$$

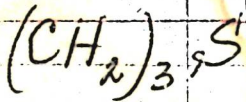
Hayashi M., Nakagawa J.,
Kuwada K.

Chem. Lett., 1975, N12, 1267-1270

1267-129

10

1975

молекула
триметилен

24 Б154. Исследование молекулярной структуры триметиленсульфида методом газовой электронографии с привлечением данных о вращательных постоянных. Karakida Ken-ichi, Kuchitsu Kozo. Molecular structure of trimethylene sulfide as studied by gas electron diffraction with joint use of rotational constants. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1975, 48, № 6, 1691—1695 (англ.)

С помощью данных по газовой электронографии для молекулы триметиленсульфида вычислены структурные параметры. Использование лит. данных о вращательных постоянных позволило существенно уточнить угловые параметры и параметры атомов водорода. При вычислениях предполагали, что средние положения атомов во-

21975 №24

дорода таковы, при к-рых плоскость HCN перпендикулярна плоскости, проходящей через атом углерода и два соседних атома кольца, а биссектрисы углов коллинеарны. Анализ выполнен с помощью матрицы ошибок. Окончательно определены след. структурные параметры: $r(\text{C}-\text{S}) = 1,847 \pm 0,002$ А, $r(\text{C}-\text{C}) = 1,549 \pm 0,003$ А, $r(\text{C}_\alpha-\text{H}) = 1,09 \pm 0,02$ А, $r(\text{C}_\beta-\text{H}) = 1,12 \pm 0,04$ А, $\angle \text{C}-\text{S}-\text{C} = 76,8 \pm 3^\circ$, $\angle \text{H}-\text{C}_\alpha-\text{H} = 112 \pm 4^\circ$, $\angle \text{H}-\text{C}_\beta-\text{H} = 114 \pm 5^\circ$ и двугранный угол $\angle \text{C}_2\text{SC}_4-\text{C}_2\text{C}_3\text{C}_4 = 26 \pm 2^\circ$. Полученные данные в пределах точностей согласуются с микроволновыми данными.

С. Н. Мурзин

50328.7208
Ch, TC

$(CH_3)_2S$ 92073

*

1975
4-8388

Sakai Hideki, Yamabe Tokio, Kato Hiroshi,
Nagata Shinichi, Fukui Kenichi.

An MO theoretical investigations of
the electronic spectra of divalent
sulfur compounds.

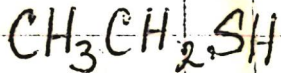
"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1975, 48, N 1, 33-36

(англ.)

0328 пик

312 312

ВИНИТИ



от. 4070

1975

21 Б296. Микроволновый спектр этилмеркаптана.
Schmidt R. E., Quade C. R. Microwave spectrum of
ethyl mercaptan. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 10,
3864—3874 (англ.).

Изучен МВ-спектр транс- и гош-изомеров нормально-
го и двух изотопич. образцов этил меркаптана, CH_3 -
 CH_2SH в основном и первом возбужденном колебатель-
ном состояниях и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SD}$ и $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{SH}$ в основном
колебательном состоянии, в области частот 12—40 Ггц.
Для всех образцов и всех состояний определены вра-
щательные постоянные, в двух случаях определены посто-
янные центробежного искажения. Для транс- и гош-изо-

(м.п.)

XIV-6566a

ж 1975 N 21

меров нормального образца в основном состоянии вращательные постоянные, Мгц соотв. $A=28416,59$ и $28746,371$, $B=5485,76$ и $5294,850$, $C=4881,81$ и $4846,950$. По эффекту Штарка 2-го порядка для 7 переходов для всех образцов и всех состояний определены компоненты дипольного момента. Для транс- и гош-изомеров нормального образца в основном состоянии компоненты дипольного момента и полный дипольный момент равны соотв. $\mu_a=1,06\pm0,03$ и $1,49\pm0,02$, $\mu_b=1,17\pm0,03$ и $0,19\pm0,1$, $\mu_c=0$ и $0,59\pm0,02$, $\mu=1,58\pm0,04$ и $1,61\pm0,05$ D. В случае транс-изомера барьер внутреннего вращения метильной группы равен 1156 ± 30 см⁻¹. Уточнены структурные параметры молекулы. С. Н. Мурзин

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

(м. в. спектр)

$\text{C}_0(\text{CH}_3)$

Ф. 1975, 11

4070

1975

39959-11X

11 Д470. Микроволновый спектр этилмеркаптана.
Schmidt R. E., Quade C. R. Microwave spectrum of
ethyl mercaptan. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 10,
3864—3874 (англ.)

) Исследованы микроволн. спектры транс- и гошизо-
меров норм. (I) и двух изотопич. образцов ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{-}$
 SD (II) и $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{SH}$ (III)) молекулы этилмеркап-
тана. Идентификация спектра трансизомера I и III
расширена вплоть до $J=19$. Определены вращательные
постоянные гошизомера всех образцов. С помощью
квадратичного эффекта Штарка получены значения ди-
польного момента: $\mu_a=1,06\pm0,03$; $\mu_b=1,17\pm0,03$; $\mu_c=$
 $=0$; $\mu_{\text{общ}}=1,58\pm0,4$ ед. Дебая (для трансизомера I)
и $\mu_a=1,48\pm0,02$; $\mu_b=0,19\pm0,10$; $\mu_c=0,59\pm0,02$; $\mu_{\text{общ}}=$
 $=1,61\pm0,05$ ед. Дебая (для гошизомера I). Барьер
внутреннего вращения CH_3 -группы для трансизомера
найден равным 1156 ± 30 см^{-1} . Определены коэф. по-
тенц. ф-ции для SH-группы: $V_1=-65$ см^{-1} , $V_2=$
 $=-135$ см^{-1} , $V_3=440$ см^{-1} .

