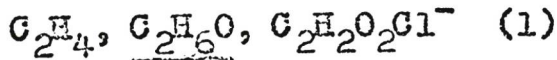


CaH₆O

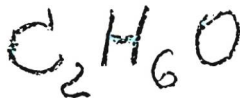
7363 - IV

1907



Bose
3.Z.physik.Chem. 58, 585 (1907)

W, M



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

(20-0, 4000)

4337-IV

1932

Brú L.

Anales soc.espan.fis.quim.

1932, 30, 486-91

"Methyl ether and ...

J

931-IV

1933

$C_{12}H_{22}O$ vapor ($\angle C-H$; $\angle C-O$; L)

$C_{12}H_{22}O$ vapor ($\angle C-O$; $\angle C-C$; L)

Cited in:

Compt. rend. 1933, 196, 591-4

"Vibrational spectra" and ...

$C_{12}H_{22}O$

C.A., 1933, 2623

D_{C-OH} (CH_3OH , C_2H_5OH)

IV-867

1934

Fukumoto Y.

Nature 1934, 134, 538

"Energy of the C-OH bond
and molecular structure in ...

G.A., 1935, 2086¹

C_2H_6O

u

C₂H₆O

B9 7552-IV | 1940

Cummings C.S.,
Bleakney W.

(7)

"Phys. Rev.", 1940, 58,
787-92.

9032 - IV, BP-1555-II

1941

J(H_2O , CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$,

H_2S , $\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{S}$,

NH_3 , $(\text{CH}_3)_3\text{N}$, HCHO , CH_3CHO , $\text{H}_2\text{C}:\text{CHCl}$,

$\text{ClCH}:\text{CHCl}$)

Sugden T.M., Walsh A.D., Price W.C.

Nature 1941, 148, 372-3

"Ionization ...

10 C_2H_6

C.A., 1942, 336⁴

ЕСТЬ Ф. Н.

9

C_2H_5OH (D_0 , ΔF)

861-12

1948

~~Polkovnikov~~ B. B.

~~Polkovskii V. B.~~

Zhur. Obshchei Khim., 1948, 18,

1639-1642:

Bond free energies in organic
compounds

C.A., 1949, 3276f

C_2H_6O

u

11-4313

1948

C_2H_5OH (vi ?)

Plyler E.K., Kruegel S.L.
Phys. Rev. 1948, 74, 1247

Infrared absorption spectra of
ethyl and of propyl alcohol.

2

W

~~Adm. 9/22/48~~

CA, 1950, 44, 6269f

IV-4315 1948
C₂H₅OH, C₂H₅SH (мол. спектр.)

Royault M., Gallagher G.

Phys. Rev., 1948, 75, 1319

Electron diffraction by gas ...

C₂H₆O

$C_2H_5OH (V_0)$

IV-4305

1949

Halford J. O.

J. Chem. Phys., 1949, 17, 111-117

Hindered rotation in ethyl alcohol.

10

C.A., 1949, 4527 f 2

C₂H₅OM

[BP-878-IV]

1950

Halford J. O.

J. Chem. Phys., 1950, 18,
361-65.

(Барьер в н.
спинзет
S₂₉₈)

C_2H_5OH (*спирт* ^{IV-388}) 1950

Kimura M.

J.Chem.Soc.Japan, Pure Chem.Scet.,
1950, 71, 18-21.

The molecular structures of gases...

C_2H_6O

C.A., 1951, 4959a

to

8357 - IV

1951



Mallherbe F.H., Bernstein H.J.
J. Chem. Phys., 1951, 19, 1607-08

Infrared spectra of ...



1951

8518 - 10

CO₂ (J) C₂H₅OH ; CH₄ ;

Nief G.

J.chim.phys.1951, 48, 333-335

Determination of ...

J, M

C₂H₆O

C_2H_5OH

13p-4297-iv

1952

C_2H_5OD

Barrow R. M.

Is

J. Chem. Phys., 1952,
20 with 1739-44.

C_2H_5OH

V_0

Kazuo Ito

1952

J. Chem. Phys. 1952, 20, 531

Измерен. поглощ. в спиртовом
смысле.

1952

IV-4318

$(CH_3)_2O$, $(CH_3)_2S$, $(CH_3)_2Se$,

CH_3OH , CH_3OD , CH_3SH ()

Siebert II.

Z.anorg.u.allgem.Chem. 1952, 271, 65
75

The force constants for ...

C_2H_6O

J

1246-IV

1953

Y: (ClCH₂Cl, BrCH₂Br, ClH₂COH₂Cl,
BrH₂COH₂Br, ClH₂COH₂OH, CH₃CH₂OH,
CH₃CH₂Cl, CH₃CH₂Br)

Mizushima S., Schimazuuchi T.,
Nakagawa J., Miyake A.

J. Chem. Phys., 1953, 21, # 2,
215-219 (Ann.)

The configurations of rotational

Ex., 1954, # 8, 15939
10

C₂H₆O

939-IV

CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, CH_3COOH , CHCl_3 ($\int_1$) 1953

Симова Б.Д.

Докл. Болгар. АН., 1953, 5, № 2-3, 5-8
Исследование спектров ...

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

РХ., 1954, N 23, 49411

10

(CH₃)₂O

Bop-4339-IV . 1954

Madni A.,

(Vi)

"Chem. Res." 1954, 239, N4,
349-54.

1522-11

1954

I(H_2S , CS_2 , C_2H_4 , CH_3I , NH_3 , NO , CH_3OH ,

$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$)

Watanabe K.

J. Chem. Phys. 1954, 22, N 9, 1564-1570
()

40 Photoionization and total absorption
cross section of gases. I. Ionization poten-
tials of several molecules. Cross section
of NH_3 and NO .

PX, 1955, 31006

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

chem. sp. n.

I(C₂H₅OH)

11 got

1955

Omura Itiro, Baba H., Higasi K.,

Bull. Chem. Soc. Japan, 1955, 28,
N 2, 147 (anal.)

The ionization potentials of ...

C₂H₆O

PX., 1955, 45258

Mito

C_2H_5OH	B9P-865-IV	1956
------------	------------	------

(A.P)

Friedland S.,
Strakna R.,

"J. Phys. Chem.", 1956, 60,
v6, 815-816.

CaH₅OH

1395-846-IV 1956.

Omura T, Higashik,
Baba H.

(3)

"Bull. Chem. Soc. Japan",

1956, 29, 4, 501-507,

IV-897

1957

CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (V_1)

MacIou M., Henry L.

C.R.Acad.Sci., 1957, 244, N 11,
1494-1496 (франс.)

Etude des bandes OH et OD ...

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

PX., 1958, N 4, 10321

HP

11-4348

1957

(CH₃)₂O

Taylor R. C., Vivade G. L.

J. Chem. Phys., 1957, 26, 122-123

Раман-спектры и колебательные
разоры затворбашно диметилового
эфира

928

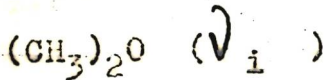
CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, CH_3OD , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OD}$ (O_i) 1957.

Tarte P.J., Deponthiere R.
Bull.Soc.chim.belges, 1957, 66,
N 7-8, 525-542 (apparatus.)
Spectres infrarouges des ...

PX., 1958, N 3, 6937

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

10



IV-4348

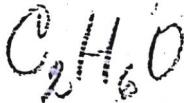
1957

Taylor R.C., Vidale G.L.,

J.Chem.Phys., 1957, 26, N 1,

122-123

Спектр комбинационного...



J

CO, O₂, NO, Cl₂, Br₂, I₂, HCl, HBr, HI, H₂O, H₂S, CO₂, SO₂,
CS₂, N₂O, NO₂, O₃, NH₃, CH₄,
C₂H₆, CH₃Cl, CH₃Br, CH₃I, C₂H₅Cl,
C₂H₅Br, C₂H₅I, CH₂Cl₂, CHCl₃, CCl₄,
C₂H₄, C₂Cl₂H₂, C₂H₂, CH₃OH, C₂H₅OH (Y)

10

всв. ф. к 68

Watanabe K.,

J. Chem. Phys., 1957, 26, 53, 542-547 (англ.)

Потенциалы ионизации
некоторых молекул.

РФХ, 1957, 24, 6390.

C_2H_5OH (²²⁷⁻¹⁶ длины связей, До) 1958

Glockler G.,

J. Phys. Chem., 1958, 62, N 9,
1049-1054 (англ.)

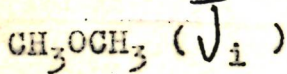
Энергии и длины связей углерода
с кислородом

РХ., 1959, N 8, 26104

М.Ю

4344 - IV

1958

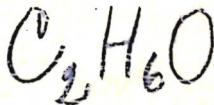


Mashiko Y.

J. Chem. Soc. Japan. Pure Chem. Sec.,
1958, 79, N 4, 470-478

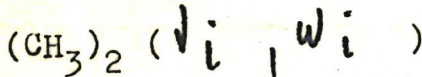
Колебательный спектр ...

J



4345 - IV

1958



Mashiko Y., Pitzer K.S.,

J. Phys. Chem. 1958, 62, N 3,
367-368

Vibrational spectra of ...

J

10060 - IV

CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (Do

1959
)

Ватищева М.Г.

Инж.-физ.ж., 1959, 2, № 5, 107-109

Спектроскопическое исследование
мономерной группы OH чистых спиртов ...

РХ., 1960, № 11, 41657

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

4338 - IV

1959

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (vi)

Costa C., Calcinari R.,

Gazz. chim. ital., 1959, 89, 1415-
1426

Инфракрасные спектры ...

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

J

41-14
 CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (Сродство к про-) 1959
тону

Франкевич Е.Л., Тальрозе В.Л.,

И. физ. химии, 1959, 33, 5, 1093-1099

Сродство к протону молекул ...

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

РХ., 1959, N 23, 80948

(10)

Есть оригинал.

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

структура

Kasai R. K., Myers R. J.,

J. Chem. Phys., 1959, 30, 1096.

ИФ-спектр, структура и вращательное движение в димерном состоянии.

C-O	1,417 Å	В-углы линии
C-H	1,093 "	Осью симметрии
$\angle \text{COC}$	$111^\circ 37'$	каждой группы
$\angle \text{H-C-H}$	$109^\circ 51'$	CH_3 и линия
$\theta = 4029^\circ$		C-O

Курс. Барн.

Возвр. франц. 2, 72 кка

4342 - IV

1959

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (*структура*)

Kimura K., Kubo M.,

Nature, 1959, 183, N 4660, 533-534

Стабильная конфигурация ...

4343

- IV

1959

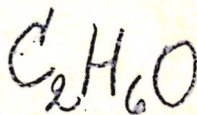
$(\text{CH}_3)_2\text{O}$, CH_3OH (структурные параметры)

Kimura K., Kubo M.,

J. Chem. Phys., 1959, 30, N 1,
151-158

Структура диметилового эфира...

J



$C_2H_5 OH$ (ν_i)

11-895

1959

10. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, Vol. 30, No. 1, 1959, p. 743-748.

Спектры в области инфракрасной ...

1960, 20, 79966

$2H_2O$

10

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

11960
✓ 16B82. Приближенный метод расчета частот колебаний молекул, содержащих метильные группы. Сообщение II. Метилловый эфир, диметилсульфид и ацетон. Mirone Paolo, Chiorboli Paolo. Un metodo approssimato per il calcolo delle frequenze di vibrazione di molecole contenenti gruppi metilici. Nota II. Etere dimetilico, dimetilcolfuro e acetone. «Ann. chimica», 1960, 50, № 8-9, 1095—1107 (итал.).—Для расчета частот колебаний молекул, содержащих метильные группы, предлагается мысленно заменить группу CH_3 «двухатомной» группой $\text{C}\equiv(\text{H}_3)$. В этом приближении, с использованием потенциала валентных сил, рассчитаны молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (I), $(\text{CH}_3)_2\text{S}$ (II) и $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ (III). Лучшее согласие с экспериментом для первых двух молекул получено со следующими значениями силовых постоянных (в мдн/А): k_2 (вал. кол. $\text{CH}_3\text{—X—CH}_3$) 5,17 (I), 3,20 (II), h_1 (деф. кол. $\text{X—C—(H}_3)$) 1,06 (I), 0,865 (II), h_2 (деф. кол. $\text{CH}_3\text{—X—CH}_3$) 1,39 (I), 1,09 (II), где (X = O или S). Максим. расхождение с эксперим. частотами скелетных колебаний около $\pm 3\%$.

IV - 4346

Р.И. ХИМИЯ
1961. 16 B82

сч. н./об.

Различно такого же порядка возникает при расчетах, учитывающих недиагональные силовые постоянные. Расчет III не дает возможности однозначно определить все силовые постоянные; наиболее точно можно выбрать k_2 (вал. кол. CH_3-C) 4,4—4,43 и h_1 (деф. кол. $\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3$) 0,746—0,77. Предлагается новая интерпретация частот 1257 см^{-1} (B_1), 483 см^{-1} (B_2) и 380 см^{-1} (A_1). Экспериментально исследован спектр поглощения ацетона в области $600-1600 \text{ см}^{-1}$. Е. Никитин

C_2H_5OH

ВФ-4333-IV

1961

Шмаров А. М. и др.

и. н.

Бонн. АН Азерб. ССР

1961, XVII, № 10, 861-63

IV-892

1961

CH_3OH (VI)

$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

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

Arishnan K.

Proc. Indian Acad. Sci. 1961, 453.

N. 5, 151-167 (ANTI.)

ОБОБЩЕНИЕ ПОЛНОМОЩНОГО РАССЕЯНИЯ...

EX. 1961, 24B154

10

M 1090 - IV
Vi, U. $(\text{CH}_3)_2\text{SiH}_2$, $(\text{CH}_3)_3\text{SiH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$,
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, $(\text{CH}_3)_3\text{N}$

1962

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

F

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

7681 - IV

1962

V, i: $(\text{CH}_3\text{CHO}, \text{CH}_3\text{CHF}_2, \text{HCOOCH}_3, (\text{CH}_3)_2\text{O},$
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}, (\text{CH}_3)_2\text{NH}, (\text{CH}_3)_2\text{ND}, \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl})$

Fateley W.G., Miller F.A.

Internat. Sympos. Molec. Struct. und
Spectrosc. Tokyo, 1962, SI, C408/I -
C408/3

Torsional frequencies in the far
infrared.

J

PX, 1963, 145117

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

orig.

1962

14 Б221. Сверхвысокочастотный спектр, вращательные постоянные и дипольный момент молекулы этилового спирта. Иманов Л. М., Каджар Ч. О. «Азерб. ССР Елмлер Акад. хәбәрләри. Физ.-ријазийат və техн. елмләри сер., Изв. АН Азерб. ССР. Сер. физ.-матем. и техн. н.», 1962, № 4, 55—58 (рез. азерб.).

С помощью спектрометра с электрич. мол. модуляцией в диапазоне 20,7—31,7 кМгц исследован спектр $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Приведена таблица частот > 100 линий, обладающих в основном эффектом Штарка второго порядка. Идентифицировано 7 линий переходов и найдены вращательные постоянные (в Мгц) 34916,6; 9376,2; 3160,8. Определены структурные параметры молекулы: $r_{(\text{C}-\text{C})}$ 1,533 А; $r_{(\text{C}-\text{O})}$ 1,420, $r_{(\text{C}-\text{H})}$ 1,0922 А; $r_{(\text{O}-\text{H})}$ 0,936 А; $\angle \text{COH}$ $106^\circ 00'$; $\angle \text{CSO}$ $107^\circ 26'$; $\angle \text{CSH}$ $109^\circ 46'$. По эффекту Штарка переходов $1_{01} \rightarrow 1_{10}$, $2_{02} \rightarrow 2_{11}$ найдено $\mu_B = 1,58 \pm 0,04 \mu_A \ll \mu_B$. Т. Бирштейн.

 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

Спирт

11-0525-66
B9-4290-17

X.1963.14

10105 - IV | 1962
C₂H₅OH (взаим. пост,

гс-с, гс-о, гс-н, гсОН,
гсСО, гсСН)

Иванов Л. М., Кадмаев Г. О.

Изв. АН Узб. ССР, сер. физ.-матем. и
техн., 1962, № 4, 55-58.

Свдх вращающегося спектра,
вращательные постоянные и инерци-
ный момент молекулы этилового
спирта.

Рис. Хим, 1963, 145221.

C₂H₅O

(см₃)₂ 0

ВФ-10109-IV

1962

7 Б158. Колебательные спектры метилового эфира.
I. Расшифровка спектров. Канадзава Йоко, Ну-
када Кэнкити. «Токё когё сикэнсё хококу, Tokyo
kogyo shikensho hokoku, Repts Govt Chem. Industr. Res.
Inst., Tokyo», 1962, 57, № 10, 495—502, 53 (японск.; рез.
англ.)

Получены спектры комб. расс. и ИК-спектры чистого
метилового эфира (I) и его дейтерированного производ-
ного. Симм. вал. кол. связи СОС в I расположены при
928 см⁻¹, антисимм. вал. кол. появляются при 1102 см⁻¹,
а деф. кол. при 418 см⁻¹. После дейтерирования эти ко-
лебания соответственно появляются при 827, 1162 и
362 см⁻¹.

Резюме авторов

X. 1964. 4

(CH₃)₂O

1962

3Б84. Колебательный спектр метилового эфира. I. Отнесение спектра. Kanazawa Yôko, Nukada Kenkichi. Vibrational spectra of methyl ether. I. Assignment of the spectra. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1962, 35, № 4, 612—618 (англ.)

Исследованы спектры комб. расс. и ИК-спектры поглощения (CH₃)₂O и (CD₃)₂O и дано полное отнесение наблюдаемых частот. Отнесение частот в области вал. кол. C—H и C—D находится в полном соответствии с литературными данными для метоксигрупп. Сильная линия 2869 см⁻¹ в спектре комб. расс. и полоса 2887 см⁻¹ в ИК-спектре отнесены к обертому деф. кол. CH₃ или составному тону с его участием. К соответствующим кол. CD₃ отнесена линия 2137 см⁻¹ в спектре комб. расс. Однозначное отнесение частот шести деф. кол. CH₃, группирующихся в области 1470—1450 см⁻¹, оказалось невозможным. В ИК-спектре (CD₃)₂O этим колебаниям соответствуют полосы при 1062 и 1056 см⁻¹, в спектре комб. расс.—линия при 1062 см⁻¹. В области скелетных колебаний отнесение полос 920 и 420 см⁻¹ к симм. кол. C—O и деф. кол. СОС соответственно не вызывает сомнения и подтверждается литературными данными; к антисимм. кол. C—O можно отнести две полосы 1179 и 1102 см⁻¹,

11-1434-11

см

шоб.