$(CH_3)_2S$

1975

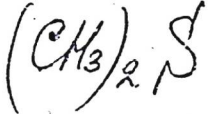
Y₂

84: 128694f Flash photolysis study of dimethyl sulfide and iodine in the gas phase. Smalley, John F., (Rensselaer Polytech. Inst., Troy, N. Y.). 1975. 232 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 75-25,886. From Diss. Abstr. Int. B 1975, 36(5), 2250-1.
04: 106605- Kinetics of radiative chemisorption of hydrogen

unpublished.
pencil

(+1) ☒

C.A. 1976 84 N18



1976

Conbeall D., et al.

J. Chim. phys., et
phys.-chim. biol., 1976,
73, N7-8, 787-94.

(электрон.
структура
иол. парам.)

(all. H_2CS ; III)

$(CH_3)_2S$

*4-16847

1976

$(CH_3)_2Se$
 $(CH_3)_2Te$

спектры
К.Р.

(+1) ☒

Х. 1977. № 11

11 Б190. Спектры комбинационного рассеяния, инфракрасные спектры и спектры протонного магнитного резонанса и строение диметилхалькогенидов. Hamada Keinosuke, Morishita Hirofumi. The Raman, infrared and proton NMR spectra and the structures of dimethyl chalcogenides. «Spectrosc. Lett.», 1976, 9, № 11, 743—747 (англ.)

Обсуждены результаты исследования строения ряда диметилхалькогенидов CH_3-X-CH_3 ($X=O, S, Se, Te$) с помощью колебательной спектроскопии и спектроскопии ПМР. Сделан вывод о линейном строении этих соединений. Указана причина ошибочной интерпретации колебательных спектров в более ранних работах. Рассмотрена возможность существования линейной структуры для данных соединений с точки зрения теории гибридизации.

Ю. Н. Панченко

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

АС - 17652

- 1976

14 Б246. Микроволновый спектр, структура, дипольный момент и внутреннее вращение этанэтиола. II. Гош-изомер. Nakagawa Jun, Kuwada Kazunori, Hayashi Michiro. Microwave spectrum, structure, dipole moment and internal rotation of ethanethiol. II. Gauche isomer. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1976, 49, № 12, 3420—3432 (англ.)

Измерены МВ-спектры десяти изотопич. образцов гош-изомера этанэтиола, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$, в основном и в первых возбужденных SH и CH_3 торсионных состояниях и транс-изомера $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ в возбужденных SH и CH_3 торсионных состояниях в области частот от 8 до 43 ГГц. Для всех образцов и состояний определены вращательные постоянные, главные моменты инерции и постоянные центробежного искажения. Для нормального изотопного образца (I) в основном состоянии вращательные постоянные равны (в МГц) $A=28747,09(50)$, $B=5294,78(12)$, $C=4846,18(12)$. При ряде допущений определена r_s -структура I. Структурные параметры групп CSH и CH_3C для I совпадают с аналогичными параметрами для транс-изомера, за исключением не-

М.И.
геометрия

12058-11X-8564
B9-11X-461

X.1977. N14

сколько более длинной SH и более короткой CS связей. Двугранный угол CSSH для I равен $61^{\circ}45'(58')$. Значительно отличаются для двух изомеров шесть углов связей около атома C в группе метилена. Определены коэф. Фурье внутреннего вращения меркаптогруппы: $V_1=207(67)$, $V_2=386(27)$, и $V_3=1305(20)$ кал/моль, и потенциальный барьер внутреннего вращения CN_3 группы для транс-изомера: $V_3=3260(30)$ кал/моль. Из полученных структурных данных и известных данных о дипольном моменте I определено возможное направление дипольного момента. Сообщ. I см. РЖХим, 1975, 14Ф1308. С. Н. Мурзин

70228.3475
Ph, TC

$(CH_3)_2$ 840892

1976
* 8-17237

Scott John D., Russell B.R.
Erratum: electronic symmetries, dipole moments, and polarizabilities of molecules in Rydberg states determined from electric-field effects on absorption spectra.
"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 12, 5540
(англ.)

0822 ЕММ

793 801

813

ВИНИТИ

1976

 $(CH_3)_2S$ $(C_2H_5)_2S$ спектры
К.Р.

⊕ ⊗

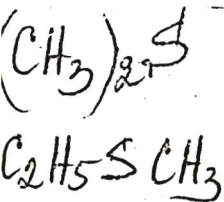
16 Б203. Низкочастотные спектры комбинационного рассеяния диметил-, метилэтил- и диэтилдисульфидов и поворотная изомерия относительно связей углерод — сера в них. Van Wart H. E., Cardinaux F., Scheraga H. A. Low frequency Raman spectra of dimethyl, metnyl ethyl, and diethyl disulfides. and rotational isomerism about their carbon — sulfur bonds. «J. Phys. Chem.», 1976, 80, № 6, 625—630 (англ.)

Исследована т-рная ($T=77-320^\circ K$) зависимость спектров КР диметил-, метилэтил- и диэтилдисульфидов в области $80-800\text{ см}^{-1}$. Характер изменения относит. интенсивностей линий в спектрах при $\sim 500\text{ см}^{-1}$ и $200-400\text{ см}^{-1}$ указывает на то, что для всех изученных соединений в жидком состоянии присутствуют три поворотных изомера (вращение вокруг связей C—S), в кристалле остаются лишь два из них, разность энергий к-рых невелика. Анализ результатов электронографич. исследований для метилэтилдисульфида и рентгенографич. исследованиями дитиогликолевой к-ты (а также

X. 1976. № 16

ее спектрами КР) показывает, что транс-конформациям отмечает колебание связи S—S с частотой 508 см^{-1} (в крист. состоянии исчезают линии с частотами 524 см^{-1}). Уточнено отнесение линий в спектрах к различным типам колебаний. По т-рной зависимости относит. интенсивностей линий оценена разность энергий поворотных изомеров. А. Бобров

ГОУ,
ТОЯНИ:



1976

16 Б91. Структуры диметилдисульфида и метилэтил-
 дисульфида, определенные методом газовой электроно-
 графии. Колебательный анализ среднеквадратичных ам-
 плитуд. Yokozeki A., Bauer S. H. Structures of di-
 methyl disulfide and methyl ethyl disulfide, determined by
 gas-phase electron diffraction. A vibrational analysis for
 mean square amplitudes. «J. Phys. Chem.», 1976, 80, № 6,
 618—625 (англ.)

молекул.
 структ.

Методом газовой электронографии изучена структура
 молекул MeS_2Me (I) и EtS_2Me (II). Найдены след. зна-
 чения межъядерных расстояний (r_g , Å) и углов: I, C—S
 $1,816 \pm 0,003$, S—S $2,029 \pm 0,003$, C—H $1,105 \pm 0,005$, $\angle SSC$
 $103,2 \pm 0,2^\circ$, $\angle SCH$ $111,3 \pm 0,6^\circ$, угол поворота вокруг связи
 S—S Φ_3 (CS—SC) $85,3 \pm 3,7^\circ$; II, C—S $1,817 \pm 0,004$, S—S
 $2,031 \pm 0,003$, C—C $1,540 \pm 0,007$, C—H $1,111 \pm 0,005$,
 $\angle CCS$ $112,4 \pm 1,6^\circ$, $\angle SSC$ $103,2 \pm 0,3^\circ$, Φ_3 (CS—SC) $84,4 \pm$
 $\pm 6,9^\circ$. Для II эксперим. данные не настолько точны,

(+1) ☒

х. 1976 № 16

чтобы получить однозначные результаты относительно поворотной изомерии вокруг связи $CC-SS$. Однако, из анализа этих данных следует, что в парах II присутствует более 2-х конформеров, содержание транс-конформера достаточно велико, а эксперим. значениям интенсивностей удовлетворяет набор конформаций, зависящий от относит. стабильностей цис-, двух гош- и двух скрученных форм. При помощи силового поля Юри—Бредли со значениями констант, перенесенных из аналогичных молекул, рассчитаны амплитуды колебаний и колебательные поправки в структурных параметрах  В. Спиридонов

CH₃SCM₃

[* 4-18367]

1977

Dewar Michael J.S.

J. Amer. Chem. Soc.

1977, 99, N6, 1685-91.

(packet
red. zacet.)

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

оттиски 5735 1974

2 Д153. Анализ спектров крутильных колебаний молекул, содержащих два внутренних волчка с симметрией C_{3v} . VIII. Потенциальная функция крутильного колебания диметилсульфида. Durig J. R., Griffin M. G. Analysis of torsional spectra of molecules with to internal C_{3v} rotors. VIII. The torsional potential function of dimethylfulfide. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 5, 2220—2223 (англ.)

Уо; м.ч.

Исследованы спектр комб. рас. в области 50—3500 см^{-1} и ИК-спектр в области 100—400 см^{-1} молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ в газовой фазе. Дано отнесение полос к основным колебаниям. В низкочастотном спектре комб. рас. и в длинноволновом ИК-спектре идентифицированы полосы переходов между различными уровнями крутильных колебаний метильных групп. По частотам этих переходов вычислены значения барьера внутреннего вращения $V_3 = 1,89$ ккал/моль и коэф. взаимодействия метильных групп $V_{33} = 0,42$ ккал/моль. М. Р. Алиев.

ф. 1978
№ 2

$(CH_3)_2 S$

omni 5735

1977

Ho, Jr.
Raman
спектр

S7: 159574h Analysis of torsional spectra of molecules with two internal C_{3v} rotors. VIII. The torsional potential function of dimethyl sulfide. Durig, J. R.; Griffin, M. G. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S. C.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(5), 2220-3 (Eng). The Raman spectrum of gaseous Me_2S was recorded between 50 and 3500 cm^{-1} . The region from 300 to 400 cm^{-1} was recorded with a resolu. of 2 cm^{-1} . The far-IR spectrum was recorded from 100 to 400 cm^{-1} with a resolu. of 0.25 cm^{-1} . Considerable torsional data are reported and used to characterize the torsional potential function based on a semirigid model. The av. effective V_3 was 659 ± 3 cm^{-1} . The cosine-cosine coupling term V_{33} was 146 ± 8 (0.42 kcal/mol) and the sine-sine term V_{33} has a value of -22 ± 3 cm^{-1} (-0.06 kcal/mol). These data are compared to the corresponding quantities obtained from microwave data. Comparisons are also given to similar quantities obtained for other mols.

C.A. 1977, 87, 120

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

и.п. 40

2, №2, 1978

V/5 Б220. Анализ спектра крутильных колебаний молекул с двумя внутренними C_{3v} -роторами. VIII. Крутильная потенциальная функция диметилсульфида. Dugig J. R., Griffin M. G. Analysis of torsional spectra of molecules with to internal C_{3v} rotors. VIII. The torsional potential function of dimethylsulfide. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 5, 2220—2223 (англ.)

Измерены в области частот $100\text{--}400\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,25\text{ см}^{-1}$ ИК-спектр и в области частот $50\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ с разрешением 2 см^{-1} спектр КР диметилсульфида, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. Идентификация спектров выполнена с использованием модели двух внутренних роторов с симметрией C_{3v} и остова молекулы с симметрией C_{2v} . Получены следующие значения постоянных крутильной потенциальной функции (см^{-1}): $V_{30}=V_{03}=804,3\pm6,2$, $V_{33}=145,8\pm8,4$, $V_{33}'=-22,4\pm3,1$. Среднее эффективное значение барьера внутреннего вращения V_3 равно $659\pm\pm3\text{ см}^{-1}$, что на 175 см^{-1} ниже соотв-щего параметра для диметилового эфира и на 40 см^{-1} ниже параметра для диметилфосфина. Вычисленное значение параметра V_{33} составляет $\sim 15\%$ от величины V_3 , что хорошо согласуется с соотв-щими величинами для родственных молекул с двумя внутренними C_{3v} -роторами. Ч. VII см. пред. реферат.