X.1963.3

из которых авторы, пользуясь данными расчета, выбирают полосу 1102 см^{-1} . Частота 1179 см^{-1} так же, как и 1150 см^{-1} (неактивная в ИК-спектре), отнесена к неплоским маятниковым кол. CH_3 . Полоса 1244 см^{-1} , всегда наблюдаемая в спектрах молекул, имеющих метоксигруппу, и относящаяся раньше к деф. кол. CH_3 , повидимому, обусловлена плоскими маятниковыми колебаниями CH_3 , что подтверждается расчетом.

Е. Матросов

1962

У 13 Б136. Микроволновый вращательный спектр этилового спирта. Michielsen-Effinger Janine. Spectre de rotation de l'alcool éthylique en microondes. «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1962, 48, № 4, 438—452 (франц.)

Изучен микроволновый спектр C_2H_5OH в области 13 000—26 000 Мгц. На основании строения CH_3OH и этилгалогенидов были приняты следующие значения структурных параметров: $r(C-H) = 1,11$, $r(C-C) = 1,54$, $r(C-O) = 1,43$, $r(O-H) = 0,94$ Å, $\angle C-O-H = 105^\circ 56'$, углы $H-C-H$ и $C-C-O$ — тетраэдрические. Вычисленные значения вращательных постоянных равны: $A = 32\,280$, $B = 9580$, $C = 8180$ Мгц. Молекула представляет собой слегка асимметричный вытянутый волчок с параметром асимметрии $K = -0,884$. Главная ось составляет 35° с направлением связи $C-C$. Дипольный момент можно разложить на две компоненты — составляющую вдоль главной оси a и перпендикулярную составляющую b . Поэтому одновременно наблюдаются два спектра, типа a и типа b . Каждый спектр состоит из определенного кол-ва ветвей Q , P и R , которые слегка перекрываются. Обнаружено, что

X.1963.13

17-02420-11
Bp-8420-11

внутреннее вращение водорода гидроксильной группы относительно связи С—О существенно отличается от подобного вращения в CH_3OH . Потенциальная функция несимметрична и имеет два минимума неравной глубины, вследствие чего нет вырождения вращательных состояний, а имеются два состояния с различной энергией, которым соответствуют два поворотных изомера.

И. Милевская

Rotation spectrum of ethyl alcohol by microwaves. Janine Michielsens-Effinger (Centre Phys. Nucl. Mol., Heverlee-Louvain, Belg.). *Bull. Classe Sci., Acad. Roy. Belg.* 48, 438-52(1962). The rotation spectrum is measured, 13-26 kMc., at room temp. An approx. structure is proposed for EtOH, taking into account the 2 internal rotation movements. Several hundred observed rotation transitions are tabulated. On the basis of Et halide and MeOH structures, values were adopted for the mol. parameters: $r_{C-H} = 1.11$, $r_{C-O} = 1.54$, $r_{O-H} = 1.43$, $r_{O-C} = 0.94$ A., $\angle C-O-H = 105^\circ 56'$, and $\angle H-C-H$ and $\angle C-C-O$ are tetrahedral. Rotation consts. of the mol. calcd. from these data are: $A = 32.28$ kMc., $B = 9.58$ kMc., $C = 8.18$ kMc. The mol. is a slightly asym. prolate rotator with a parameter of asymmetry $b_p = C-B/2A-B-C$ approx. equal to -0.0299 ($k = -0.884$). The principal axis a , corresponding to the smallest moment of inertia, makes an angle of $\sim 35^\circ$ with the C-C axis. The dipole moment of the mol. contained in the plane of symmetry can be resolved into 2 components, one along the principal axis a and the other, smaller, along axis b . The rotation spectrum is characterized by rotation transitions in the fundamental torsion state and by satellites coming from mols. in excited torsion states. The height of the potential barrier is detd. by their relative intensities. The 2 possible arrangements are based on differences in this potential barrier. Future work is planned on EtOH in the range 26-50 kMc. and on deuterated EtOH.

CA

11-05-68
BIP-2420-17C₂H₅OH

C.A. 1963

58.5

Y0618c

1962

 C_2H_5OH
 C_2H_5OD V.
1

Vibrational spectra of ethyl alcohol and ethyl alcohol-d. Chizuko Tanaka (Univ. Tokyo). *Nippon Kagaku Zasshi* 83, 792-8(1962). The infrared spectra of EtOH and EtOD were recorded in the liquid and gaseous states and in solns. The Raman spectra were taken in the liquid state. Assignments were made for the fundamental vibrational frequencies appearing within 1500-400 cm^{-1} . The results obey the product rule.

Masaji Kubo

C.A. 1963. 58. 11

108826

9180 - IV

1962

CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (ν_1)

Venkateswarlu K., Mariam S.,

Acta phys.austriaca, 1962, 15, N 4,
362-366

Raman spectra of ...

J

$(CH_3)_2O$ (r_{C-O} , $\angle COC$, r_{C-H} , $\angle HCH$) 7375-1963

Blukis U., Kasai P.H., Myers R.J.,

J. Chem. Phys., 1963, 38, 2753-60.

Microwave spectra and structure
of dimethyl ether. r_g $\phi.K$

10. C_2H_6O • CA, 1963, 59, 143d.

B90 - 7950_a - IV

1963

(CH₃)₂O

УФ спектр

12 D239. УФ-спектр поглощения диметилового эфира в вакуумной области. Hernandez G. J. Vacuum ultraviolet absorption spectrum of dimethyl ether. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 7, 1644—1646 (англ.)

Исследован УФ-спектр поглощения диметилового эфира в области 50 000—90 000 см⁻¹. Найденная величина первого ионизационного потенциала равна 80 330 см⁻¹ (9,66 эв). Анализ колебательной структуры позволяет сделать вывод, что колебательные частоты возбужденного состояния незначительно отличаются от колебательных частот молекулы эфира в основном состоянии. Библи. 16 назв.

ф. 1963. 129

B9p-7950a-1V

1963

(CH₃)₂O

Banyan

4.8
Chilip

Vacuum ultraviolet absorption spectrum of dimethyl ether. G. J. Hernandez (Air Force Cambridge Res. Labs., Bedford, Mass.). *J. Chem. Phys.* 38, 1644-6(1963). The vacuum ultraviolet spectrum of Me₂O was reinvestigated and extended to higher frequencies. Rydberg series converge to a 1st ionization potential at 80,330 cm.⁻¹ (9.96 e.v.). Analysis of the vibronic structure indicates only a slight change in the vibrational frequencies of the excited electronic states from those of the ground state.

CA

C.A. 1963. 58. 11

10870 g

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

микро-
волн.
спектр

1963

11 Д245. Микроволновый спектр молекулы $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Иманов Л. М., Абдурахманов А. А. «АзербССР Елмәр Акад. хәбәрләри. Физ.-ријазийат вә техн. елмләри сер., Изв. АН АзербССР. Сер. физ.-матем. и техн. н.», 1963, № 6, 79—82 (рез. азерб.)

Исследован микроволн. спектр молекулы $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$, содержащей обычный этиловый спирт. При наблюдении спектра в диапазоне 20—32 кМгц, помимо спектральных линий этилового спирта, обнаружены линии, относящиеся, по-видимому, к молекуле $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Некоторые из них приводятся в таблице. Измерения проводились на специально сконструированном радиоспектрометре с электронной молекулярной модуляцией. Приводятся схемы блоков стабилизации частоты кलिстрона и умножителя частоты.

А. Изюмов

ф. 1964. 118

1963

C₂H₅OHA, B, C
of asym. rot.

The superhigh-frequency spectrum and dipole moment of the ethanol molecule. L. M. Imanov and Ch. O. Kadzhar. *Optika i Spektroskopiya* 14, 300-1 (1963); cf. *CA* 58, 3011d. An investigation was made with the aid of a radiospectrometer with elec. mol. modulation (*CA* 54, 23797h) of the high-frequency spectrum of EtOH in the range $(20.7-31.7) \times 10^9$ cycles/sec. Of more than 100 lines, 7 transitions were identified as corresponding to the μ_b component of the dipole moment. The most intense ($\sim 5 \times 10^{-6}$) were the Q branches ($\Delta K_{-1} = 1$, $\Delta K_{+1} = -1$). Based on the frequencies of these branches the A-C difference was 26,755.8 and the asymmetry parameter $\kappa = -0.909148$. The A + C term was detd. from the transition $2_{12}-3_{03}$ ($\nu = 28,074.8 \pm 0.2$ Mc./sec.). The effective rotation consts. were: A = 34,916.6, B = 9376.2, and C = 8160.8 Mc./sec. The av. value for μ_b was 1.58 ± 0.05 D. The μ_b formed an angle of $57^\circ 16'$ with the C-C axis of the mol. A. P. Kotloby

C.A. 1963. 58. 11

10884c

$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

1963

8 Б265. Сверхвысокочастотный спектр и дипольный момент молекулы этилового спирта. Иманов Л. М., Каджар Ч. О. «Оптика и спектроскопия», 1963, 14, № 2, 300—301

В области 20,7—31,7 кМгц обнаружено >100 линий молекулы этилового спирта, по которым идентифицировано 7 переходов, соответствующих составляющей μ дипольного момента. Получены значения эффективных вращательных постоянных: A 34916,6; B 9376,2 и C 8160,8 Мгц . Среднее значение составляющей μ дипольного момента равно $1,58 \pm 0,05 D$, угол с осью CC молекулы $57^\circ 16'$.

В. Ш.

Х. 1965-8

4341-IV

1963

$(CH_3)_2O$; $(CD_3)_2O$ (9)

Kanazawa Yoko, Nakada Hoshichi,
 Vibrational spectra of methyl
 ether. I. Assignment of the spectra.
 "Bull. Chem. Soc. Japan", 1962, 35, 4,
 612-616 (ann.)

EX., 1963, 3, 684

1963

M 1242

- IV

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

C2H6O

U342-IV; IV-8924 1963

J (CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$)

Sjögren H., Lindholm E.
Phys. Letters, 1963, 4, N 2,
85-86

Higher ionisation ...

J

F

PK., 1965, 6565

ESTD 6. 15

BOP-7348-IV

1963

(CH₃)₂O

V22 Б132. Микроволновые спектры и структура диметилового эфира. Blukis Uldis, Kasai Paul H., Myers Rollie J. Microwave spectra and structure of dimethyl ether. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 11, 2753—2760 (англ.)

М.В. Смирнов

В диапазоне 8—48 кМгц исследованы микроволновые спектры $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (I); $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ (II); $(\text{CD}_3)(\text{CH}_3)\text{O}$ (III); $(\text{C}^{13}\text{H}_3)(\text{C}^{12}\text{H}_3)\text{O}$ (IV); $(\text{CH}_3)_2\text{O}^{18}$ (V) и *симм.* $(\text{CH}_2\text{D})\times(\text{CH}_3)\text{O}$ (VI) и *асимм.* $(\text{CH}_2\text{D})(\text{CH}_3)\text{O}$. Наблюдались переходы $J_{0J} \rightarrow J_{1J-1}$ ($J \leq 5$) и $J \rightarrow J+1$ ($J=0-4$). Найдены моменты инерции (в ат. ед. массы $\times \text{Å}^2$): I 13,02902; 50,25317; 56,86752; II 19,66719; 67,52843; 74,34077; III 16,34849; 58,52307; 65,22916; IV 13,08735; 51,59214; 58,26667; V 13,59557; 50,24517; 57,43301; VI 13,20154; 54,28838; 61,05123; VII 14,53730; 52,41239; 59,19693. По моментам инерции I, IV и V найдено $d_{\text{C-O}} 1,410 \pm 0,003 \text{ Å}$ и $\angle \text{COC } 111^\circ 43' \pm 20'$. Из данных для VI и VII следует, что атомы водорода метильной группы не эквивалентны.

К. 1964 N22

Угол между связью СО и перпендикуляром к плоскости, проведенной через атомы Н метильной группы, составляет $2^{\circ}31' \pm 40'$, $d_{C-H_a} 1,100 \pm 0,005$ А; $d_{C-H_s} 1,091 \pm 0,007$ А; $\angle OCH_a 110^{\circ}50' \pm 20'$; $\angle OCH_s 107^{\circ}14' \pm 35'$; $\angle H_aCH_a 108^{\circ}44' \pm 30'$; $\angle H_aCH_s 109^{\circ}33' \pm 35'$. Асимметрия метильных групп обусловлена, по-видимому, их стericким взаимодействием. Наблюдаемые значения отвечают $sp^{3,11}$ и $sp^{2,87}$ гибридизации для связей CH_a и CH_s соответственно. По эффекту Штарка определен дипольный момент $1,31 \pm 0,01 D$.

Т. Бирштейн

1963

(CH₃)₂ O

спинт)

2 Д238. Микроволновые спектры и структура диметилэфира. Blukis Uldis, Kasai Paul H., Myers Rollie J. Microwave spectra and structure of dimethyl ether. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 11, 2753—2760 (англ.)

В диапазоне 8—48 кМгц измерены микроволн. спектры шести изотопич. образцов диметилэфира. Определены вращательные константы и моменты инерции. Исследована молекулярная структура диметилэфиров. Вычислены значения структурных параметров. Найдено, что диметилэфир обладает симметрией C_{2v} и метильные группы расположены в шахматном порядке по отношению к связям С—О. Показано, что микроволн. данные для дейтерированных молекул могут быть удовлетворительно объяснены только в предположении молекулярной структуры, содержащей асимметричные метильные группы. Водородные атомы в метильных группах обладают осью симметрии, не проходящей через атом С. Такая структура метильных групп согласуется с s- и p-гибридизацией орбиталей атомов С. Связь СО оказывается изогнутой.

11-86-11
1390-7348-11

ф. 1964. 29

сш. кфд.

Измерен также эффект Штарка для $1_{0,1}—1_{1,0}$ переходов в $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ и $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ и определены дипольные моменты (μ). Получено соответственно $\mu[(\text{CH}_3)_2\text{O}] = 1,302 \pm \pm 0,01$ ед. Дебая и $\mu[(\text{CD}_3)_2\text{O}] = 1,319 \pm 0,01$ ед. Дебая. Эти результаты находятся в хорошем согласии с данными по измерениям диэлектрич. константы: $1,29 \leq \mu \leq 1,31$ (ед. Дебая).

Е. Пшеничников

(CH₃)₂O

M.B.

Chenop

Microwave spectra and structure of dimethyl ether. Uldis Blukis, Paul H. Kasai, and Rollie J. Myers (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 38, 2753-60(1963). The microwave spectra of 6 isotopic species of Me₂O were investigated at 8-48 kMc. From the changes in moments of inertia with C¹³ and O¹⁸ substitutions, the CO distance and ∠COC were found to be 1.410 ± 0.003 Å. and $111^\circ 43' \pm 20'$, resp. The conformation of the methyl groups was detd. from the (CH₂D)-(CH₃)O species. Me₂O has C_{2v} symmetry and the methyl groups are staggered with respect to the opposite CO bonds. The data from D substitutions could only be satisfactorily fitted by a structure contg. asymmetric methyl groups. The two C-H distances in this structure differ by 0.009 Å., the ∠HCH by 49', and the angle between the CO internuclear line and a perpendicular to its resp. H plane is $2^\circ 31' \pm 40'$. If an av. C-H distance of 1.095 Å. is assumed the average ∠HCH is $109^\circ 29'$. The structure of the asymmetric methyl groups is shown to be consistent with *s* and *p* hybridization of the C orbitals. In this scheme the carbons form bent bonds with the O. From the Stark effect the dipole moment of Me₂O was detd. to be $1.31 \pm 0.01 \times 10^{-18}$ e.s.u.

RCJQ

C-A-1963-59.1

134c

1963

11-24-63

1964

9670

-IV

$(CH_3)_2O$, CH_3OH , $(CH_3)_2O$,

CH_3OH , CH_3OH_2 , CH_3OH , $(CH_3)_2OH$

(etc., $\angle xyz$)

Dimethyl P.E.

Isopropyl J.Chem., 1967, 2, 11, 3,
87-90

Structural ...

C_2H_6O

J

1964

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

G. A. Imanov

Radiospectroscopic study of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ and $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$ molecules. L. M. Imanov, Ch. O. Kadzhar, and A. A. Abdurakhmanov. *Tr. Komis. po Spektroskopii, Akad. Nauk SSSR* 3(1), 214-20(1964)(Russ). Microwave spectra of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ and $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$ mols. were studied in the range 20.7-31.7 kMc. on a radiospectrometer with elec. mol. modulation. Some 200 lines were found and their frequencies were studied. The Stark effect was studied for each line. Several transitions of R , Q , and P branches were identified, rotation consts. were detd., and dipole moment components were found. A provisional structure of the EtOH mol. was detd. from the obtained data. From *Ref. Zh., Khim.* 1965, Abstr. No. 22B166. MVRK

C. A. 1966. 64. 12

16858 c

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

1964

1-3 Д365. Радиоспектроскопическое исследование молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Иманов Л. М., Каджар Ч. О., Абдурахманов А. А. «Тр. Комис. по спектроскопии. АН СССР», 1964, Т. 3, вып. 1, 214—220, библиогр. 13 назв.

С помощью радиоспектрометра с электрич. молекулярной модуляцией в диапазоне 20,7—31,7 кМгц исследованы микроволн. спектры молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Обнаружено около 200 линий, измерены их частоты, и исследован эффект Штарка для каждой из них. Идентифицирован ряд переходов R-, Q- и P-ветвей, определены вращательные постоянные и найдены составляющие дипольного момента. На основании полученных данных предварительно определена структура молекулы этилового спирта.

ф. 1966. 3Я

1964

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

22 Б166. Радиоспектроскопическое исследование молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Иманов Л. М., Каджар Ч. О., Абдурахманов А. А. «Тр. Комис. по спектроскопии. АН СССР», 1964, вып. 1, 214—220

На сконструированном авторами радиоспектрометра с электр. молекулярной модуляцией в диапазоне 20,7—31,7 кМгц исследованы микроволновые спектры молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Обнаружено ~200 линий, измерены их частоты и исследован эффект Штарка для каждой из них. Идентифицирован ряд переходов R-, Q- и P-ветвей, определены вращательные постоянные и найдены составляющие дипольного момента. На основании полученных данных определена предварительная структура молекулы этилового спирта.