С. Н. Мурзин

1978
5735
отмеч

CH₃SCN₃

Quinn 5380 1944

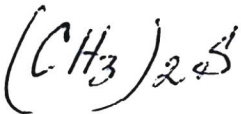
(7)

Gibson M. W.

Can. J. Chem. 1944,

55, 2834-41

1977



Структ.
молекулы

5 Б94. Структура молекулы диметилсульфида: Iijima Takao, Tsuchiya Shuzo, Kimura Masao. The molecular structure of dimethyl sulfide. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1977, 50, № 10, 2564—2567 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы диметилсульфида $(\text{CH}_3)_2\text{S}$. Путем совместного анализа электронографич. и микроволновых (см. «J. Chem. Phys.», 35, 479) данных найдены след. значения межъядерных расстояний (r_g , Å) и углов: S—C 1,807(2), C—H 1,116(3), $\angle$ CSC 99,05 (4)°, $\angle$ HCH 109,3(5)°. В ходе структурного анализа принята симметрия метильных групп C_{3v} и их наклон по отношению к оси S—C 2,35°. Изучение изотопного замещения водорода на дейтерий показало, что при т-ре абс. нуля угол ДСД для средн. структуры должен быть больше угла HCH.

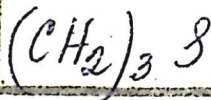
В. Спиридонов

22, № 5, 1978

70310.1231

B, Ch, TC

96615



отт

1977

4942

Mastryukov V.S., Osina E.L.
Empirical relation between bond angles
in C-CH₂-C fragments.

"J. Mol. Struct.", 1977, 36, N 1, 127-132

(англ.)

0829

785

788

18 20

ВИНИТИ

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

1977

центроб.
искаж.
М. И.

9 B181. Центробежное искажение в триметиленсульфиде. Nielsen C. J. Centrifugal Distortion in thieta-
ne. «Acta chem. scand.», 1977, A31, № 9, 791—792 (англ.)
Исследован МВ-спектр триметиленсульфида (I) в ко-
лебательных состояниях $V=0,1$ деф. кол. изгиба кольца
в области 8000—40 000 Мгц. Полученный спектр интер-
претирован на основе эффективного двухуровневого коле-
бательно-вращательного гамильтониана, включающего
квартич. и секстич. члены центробежного искажения по
Уотсону в состояниях $V=0,1$ и члены, ответственные за
деф. кол. кольца большой амплитуды вида $0 > H_c < 1 | +$
 $+ | 1 > H_c < 0 |$, где $H_c = \mu_{yz}(J_y J_z + J_z J_y)$, или $L_x J_x$ (L_x —
х-компонента внутреннего углового момента). Определе-
ны след. значения молек. постоянных I $A = 10\,107,2018 \pm$

Л. 1978 № 9

$\pm 0,0016$ ($V=0$), $= 10\,107,5431 \pm 0,0013$ МГц ($V=1$), $B =$
 $= 6670,1426 \pm 0,0011$ ($V=0$), $= 6670,0768 \pm 0,0011$ МГц
($V=1$). $C = 4443,6175 \pm 0,0011$ ($V=0$). $= 4444\,2911 \pm$
 $\pm 0,0011$ МГц ($V=1$), $\Delta J = 2,386 \pm 0,019$ ($V=0$). $= 2,388 \pm$
 $\pm 0,020$ КГц ($V=1$). $\Delta JK = -2,171 \pm 0,060$ ($V=0$).
 $= -2113 \pm 0,049$ КГц ($V=1$). $\Delta K = 6,69 \pm 0,10$ ($V=0$).
 $= 6,769 \pm 0,90$ КГц ($V=1$). $\delta_J = 0,6119 \pm 0,0044$ ($V=0$),
 $= 0,599 \pm 0,030$ ($V=1$) КГц, $\delta_K = 2,085 \pm 0,033$ ($V=0$),
 $= 1,954 \pm 0,031$ КГц ($V=1$), $h_{JK} = 0,0943 \pm 0,0037$ ($V=0$),
 $= 0,0757 \pm 0,0019$ ($V=1$) гц, $W_{01} = \langle 1 | H^0_{\text{vib}} | 0 \rangle =$
 $= \langle 0 | H^0_{\text{vib}} | 0 \rangle = 8231,961 \pm 0,015$ МГц, $\mu_{yz} = 121,3323 \pm$
 $\pm 0,00400$ МГц.

А. П. Александров

$(CH_3)_2S$

расчет,
много
ссылки
србичский
Но:

ссылка 5515 1977

Whangbo M-H;

Can. J. Chem., 1977,

55, 2778-2787

0111111111 8089

1978

CH₃CD₃S

Uo

racman-
-cunip

89: 67973a Application of the Raman effect for the determination of the coupling parameters for molecules with two C_{3v} rotors. Durig, J. R.; Natter, W. J. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S. C.). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1978, 16(3), 385-93 (Eng). The recent vibrational anal. of torsional spectra of mols. with 2 internal C_{3v} rotors, in briefly reviewed. These barriers and coupling parameters are compared with the corresponding quantities obtained from microwave data. Comparisons with similar quantities obtained for several mols. are also given. To demonstrate the utility of the Raman effect in detg. the torsional potential function and the coupling parameters, the Raman spectrum of gaseous MeCD₃S was recorded between 50 and 3500 cm⁻¹. The region from 50 to 400 cm⁻¹ was recorded with a resolu. of 2 cm⁻¹. The far-IR spectrum was recorded from 100 to 400 cm⁻¹ with a resolu. of 0.25 cm⁻¹. Considerable torsional data are reported and used to characterize torsional potential function based on a semi-rigid model. The av. effective V₃ was 685 ± 20 cm⁻¹ (1.95 kcal/mol). The cosine-cosine coupling term (V₃₃) was 37 ± 29 cm⁻¹ (0.11 kcal/mol) and the sine-sine coupling term (V₃₃) has a value of -15 ± 23 cm⁻¹ (-0.04 kcal/mol). These data are compared with the corresponding quantities obtained from microwave data. The results are also compared with those obtained for the "light" mol.