Реферат авторов

Х. 1965. 22

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

микроволн.
спектр

1964
6 Б291. Микроволновый спектр и эффективные вращательные постоянные молекулы $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Иманов Л. М., Абдурахманов А. А., Рагимова Р. А. «Оптика и спектроскопия», 1964, 17, № 2, 306—307

Приводятся результаты исследования микроволнового спектра в диапазоне 10—33 кМгц на радиоспектрометре с электрич. молекулярной модуляцией молекулы β -тридейтероэтилового спирта с целью уточнения структуры молекулы этилового спирта. Обнаружены и измерены частоты >200 линий. По штарковскому расщеплению идентифицирован ряд переходов Q -, R -, P -ветвей. Данные приводятся в таблице. Отмечается, что наиболее интенсивные линии (10^{-6} см^{-1}) принадлежат к Q -ветви с $\Delta K_{-1}=1$ и $\Delta K_1=-1$. По частотам переходов $1_{01}-1_{10}$ и $2_{02}-2_{11}$ определены значения $A-C$ и χ , а по линии $2_{12}-3_{03}$ значение $A+C$. Полученные таким образом вращательные постоянные приводятся в таблице. Указы-

ж. 1965. 6

вадается на хорошее совпадение полученных эксперим. данных с результатами расчета. Расхождение, которое наблюдается для отдельных переходов, объясняется наличием центробежного возмущения и внутреннего вращения. У каждой из идентифицированных линий молекулы $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$ обнаружены сателлиты, по интенсивности в несколько раз слабее основных линий. Предполагается, что они принадлежат первому возбужденному колебательному состоянию.

А. Изюмов

Спектр

Спектр

Вср - М481-IV

1964

13 Б227. Микроволновый спектр и внутреннее вращение в этиловом спирте. Michielsen—Effinger Janine. Spectre microonde et mouvements de rotation interne de d'alcool éthylique. «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1964, 50, № 6, 645—652 (франц.; рез. англ.)

Исследован спектр C_2H_5OH в области 12—47 $кМгц$. Дублетный характер переходов указывает на наличие двух стабильных конформаций. Для одного из изомеров, для которого 3 тяжелых атома и водород гидроксилкопланарны, найден барьер внутреннего вращения вокруг связи $C—C$ (270 ± 40) $см^{-1}$. Т. Бирштейн

Х. 1966. 13

C_2H_5OH

Вар - М 481 - IV

1964

м.-волн.
спектр

9 Д222. Микроволновый спектр и заторможенные вращения этилового спирта. Michielsen-Effinger Janine. Spectre microonde et mouvements de rotation interne de d'alcool éthylique. «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1964, 50, № 6, 645—652 (франц.; рез. англ.)

С помощью спектрографа со штарковской модуляцией наблюдался микроволн. спектр C_2H_5OH в диапазоне 12—47 Гц. Показано существование двух стабильных вращательных изомеров. Высота барьера внутреннего вращения вокруг связи C—C равна $270 \pm 40 \text{ см}^{-1}$ в случае изомера с компланарным расположением атома водорода гидроксильной группы и тяжелых атомов.

ф. 1965. 98

C2H5OH
(No.)
Bp = 481-11
1964
Microwave spectrum and inner rotation of ethyl alcohol. Janine Michielsens-Effinger (Centre Phys. Mol. Nucl., Heverlee-Louvain). *Bull Classe Sci. Acad. Roy. Belg.* 50(6), 645-57 (1964)(Fr). The microwave spectrum of EtOH has been observed, 12-47 kMc. The existence of 2 stable rotational isomers has been demonstrated. The barrier to internal rotation about the C-C single bond is $270 \pm 40 \text{ cm}^{-1}$ in the isomer I, in which the 3 heavy atoms and the hydroxyl H are coplanar.

RCCR

C.A. 1966. 64.5
5963 d

CH_3OCH_3

CH_3OCD_3

ИК-спектр

IV-9816

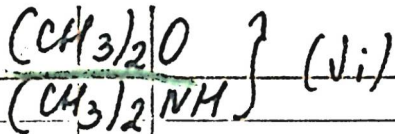
1964

✓ 6 Б265. Изучение некоторых гем-диметилированных молекул методом инфракрасной спектроскопии. I. Спектры CH_3OCH_3 и CH_3OCD_3 . Perchard Jean-Pierre, Foret Marie-Thérèse, Josien Marie-Louise. Etude par spectroscopie infrarouge de quelques molécules gemdyméthylées. I. Spectres des oxydes diméthyliques CH_3OCH_3 et CH_3OCD_3 . «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1964, 61, № 5, 632—644 (франц.)

Получены ИК-спектры поглощения соединений CH_3OCH_3 и CH_3OCD_3 в газообразном состоянии и в р-ре CCl_4 в области $650\text{—}3000\text{ см}^{-1}$ и интерпретированы, исходя из структуры колебательно-вращательных полос. Потенциальный барьер, тормозящий вращение метильной группы, оценен равным $2,84 \pm 0,12$ ккал/моль.

Резюме авторов

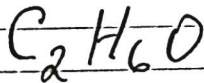
Х. 1965. 6



IV

1965
M1262

Chalmers H.D., McKean D.C.,
Spectrochim. Acta, 1965, 21, N8,
1387-89



10

СК CH_2 ОН

м-волн.
вращат.
спектр

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

ф. 1966.

2 Д309. Микроволновый вращательный спектр молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и CH_3CHDOH . Иманов Л. М., Каджар Ч. О., Исаев Дж. «АзербССР Елмләр Акад. хәбәрләри. Физ.-техн. və риязијјат елмләри сер., Изв. АН АзербССР. Сер. физ.-техн. и матем. н.», 1965, № 2, 62—67 (рез. азерб.).

С помощью радиоспектрометра с электрич. модуляцией исследованы вращательные спектры молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и CH_3CHDOH в диапазоне частот 12,0—35,5 Мгц при т-ре около -40°C и давлении 10^{-1} — 10^{-2} мм рт. ст. Получено удовлетворительное согласие между измеренными и рассчитанными частотами. Вращательные постоянные молекул определялись в приближении жесткого асимметричного волчка с низким J_{101} — 1_{10} , 2_{02} — 2_{11} , 1_{11} — 2_{02} и 2_{12} — 3_{03} , где величина центробежного возмущения мала. Приведены значения вращательных постоянных, параметра асимметрии и главных моментов инерции названных молекул.

2А

1965

896

11-11

IV-M-896

1965

CH₃CH₂OH
CH₃CHDOH
м.к. Вран.
менг.

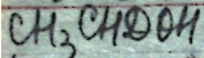
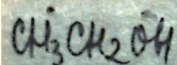
Microwave rotational spectrum of the CH₃CH₂OH and CH₃-CHDOH molecules. L. M. Imanov, Ch. O. Kadzhar, and I. D. Isaev. *Izv. Akad. Nauk Azerb. SSR, Ser. Fiz.-Tekhn. i Mat. Nauk* 1965(2), 62-7(Russ). See CA 63, 3795d. VNJZ

M centers in potassium bromide. I. Theodore J. Neubert (Illinois Inst. of Technol., Chicago) and Sherman Susman. *J. Chem. Phys.* 43(8), 2819-29(1965)(Eng). Oriented distributions of M centers were produced in KBr and the resulting anisotropic spectra measured at -76 and -194°. Dichroic absorption bands are observed corresponding to transitions from the ground state to a variety of higher excited states. Included in these are previously unreported transitions that lie 0.7-1.1 ev. higher than the F band energy. Some energy-level assignments are made by using the F₂ model of the M center. A simplified treatment is presented for the interpretation of dichroic spectra arising from the optical dipole transitions of anisotropic centers in an otherwise isotropic lattice. RCJQ

C.A. 1965. 63. 12
15731 e

1965

B9p-332M-IV



(M. I. Kozel)

смет

Microwave rotational spectrum of the $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ and $\text{CH}_3\text{-CHDOH}$ molecules. L. M. Imanov, Ch. O. Kadzhar, and I. D. Isaev. *Optika i Spektroskopiya* 18(2), 344-5(1965)(Russ). The microwave rotational spectra of CH_3CHDOH and $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{OH}$ were measured with a radiospectrometer with elec. mol. modulation in the range 13,000-33,500 Mc. at -40° . Fifteen transitions were identified; the measured and the calcd. wavelength are in agreement. The rotational consts., the asymmetry parameters, and the chief moments of inertia are calcd., as well as the atm. distances and the angles. M. Wiedemann

C.A. 1965. 63.4

3795 de

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

Вр - МЗЗЗ - IV

1965

CH_3CHDOH

м.-волн.
вращат.
спектр

9 Д224. Микроволновый вращательный спектр молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и CH_3CHDOH . Иманов Л. М., Каджар Ч. О., Исаев И. Д. «Оптика и спектроскопия», 1965, 18, № 2, 344—345

Исследован вращательный спектр молекул CH_3CHDOH и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ в диапазоне 13—33,5 кМгц при t -ре около -40°C . Приведены частоты идентифицированных переходов. По переходам $1_{01}-1_{10}$, $2_{02}-2_{11}$, $1_{11}-2_{02}$ и $2_{12}-3_{03}$ определены вращательные постоянные молекул в приближении жесткого асимметричного волчка. Найдены параметр асимметрии и главные моменты инерции.

ф. 1965. 98

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

ВФ-М 332-IV

1965

20 Б133. Микроволновый вращательный спектр молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ и CH_3CHDOH . Иманов Л. М., Каджар Ч. О., Исаев И. Д. «Оптика и спектроскопия», 1965, 18, № 2, 344—345

Исследован вращательный спектр молекул CH_3CHDOH и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ в диапазоне 13—33,5 кГц при t -ре около -40° . Приведены частоты идентифицированных переходов. По переходам $1_{01}-1_{10}$, $2_{02}-2_{11}$, $1_{11}-2_{02}$ и $2_{12}-3_{03}$ определены вращательные постоянные молекул в приближении жесткого асимметричного волчка. Найдены параметр и главные моменты инерции. Реферат авторов

Х. 1965. 20

1965

СН₃ОСН₃

3 Д373. Изучение изменений в ИК-спектре паров метилового эфира, ассоциированного с галоидоводородами. Le Calvé Jacques, Grange Pierre, Lascombe Jean. Etude en phase gazeuse des perturbations du spectre infrarouge de l'éther méthylique par association avec les halogénures d'hydrogène. «C. r. Acad. sci.», 1965, 261, № 10, 2075—2078 (франц.)

По ИК-спектрам поглощения изучено возмущающее действие ассоциаций паров метилового эфира с HCl и HF на полосы вал. и деф. кол. скелета СОС и вал. кол. С—Н. Проведено обсуждение полученных результатов. Библи. 9 назв.

Е. Рыльцев

ф. 1966. 32

C₂H₅OH

IV - M - 1044

1965

Analysis of the rotational spectrum in the centimeter [microwave] region for ethyl alcohol. Janine Michielsens-Effinger (Univ. Louvain, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. I* 79(3), 253-66(1965)(Fr). Microwave spectra for EtOH, EtOD, Et¹⁸OH, MeCHDOH, and MeCD₂OH were detd., 13-50 kMc. The EtOH exists as 2 stable trans and gauche rotational isomers. For the trans form, the barrier hindering rotation of the Me group is $\sim 270 \text{ cm.}^{-1}$ (0.8 kcal.). Values for various rotational lines of the isomers are listed and compared to values calcd. by using 108° for the trans form, $110^\circ 30'$ for the gauche form of the CCO angle.

Charles A. Horton

C.A. 1966. 65.2

1622 h

СН₅ОН

микро

И-А-1044

1965

13 Б226. Изучение вращательного спектра молекулы этилового спирта в сантиметровом диапазоне. Michielsen-Effinger Janine. Analyse du spectre de rotation dans la région centimétrique de la molécule d'alcool éthylique. «Ann. Soc. scient. Bruxelles», 1965, Sér. 1, 79, № 3, 253—266 (франц.; рез. англ.)

В диапазоне частот 13—50 ГГц изучены микроволновые вращательные спектры C_2H_5OH (I) и 4 его изотопных аналогов. Установлено существование 2 устойчивых изомеров молекулы I: *транс* и *гош*. Для *транс*-изомера по расщеплению линии перехода $0_{00} \rightarrow 1_{01}$ основного состояния определен потенциальный барьер внутреннего вращения метильной группы, равный 270 см^{-1} (0,8 ккал/моль). В. Щерёдин

х. 1966. 13

(CH₃)₂O

и.к.

1965

3 Д378. Водородная связь в газовых смесях. Ч. VI. ИК-спектры комплексов эфиры — азотная кислота. Millen D. J., Samsonov O. A. Hydrogen bonding in gaseous mixtures. Part VI. Infrared spectra of ether-nitric acid systems. «J. Chem. Soc.», 1965, May, 3085—3090 (англ.)

В области 2200—3600 см⁻¹ получены ИК-спектры поглощения газовых смесей Me₂O, MePrO и Et₂O с HNO₃ и DNO₃. Полоса с центральным максимумом 3130 см⁻¹ и боковыми максимумами 2765 и 3470 см⁻¹ приписана комплексу Me₂O...HNO₃. Боковые максимумы объяснены комбинацией колебания $\nu(\text{OH})$ кислоты с низкочастотным колебанием водородной связи. Оценена силовая постоянная водородной связи — 1,8 мдн/Å. Библ. 9 назв.

Ч. V см. реф. 3Д377

ф. 1966. 3Д

1965

 $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ ИК -
спектр

1 Д231 Д. Исследование ИК-спектров некоторых диметилированных молекул $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, CH_3OCD_3 и CH_3SCD_3 . Perchard Jean-Pierre. Contribution à l'étude par spectroscopie infra-rouge de quelques molécules gem-diméthylées $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, CH_3OCD_3 et CH_3SCD_3 . These doct.-ingr. Fac. sci. Univ. Paris, 1963. Luisant-Chartres, 1965, 36 p., ill. (франц.)

ф. 1966. 12



Me_2O

Favero P. G., Scappini F., 1966
Mirri A. M.

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

Boll. Sci. Fac. Chim. Ind. Bo-
logna 24 (2-3), 93.

Double resonance experiments
in the millimeter wave re-
gion.
(see MCOF)

CH₃OCH₂-H

1 BOP-M1531-IV | 1966

Martin R.H., Lampe F.W.,
Taft R.W.

(Do)

"J. Amer. Chem. Soc., 1966,
88, 47, 1353-57.

[Bp - XI-3023]

[1967]

C_2D_5OH (vi, снов. ност.)

Culot J. P.

Bull. Belg. Phys. Soc., 1967,
~ 4-5, 324-325

Есть ф. к.

АД.

1964

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

20 Б60. Групповые колебания и колебательный анализ молекул, содержащих метильные группы. III. Диметиловый эфир, диметилсульфид, диметилселенид и диметилтеллурид. Freeman J. M., Henshall T. Group vibrations and the vibrational analysis of molecules containing methyl groups. III. Dimethyl ether, dimethyl sulphide, dimethyl selenide and dimethyl telluride. «J. Molec. Struct.», 1967, 1, № 1, 31—37 (англ.)

Произведен расчет нормальных колебаний диметилового эфира, диметилсульфида, диметилселенида и диметилтеллурида; приведены вычисленные мол. параметры, силовые константы. Часть II см. РЖХим, 1968, 1Б151.

Из резюме

2. 1968 20

12

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

1967

9 Д148. Групповые колебания и колебательный анализ молекул, содержащих метильные группы. III. Диметилэфир, диметилсульфид, диметилселенид и диметилтеллурид. Freeman J. M., Henshall T. Group vibrations and the vibrational analysis of molecules containing methyl groups. III. Dimethyl ether, dimethyl sulphide, dimethyl selenide and dimethyl telluride. «J. Molec. Struct.», 1967, 1, № 1, 31—37 (англ.)

сим. пост.

Для молекул $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) составлены координаты симметрии и ф-лы для кинематич. коэф. и силовых постоянных в этих координатах. Приводятся значения длины связей и валентных углов в этих молекулах. С помощью методики отделения частот колебаний ме-

ф. 1968. 9А

7

тильных групп определены численные значения 11 силовых постоянных в естественных колебательных координатах. На основании расчета частоты колебаний отнесены к типам симметрии, к колебаниям связей СХ и к деформациям колебаниям метильных групп. Валентные и деформационные силовые постоянные убывают с убыванием электроотрицательности атома Х. Ч. II см. РЖФиз, 1967, 10Д166. М. Ковнер

CH₃OCH₃

1967

16272e Group vibrations and the vibrational analysis of molecules containing methyl groups. III. Dimethyl ether, dimethyl sulfide, dimethyl selenide and dimethyl telluride. J. M. Freeman and T. Henshall (Univ. Salford, Engl.). *J. Mol. Struct.* 1(1), 31-7 (1967) (Eng); cf. CA 66: 42009c. A vibrational analysis using the Me group factorization procedure was made on recent vibrational assignments for Me₂X (X = O, S, Se, Te). A small unit displacement in the CXC angle tends to shorten the C-X bond for X = O, S, and Se implying that during the angular deformation vibration in these mols. the amt. of s-character in the bond increases. The C-Te-C bond is mostly p in character. The C-X stretching force const. agrees with the relation between force const. and electronegativity (Gordy, CA 40: 4268²), except for Me₂O probably due to the importance of interaction const. in the force field for this mol. An attempt to discuss quant. the significance of the stretch-bend interaction force consts. in this series had limited success. CDJN

Vi
Cen. us.

+3

C.A. 1968. 68.4

✓

C₂H₅OH

XIV-3411

1967

6 Д478. Микроволновой спектр, структура, дипольный момент и внутреннее заторможенное вращение молекулы этилового спирта. Иманов Л. М., Каджар Ч. О. «АзербССР Елмләр Акад. хәбәрләри. Физ.-техн. вә ријазийјат елмләри сер., Изв. АН АзербССР. Сер. физ.-техн. и матем. н.», 1967, № 3—4, 33—42

Исследован и идентифицирован спектр восьми изотопозамещенных образцов молекулы этилового спирта. Найдены межатомные расстояния (в Å): $r_{C-H}=1,093$; $r_{C-H}=1,100$; $r_{C-C}=1,524$; $r_{C-O}=1,428$; $r_{O-H}=0,956$ и валентные углы: $\angle CCH=110^{\circ}41'$; $\angle CCH=109^{\circ}30'$; $\angle CCO=107^{\circ}36'$; $\angle CON=104^{\circ}46'$. Найдены высота потенц. барьера и дипольный момент молекулы. И. Б.

Ф. 1968. 69

C_2H_5OH

(M. B. Ruzay)

1166

XIV

14594h Microwave spectrum, structure, dipole moment, and internal constrained rotation of an ethyl alcohol molecule. Imanov, L. M.; Kadzhar, Ch. O. *Izv. Akad. Nauk Azerb. SSR, Ser. Fiz.-Tekh. Mat. Nauk* 1967, (3-4), 33-42 (Russ). Radiospectroscopic investigation of EtOH and 8 labeled ethyl alcs. (CH_3CH_2OH , $CH_3CH_2^{18}OH$, CH_3CHDOH , CH_3CH_2OD , CH_3CD_2OH , CD_3CH_2OH , CD_3CD_2OH , and CD_3CD_2OD) was carried out and their structure detd. Potential barriers leading to internal constrained rotation and the dipole moment were measured. A careful anal. of the mol. spectra of CH_3CH_2OH , CH_3CHDOH , CH_3CD_2OH , and CD_3CH_2OH showed that the most intense rotational lines of the Q branch of the fundamental vibrational state are present also in the excited vibrational states. These can be assocd. with the lowest vibrational frequencies of ethyl alc. owing to rotation around the C-C bond and deformation of the C-C-O group. Each spectra line was identified by comparing its frequency and intensity with the approx. calcd. values, and after an anal. of the Stark effect exhibited by them.

Ved Prakash Gupta

C.A. 1968.

69.4

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

1967

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^{18}\text{H}$

10 Д368. Микроволновой спектр молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^{18}\text{H}$. Иманов Л. М., Каджар Ч. О., Исаев И. Дж. «Оптика и спектроскопия», 1967, 22, № 5, 837—838

В области 18—33,5 кМгц исследованы вращательные спектры молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^{18}\text{H}$ (I) и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ (II) при t -ре около -45°C и давлении 10^{-1} — 10^{-2} мм рт. ст. Идентифицирован ряд новых переходов Q_6 -ветви спектра молекулы I. Частоты измерены с точностью 0,2 Мгц . По частотам 1_{01} — 1_{10} и 2_{02} — 2_{11} найдены величины A — C и параметр асимметрии χ . Приведены измеренные и рассчитанные по экспериментально определенным вращательным постоянным частоты идентифицированных переходов молекулы II.

И. И. Б.

м.и.

ν_i

09.1967.10

⊗

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

1967

мв спектр

список

М.П.

59184z Microwave spectrum of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ and $\text{CH}_3\text{CH}_2^{18}\text{OH}$ molecules. L. M. Imanov, Ch. O. Kadzhar, and I. Dzh. Isaev. *Opt. Spektrosk.* 22(5), 837-8(1967)(Russ). A series of new transitions of the bR and bP branches was identified in the spectrum of EtOD, which made it possible to refine the $A + C$ value given previously (CA 63: 5137c). The mol. parameters are $A = 34,773.1$, $B = 8,768.6$, and $C = 7,687.5$ Mc., $I_a = 14.5380$, $I_b = 57.6524$, and $I_c = 65.7601$ at. mass units $\text{\AA}^2$, and $\chi = -0.920170$. For the transitions $2_{12}-3_{03}$, $5_{24}-6_{16}$, $3_{12}-2_{21}$, $4_{14}-3_{21}$, and $6_{24}-5_{33}$, with the exptl. frequencies 24,280.0, 30,025.6, 27,042.6, 19,463.1, and 32,164.8 Mc., resp., the mol. consts. lead to the calcd. frequencies 24,280.0, 30,029.9, 27,044.5, 19,467.2, and 32,161.0 Mc., resp. The frequencies of Et ^{18}OH were detd. in its mixt. with EtOH (4:96). The $A-C$ value and

C.A. 1967. 67. 12



the asymmetry parameter χ were detd. from the $1_{01}-1_{10}$ and $2_{02}-2_{11}$ transitions. The $A + C$ value could not be detd. in the mixt., the mol. consts. were therefore calcd. by assuming the Δ value, $I_a + I_b - I_c$, to be $\Delta(\text{EtOH})-0.009$. The parameters are then $A = 34,437.0$, $B = 8,943.5$, and $C = 7,800.8$ Mc., $I_a = 14.6799$, $I_b = 56.5249$, and $I_c = 64.8050$ at. mass units $\text{\AA}^2$, and $\chi = -0.914199$. For the $1_{01}-1_{10}$, $2_{02}-2_{11}$, $3_{03}-3_{12}$, and $4_{04}-4_{13}$ transitions, the exptl. and calcd. frequencies are 26,636.2 and 26,636.2, 27,816.8 and 27,816.8, 29,657.4 and 29,657.6, and 32,239.6 and 32,240.2 Mc., resp.

P. Adamek

1967

M-2016-IV

109966Z) Microwave spectrum of the ethanol-1,1-d₂ and ethanol O-d molecules. L. M. Imanov, A. A. Abdurakhmanov, and R. A. Ragimova. *Opt. Spektrosk., Akad. Nauk SSSR, Old. Fiz.-Mat. Nauk, Sb. Statei* 3, 337-8(1967)(Russ). Rotational spectra of MeCD₂OH (I), and of MeCH₂OD (II) were measured with a radiospectrometer. Spectral lines corresponding to Q, R, and P branches were found in the range 11-34 Ghz. Rotational consts., the main moments of inertia, asymmetry parameters, and the line frequencies of I and II are tabulated. The accuracy of results was tested by a comparison with the values of I and II dipole moments and a good agreement was observed. The slope angle of the main inertia axes was estd. and by its means, the direction of dipole moment μ in relation to the bond C $_{\alpha}$ -C $_{\beta}$ was detd. ($122^{\circ}33' \pm 1^{\circ}$). The dipole moment was resolved into its components: μ_{HC} 0.4, μ_{CO} 0.9, μ_{HO} 1.3 D.
H. Parizkova

C.A. 1968. 68. 24

1967

 C_2H_5OH

9 Б667. Экспериментальное исследование p, v, t -зависимости этилового спирта. К а л а ф а т и Д. Д., Р а с - с к а з о в Д. С., П е т р о в Е. К. «Теплоэнергетика», 1967, № 5, 77—81

В интервале t -р 150—300° для давл. от 10 до 200 бар исследована $p-v-t$ -зависимость 96%-ного p -ра этанола в воде. Измерения уд. объемов проводились методом безбалластного пьезометра постоянного объема. Приведены схема и описание установки. Граница термич. стойкости определялась по прямому и обратному ходам t -р на изохорах; найдено, что заметного разложения в процессе опыта не было. Результаты определения уд. объема перегретого пара, жидкости и в крит. области приведены в таблице. Приведена также p, t -диаграмма. Полученные результаты сравнены с данными других авторов.

В. Ф. Байбуз

X. 1968. 9

C_2H_5O-H

Leggett C.,
Thynne J.C.J.

1967

⊙

Trans. Far. Soc., 63, N10, 2504

Термическое разложение
дисульфидперекиси и мет-
лола образования эток-
сильного и цитроноксиль-
ного радикалов.

(см. CH_3OH) III

III

C_2H_5OH

1487
8 Б145. Спектр люминесценции паров этанола; колебательный анализ. Longin Paule. Spectre de luminescence de l'éthanal en phase vapeur; analyse vibrationnelle. «С. г. Acad. sci.», 1967, 265, № 8, В 475—В 478 (франц.)

м.ч.
Vi
При использовании установок с высокой дисперсией в области 3300—5500 Å записан спектр люминесценции паров этанола. Спектр обладает резкой колебательной структурой. На том основании, что добавки азота ослабляют равномерно весь спектр, все колебательные полосы приписаны одному электронному переходу ($S^* \rightarrow S_0$). Определена частота 0,0-перехода и выделены 5 характеристич. частот: 1175 (ν_{CO}, A'), 772 (ν_{CH}, A''), 1113 (ν_{CC}, A'), 509 (δ_{CCO}, A'), 1352 (δ'_{CH_3}, A'). На основе этих частот проведен колебательный анализ спектра.
В. П. Колобков

Л. 1968. 8

1967

C₂H₅OH

M. B. G. G. G.

6910t Microwave rotational spectrum of the ethanol molecule. Michielsens-Effinger, Janine, (Center Phys. Mol. Nucl., Heverlee-Louvain, Belg.). *Bull. Cl. Sci., Acad. Roy. Belg.* 1967, 53(3), 226-31 (Fr). The EtOH spectrum was studied in the region 13-50 MHz. Both the *a*- and *b*-type transitions were assigned. The observed spectrum is consistent with the existence of 2 forms of the mol.: (1) a trans isomer of *C_s* symmetry, with rotational consts. $A = 34,891.5$, $B = 9350.6$, and $C = 8135.1$ Mc./sec.; and (2) a gauche isomer, in which the hydroxyl H occupies either of 2 equiv. positions not in the symmetry plane. The potential barrier of the Me group is relatively high, at least for the trans isomer. BGJF

C. A. 1968. 69. 2

C_2H_5OH

1967

11 Б219. Микроволновый вращательный спектр молекулы C_2H_5OH . Michielsen-Effinger Janine. Spectre de rotation en microondes de la molécule C_2H_5OH . «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1967, 53, № 3, 226—231 (франц.; рез. англ.)

Исследован МВ-спектр молекулы C_2H_5OH в диапазоне 13—50 Гц. Часть обнаруженных линий отнесена к вращательным переходам транс- и гом-изомеров C_2H_5OH . Найдены значения вращательных постоянных транс- C_2H_5OH : $A=34891,5$, $B=9350,6$ и $C=8135,1$ Мгц.
Резюме

X: 1968. II

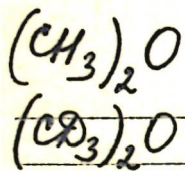
C_2H_5OH

1967
2 Д286. Вращательный спектр молекулы C_2H_5OH в микроволновой области. Michielsen-Effinger Janine. Spectre de rotation en microondes de la molécule C_2H_5OH . «Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.», 1967, 53, № 3, 226—231. (франц.; рез. англ.)

и. н.;
Ч. 1

Проведен анализ вращательного спектра молекулы C_2H_5OH в области 13—50 KMc . Обнаружено два вращательных изомера этилового спирта. Для транс-формы рассчитаны вращательные постоянные $A=34891,5$, $B=9350,6$ и $C=8135,1$ Mc . У гош-изомера экспериментально не удалось достаточно точно определить высоту потенциального барьера для вращения метильной группы. Барьер, рассчитанный из переходов $0_{00}-1_{01}$ и $1_{01}-2_{02}$, достаточно низок (порядка 800—1000 кал.). В. И. П.

1968. 20



Moeller K. D. u gp. 1967

J. Chem. Phys., 47(8),
2609.

Far-infrared² torsional
vibration spectra of
one - two - and three-
 $(CH_3)_3$ top molecules.

(all. C_2H_5Cl) III

CH_3OCH_3

IV - 14 - 2086 1967

18 Б232. Колебательный анализ десяти простых алифатических эфиров: спектры, отнесения, валентно-силовое поле и молекулярные конформации. Snyder R. G., Zerbi G. Vibrational analysis of ten simple aliphatic ethers: spectra, assignments, valence force field and molecular conformations. «Spectrochim. acta», 1967, А 23, № 2, 391—437 (англ.)

Проведен анализ нормальных колебаний 10 простых алифатич. эфиров. Получены ИК- и КР-спектры, проведено отнесение полос и рассчитано валентно-силовое поле. Изучены следующие эфиры: диметиловый, метилэтиловый, диэтиловый, метилизопропиловый, этилизопрпиловый, диизопропиловый, 1,2-диметоксэтан, 1,4-диоксан, тетрагидропиран, 2,5(e,e)-диметилдиоксан-1,4. Валент-

1/2

м.н.

2. 1967. 18

но-силовое поле содержит 76 параметров. 43 из них не определены, вместо них были использованы аналогичные силовые постоянные, определенные при исследовании парафинов; остальные 33 определены, на основе 204 частот, наблюдавшихся в спектрах. После уточнения среднего отклонение рассчитанных частот от эксперим. составило $10,7 \text{ см}^{-1}$. Для 6 эфиров возможна поворотная изомерия. В этих случаях определена конформация молекулы в твердом состоянии. В жидком состоянии для этих молекул можно идентифицировать более, чем одну конформацию.

Резюме

1967

C_2H_5OH

Werner A.P. Lick

сметр

Discuss. Faraday

soc, no 43, 115

[Cu. H₂O](I)

C₂H₅OH

1947

Spencer

76449g Reinvestigation of the structures of ethanol and methanol at room temperature. D. L. Wertz and R. K. Kruh (Univ. of Arkansas, Fayetteville). J. Chem. Phys. 47(2), 388-90 (1967)(Eng). Diffraction studies of EtOH and MeOH indicate strong intermol. H bonding between neighboring alc. mols. at room temp. Each O has, on the av., two nearest O neighbors at 2.7 Å. in each alc. From an analysis of the radial-distribution function of each alc., a reasonable accounting of the observed intermol. interactions is made.. RCJQ

+1

C.A. 1964. 64. 16

17

C₂H₅OH

XIV - 9830

1968

22 Б102. Радиоспектроскопическое определение структуры молекулы этилового спирта. К а д ж а р Ч. О., И с а е в И. Д ж., И м а н о в Л. М. «Ж. структури. химии», 1968, 9, № 3, 445—447

По найденным моментам инерции молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, CH_3CHDOH , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^{18}\text{H}$, $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{CH}$, $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$ и $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OD}$ методом изотопич. замещений определены следующие структурные параметры молекулы этилового спирта: $r(\text{C}-\text{H}_\alpha) = 1,093$, $r(\text{C}-\text{H}_\beta) = 1,100$, $r(\text{C}-\text{C}) = 1,524$, $r(\text{O}-\text{C}) = 1,428$, $r(\text{O}-\text{H}) = 0,956$, $\angle \text{CCH}_\alpha = 110^\circ 41'$, $\angle \text{CCH} = 109^\circ 30'$, $\angle \text{CCO} = 107^\circ 36'$, $\angle \text{COH} = 104^\circ 46'$. Резюме

X. 1968. 22

C_2H_5OH (2:) - 14 XIV.2019 1968

Perchard J. P., Josien M. L., ~~Jeau~~ P.,
J. Chim. Phys. Physicochim. Biol., 1968,
65 (10), 1856-75.

Vibrational spectra of twelve iso-
topic associated ethanol species I.
10 (4) J. CA, 1969, 72, 116, 722958.

1968

 C_2H_5OH

Vi

(72294s) Vibrational spectra of twelve isotopic monomeric ethanol species. I. Perchard, Jean P.; Josien, Marie L. (Lab. Spectrochim. Mol., Fac. Sci., Paris, Fr.). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1968, 65(10), 1834-55 (Fr). The ir spectra of 12 isotopic species of EtOH in the gaseous state and in dil. soln. have been examd. in the 3000-500-cm.⁻¹ range. An assignment is proposed on the basis of the isotopic substitutions. The problem of rotational isomerism is also discussed. RCQQ

C.A. 1969. 70. 16

1968

 C_2H_5OH

7 Д349. Ч. I. Исследование колебательных спектров двенадцати изотопов мономерного этанола. Perchard Jean-Pierre, Josien Marie-Louise. I. Étude des spectres vibrationnels de douze espèces isotopiques d'éthanol monomères. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1968, 65, № 10, 1834—1855 (франц.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры ($400-1500$ и $2000-3750\text{ см}^{-1}$) и спектры комб. рас. этанола и его D_1 дейтеропроизводных в жидком и газообразном состоянии и в растворах в CS_2 и CCl_4 . Расшифровка спектров проведена на основе сопоставления спектров изомеров с различной степенью дейтерирования и анализа симметрии молекул исследованных в-в. Определены константы взаимодействия и силовые постоянные для метильной и мети-

ν_i ; м.ч.;
сим. несим.

ф. 1969. 7Д

леновой групп; частоты полос, рассчитанные с использованием этих констант, хорошо согласуются с эксперим. величинами. Присутствие дополнительных Q-максимумов в тонкой структуре полос вал. кол. ROD и ROH для некоторых образцов объяснено существованием двух различных конформаций. Обнаруженное взаимодействие колебаний $\delta(\text{COH})$ и $t(\text{CH}_2)$ несовместимо в рамках теории гармонич. силового поля с существованием *транс*-изомера. Предположено, что эти конформации представляют *гош*-изомеры с различной ориентацией связей C—H относительно неподеленной пары электронов атома кислорода. Библ. 28.

Л. Б.

1968

XIV - 9874

Транс-С₂H₅ОН

4 Б308. Микроволновый спектр этилового спирта. Транс-изомер. Takano Mitsuru, Sasada Yoshiaki, Satoh Takeshi. Microwave spectrum of ethyl alcohol. The trans rotamer. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 2, 157—162 (англ.)

м. в. спектр,
дип. мом.,
м. п.

В области 8—34 Гц исследован микроволновый спектр молекулы транс-С₂H₅ОН. Отождествлено 13 линий в основном состоянии. Определены вращательные константы $A=34891,68$; $B=9350,44$; $C=8135,23$ Мгц. Определено значение дипольного момента $\mu=1,441 \pm 0,007$ и его компонентов $\mu_a=0,046 \pm 0,014$ и $\mu_b=1,438 \pm 0,019$ Д. И. Б.

X. 1969. 4

C₂H₅OH

XIV - 9877

1968

(J. B. Curran)

14597m Microwave spectrum of ethyl alcohol. The trans rotamer. Takano, Mitsuru; Sasada, Yoshiaki; Satoh, Takeshi (Def. Acad., Yokosuka, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 26(2), 157-62 (Eng). The microwave spectrum of EtOH was investigated in the frequency region 8-34 GHz. About 13 lines were assigned to ground state transitions. The existence of the trans rotamer was verified. The rotational consts. were $A = 34891.68$, $B = 9350.44$, $C = 8135.23$ GHz. for the ground vibrational state of the trans rotamer. From b -type transitions $2_{11} \leftarrow 2_{02}$, $3_{12} \leftarrow 3_{03}$, $4_{13} \leftarrow 4_{04}$, $3_{03} \leftarrow 2_{12}$, and $C_{21} \leftarrow 3_{12}$ the dipole moment μ and its components μ_a and μ_b were $\mu = (1.441 \pm 0.007)$, $\mu_a = (0.046 \pm 0.014)$, and $\mu_b = (1.438 \pm 0.019)$ D., resp. The results were crit. examd. in comparison with the data presented by the researchers, Imanov and Kadzhar, and Michielsen-Effinger.

RCKP

C.A. 1968. 69.4

C_2H_5O-H

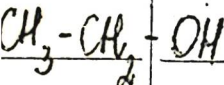
williams J. M., et al. ¹⁹⁶⁸

J. Chem. Phys., 1968,

49, ~ 10, 4467.

мерней
свечи

($C_{25}H_{51}^+$)⁺



21 Б299. Изучение молекулы этилового спирта методом микроволновой спектроскопии. Culot Jean-Pierre. Contribution à l'étude de la molécule d'alcool éthylique en spectroscopie hertzienne. «Ann. Soc. scient. Bruxelles», 1969, Sér. 1, 83, № 1, 65—95 (франц., рез. англ.)

1969

В диапазоне 8—59 Гц исследованы МВ-спектры 6 изотопич. модификаций этанола $\text{CH}_3 - {}^{13}\text{CH}_2 - \text{OH}$, $\text{CH}_2\text{D} - \text{CH}_2 - \text{OH}$, $\text{CH}_3 - \text{CD}_2 - \text{OH}$, $\text{CD}_3 - \text{CH}_2 - \text{OH}$, $\text{CD}_3 - \text{CD}_2 - \text{OH}$ и $\text{CD}_3 - \text{CD}_2 - \text{OD}$ в основном колебательном состоянии. Идентифицировано большое число линий вращательных переходов типа «в» и ряд линий переходов типа «а» *транс*-изомера. Приведены таблицы всех измеренных частот. Обработка спектров проведена с учетом поправок центробежного искажения 2-го порядка по ф-ле Уотсона для вращательной энергии асимм. волчка, содержащей 3 вращательных постоянных и 5 независимых линейных комбинаций центробежных постоянных. Для всех изотопов определены значения вращательных и центробежных постоянных.