C.A. 197829, N 8

(Сел. ДТТ 8005)
неправ

1978

Manada K, et al

J. Mol. Struct., 1978,

ИК спектры, 44, т. 2, 119-131
стр-ра



(Сел. $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$; III)

1078

 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$ $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_2$ расчет
электрон.
структ.

ф. 1978, N 12

(42)

12 Д180. Теоретическое исследование электронной структуры и спектров диметилсульфида, сульфоксида и сульфона. Хаустова В. И. «Изв. вузов. Физика», 1978, № 5, 19—22

Методом ППДП/С проведены расчеты электронной структуры и спектров диметилсульфида (DMS), диметилсульфоксида (DMSO) и диметилсульфона (DMSO₂). Расчетные значения энергий верхних занятых в основном состоянии МО, а также энергий синглет-синглетных переходов находятся в согласии с эксперим. данными. Переход в низшее возбужденное состояние относится к $n-\pi^*$ типу. Проведен анализ заселенности в основном и в низшем возбужденном синглетном состоянии молекул. Увеличение потенциала ионизации и гипсохромный сдвиг ДВ-плосы поглощения при переходе от DMS к DMSO и DMSO₂ связывается с делокализацией электронной плотности с атома серы на атомы кислорода. И. Р

1978

 $(CH_3)_2S$ $(CH_3)_2SO$ Дисперс-
спектры

22 Б29. Теоретическое исследование электронной структуры и спектров диметилсульфида, сульфоксида и сульфона. Хаустова В. И. «Изв. вузов. Физика», 1978, № 5, 19—22

Методом ППДП в многоконфигурац. приближении со спектроскопич. параметризацией проведен расчет электронного строения молекул диметилсульфида (I), диметилсульфоксида (II) и диметилсульфона (III). Энергии высших МО и низших синглет-синглетных переходов сопоставлены с фотоэлектронными спектрами и с оптич. спектрами поглощения. Сравнение теор. и эксперим. данных показало, что наблюдаемое увеличение потенциала ионизации от I к III вызвано делокализацией электронной плотности с атома S на атом O. Гип-

(41) ☒

д. 1978, N 22

сохромный сдвиг длинноволновой полосы поглощения от I к II и III связан с уменьшением электронной плотности на атоме S и локализацией ее на атомах O. Заселенность 3d-орбиталей атома S возрастает по мере увеличения валентности последнего. В III 3d-орбитали S заселены в основном состоянии молекулы. И. Тополь

$(CH_3)_2S$ omura 6232 1978
Fujima T., Tsuchiya S.
et al.

исслед.
свойств. Bull. Chem. Soc. Japan
1978, 50, (10), 2564-67.

The Molecular Structure
of $(CH_3)_2S$. ●

$(CH_2)_2$ 5 om mcr 6883 1978

McKean D.C., et al.

u.k.
mcr
 $\bar{e}$

J. Mol. Struct., 1978,
49, 275-285

Isolated CH-stretching
frequencies ...

CH_3SCH_3

summen 6960

1978

empyngia
lialia

Tossell J. A.
Gibbs R. W.

Acta crystallogr.,
1978, A34, 463-72

1979

(СМЗ)25

6 Д182. Анализ частот и форм нормальных колебаний диметилсульфида. Бургина Е. Б., Юрченко Э. Н. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 6, 1013—1018

Рассмотрены модели силового поля молекулы диметилсульфида и ее дейтероаналогов. Показано, что хорошее совпадение расчетных и эксперим. частот может быть достигнуто только при учете различий распределения электронной плотности на связях СН, лежащих в плоскости и вне плоскости симметрии молекулы. Получены два набора силовых постоянных для решения прямой спектральной задачи с истинными и спектроскопич. массами водорода и дейтерия, которые в дальнейшем могут использоваться как нулевое приближение силового поля лиганда ДМС при расчете соответствующих комплексных соединений. Резюме

2,
СМЗ-КСГ.

р 1980 №6

C_2H_5SH

1979

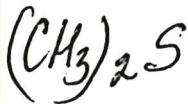
Ғаҗетов В. И.; 1979.

Кв. мех.
фрагм.

Узб. АН СССР. Сер. хим.
1979, (12), 2797-2800

(см. C_2H_5OH ; III)

1979



92: 13187r The Raman and infrared spectra and the structures of dimethyl, methylgermyl and digermyl sulfide. Hamada, Keinosuke; Morishita, Hirofumi (Fac. Educ., Nagasaki Univ., Nagasaki, Japan). *Nagasaki Daigaku Kyoikugakubu Shizen Kagaku Kenkyu Hokoku* 1979, (30), 25-36 (Japan). The IR and Raman spectra of $(\text{Me})_2\text{S}$ (I), $(\text{GeH}_3)_2\text{S}$ (II) and GeH_3SMe (III) indicated D_{3d} symmetry for I and II and C_{3v} symmetry for III.

S. Matsueda



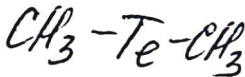
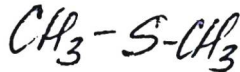
и.к., СКР, Ji
структура



С.А. 1980.92 N2

Витмаск 800.5

1979

геометрия
молекул

8 Б198. Дополнение к статье К. Hamada и Н. Morishita о структуре молекул $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ («J. Mol. Struct.», 1978, 44, 119). McKean D. C., Duncan J. L. Objections to the paper concerning the structure of $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ molecules by K. Hamada and H. Morishita, «J. Mol. Struct.», 44 (1978) 119. «J. Mol. Struct.», 1979, 51; № 1, 149—150 (англ.)