М. Р. Алиев

М.И.

Х. 1969. 21

1969

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

~~44135t~~ Microwave spectroscopic study of the ethyl alcohol molecule. Culot, Jean P. (Univ. Cathol. Louvain, Louvain, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1969, 83(1), 65-95 (Fr). Spectra were measured at 8-42 GHz. in a waveguide at -30° and at 42-59 GHz. in a 2nd waveguide. Extensive calcns. and observed spectral data are given for $\text{Me}^{13}\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{OH}$, MeCD_2OH , $\text{CD}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OH}$, and $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{OD}$. The Watson formula was used for the centrifugal distortion correction of the rotational energy levels thus giving some new attributions on the microwave spectra of these isotopic species in the fundamental vibration state. The assigned transitions correspond to the dipole component along the axis of intermediate moment of inertia (μ_b). The anal. of the Stark effect imposes an upper bound to the component μ_a along the axis of least moment of inertia ($\mu_a \leq 0.1 \mu_b$) for the trans form where the hydroxy H lies in the plane of the heavy atoms. Edgar S. Peck

брав.
ноч.

C. A. 1969. 71. 10

C₂H₆O

1969

CH₃OSCH₃

Haney M.A.,
Franklin J. G.

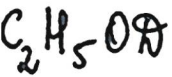
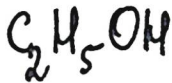
сродство
к иротику

J. Phys. Chem.,

1969, 73, n12, 4528

(C₆H₅CH₂NH₂)III

1969

V₀

u.b.челер

(17786m) Microwave spectrum of the ethyl alcohol molecule. Imenov, L. M.; Kadzhar, Ch. O.; Isaev, I. D. (Fiz. Inst., Baku, USSR). *Spektrosk., Tr. Sib. Soveshch.*, 4th 1965 (Pub. 1969), 13-6 (Russ). Edited by Prilezhaeva, N. A. Izd. "Nauka": Moscow, USSR. The microwave spectra of D-substituted EtOH: EtOD (I), MeCHDOH (II), MeCD₂OH (III), CD₃CH₂OH (IV), CD₃CD₂OH (V), and CD₃CD₂OD (VI) are recorded at 12-33.5 Hz, -40°, and 10⁻¹-10⁻² torr. From the Stark effect and the line intensity, the transitions of the P-, Q-, and R-branches are identified. The structural parameters obtained from the spectral anal. are used to calc. the height of the potential barrier (*h*), damping the internal rotation of 2 groups of atoms in EtOH around the CC bond. For IV *h* = 3170 ± 320 and for II *h* = 3250 ± 320 cal-mole⁻¹.

G. S. Nikolov

+2

C.A. 1971. 74. 4



C_2H_5OH

1969

1) 11 Д389. Вращательный спектр молекулы этилового спирта (CH_3CH_2OH) в микроволновой области. Michielsen-Effinger Janine. Spectre de rotation en microondes de la molécule d'alcool éthylique CH_3CH_2OH . «J. phys.», 1969, 30, № 4, 336—340 (франц.; рез. англ.)

И. П. Из анализа микроволн. спектра молекулы C_2H_5OH (I) установлено существование двух стабильных изомеров — *транс*- и *гош*-конформации. Наблюдено более 100 вращательных линий *b*-типа *транс*-формы, а также линии *a* и *b*-типа *гош*-формы. Приведены рассчитанные значения этих линий с учетом теории центробежного искажения Ватсона. С помощью метода наименьших квадратов рассчитаны вращательные постоянные для основного состояния I. Получены значения 5 коэф. центробежного искажения. Г. П.

Ф. 1969. 112

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

и.в. спектр

г. 1969. 20

1969
20 Б281. Микроволновый вращательный спектр молекулы этилового спирта $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Michielsen - Efinger Janine. Spectre de rotation en microondes de la molécule d'alcool éthylique $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. «J. phys.», 1969, 30, № 4, 336—340 (франц.; рез. англ.)

Идентифицированы более 100 линий *транс*-изомера молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ в МВ-спектре. Расчет положения этих линий произведен по ф-ле Ватсона. Из анализа спектра методом наименьших квадратов получены след. величины постоянных для основного состояния:
 $A=34891$, 6715 , $B=9350$, 6428 , $C=8135$, 19914 Мгц.
 $\kappa=-0,909147689$, $\tau_{xxxx}=-0,04812468629$, $\tau_{yyyy}=-0,01916837651$, $\tau_{zzzz}=-0,9271844319$, $\sigma_{xxyy}+\sigma_{yyzz}+\sigma_{zzxx}$ ($\sigma_{aabb}=\tau_{aabb}+2\tau_{abab}$) $=+0,01237467114$,
 $v\sigma_{xxyy}+\sigma_{yyzz}$ ($v=2/(1+\kappa)$) $=-0,6953338768$ Мгц.
Из резюме

1969

C₂H₅OHM.B.
Merrill

110300a Microwave spectrum of ethyl alcohol. Michielsen-Elfinger, Janine (Centre Phys. Mol. Nucl., Heverlee-Louvain, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(3), 489-91 (Eng). The existence of 2 stable isomers was confirmed by the identification of $2^bQ_1, {}^1J_{0J} \rightarrow J_{1,J-1}$ subbranches, not only in the spectrum of EtOH but also in the spectra of MeCD₂OH, Et¹⁸OH, EtOD and of MeCHDOH. The mol. was definitely established to exist in 2 stable rotational isomers, a trans form and a *gauche* form. Anal. of the spectrum by the method of least-sqs. yielded the ground-state rotational parameters which are given. The assignment of 96 rotational transitions involving J values < 28 was made; these are: 7 μ_b Q-branch lines of the series $J_{0,J} \rightarrow J_{1,J-1}$; 48 μ_b R-branch lines of the type ${}^bR_{11}, {}^bR_{1,1}, {}^bR_{1,3}$ and 41 μ_b P-branch lines of the type ${}^bP_{1,1}, {}^bP_{1,3}$. No splitting into A/E doublets by the restricted rotation of the Me group has been observed.

DWJN

C.A. 1969. 70. 24

1969

CH₃CH₂OH

V) 10 Д308. Микроволновой спектр этилового спирта. Michielsen-Effinger, Janine. Microwave spectrum of ethyl alcohol. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 489—491 (англ.)

Исследован микроволн. спектр молекулы CH₃CH₂OH (I). С помощью метода наименьших квадратов вычислены вращательные параметры транс-формы I в основном состоянии. Отождествлено 96 вращательных переходов, включая значения $J < 28$. Для транс-формы переходы α -типа не наблюдаются. Для *gauche*-формы исследованы $0 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 2$ переходы α -типа. Структура этого изомера предполагает потенциальную ф-цию с двойным минимумом.

Г. П.

г. в.
спектр

ф. 1969. 108

1969

Транс-
CH₃CH₂OH

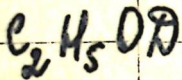
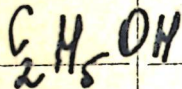
21 Б298. Микроволновый спектр этилового спирта.
Michielsen-Effinger Janine. Microwave spectrum of ethyl alcohol. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 489—491 (англ.)

Суммированы результаты исследований МВ-спектров этилового спирта и его изотопич. разновидностей, проведенных автором. Приведены значения вращательных и центробежных постоянных транс-CH₃CH₂OH. М. Р. Алиев.

№ 1969. 21

XIV - 453

1970

ИК-спектр
поглощения
(в матрице)

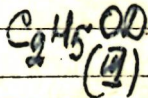
2 Д429. Криогенные исследования в ИК-спектроскопии. V. Этанол и этанол-*d* в матрицах из Ar. Barnes A. J., Hallam H. E. Infra-red cryogenic studies. Part 5. Ethanol and ethanol-*d* in argon matrices. «Trans. Faraday Soc.», 1970, 66, № 8, 1932—1940 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения ($40-4000\text{ см}^{-1}$) C_2H_5OH и C_2H_5OD в аргоновой матрице при 20°K и разбавлениях $M/A=3000-20$. Рассмотрена самоассоциация молекул спирта в *транс*- и *гош*-конформациях в матрице посредством водородной связи. Проведено полное отнесение колебаний для более стабильной *транс*-конформации (в парах при комнатной т-ре отношение числа молекул в *транс*-форме к *гош*-конформациям составляет 2:1). Среди ассоциатов идентифицированы открытые цепные димеры, тримеры и тетрамеры и циклич. тетрамеры. Библ. 13. Ч. IV см. реф. 2Д428. С. Ф. Б.

оо. 1981. 2Д

См. также

①



1970

(CH₃)₂O

м. в.
смешан

24 Б209. Молекулярный эффект Зеемана в диметиловом эфире и диметилсульфиде и сравнение их анизотропий магнитной восприимчивости с этиленсульфидом и окисью этилена. Benson R. C., Flygare W. H. Molecular Zeeman effect of dimethyl ether and dimethyl sulfide; and comparison of the magnetic susceptibility anisotropies with ethylene sulfide and ethylene oxide. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 10, 5291—5298 (англ.)

Исследован вращательный эффект Зеемана в МВ-спектрах диметилового эфира (I), диметилсульфида (II) для малых J ($0 \leq J \leq 3$, 9000—31 106 МГц). Определены молек. g -факторы (для I $g_{aa} = -0,0214 \pm 0,0006$, $g_{bb} = -0,0093 \pm 0,0004$, $g_{cc} = -0,0210 \pm 0,006$; для II $g_{aa} = -0,0193 \pm 0,0007$, $g_{bb} = 0,0000 \pm 0,0003$, $g_{cc} = -0,0083 \pm 0,0003$), анизотропии магнитной восприимчивости для I $(2\chi_{aa} - \chi_{bb} - \chi_{cc}) = -10,4 \pm 0,7$, $(-\chi_{aa} + 2\chi_{bb} - \chi_{cc}) = 1,2 \pm 0,6$; для II $(2\chi_{aa} - \chi_{bb} - \chi_{cc}) = -4,2 \pm 0,5$, $(-\chi_{aa} + 2\chi_{bb} - \chi_{cc}) = -2,8 \pm 0,5 \cdot 10^{-6}$ абс. эл.-магн. ед./ч и

X. 1970. 24

(+1)

47

молек. квадрупольные моменты. В обоих случаях оси a и b лежат в плоскости молекул I, II, а ось c делит пополам угол COC или CSC . Определены анизотропии второго момента распределения электронной плотности. Данные авторов по анизотропиям магнитной восприимчивости I, II и пропена сопоставлены с соотв-щими величинами для окиси этилена, этиленсульфида и циклопропена. Сделан вывод, что в предшествующих теор. работах Мушера недооценивались нелокальные вклады в значения анизотропии магнитной восприимчивости соотв-щих циклич. молекул.

А. П. Александров

CH_3OCH_3

Л;

см. пост;

У.

Vodoch N., et al.

1970

У. Амер. Спект. Рос.,

92, 13, 3854.

Основные состояния
молекулы с б-свечением.

Х. Как исследованные
молекулы гетерогенного
метода измерения

ного преобразования диф-
ференциальным переори-
ванием на содержание,
содержание в том же
кислород.



$(CH_3)_2O$

1940

ν_i

(27708x) Vibration-rotation spectra of dimethyl ether and dimethyl ether- d_6 . Duncan, Budd L. (Univ. Tennessee, Knoxville, Tenn.). 1970, 154 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-20,303. From *Diss. Abstr. Int. B* 1970, 31(5), 2596.

C.D. 1941. 45.4.

$O(CH_3)_2$

расчет

Kahn O.

1950

Bull. Soc. Chim.

France, N12, 4193.

$[Si. B(CH_3)_3]_{III}$

1970

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

3 Б283. ИК-спектры в области от 800 до 3000 cm^{-1} эфиров $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ и CH_3OCD_3 в матрице аргона. Lassègues Jean-Claude, Grenié Yves, Forel Marie-Thérèse. Spectres infrarouges de 800 à 3000 cm^{-1} des éthers $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, CH_3OCD_3 et $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ en matrice d'argon. «C. r. Acad. sci.», 1970, 271, № 7, B421—B424 (франц.)

Изучены ИК-спектры эфиров $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ и CH_3OCD_3 в матрице аргона в области от 800 cm^{-1} до 3000 cm^{-1} . В полученных спектрах разрешены многие полосы поглощения, к-рые перекрыты в обычном спектре. Уточнена интерпретация колебательных спектров этих молекул. Ю. М. Богуславская

+2

X. 1971. 3

81

1970

 $(CH_3)_2O$ $(CD_3)_2O$

смет

6

смет

135539k Infrared spectra from 800 to 3000 cm^{-1} of the ethers $(CH_3)_2O$, CH_3OCD_3 , and $(CD_3)_2O$ in an argon matrix. Las-
 seques, Jean C.; Grenie, Yves; Forel, Marie T. (Centre Rech.
 Paul Pascal, Talence, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1970,
 271(7), 421-4 (Fr). Frequencies and assignments of ir absorp-
 tions (800-3000 cm^{-1}) of Me_2O , $MeOCD_3$, and $(CD_3)_2O$ in Ar at
 20°K are presented and discussed. FBJF


 (19)

C.A. 1970. 73 26



$(CH_3)_2O$

1970

4 Д380. Низкочастотные колебательные спектры изотопических соединений алифатических эфиров. Ч. I. Диметиловый эфир. Perchard J. P. Spectres vibrationnels de basses fréquences de diverses espèces isotopiques des premiers éthers aliphatiques. I. Ether diméthylique. «J. Mol. Struct.», 1970, 6, № 5, 359—374 (франц.; рез. англ.)

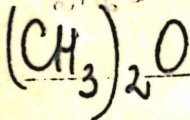
Изучены ИК-спектры четырех изотопич. соединений диметилового эфира (I) в области $50-500\text{ см}^{-1}$ в различных состояниях. Получены спектры комб. рас. трех соединений I в кристаллич. состоянии при 80°K . Дано отнесение колебаний. На основании полученных результатов вычислен потенц. барьер. Приведены спектры и таблицы. Библ. 12. К. М.

ν_0

ν_i

ор. 1971. 42

1970



8006e Low-frequency vibrational spectra of different isotopic species of primary aliphatic ethers. I. Dimethyl ether. Perchard, Jean P. (Lab. Chim. Phys., C.N.R.S., Thiais, Fr.). *J. Mol. Struct.* 1970, 6(5), 359-74 (Fr). The ir spectra of 4 isotopic dimethyl ether species in various phys. states have been interpreted between 500 and 50 cm^{-1} . Crystals of 3 species at 80°K exhibit in their Raman spectra a few lines related to the torsion vibrations of Me groups, in agreement with the absorption results. A calcn. of the potential barrier from the frequency values was made and earlier work in this field is discussed.

RCBF

C.A. 1971.74.2

1970

 $(C_{2v})_{20}$

4 Б242. Пробные стандартизованные координаты симметрии для многоатомных молекул. XIV. Другие модели с симметрией C_{2v} . Vizi B., Cyvin S. J. Tentatively standardized symmetry coordinates for vibrations of polyatomic molecules. XIV. Further molecular models with C_{2v} symmetry. «Acta chim. Acad. sci. hung.», 1970, 64, № 4, 351—356 (англ., рез. русск.)

Предложены координаты симметрии для использования в расчетах частот и форм, моделей следующих типов с симметрией C_{2v} : метилового эфира, ацетона, пропана, диметилкетена. Пред. сообщ. см. пред. реферат.

Ю. М. Богуславская

Координаты
симметрии (C_{2v})

X. 1971. 4

CH₃OCH₃

1971

спектр
в матрице

7i

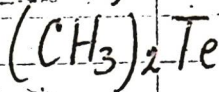
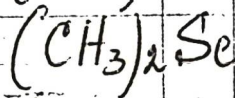
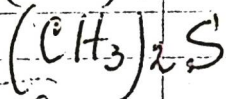
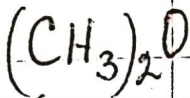
18 Б269. Некоторые приложения техники изоляции в матрицах инертных газов в инфракрасной спектроскопии. Gréne Yves, Lassegues Jean-Claude. Quelques applications de la technique des matrices de gaz inertes en spectroscopie infrarouge. «Mét. phys. anal», 1971, 7, № 3, 254—257 (франц., рез. англ.)

Проведено несколько типичных исследований с применением метода матричной изоляции. Получены ИК-спектры CH₃OCH₃ и CH₃OCD₃, изолированных в матрице Ag, к-рые обсуждены в связи с отнесением наблюдаемых полос. Возможность изучения Н-связи и самоассоциации молекул внутри матрицы иллюстрируется на спектрах (CH₃)₂O, изолированного в Ag. На примере H₂N—CH₂—COOH показана возможность стабилизации в матрице «высокот-рных модификаций» молекул. Показана возможность использования метода псевдо-матричной изоляции для качеств. и колич. анализа газов. Г. Кузьянц

X. 1972. 8



1971

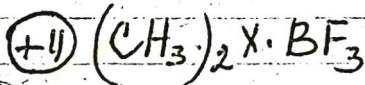


22 Б176 Д. Валентно-силовое поле и нормальные координаты для гем-диметильных соединений VIB группы и их аддуктов с трехфтористым бором. Labarbe Pierre. Champs de force de valence et coordonnées normales des molécules gem—diméthylées de la colonne VI B et de leurs composés d'addition avec le trifluorure de bore. Thèse doct. sci. phys. Fac. sci. Univ. Bordeaux, 1971. 118 p., ill. (франц.)

На основании данных по ИК-спектрам и спектрам

(сильнос.; ν_i)

ж. 1975. № 22



06



X = O, S, Se, Te.

КР простых и дейтерированных молекул типа Me_2X , где $\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$, проведен расчет частот и форм нормальных колебаний и распределения потенциальной энергии по колебательным координатам. Для молекулы Me_2Te данные по изотопозамещенным отсутствовали, поэтому силовое поле получено с меньшей достоверностью. Отмечено несколько более высокое значение силового коэф. связи CH , лежащей в плоскости скелета CXC по сравнению с двумя другими связями CH метильной группы. Обсуждена зависимость силовых коэф. молекул от природы атома X . Изучены ИК-спектры и спектры КР донорно-акцепторных комплексов типа $\text{Me}_2\text{X} \rightarrow \text{BF}_3$. Обсуждено отнесение частот и изменения в спектрах компонентов при образовании комплекса. Проведен расчет нормальных колебаний комплексов. Отмечено, что в комплексе $\text{Me}_2\text{O} \rightarrow \text{BF}_3$ силовые постоянные связей CO понижаются по сравнению со свободной молекулой эфира (с 5,50 до 4,40 мдн/А), тогда как для связей CH наблюдается нек-рый рост силовых коэф. В случае пр-ных S и Se эффекты аналогичны, хотя и гораздо менее явно выражены. Изменения в спектрах сопоставлены с природой связи в комплексах.

Б. В. Локшин

C_2H_5OH

Salahub J.R. 1944
Sandorfy C.

Vi
XIV-2436

Chem. Phys. Lett. 1944,
8, 41, 41-44.

● $(C_{60}H_{12}O)_n$

$(CH_3)_2O$

1971

спектр,

ν_0

+2

11 Д202. Внутреннее вращение в молекулах $(CH_3)_2X$ с симметрией C_{2v} . Барьер внутреннего вращения диметилэфира. Tuazon Ernesto C., Fateley William G. Internal rotation in $(CH_3)_2X$ molecules of C_{2v} symmetry-barrier to internal rotation in dimethyl ether. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 10, 4450—4454 (англ.)

Предложен метод определения эффективного барьера внутреннего вращения молекул, имеющих 2 метильные группы и принадлежащих к точечной группе C_{2v} , из частот крутильных колебаний типа B_1 незамещенной и полностью дейтерированной молекул. Используется гамильтониан, в котором учитываются динамич. и кинематич.

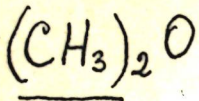


Б. 1971. 112



взаимодействия волчков. Экспериментально исследованы длинноволн. ИК-спектры молекул $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ и CH_3OCD_3 в газовой фазе. Из частот 240 и 192 см^{-1} колебания ν_1 молекул $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ и $(\text{CD}_3)_2\text{O}$, соответственно вычислены эффективный барьер $V_{\text{эф}} = 946 \pm 15 \text{ см}^{-1}$ и коэф. взаимодействия волчков $V'_{12} = 30 \pm 9 \text{ см}^{-1}$. Эти значения $V_{\text{эф}}$ и V'_{12} использованы для вычисления энергии крутильных уровней молекулы CH_3OCD_3 . Сравнение вычисленных частот CH_3OCD_3 с эксперим. частотами (158 и 220 см^{-1}) показывает, что крутильные уровни групп CH_3 и CD_3 подвержены сильному взаимному резонансу.

М. Р. Алиев



1972

(A)

130914b Proton affinities of benzene, toluene, and the xylenes. Chong, Shuang-Ling; Franklin, J. L. (Dep. Chem., Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1972, 94(19), 6630-5 (Eng). By operating the ion source of a mass spectrometer at pressures above 0.14 torr, equil. consts. were obtained for the proton transfer reaction of HCOOH with benzene, and of both methanethiol and $(CH_3)_2O$ with toluene and the 3 xylenes. The resulting free energies when combined with the known proton affinities of the ref. compds. (and assuming 0 intrinsic entropy of reaction) give the following values for the proton affinities: benzene, 178.0; toluene, 187.4; *p*-xylene, 188.0; *o*-xylene, 188.0; *m*-xylene, 188.1, all in kcal/mole. The value for benzene is referred to $\Delta H_1(sec-C_3H_7^+)$ of 191.7 kcal/mole and all others are referred to proton affinity of $(CH_3)_2O$ of 187 kcal/mole.

C.A. 1972, 77, N20

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

AlCl_4^-

AlBr_4^-

(см. п.

1.)

1982

18 Б68. Сравнение валентных силовых полей координационных соединений $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlCl}_3$ и $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlBr}_3$ с силовыми полями $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ и AlCl_4^- или AlBr_4^- . Derouault J., Fouassier M., Fotrel M. T. Comparaison entre les champs de force de valence des composés d'addition $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlCl}_3$ ou $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlBr}_3$ et ceux des dérivés $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ et AlCl_4^- ou AlBr_4^- . «J. Mol. Struct.», 1972, 11, № 3, 432—438 (франц., рез. англ.)

Методом GF-матриц из частот колебаний и структурных параметров вычислены силовые постоянные и распределение потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам для $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, AlCl_4^- и AlBr_4^- . Дано отнесение частот по форме колебаний. Полученные силовые постоянные использованы

X. 1982. 18

(42) ☒

для вычисления частот координац. соединений $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlCl}_3$ и $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlBr}_3$ и их полностью дейтерированных видов, а также распределения потенциальной энергии по внутренним координатам. На основании результатов расчета интерпретированы колебательные спектры этих соединений. Отмечено, что некоторые силовые постоянные свободных фрагментов при комплексообразовании изменяются.

М. Р. Алиев

C_2H_5OH

Холлати. и. Т. Г.

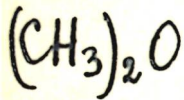
1972

"Phys. BL. "

сметр.
в издании

1972, 2 P, N°12, 555-560.

/см III) HCl



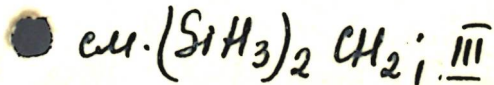
Gebhardt D.;
et al.

1972.

(c.n)

"J. Mol. Struct"

1972, 12 N2, 205-14



C_2H_5OH

C_2H_5SH

(min)

1972

18 Б240. Исследование некоторых спиртов методом микроволновой спектроскопии. Иманов Л. М., Кад-

жар Ч. О., Аббасов А. А., Абдуллаев Г. А., Аскеров А. Б. В сб. «Материалы 1-го Всес. симпоз. по вращательн. спектрам молекул. 1969». Баку, 1972, 55—63

Обсуждены результаты исследования МВ-спектров и строения спиртов $EtOH$, CH_2CHCH_2OH , CH_3CH_2OH и тиоспирта, $EtSH$; для даллилового спирта построены потенциальные кривые внутреннего вращения.

Б. В. Рассадин

Х. 1973 № 18

(+3)



C_2H_5OH

1972.

5 Б244. Микроволновый вращательный спектр гош-изомера этилового спирта. K a k a r R a m e s h K., S e i b t P e t e r J. Microwave rotational spectrum of gauche ethyl alcohol. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 9, 4060—4061 (англ.)

ш.п.

Методом микроволнового двойного резонанса идентифицированы новые линии вращательных переходов с-типа основного колебательного состояния гош-изомера в микроволновом спектре молекулы этанола. Определены значения вращательных постоянных для обоих подуровней туннельного расщепления. Из величины расщепления $E^- - E^+ = 96993$ Мгц оценен барьер внутреннего вращения метильной группы $V_3 = 420$ см⁻¹. М. Р. Алиев

х. 1973. № 5.

C_2H_5OH

1972

3 Д523. Микроволновый вращательный спектр *gauche*-изомера этилового спирта. Kakar Ramesh K., Sebibt Peter J. Microwave rotational spectrum of gauche ethyl alcohol «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 9, 4060—4061 (англ.)

(м.п.) Методом микроволн. двойного резонанса идентифицированы новые линии вращательных переходов *c*-типа основного колебательного состояния *gauche*-изомера в микроволн. спектре молекулы этанола. Определены значения вращательных постоянных для обоих подуровней туннельного расщепления. Из величины расщепления $E^- - E^+ = 96993$ Мгц оценен барьер внутреннего вращения метильной группы $V_3 = 420$ см⁻¹. М. Р. Алиев

Ф. 1972. № 3.

C_2H_5OH

1972

(u.h)

77754s Microwave-microwave double resonance studies of some rotational transitions in ethyl alcohol. Seibt, Peter Joseph (Texas Technol. Univ., Lubbock, Tex.). 1972, 71 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 72-32,063. From *Diss. Abstr. Int. B* 1972, 33(6). 2750-1.

C. A. 1973. 78 N12

C_2H_5OH

1972

1 Д381. Исследование индуцированных соударениями переходов в C_2H_5OH , CH_2DOH_2OH и C_2H_5OH-He методом микроволнового двойного резонанса. Seibt Peter J. Microwave double resonance studies of collision-induced transitions in C_2H_5OH , CH_2DOH_2OH , and C_2H_5OH-He . «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 3, 1343-1350 (англ.)

(м.н.)

Методом микроволнового двойного резонанса с модуляцией и без модуляции исследованы индуцированные столкновениями вращательные переходы в чистых газах C_2H_5OH (I) и CH_2DOH_2OH (II) и в смеси I—He при давлениях 0,1÷3,5 мм рт. ст. Показано, что переходы, для которых выполняются дипольные правила отбора, имеют наибольшую вероятность. В чистых газах транс-изомеров I и II происходят преимущественно переходы, поляризованные по главной оси b молекулы: переходы типа a и переходы S-ветви в некоторых случаях прояв-

Р.м.р. 1973. 1

71

8

ляются, но имеют очень малую вероятность. В смеси I—
Не дипольные и недипольные переходы имеют сравнимую
вероятность. Для количеств. интерпретации результатов
использована теория Андерсона в приближении диполь-
дипольного взаимодействия и показано, что в чистых га-
зах перенос вращательной энергии при столкновении мо-
лекул осуществляется главным образом по диполь-ди-
польному механизму. К такому заключению приводят
также данные по уширению вращательных линий.

М. Р. Алиев

40108.3631

 $(CH_3)_2O$

1973

CH₃TE

58616 GR

1571

Bock H., Möllere P., Becker G., Fritz G.
Photoelectron spectra and molecular
properties. IX. Dimethyl ether, metho-
xyllane, and disiloxane. "J. Organo-
metal. Chem.", 1973, 61, 113-125

(англ.)

0018 Ник' 20 к

004 004

0 1 1

ВИНИТИ

1973

$(CH_3)_2O$

Christoffersen R.E.
et al.

раствор
геометр.

"J. Amer. Chem. Soc."
1973, 95 N26, 8526-36.

и. и.

● (см. C_2H_4 ; III)



1973



6 Д507. Микроволновые спектры, дипольные моменты и структура молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ в *gauche*-конформации. Каджар Ч. О., Аббасов А. А., Аскеров А. Б., Иманов Л. М. «АзССР Елмлер Акад. хәбәрләри. Физ.-техн. вә ријазийјат елмләри сер., Изв. АН АзССР. Сер. физ.-техн. и мат. н.», 1973, № 3, 80—84 (рез. азерб., англ.)

спектр.

Обнаруженные отклонения от спектров жестких волчков объяснены воздействием туннелирования водорода гидроксильной или гидросульфидной группы через *cis*-барьер. Замещение атома О на S приводит к уменьшению вращательных постоянных и возможности наблюдения достаточного кол-ва переходов в исследуемом диапазоне. Большая интенсивность линий переходов $J_{1,J} \rightarrow (J_{1,J+1}+1)$, $J_{1,J-1} \rightarrow (J_{1,J}+1)$ и хорошее разрешение штарковских компонент позволило идентифицировать спектр молекулы этилмеркартана в *gauche*-конформации.

Ф. 1974 N 6.



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

1973

м.п., г.г.г.

12 Б245. Микроволновые спектры, дипольные моменты и структура молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$ в гош-конформации. Каджар Ч. О., Аббасов А. А., Аскеров А. Б., Иманов Л. М. «АзССР Елмләр Акад. хәбәрләри. Физ.-техн. вәријазијјат елмләри сер., Изв. АН АзССР. Сер. физ.-техн. и мат. н.», 1973, № 3, 80—84 (рез. азерб., англ.)

В диапазоне 16—40 Гц исследованы МВ-спектры молекул этилового спирта (I) и этилмеркаптана (II). По эффекту Штарка идентифицированы линии вращательных переходов типа «а», состоящие из «инверсионных» дублетов, для гош-конформаций этих молекул. Найдена «а»-компонента дипольного момента: $\mu_a = 1,36$ (I) и $1,29$ D (II). Определены вращательные постоянные и показано, что валентный угол CCO (S) в гош-конформации I (II) на 3—4° больше тетраэдрического.

М. Р. Алиев

ж. 1974

№ 12

(41)

☒

C_2H_5OH

1973

Katsumato Shunji, et al.
"Bull. Chem. Soc. Jap."
1973, 46, NII, 3391-95.

Chemical; Vi

(see. CH_3NH_2 , III)

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

1973

6 Д377. Сравнение силовых валентных полей молекул, образованных атомами VI A столбца с двумя метильными группами. Labarbe Pierre, Fogel Marie-Thérèse. Comparaison des champs de force de valence des molécules gem-diméthylées de la colonne VI A. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1973, 70, № 1, 180—187 (франц.; рез. англ.)

Изучены колебательные спектры молекул типа $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ ($\text{X}=\underline{\text{O}}, \underline{\text{S}}, \underline{\text{Se}}, \underline{\text{Te}}$) и их дейтеропроизводных. Структура молекул определена по микроволн. данным, за исключением $(\text{CH}_3)_2\text{Te}$, геометрия которой принята аналогичной остальным. По частотам молекул с $\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$ определены силовые постоянные и форма колебаний. Получены соотношения между значениями силовых постоянных, электроотрицательностью центрального атома и энергиями диссоциации молекул. Из этих соотношений найдены силовые постоянные $(\text{CH}_3)_2\text{Te}$ и рассчитан колебательный спектр, частоты которого хорошо согласуются с опытными данными. Библ. 42.

М. В. Тонков

$\text{Vi}; \text{c.n.}$
геометр

Ф. 1973. № 6

(+3)

☒

40206.3726

Ex-Ch/XPH-z,

Ph, Ch, TE, MGU

 $(CH_3)_2O$

m.p. 96201

1973

1749

Pacey Philip D. Detection of methyl radicals in flow pyrolysis by ultraviolet spectroscopy. "Chem. Phys. Lett.", 1973, 23, N 3, 394-396

(англ.)

0038 ББК

544

025 025 031

ВИНИТИ

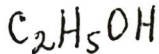
C_2H_5OH

1973

19 Б159. Аномальное поведение соединений, меченых O^{18} . XI. Валентные колебания C—O изотопических этоксид-ионов. Pinchas S. The anomalous behaviour of O^{18} -labelled compounds. XI. The C—O stretching frequency of isotopic ethoxide ions. «Spectrochim. acta», 1973, A 29, № 5, 853—855 (англ.)

(Vi) Измерены спектры КР этанола (I) и этанола- O^{18} (II), а также их Na-солей (III и IV). Полосы вал. кол. $\nu(CO)$ лежат при 1050 и 1041 cm^{-1} в I и II и при 1068 и 1058 cm^{-1} в III и IV. Полученные результаты сравнены с соотв-щими данными по фенолятам. Тот факт, что изотопич. сдвиг при O^{18} -замещении практически одинаков для I—II и III—IV, говорит о незначительном двойном характере связи C—O в III и IV (в фенолятах величина изотопич. сдвига возрастает при ионизации на 7 cm^{-1}). Для деф. кол. CO наблюдается увеличение изотопич. сдвига в III—IV по сравнению с I—II, что говорит о большом участии атома кислорода в деф. кол. $\delta(CO)$. Сообщ. VII см. РЖХим, 1972, 13Б210. Е. Разумова

х. 1973 № 19



1973

9 Д262. Аномальное поведение соединений, меченных ^{18}O . Ч. XI. Валентная частота C—O замещенных этилат-ионов. Pinchas S. The anomalous behaviour of ^{18}O -labelled compounds. XI. The C—O stretching frequency of isotopic ethoxide ions. «Spectrochim. acta», 1973, A 29, № 5, 853—855 (англ.)

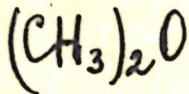
(Vi).

Получены спектры комб. рас. этанол, этилата натрия и их изотопнозамещенных по ^{18}O аналогов. Частоты полос вал. кол. ν CO этанола и этилат-иона найдены равными 1050 и 1068 cm^{-1} соответственно; для ^{18}O -замещенных соединений они составляют 1041 и 1058 cm^{-1} . Одинаковая величина сдвига при замещении кислорода для этанола и иона этилата свидетельствует о незначительной степени двоевязанности C—O⁻ в алифатич. этилат-ионах.

(41)

С. Ф. Б.

Ф. 1973 № 9.



1973

Pozzoli S.A. et.al.

рефер

"J.Chem. Soc. Faraday Trans ."
1973, Part 2, 69, N2, 256-261.

(см. H_2O ; III)

1973

 C_2H_5OH

6 Д614. Вычисление контуров Фойгта для линий комбинационного рассеяния с помощью ЭВМ. Sundius T. Computer fitting of voigt profiles to Raman lines. «J. Raman Spectrosc.», 1973, 1. № 5, 471—488 (англ.)

спектр

Предложена программа для анализа с помощью ЭВМ сложных спектров комб. рас. Программа позволяет определить истинное распределение интенсивности в спектре комб. рас., если известно аналитич. выражение для аппаратной ф-ции спектрометра. Производится разложение сложного спектра на элементарные контуры в предположении лоренцевской формы отдельных линий. В качестве примера проведен анализ сложной структуры спектра комб. рас. этилового спирта в области C—H-колебаний ($165—357\text{ см}^{-1}$). Отмечено, что предложенный метод позволяет с большой точностью определить расстояние между перекрывающимися линиями и может быть использован для анализа давидовского расщепления в спектрах комб. рас. органич. кристаллов. Библ. 31.

С. П.

Ф. 1974 № 6



(+1)

программа ЭВМ

C_2H_5OH

Сил. пос.

ν_i

10 Д356. Теоретическое исследование колебательных спектров молекул этанола и его дейтерозамещенных. Землянухина И. Я., Свердлов Л. М. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1973. 30 с., ил., библиогр. 11 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 14 мая 1973 г., № 6046—73 Деп.)

1973

На основе использования имеющихся эксперим. частот колебаний для этанола и семи его дейтерозамещенных решена обратная колебательная задача для молекулы этанола. При вычислении силовых постоянных использованы геометрич. параметры молекулы этанола, определенные радиоспектроскопич. методом. Выяснены особенности силового поля для молекулы этанола. На основе расчета частот, нормированных форм норм. колебаний и распределения потенц. энергии по внутренним координатам дана полная интерпретация колебательных спектров этанола и семи его дейтерозамещенных. Между вычисленными и эксперим. частотами достигнуто достаточно хорошее согласие (максим. расхождение составляет 49 см^{-1} , средняя ошибка — 12 см^{-1}). Расчеты производились на ЭВМ «Урал-4» и «М-220М».

Автореферат

Ф. 1973 № 10

C_2H_5OH

1973

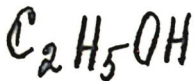
21 Б218 Деп. Теоретическое исследование колебательных спектров молекул этанола и его дейтерозамещенных. Замлянухина И. Я., Свердлов Л. М. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1973. 30 с., ил., библи. Рукопись деп. в ВИНТИ 14 мая 1973 г., № 6046—73 Деп.).