Критически разобран вывод статьи К. Hamada и Н. Morishita о линейности скелета молекул $\text{CH}_3-\text{X}-\text{CH}_3$ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$). Это утверждение основано на неправильной интерпретации колебательного спектра плохого кач-ва. Вывод не согласуется с данными микро-волновых спектров, измерений дипольных моментов молекул и электронографич. данными, из к-рых следует, что угол $\angle \text{COC} = 111^\circ 43'$, $\angle \text{CSC} = 98^\circ 52'$, $\angle \text{CSeC} = 96^\circ 11'$. Отсутствие совпадающих частот в ИК-спектрах и спектрах КР еще не является доказательством линейности подобных структур. Только обратное утверждение имеет смысл: совпадение частот в колебательных спектрах свидетельствует об отсутствии центра симметрии молекул.

И. А. Гарбузова

Х-1579/8

$(CH_3)_2S$

number 10218

1980

See Donald H. et al.

found.
enrich

J. Amer. Chem. Soc. 1980,
102, 116, 5454-57

cc. $(CH_3)_2NH$ - $\overline{H}$

$(CH_3)_2S$

ommuch 10749

1980

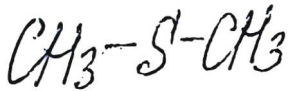
✓ 93: 212680s Microwave spectrum of dimethylsulfide; determination of the methyl top moment of inertia. Demaison, J.; Schwach, D.; Tan, B. T.; Rudolph, H. D. (Dep. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 83(2), 391-400 (Eng). The vibrational ground-state rotational transitions of the 2-top mol. Me_2S show triplet or quartet structure due to the Me top internal rotation. A sufficient no. of quartets originating from near-degeneracies were included in earlier data to obtain a reliable value of the Me top moment of inertia, $I_{\alpha}^{1r} = 3.242 \text{ amu.}\text{\AA}^2$. For a mol. of this type I_{α} can also be independently detd. from a consideration of the carefully cor. inertial defect Δ . $I_{\alpha}^0 = 3.134 \text{ Amu.}\text{\AA}^2$, which is of r_0 quality and (by employing Δ of both Me_2S and $(CD_3)_2S$) $I_{\alpha}^0 = 3.212 \text{ amu.}\text{\AA}^2$, which should approach r_e quality.

M. L. C. C. C.

C. A. 1980, 93 N 22

Оттиск 14933

1982



Раман спектр,
ИК спектр,
структура

Hamada K., Moris-
hita H.,

Spectrosc. Lett.,
1982, 15, N6, 481-

497

C_2H_5SH

1983

Okno K., Imal K., et al.

Электрон. $J.$ Phys. Chem., 1983,
спектр. 87, N 22, 4346-4348.

(сер. $C_2H_5NH_2$; III)

$S(CH_3)_2$

1984

Magnusson Eric.

2000emp;
pacrem.

J. Comput. Chem.,
1984, 5, N6; 612-628.

($\bullet$ ser. PH_3 ; III)

C_2H_5SH

[Om. 20 663]

1984

Ohzawa M., Ichishi T.,
et al.,

ab initio
param

Bull. Chem. Soc. Jap.,
1984, 57, N10, 2791-2796



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

~~Am.~~ 20618) 1984

7 Б1175. Теоретические и экспериментальные потенциалы ионизации $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_2$. Влияние заместителей R на сдвиги рентгеноэлектронных спектров серы в рядах R_2S , R_2SO и R_2SO_2 . Theoretical and experimental ionization potentials of $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ and $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$. 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., Csizmadia I. G., Robb M. A. «J. Mol. Struct.», 1984, 110, № 3—4, Suppl.: «Theochem.», 19, № 3—4, 381—387 (англ.)

у;

Измерены рентгеноэлектронные спектры (РЭС) основных $\text{O}1\text{s}$ -, $\text{Cl}1\text{s}$ - и $\text{S}2\text{p}$ -уровней в молекулах $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$ в газовой фазе. Методом ССП МО ЛКАО в двухэкспонентном базисе гауссовых ф-ций рассчитано электронное строение молекул $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$. Для обеих молекул в рамках теоремы Купманса и в приближении $\Delta\text{ССП}$ проведены расчеты потенциалов ионизации (ПИ) основных и валентных уровней. Теор.

Х. 1985, 19, № 7

ПИ, определенные по теореме Купманса, превышают соотв. эксперим. ПИ на 10—26 эВ, в то время как ПИ, вычисленные в приближении Δ ССП, отличаются от эксперим. ПИ не более чем на 2 эВ. Для ПИ валентных уровней оба метода расчета приводят к близким значениям. С использованием вычисленных ПИ, а также данных ранее проведенных расчетов исследованы изменения хим. сдвигов S_{2p} -РЭС в рядах R_2SO и R_2SO_2 по отношению к S_{2p} -РЭС в соотв. молекулах R_2S , где $R=H$, CH_3 и C_6H_5 . Замещение водорода метильной группой в исследованных рядах не приводит к существенным изменениям величин S_{2p} -ПИ, в то время как замещение водорода фенильной группой приводит к значит. уменьшению хим. сдвига S_{2p} -ПИ, обусловленному переносом электронной плотности от фенильных групп к атому серы.

И. А. Тополь

$(CH_3)_2S$

(DM. 20970) 1984

Tsuboyama A., Takeshi-
ta K., Konaka S. et al.

монетно-
структура,
ab initio
расчет

Bull. Chem. Soc. Jap.,
1984, 57, N 12,
3589-● 3590.

$(CH_3)_2S$

$(CH_3)_2S: HCl$

спектры в
матрицах

х. 1986, 19, № 13

1985

У 13 Б1248. Конформационная изомерия этилхалькогенидов в инертных матрицах. Влияние на структуру полосы ν_s комплексов с HCl с водородной связью. Conformational isomerism of ethyl chalcogenides in inert matrices: Influence on the ν_s band structure of H-bonded complexes with HCl. Maes G., Graindourze M. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 2, 280—288 (англ.)