На основе использования имеющихся эксперим. частот колебаний для этанола и семи его дейтерозамещ. решена обратная колебательная задача для молекулы этанола. При вычислении силовых постоянных были использованы геометрич. параметры молекулы этанола, определенные радиоспектроскопич. методом. Выяснены особенности силового поля для молекулы этанола. На основе расчета частот, нормированных форм нормальных колебаний и распределения потенциальной энергии по внутренним координатам дана полная интерпретация колебательных спектров этанола и семи его дейтерозамещ. Между вычисленными и эксперим. частотами достигнуто хорошее согласие (максим. расхождение составляет 49 см^{-1} , средн. ошибка — 12 см^{-1}). Все расчеты производились на ЭВМ «Урал-4» и «М-220М».

Ди;
Уголметр.
Спирит

Ж. 1973 № 21

Автореферат



1973

(2:)

126386a Vibrational spectra of molecules of ethanol and its deuterio derivatives. Zemlyanukhina, I. Ya.; Sverdlov, L. M. (Saratov. Politekh. Inst., Saratov, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1973, 47(8), 2182 (Russ). Addnl. data considered in abstracting and indexing are available from a source cited in the original document. The vibrational spectra of EtOH and its deuterated analogs indicate that the trans isomer of EtOH displays C_2 group symmetry with 21 normal vibrations of the $G = 13 A' + 8 A''$ symmetry types. A calcn. of the vibrational spectra was performed by using Wilson's AK matrix method. Calcd. and exptl. frequencies agree well. V. Hancil

C.A. 1974.80 N22

C_2H_5OH

1974.

Вовна В. И., Лопатин С. Н.
и др.

(3)

«Оптика и спектроскоп»

1974, 36 №1, 173-78.

(см. H_2O ; III)

Зах. 247

$(CH_3)_2O$

№ 4-5670

1974

11 Д352. О переходе 1700 Å в диметиловом эфире.
McDiarmid Ruth. On the 1700 Å transition of di-
methyl ether. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 10, 4091—
4092 (англ.)

Экспериментальный материал по спектрам поглоще-
ния, а также по фотоэлектронным спектрам использо-
ван для исследования полосы поглощения 1700 Å ди-
метилового эфира. Предполагается, что наиболее веро-
ятым является отождествление этой полосы с перехо-
дом $b_1^* \leftarrow a_1, {}^1B_1$.

Т. Н. Т.

ф. 1974. № 11

AlSe
 C_2H_5OH

Jenouvrier Alain 1974

список
испуск,
м.п.

Miss. Abstr. Sub. B
1976, 36(11), 5546-7

● (см. CO_2 ; III)

505191.2502

Ch, TC

9097821. стр. 1

1974

 C_2H_5OH

4-8958

перевод с японского

Ituta Shigoru, Harada Katsunori, Yoshihara Kenji, Shiokawa Takanobu. Application of molecular orbital calculation to fragment ionization processes in ethanol and ethylamine. "Спектр бунсэки, Mass Spectrosc.", 1974, 22, N4, 239-244

(англ.)

348

953

0361 пик ВИНТИ

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

1974

Jen J.S., Thomas T.D.,

(2) J. Electron. Spectrosc.,
and Relat. Phenom.,
1974, 4 N1, 43-47

● (cur. NH_2NH_3^+ ; 1)

41004.1801

Ch, Ex-Ch, TC

C_2H_5OH

40771

02

1974

2535

Martin R. J., Shirley D. A. The relation
of core-Level binding energy shifts to
proton affinity and lewis basicity.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 17,
5299-5304

(англ.)

0205 гмк

175 178 01 07

БИННТИ

Me₂O
(CH₃)₂O

(Do)

1974
Sanderson R.T.

Edue. Chem 1974
11(6) 208-9 (Eng)

(all R & L III)

$(CH_3)_2O$

1974.

Schweig A; Thiel W.

"Mol. Phys"

chemsp

1974, 27 N1, 265-68

(crs. CO_2 ; III)

Зах. 247

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

(γ)

X/1976
N13

13 Б71. Корреляция значений молекулярных термов благородных 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.)

Установлена линейная корреляция между первыми потенциалами ионизации I молекул диметилхалькогенидов $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) и атомов благородных газов Ne, Ar, Kr и Xe соотв. Сопоставление значений молек. термов $((\text{CH}_3)_2\text{S}$ (I), $(\text{CH}_3)_2\text{Se}$ (II) и $(\text{CH}_3)_2\text{Te}$ (III) *s*-, *p*- и *d*-серий ридберговских переходов с соотв.щими атомными термами Ar, Kr и Xe показало, что при всех номерах *n* (главных квантовых числах) термов в серии величины $T_n = I - \nu_n$, где ν_n — частота ридбергова перехода в серии, хорошо согласуются для пар I — Ar ($n=4-10$), II — Kr ($n=5-11$), III — Xe ($n=6-13$). Отмечено, что подобная корреляция полезна для отнесения ридберговских полос и для установления главного квантового числа ридберговских орбиталей (при правильном его выборе наблюдается постоянство квантового дефекта для всех членов серии).

Н. Ф. Степанов

1974

(+1)

⊗

40531.6698

Ch, TE

 CH_2OCH_3 96601 02
соединение
электронное

1974

Xy5101

Tam Wing-Cheung, Brion C.E.

Electron impact spectra of some alkyl
derivatives of water and related compo-
unds. "J. Electron Spectrosc. and
Relat. Phenom.", 1974, 3, N 4, 263-279
(англ.)

102 103

0 121
ВИНИТИ

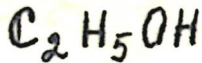
1974

 $(CH_2)_3O$

(2i)

162153x Vibrational spectra and ring puckering progressions in the carbon-hydrogen stretching region of trimethylene oxide and several deuterated analogs. Wieser, H.; Danyluk, M.; Kydd, R. A.; Kiefer, W.; Bernstein, H. J. (Dep. Chem., Univ. Calgary, Calgary, Alberta). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(11), 4380-93 (Eng). The ir (vapor, and solid at 15°K) and Raman (vapor and liq.) spectra in the region of 2700-3200 cm^{-1} are reported for 3 deuterated analogs of trimethylene oxide, viz. $\alpha-d_2$, $\beta-d_2$, and $\alpha,\alpha'-d_4$, and compared to the spectra of the normal compd. All principal ir absorptions and Raman lines were identified and assigned to vibrational modes of the $\alpha-CH_2$ and $\beta-CH_2$ groups (6 stretching fundamentals and 3 scissoring overtones). A no. of band sequences were obsd. in the ir and Raman spectra of the vapors. They are ascribed to combinations of various C-H stretching fundamentals and CH_2 scissoring overtones with the ring puckering vibration and its overtones. The puckering sepns. in these vibrationally excited states in general do not differ greatly from the pure puckering differences.

CA. 1975, 82 v 24



1974

8 Д536. Расчет постоянных центробежного искажения молекулы этилового спирта. Землянухина И. Я., Свердлов Л. М. «Оптика и спектроскопия», 1974, 36, № 4, 672—675

Ді, сил. пост.
м.п.

На основе имеющихся эксперим. данных по колебательным спектрам этилового спирта и его дейтерозамещенных выполнен расчет силовых постоянных для молекулы этилового спирта. Для определения 48 силовых постоянных использовано 128 независимых частот колебаний (с учетом изотопич. соотношений) этилового

ф. 1974. № 8

спирта и семи его дейтерозамещенных. На основе найденного силового поля для молекулы этилового спирта выполнен расчет τ -постоянных центробежного искажения. Вычисленные значения **постоянных τ_{aaaa}** достаточно хорошо согласуются с эксперим. значениями — максим. отклонение составляет 15%, среднее 9%. Вычислены постоянные центробежного искажения в форме Кивельсона — Вильсона ($D_J, D_{JK}, D_K, R_5, R_6, \delta_J$) и в форме Уотсона ($d_J, d_{JK}, d_K, d_{WF}, d_{WK}$).



1975

Автореферат (КФМ.Н.)

Структ.; Аскеров А. Б. Докл.
Мол. пос. Исследования м. в.

Вращ. спектра возбужден-
ных состояний молекулы
 $\text{C}^1\text{D}_3\text{C}^2\text{D}_2\text{OH}$ спектр. и структур.

$(CH_3)_2O$

1975

Becker, S., et al.,

Collect. Czech. Chem. Commun.

1975, 40(3), 794-798.

кв. мет. раскв.

(с H_2O ; III)

1975

 C_2H_5OH

(I; II)

21 Б238. Спектры комбинационного рассеяния газов. XVI. Крутильные переходы в этаноле и этантиоле. Durig J. R., Bucy W. E., Wurrey C. J., Carreira L. A. Raman spectra of gases. XVI. Torsional transitions in ethanol and ethanethiol. «J. Phys. Chem.», 1975, 79, № 10, 988—993 (англ.)

В спектрах КР газообразных этанола (I), этантиола (II) и их дейтерированных аналогов (III, IV) выделены линии торсионных колебаний —SH (для гош-изомеров), метильных групп (и их обертонов) и OH-групп. Для торсионного колебания —SH предложена асимметричная потенциальная функция и рассчитаны ее параметры. Вычислены также значения потенциальных барьеров заторможенного внутреннего вращения метильных (3,77 и 3,84 ккал/моль для II и IV, соответственно) и гидроксильных (0,51 ккал/моль и 1,02 ккал/моль для I и III, соотв.) групп. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1974, 21Б202.

А. Бобров

x/1975 n21

1975

 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$

No. 10

ф. 1975
N 10

10 Д449. Спектры комбинационного рассеяния газов. Ч. XVI. Торсионные колебания в этаноле и этантиоле Durig J. R., Bucy W. E., Wurfey C. J., Carreira L. A. Raman spectra of gases. XVI. Torsional transitions in ethanol and ethanethiol. «J. Phys. Chem.», 1975, 79, № 10, 988—993 (англ.)

Получены спектры комб. рас. в области $50-1200\text{ см}^{-1}$ паров этанола и этантиола, а также их частично дейтерированных аналогов. По спектрам комб. рас. торсионных колебаний радикала тиола в гош-изомере этантиола вычислена асимметричная потенц. ф-ция этих колебаний. Определены также потенц. барьеры внутреннего вращения метиловых групп в молекулах этантиола и дейтерированного этантиола (3,77 и 3,84 ккал/моль соответственно). Частоты торсионных колебаний гидроксильных групп составляют в обычном и дейтерированном соединении соответственно 207 и 170 см^{-1} . По спектрам обертонов этих колебаний определен барьер внутреннего вращения гидроксильных групп для гош-конформации этанола, равный 3,62 ккал/моль. Библ. 29.

(41)

C_2H_5OH

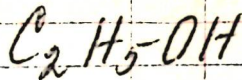
1975

(Di; Uo)

18344p Raman spectra of gases. XVI. Torsional transitions in ethanol and ethanethiol. Durig, J. R.; Bucy, W. E.; Wurrey, C. J.; Carreira, L. A. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, S. C.). *J. Phys. Chem.* 1975, 79(10), 988-93 (Eng). The Raman spectra of gaseous EtOH and EtSH were investigated. Thiol torsional fundamentals for the gauche conformer of EtSH and EtSD were obsd. and the asymmetric potential function for this vibration was calcd. Methyl torsional transitions and overtones have also been obsd. for both of these mols. Barriers to internal rotation for the methyl top are 3.77 and 3.84 kcal/mole for the EtSH and EtSD compds., resp. Hydroxyl torsional fundamentals were obsd. at 207 and 170 cm^{-1} in the EtOH and EtOD spectra, resp. Overtones of the methyl torsion in both mols. yield a barrier to internal rotation of 3.62 kcal/mole for the gauche conformer.

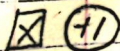
C.A. 1975 83 N2

1975



(P)

84: 156025g Vapor pressure and partial vapor pressure isotope effects of isotope ethanols, ethylamines, and ethyl iodides. Goetz, Rainer (Phys.-Chem. Inst., Univ. Heidelberg Heidelberg, Ger.). *Finn. Chem. Lett.* 1975, (7-8), 204-7 (Ger) Vapor pressure quotients and partial vapor pressure quotients of isotopic ethanols, ethylamines and ethyl iodides are interpreted with the theory of J. J. Bigeleisen (1961). The intermol vibrations of hydrogen- and deuterium-bonded mols. are responsible for the normal isotope effect ($p/p' < 1$), the intramol vibrations are responsible for the inverse isotope effect ($p/p' > 1$). The partial vapor pressure quotients $p \text{ EtOD}/p \text{ EtOH}$, $p \text{ C}_2\text{D}_5\text{OD}/p \text{ EtOH}$ and $p \text{ EtND}_2/p \text{ EtNH}_2$ were calcd. with the equations of the activity coeffs. by Wilson. The partial vapor pressure isotope effect of these pairs first is normal and then in large diln. becomes inverse. The normal effect of the hydrogen- and deuterium-bonded mols. is replaced by the inverse effect of monomers.


C.A. 1976 B4 N22

60129.9196

Ch, TC, MGU

96559

C_2H_5OH

(AH^+)

1975

45-11281

Harrison A.G., Lin SP.-H., Tsang C.W.
Proton transfer reactions by trapped-
ion mass spectrometry. "Int. J. Mass
Spectrom. and Ion Phys.", 1976, 19,
N 1, 23-51

0540 0000

(англ.)

523 525

5 2 5

ВИНИТИ

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

* 68-11547

1975

6 Д464. Микроволновый спектр диметилофира в возбужденных состояниях. крутильных колебаний. Hayashi Michiro, Imachi Misako. Microwave spectra of dimethylether in the excited torsional states. «Chem. Lett.», 1975, № 12, 1249—1252 (англ.)

Измерены микроволновые вращательные спектры молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ в основном и первом возбужденном состояниях крутильного колебания и молекулы $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ в основном и трех первых возбужденных состояниях. По величине туннельного А—Е-расщепления линий вычислены значения барьера внутреннего вращения метильной группы: $V_3 \approx 2600$ кал/моль. Определены значения вращательных постоянных для исследуемых колебательных состояний этих молекул.

М. Р. Алиев

м. в. спектры

ф 1976 N6

Физу 347

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$
 $(\text{CD}_3)_2\text{O}$

13 Б288. Микроволновые спектры диметилового эфира в возбужденных крутильных состояниях. Hayashi Michiro, Imachi Misako. Microwave spectra of dimethylether in the excited torsional states. «Chem. Lett.», 1975, № 12, 1249—1252. (англ.)

Измерены МВ-спектры двух изотопич. образцов диметилового эфира: $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (I) и $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ (II) в основном и 5 возбужденных крут. состояниях: $(0\ 0)$, $(0\ 1)^+$, $(0\ 1)^-$, $(0\ 2)^+$, $(0\ 2)^-$ и $(1\ 1)$. Для обоих образцов и всех состояний определены вращательные постоянные. Вращательные постоянные в основном состоянии равны (Мгц) для I: $A=38798,15(63)$, $B=10056,38(15)$, $C=8886,80(14)$; для II: $A=25696,37(30)$, $B=7483,76(7)$, $C=6798,08(7)$. По расщеплению линий в спектре, связанному с внутренним вращением двух метильных групп, определены величины барьеров внутреннего вращения (кал/моль) для I: $V_3=2605(14)$; для II, $V_3=2580(64)$. Вычислен ряд параметров потенциальной функции внутреннего вращения. Приведенные результаты согласуются с данными, полученными на основе ИК-спектроскопии.

С. Н. Мурзин

М. Н.
У. О.

X. 1976 N 13

1975

44-115-112

51215.6779

Ch, Ph, TC

 H_3COCCH_3 24997 GR $\text{H}_3\text{CNHCCH}_3$

1975

*4-10903

(И. К. Раман спект.)
Hamada Keinosuke, Morishita Hirofumi.

The vibrational spectra and structures
of $\text{H}_3\text{C}-\text{X}-\text{CH}_3$ ($\text{X}=\text{O}, \text{CH}_2, \text{NH}$). "Z. Phys.
Chem." (BRD), 1975, 97, N 5-6, 295-299

(англ., рез. нем.)

0524 п.м.

ВИНИТИ

C_2H_5OH

1975

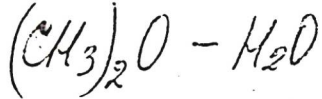
Strohbusch H, et. al.

Z. Naturforsch 1975,

30a N5, 623-626.

(А.А. Момчиц.
суд. ноем,
76).

● (суд. ноем.; III)



1976

Ayers, G. P., et al.

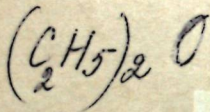
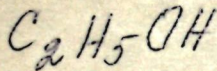
Spectrochim. acta, 1976,

(и.к. спектр.)

A32, N10; 1641-50



(соед. $\text{H}_2\text{O} - \text{HCl}$; III)



1976

3 Д140. Конформационный анализ и электронная структура этанола и диэтилового эфира. Болотин В. А., Ковальчук Д. С., Россихин В. В. «Liet. fiz. rinkinys, Лит. физ. сб.», 1976, 16, № 5, 677—684 (рез. лит., англ.)

В рамках метода ППДП-2 проведен конформационный анализ молекул этанола и диэтилового эфира, определена электронная структура их основного состояния, включающая заряды на атомах, порядки связей, полную энергию и дипольные моменты. Автореферат

Электр
структ.

Ф. 1977 №3

(+1)



70118.8751
Ch, Fh, TC

30526GR

1976

$(CH_3)_2O$

* 45-16349

Blom C.E., Otto L.P., Altona C.
Application of self-consistent-field ab
initio calculations to organic molecules.
III. Equilibrium structure of water, me-
thanol and dimethyl ether, general vale-
nce force field of water and methanol
scaled on experimental frequencies.

"Mol. Phys.", 1976, 32, N 4, 1137-1149

(АНГЛ.)

(see H₂O; III)

0793 пмк

741 751 35

ВИНИТИ

CH_3OCH_3

* 3-15639

1976

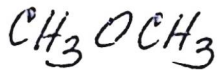
4 Д435. Анализ крутильного расщепления микроволновых спектров диметилофира CH_3OCH_3 и его изотопозамещенных CD_3OCH_3 и CD_3OCD_3 . Durig J. R., Li Y. S., Groner P. Analysis of torsional splittings in the microwave spectra of dimethylether, CH_3OCH_3 and its isotopes, CD_3OCH_3 and CD_3OCD_3 . «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 62, № 2, 159—174 (англ.)

В диапазоне 26—40 Гц исследованы микроволн. спектры молекул CH_3OCH_3 , CD_3OCH_3 и CD_3OCD_3 . Идентифицированы линии вращательных переходов в основном колебательном состоянии и в первых двух возбужденных состояниях крутильных колебаний, а также туннельное А—Е-расщепление линий. Анализ спектров выполнен по модели «внутренних осей» и определены параметры потенц. энергии крутильных колебаний. Для барьера внутреннего вращения V_3 и коэф. V_{33} взаимодействия метильных групп в CH_3OCH_3 получены значения 909 и $5,1 \text{ см}^{-1}$ соответственно.