Исследованы спектры ИК-поглощения и КР Et_2S (I) и Et_2Se (II) и их комплексов с HCl, изолированных в матрицах Ar и N₂. Проанализированы полосы колебаний $\nu(C-Se)$, $\nu(C-C)$ и $\nu(CH_2)$ и показано, что относит. конц-ии TT-, TG- и GG-конформеров I и II меняются при изменении материала матриц и их нагревании. Идентифицированы полосы, относящиеся к колебанию $\nu_s - \nu_{sin}...$ в комплексах состава $Et_2X \cdot HCl$, $Et_2X \cdot (HCl)_2$ и $Et_2X_2 : HCl$ (X=S, Se). Проанализировано влияние поворотной изомерии на мультиплетную структуру полосы ν_s и влияние строения конформеров I и II на прочность их комплексов с HCl. Г.М. Курамшина

$(CH_3)_2Se$, $(CH_3)_2Se: HCl$

$(\text{CH}_3)_2\text{S}$
 $(\text{CH}_3)_2\text{S} \cdot \text{HCl}$
 $(\text{CH}_3)_2\text{S} \cdot \text{H}_2\text{O}$

1985

13 Б1239. Возмущение внутренних колебаний $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{Se}$ в матричноизолированных комплексах с H_2O и HCl . Непрямое доказательство транс-эффекта неподеленной электронной пары в молекулах $(\text{CH}_3)_2\text{X}$. Perturbation of the internal vibrations of $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ and $(\text{CH}_3)_2\text{Se}$ in matrix-isolated complexes with H_2O and HCl : Indirect evidence for the trans lone pair effect in $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ molecules. Maes G. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 2, 289—297 (англ.)

ИК спектры
в матрицах

Измерены ИК-спектры Me_2X , где $\text{X}=\text{S}$ (I), Se (II), и комплексов I, II с H_2O и HCl , изолированных в матрицах Ar при t-ре 12 К. Обнаружены полосы мономеров I, II и их самоассоциатов. Рассмотрено возмущение колебат. спектра I, II при образовании H-комплексов с H_2O и HCl . Наибольшее смещение до 20 см^{-1} обнаружено для полос $\nu(\text{CH}_3)$, к-рое существенно

(H) ☒
X. 1986, 19, N 13

$(\text{CH}_3)_2\text{Se}$, $(\text{CH}_3)_2\text{Se} \cdot \text{HCl}$
 $(\text{CH}_3)_2\text{Se} \cdot \text{H}_2\text{O}$

- больше смещения полос $\nu(\text{СХС})$ (до 8 см^{-1}). Этот факт интерпретируется как не прямое доказательство существования транс-эффекта неподеленной электронной пары атома X в метилхалкогенидах. Доп. подтверждение этой интерпретации получено при сравнит. рассмотрении частотных сдвигов при образовании Н—комплекс. с H_2O и HCl соединений I, II, Me_2O и MeOH .

И. А. Гарбузова

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

1985

Tossell J.A., Moore J.H.,
et al.

сирок-
мупа

Inorg. Chem., 1985, 24,
N^o 7, 1100-1103.

($\bullet$ SiH_4 ; III)

C_2H_5-SH

Om. 22 925

1985

$C_2H_5-S^+H$

Wolff H., Szydłowski J.,

Can. J. Chem. 1985, 63,
N 7, 1708-1712.

констан-
спектр

и
вращат.
чрезмери

$(CH_3)_2S$

1986

Bowen-Jenkins

Philippa E., Richards

волновые

W. Graham.

функции,

расчёт

J. Chem. Soc. Chem.

Commun., 1986, N2,

133-135.

(ссыл. $(CH_3)_2CH_2$; III)

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

(Om. 25256)

1986

Ohsaka et al.,

Munro Kagaku Kaishi,
J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1986,
N 11, 1371-1376.

M;
1)

$(CH_3)_2S$

От. 29382

1987

№ 8 Л176. Миллиметровый спектр диметилсульфида: анализ внутреннего вращения и центробежного искажения. The millimetre-wave spectrum of dimethylsulfide: internal-rotation and centrifugal-distortion analysis. Vacher and J. M., Wlodarczak G., Dubrulle A., Demaison J. «Can. J. Phys.», 1987, 65, № 9, 1159—1163 (англ. рез. фр.)

М.П.

Изучен вращательный спектр диметилсульфида в диапазоне 140—300 ГГц. Более 150 зарегистрированных вращательных переходов для основного колебательного состояния проанализированы в рамках модели, учитывающей эффекты внутреннего вращения и центробежного искажения с помощью эффективного гамильтониана, записанного в молекулярной системе координат. Определены параметры центробежного искажения вплоть до секстичных, а также значения барьеров внутреннего вращения.

Е. А. Ж.

фр. 1988, 18, № 8

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

DM 29382

1987

17 Б1323. Миллиметровый спектр диметилсульфида: анализ внутреннего вращения и центробежного искажения. The millimetre-wave spectrum of dimethylsulfide: internal-rotation and centrifugal-distortion analysis. Vacher and J. M., Wlodarczak G., Dubrulle A., Demaison J. «Can. J. Phys.», 1987, 65, № 9, 1159—1163 (англ.; рез. фр.)

На супергетеродинном миллиметровом спектрометре в обл. частот 140—300 ГГц с точностью около 0,01 МГц, измерен вращат. спектр диметилсульфида, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, в основном колебат. состоянии. Анализ спектра выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения и внутреннего вращения двух эквивалентных волчков. Учет внутреннего вращения двух волчков выполнен по усовершенствованной программе по методу внутренних осей. Определены вращат. постоянные в МГц $A=17816,53562(76)$, $B=$

мм. спектр
франц. пост.

X. 1988, 19, N 17

$=7620,95066(191)$, $C=5711,10727(57)$. Величина барьера внутреннего вращения $V_3=2110,8(24)$ кал/моль согласуется с ранее выполненными измерениями. Отмечено сильное влияние модельных предположений на величины вращат. постоянных молекулы и момент инерции внутреннего волчка. С. Н. Мурзин



$(CH_3)_2S$

DM. 29382

1987

108: 139979t The millimeter-wave spectrum of dimethyl sulfide: internal-rotation and centrifugal-distortion analysis. Vacherand, J. M.; Wlodarczak, G.; Dubrulle, A.; Demaison, J. (Cent. Natl. Rech. Sci., Univ. Lille I, 59655 Villeneuve-D'Ascq, Fr.). *Can. J. Phys.* 1987, 65(9), 1159-63 (Eng). The rotational spectrum of Me_2S was measured at 140-300 GHz. A new computer program based on the internal-axis method was used to analyze the rotational spectrum in its torsional ground state. It allowed fitting the spectrum satisfactorily and detg. the rotational, internal-rotation, and centrifugal-distortion consts. accurately. The influence of the approxns. made during the internal-rotation anal. on the moment of inertia (I_a , I_b , I_c , and I_a) is pointed out. It shows the difficulty in detg. accurate geometrical structures of 2-top mols. from microwave data. For the AA substate, effective rotational parameters are given that allow the calcn. of transition frequencies of possible astrophys. interest.

frauzam-
cnekmp, J

C.A. 1988, 108, N16

$(CH_3)_2Si$

(Am. 32571)

1989

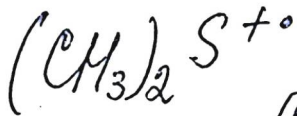
Hayashi M., Nakata N., et al.,

мас.
структура

J. Mol. Spectrosc. - 1989. -
135, ~2. - 270-288



$(CH_3)_2SiD_2$
(Cur. $(CH_3)_2SiH_2$, III)

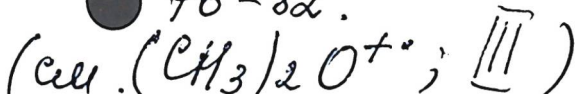


1989

Лобанов В.В., Филиппова Л.И. и др.

Теор. и эксперим. хим.
мех., 1989, 25, N 1, с.

● 76-82.



$(CH_3)_2S$ Aagaard Olav M. 1992
de Waal Bas F. M., et al.

M.N. J. Phys. Chem. 1992. 96,
N 2. c. 614-623.

(C.M. ● Cl_3^+ ; III)

$(CH_3)_2S$

Fournier R., DePristo A.E., 1992

Жермел
Сызы, 96, N 2, C. 1183-1193
жасалган

(Calc. HS_2 ; III)

H_3CSCH_3

1992

Wang Zhizhong, Shen Er-
Zhong,

u.n.

Chin. J. Chem. 1992, 10,
N1, C. 1-4.

(all. $H_3CO \bullet CH_3$; III)

$S(CH_3)_2$

1994

Mastruykov V. S.,
Alcolea P. M. et al.

ab initio
pccrēm
2e/4

THEOCHEM 1994, 110
(3), 261-7.

●
(cer. CH_2F_2 ; III)

1995

F: (CH₃)₂S

P: 3

2Б1258. {33}S-ядерное квадрупольное сверхтонкое взаимодействие во вращательном спектре диметилсульфида и диметилсульфида-d[6]. The {33}S nuclear quadrupole hyperfine coupling in the rotational spectrum of dimethyl sulfide and dimethyl sulfide-d[6] / Kretschmer U., Hartwig H., Dreizler H. // J. Mol. Spectrosc. - 1995. - 174, N 1. - С. 137-150. - Англ.

На микроволновом спектрометре в области частот 7-40 ГГц измерены вращательные спектры {33}S-диметилсульфида и {33}S-диметилсульфида-d[6] в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом центробежного искажения и {33}S-ядерного квадрупольного взаимодействия. Определены параметры внутреннего вращения.

Ршх 1997

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

1995

5 Б160. Неэмпирическое и спектроскопическое исследование диметилсульфида. Анализ спектров $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ и $(\text{CD}_3)_2\text{S}$ в области торсионных колебаний. Ab initio and spectroscopic study of dimethyl sulfide. An analysis of the torsional spectra of $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ and $(\text{CD}_3)_2\text{S}$ / Senent M. L., Moule D. C., Smeyers Y. G. // J. Phys. Chem. — 1995 — 99, № 20. — С. 7970—7976. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базе 6-31ГФ(df, p) с учетом электронной корреляции в рамках МП2—МП4 рассчитаны поверхности потенциальной энергии для вращения обеих метильных групп в Me_2S . Анализ с помощью разложения энергии и кинетич. параметров в ряды Фурье по углам поворота позволил смоделировать спектры Me_2S и его полностью дейтеропроизводного в дальней ИК-области. Н. Л.

М.Н.

X.1996, N5

1995

F: (CH₃)₂S

P: 3

5Б160. эмпирическое и спектроскопическое исследование диметилсульфида. Анализ спектров (CH₃)₂S и (CD₃)₂S в области торсионных колебаний. Ab initio and spectroscopic study of dimethyl sulfide. An analysis of the torsional spectra of (CH₃)₂S and (CD₃)₂S / Senent M. L., Moule D. C., Smeyers Y. G. // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 20. - С. 7970-7976. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31ГФ(df, p) с учетом электронной корреляции в рамках МП2-МП4 рассчитаны поверхности потенциальной энергии для вращения обеих метильных групп в Me₂S. Анализ с помощью разложения энергии и кинетич. параметров в ряды Фурье по углам поворота позволил смоделировать спектры Me₂S и его полностью дейтеропроизводного в дальней ИК-области.

Р. Ж. Х. NS, 1996