М. Р. Алнев

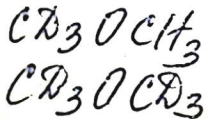
м. в. спектр
2, м. в.

ф. 1977 N 4



~~Вед~~ - * 4-15639

1976



(min)

6 Б263. Анализ торсионного расщепления в микроволновых спектрах диметилэфира, CH_3OCH_3 , и его изотопов, CD_3OCH_3 и CD_3OCD_3 . D u r i g J. R., L i Y. S., G r o n e r P. Analysis of torsional splittings in the microwave spectra of dimethylether, CH_3OCH_3 and its isotopes, CD_3OCH_3 and CD_3OCD_3 . «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 62, № 2, 159—174 (англ.)

Измерены МВ-спектры трех изотопич. образцов диметилэфира: CH_3OCH_3 (I), CD_3OCH_3 (II) и CD_3OCD_3 (III), в основном колебательном состоянии и первых двух возбужденных торсионных состояниях в области частот от 19 до 40 Гц. Исследовано мультиплетное расщепление МВ-переходов, связанных с внутренним вращением двух метильных групп. Анализ расщеплений выполнен при использовании гамильтониана; в к-ром учитывалась как кинетич., так и потенциальная энергия взаимодействия двух групп внутреннего вращения.

Х. 1977.6

В полужесткой модели предполагалось, что оси вращения двух внутренних роторов с симметрией C_{3v} расположены в плоскости симметрии молек. остова. Для коэф. потенциальной функции внутреннего вращения получены значения в случае образца I: $V_{30} = V_{03} = 909.05 \pm 0.49 \text{ см}^{-1}$, $V_{33}' = 5.06 \pm 1.60 \text{ см}^{-1}$, в случае II: $V_{30}(\text{CD}_3) = 897.18 \pm 2.41 \text{ см}^{-1}$, $V_{03}(\text{CH}_3) = 910.45 \pm 0.33 \text{ см}^{-1}$, и в случае III: $V_{30} = V_{03} = 897.00 \text{ см}^{-1}$. Для остальных коэф. потенциальной функции получены нулевые значения. Полученные результаты сопоставлены с известными МВ-данными для этих молекул.

С. Н. Мурзин



70217.4329

Ch, Ph, TC, Ex-C

43929

1976

 $(CH_3)_2O$

X 5-16847

Hamada Keinosuke,Morishita Hiro-

fumi. The Raman, infrared and proton
NMR spectra and the structures of di-
methyl chalcogenides. "Spectrosc. Lett.",
1976, 9, N 11, 743-747 (англ.)

0812 ВМК

794 798

802

ВИНИТИ

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

6 Б259. Крутильно-крутильное взаимодействие в микроволновом спектре диметилэфира. Lutz H., Dreizler H. Torsion-torsion interaction in the microwave spectrum of dimethylether. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 8, 1026—1028 (англ.)

М. Н.
Головко

Измерен МВ-спектр диметилэфира, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, в области частот от 8 до 40 ГГц. Идентифицирована тонкая структура МВ-линий, связанная с крутильно-крутильным взаимодействием, для шести вращательных переходов в возбужденных крутильных состояниях $\tilde{\nu}=1_1$ и 1_2 . Для обоих крутильных состояний определены эффективные вращательные постоянные. Для $\tilde{\nu}=1_1$ вращательные постоянные равны (в МГц) $A=38797,34 \pm 0,30$, $B=10024,95 \pm 0,05$, $C=8867,34 \pm 0,10$, и для $\tilde{\nu}=1_2$: $A=38770,43 \pm 0,30$, $B=9993,07 \pm 0,05$, $C=8870,13 \pm 0,10$. Из анализа тонкой структуры линий определены значения трех параметров полного гамильтониана заторможенного потенциала $\tilde{\nu}_3$, потенциала взаимодействия $\tilde{\nu}_{12}'$ и угла θ между осью метильного волчка и b-осью молекулы: $\tilde{\nu}_3=2654 \pm 2$ кал/моль, $\tilde{\nu}_{12}'=14 \pm 3$ кал/моль, $\theta=60,11 \pm 0,3^\circ$.

С. Н. Мурзин

2.1977
№5

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

1976

2 Д426. Вращательно-вращательное взаимодействие в микроволновом спектре диметилового эфира. Lutz H., Dreizler H. Torsion-torsion interaction in the microwave spectrum of dimethylether. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 8, 1026—1028 (англ.)

ш.н.

Дан анализ вращательной тонкой структуры линий молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ в возбужденных крутильных состояниях. Определены параметры внутреннего вращения: $V_3 = 2654 \pm 2$ и $V_{12}' = 14 \pm 3$ кал/моль.

Р. 1977. № 2

C₂H₅OH

1976

Okubo Katsutoshi,
et al.

mean
error
(A₁)

Bull. Chem. Soc. Jap.,
1976, 49, N2, 480-6

(all H₂O) III

70228.3475
Ph, TC

$(CH_3)_2O$ 0892

1976

X 9-17237

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 ENG

793 801

813

ВИНИТИ

C₂H₅OH

1976.

Sauty D. P.

Theor. chim. acta,
1976, 42, N1, 67-75.

(непр.
-ссыл.)

● (all. C₂H₅-NH₂; III)

70209, 1925

Ch, Ph, TC, MGU

(CH₃)₂O

96200

1976

* 3-16579

Wadt Willard R., Goddard William
A., III. The low-lying excited states of
water, methanol, and dimethyl ether.

"Chem. Phys.", 1976, 18, 1-2, 1-11
(англ.)

(сч. H₂O; III)

0809 КМК

779 782 801

ВИНИТИ

$(CH_3)_2O$ number 5546 1977
Blom C. E. et al.

car. no., Mol. Phys. 1977,
I, number 34, 554-41.

Application of self-consistent-field
calculations to  ab initio calculations to organic molecules

СНЗОН

(оттиски 5327)

Босюмин В.А.,
Берестюнас А.В.

1977

мощ.
сильн.,

Цо

лет. фл. епкинус.,
лит. гру. сб. 1977,
17, № 3, 321-328 (реф. лит.,
атлас.)

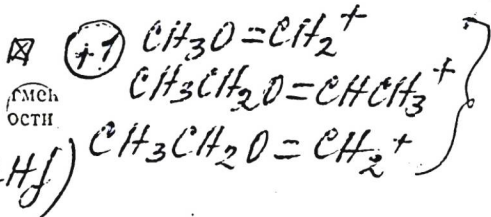
(см. СНЗОН) III

$(CH_3)_2O$

1977

3 Б114. Фотоионизация диметилового эфира и диэтилового эфира. Botter R., ~~Решине J. M., Rosenstock H. M.~~ Photoionization of dimethyl ether and diethyl ether. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1977, 25, № 1, 7—25 (англ.)

Измерены кривые эффективности фотоионизации (КЭФ) (с образованием различ. ионов) диметилового (I) и диэтилового (II) эфиров при комн. т-ре и пониженных т-рах $T=130^\circ K$ для I и $180^\circ K$ для II и



2, 1978, 13

энергиях фотонов 0—18 эв, а также фотоэлектронные спектры этих в-в. Из КЭФ определены Пт ионизации (ПИ) I и II и пороги появления различ. ионов. Обнаружено влияние горячих полос на ПИ молек. ионов. Для ПИ получены значения $10,01 \pm 0,01$ для I и $9,60 \pm 0,01$ для II. Обнаружена зависимость от T потенциалов появления (ПП) ионных продуктов распада материнских ионов, к-рая приписана эффекту влияния колебательных и вращательных горячих полос. Предложенная модель хорошо описывает зависимость ПП от T . С ее помощью путем экстраполяции измеренных зависимостей ПП от T получены теплоты образования при $T=0$ $\text{CH}_3\text{O}=\text{CH}_2^+$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}=\text{CHCH}_3^+$ и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}=\text{CH}_2^+$. Установлено, что первые два иона имеют значительно большие теплоты образования, чем соотв-щие изомерные формы, образующиеся при фрагментации спиртов. Получены доказательства значит. вклада автоионизации в процессы ионизации и фрагментации при больших энергиях фотонов. Е. Николаев

70425.8830
TC

д. 14. 1977

1977

CH_3OCH_3

~~15.12.77~~

Durig J.R., Li Y.S., Groner P.

Analysis of torsional splittings in the
microwave spectra of dimethylether,
 CH_3OCH_3 , and its isotopes, CD_3OCH_3 and
 CD_3OCD_3 , pp. 159-174. Erratum.

"J. Mol. Spectrosc.", 1977, 64, N 1, 165
(англ.)

1000 на обложке

824 329

850

0859

пик

ВИНИТИ

3/ ERRATUM

Дата полу

Индекс по рубрик.

Volume 62, Number 2 (1976); in the article, ^{2/} "Analysis of Torsional Splittings in the Microwave Spectra of Dimethylether, CH_3OCH_3 , and Its Isotopes, CD_3OCH_3 and CD_3OCD_3 , pp. 159-174, by J. R. Durig, Y. S. Li, and P. Groner:

In formula (4) on page 167, the factors $\frac{1}{2}$ preceding the terms V_{33} and V_{33}' should be omitted. On page 172, line 8 below the heading "Discussion of Potential Coefficients," should read

$$V_{33}' = +2.67 \text{ cm}^{-1}$$

instead of $V_{33}' = +267 \text{ cm}^{-1}$. In the second line thereafter, the second word "ten" should be replaced by: (10).

Виза редактора

Виза зав. сект.

Сдача в набор

1977

C_2H_5OH

$\Delta H_{acoh.}$,
 $\Delta S_{acoh.}$

Fruerip D. J., et al.,

Proc. Symp. Thermophys.
Prop. 1977, 7, 721-9.

( cell. CH_3OH ; I)

$(CH_3)_2O$

ХУ - 18217

1977

9 Д514. Анализ спектров крутильных колебаний молекул с двумя внутренними волчками C_{3v} . Ч. II. Длинноволновые ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния изотопов диметилового эфира. Groner R., Durig J. R. Analysis of torsional spectra of molecules with two internal C_{3v} rotors. II. Far infrared and low frequency Raman spectra of dimethylether isotopes. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 5, 1856—1874 (англ.)

м.п.;
и.к. спектр:

Получены спектры ИК-поглощения и комб. рас. паров диметилового эфира CH_3OCH_3 , CH_3OCD_3 и CD_3OCD_3 в ИЧ-области. Разрешение и точность определения частот составляла для спектров комб. рас. 1 см^{-1} , для ИК-поглощения $0,5\text{ см}^{-1}$. Приведены частоты наблюдаемых

Ф 1977 N 9

полос, связанных с Q-ветвями полос основных и горячих переходов крутильных колебаний. Изложена теория крутильных колебаний молекул с двумя внутренними волчками, включающая построение гамильтониана, расчет уровней энергии и определение коэф. потенц. энергии. Сравнение результатов обработки эксперим. данных с данными микроволн. исследований показывает, что введенная модель не полностью соответствует изучаемому явлению, что, по-видимому, связано с резонансом Ферми изученных колебаний с деформационным колебанием СОС. Ч. I см. РЖФиз, 1977, 4Д435. Библи. 25.

М. Тонков

CH₃ O CH₃

lamm 5380 | 1977

(J)

Gibson H. W.

Can. J. Chem. 1977,
55, 2837-41

CH₃ODCH₃

* 18367 1

1977

(
расетин
кол. расетин
)

Dewar Michael J.S.
J. Amer. Chem. Soc.
1977. 99, N6, 1685-91

C_2H_5OH

1977

1 Д434 ДЕП. Теоретическое исследование колебательных спектров гошизомера молекулы этанола и его дейтерозамещенных. Землянухина И. Я., Свёрдлов Л. М. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1977. 34 с., ил., библиогр. 13 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 5 окт. 1977 г., № 3852—77Деп.)

На основе использования в качестве нулевого приближения силовых постоянных трансизомера молекулы этанола и уточнения некоторых силовых постоянных, характеризующих фрагмент CH_2OH и его взаимодействия с группой CH_3 , произведен расчет частот, нормированных

21



ф. 1978 № 1

форм норм. колебаний и распределения потенц. энергии по внутренним координатам гошизомера молекулы этанола и семи его дейтерозамещенных. Выявлены особенности колебательного движения в гошизомере молекулы этанола. Проведенный расчет норм. колебаний позволил детально проанализировать эксперим. ИК-спектры этанола и его дейтерозамещенных и произвести отнесение нескольких групп частот для каждой молекулы разных изотопных видов к гошизомеру, а также подтвердил, что ИК-спектры этанола и его дейтерозамещенных невозможно интерпретировать только на основе существования трансизомера молекулы этанола. Наблюдаемый спектр может быть объяснен только на основе существования трансизомера молекулы этанола. Наблюдаемый спектр может быть объяснен только на основе существования двух поворотных изомеров (транс и гош). Этот вывод о существовании двух поворотных изомеров для молекулы этанола подтверждается микроволн. исследованиями.

Автореферат

$(CH_3)_2O$

номер 5575

1977

расчет,
много
молекуляр.
орбитали
по

Wangbo et al.,
Can. J. Chem., 1977,
55, 2778-2787.

CH_3OCH_3

номер 8089	1978
------------	------

номер.
нафакс/64
Ракет скрп
и. п. скрп

Durig J. R., et al.
Fridian J. Pure
and Appl. Phys.
1978, 16, 385-93

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$
 $(\text{CD}_3)_2\text{O}$

М. В. Снегирь

13 Б242. Микроволновые спектры диметилоксида $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ и $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ в возбужденных торсионных состояниях. Lutz H., Dreizler H. Microwave spectra of dimethylether $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ and $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ in excited torsional states. «Z. Naturforsch.», 1978, A33, № 12, 1498—1510 (англ.)

Измерены в области частот от 8 до 40 ГГц МВ-спектры $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (I) и $(\text{CD}_3)_2\text{O}$ (II) в основном и возбужденных торсионных состояниях $\nu_n = 0_1, 1_1, 1_2, 2_1, 2_2, 2_3$. При отнесении спектров использованы метод МВ—МВ двойного резонанса и эффект Штарка. Анализ данных выполнен с учетом заторможенного внутреннего вращения двух взаимодействующих метильных волчков. Использована модель жесткой основы и жесткого волчка. Для всех состояний II определены вращательные постоянные и главные моменты инерции. В нерасщепленном основном состоянии $\nu_n = 0_1$ вращательные постоянные II равны (в Мгц) $A = 25696,17(11)$, $B = 7483,79(3)$, $C = 6798,01(6)$. Параметры тонкой струк-

Х. 1979, № 13

туры спектров, появляющейся из-за торсионного расщепления, использованы для определения потенциала заторможенного внутреннего вращения метильных волчков. Для I и II, соотв., получены значения потенциала $V_3=2618(4)$ и $2572(6)$ кал/моль и потенциала взаимодействия волчков $V_{12}'=18(8)$ и $29(12)$ кал/моль. Для другого потенциала взаимодействия волчков V_{12} установлена сильная корреляц. связь с потенциалом V_3 .

С. Н. Мурзин

отпуск 6904

1978

(CH₃)₂O

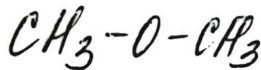
и, расст
гбисс-р

2 Д142. Барьер внутреннего вращения для диметилового эфира. Исследование неэмпирическим методом ССП с учетом структурной релаксации и сравнение с экспериментальными данными. На Т.-К., Groner P., Bauder A.; Günthard Hs. H. Barrier to internal rotation of dimethyl ether: ab initio scf study including structure relaxation and comparison to experimental results. «Chem. Phys.», 1978, 33, № 1, 27—34 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базе лепестковых гауссовских ф-ций по точности эквивалентном двухэкспонентному рассчитана молекула диметилового эфира с 4 конформациями метильных групп. Величина угла С—О—С оптимизировалась. Обнаружено заметное изменение (на 3,7°) угла С—О—С при вращении метильных групп. Рассчитанный барьер внутреннего вращения (868 см⁻¹) хорошо согласуется с данными микроволновых (909) и колебательных (943) спектров, тогда как без учета релаксации угла С—О—С при вращении согласие хуже. Рассчитаны также энергетические и структурные характеристики и дипольные моменты как ф-ции углов вращения метильных групп.

В. Л. Лебедев

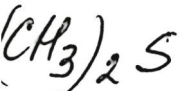
Ф. 1979. 2



см. кат. 8005
измеряв.с.

(ик. спектры, структура)

1978



11 Д582. ИК-, ^1H ЯМР-спектры, спектры комбинационного рассеяния и структура диметилхалькогенидов. Hamada Keinosuke, Morishita Hirofumi. The Raman, infrared and proton NMR spectra and structures of dimethyl chalcogenides. «J. Mol. Struct.», 1978, 44, № 2, 119—131 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения ($400-3500\text{ см}^{-1}$) газообразных и спектры комб. рас. жидких диметилхалькогенидов $\text{CH}_3-\text{X}-\text{CH}_3$ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$). Рассмотрена структура изученных молекул и доказана их симметрия D_{3d} с линейным скелетом $\text{C}-\text{X}-\text{C}$. Выполнено отнесение полос фундаментальных колебаний, обертонов и составных частот. В спектрах ЯМР у каждого соединения зарегистрирован только один нерасщепленный сигнал метильной группы; это объяснено внутренним вращением группы CH_3 . Библ. 42. С. Ф. Б.

(+2) ☒

Ф. 1978 N11 см. кат. 8005

$(CH_3)_2O$

Кривбаева Ч.С. и др. 1978

Рукопись деп. в ВУНЦТИ
13 июня 1978 г., и 1952-78 деп.

растения
геометрия,
м., 8 i

см. $(CH_2)_2O$; III

CH_3OCH_3

number 6960

1978

Tossell J. A.

crystallization

Bibbs G. W.

Alloys

Acta crystallogr.

1978, A34, 463-72

C_2H_5OH

1949

Burkert U.

ΔE, reomemp.

Tetrahedron, 1949, 35,
N 2, 209-212.



1cm. CH_3OH ; III)

1979

C_2H_5OH
 C_2H_5-SH

6 Б55. Расчеты методом MINDO/3 переходных состояний молекулярного элиминирования этилена из C_2H_5OH и C_2H_5SH . Фаустов В. И., Юфит С. С. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1979, № 12, 2797—2800
Методом МЧПДП/3 с варьированием всех независимых степеней свободы рассчитаны C_2H_5OH (I), C_2H_4

кв. мех.
расчет

(+1) ☒

—

2.1980. N6

(II), H_2O , $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}$ (III), H_2S и переходные состояния (ПС) р-ций 1,2-отщепления $\text{I} \rightarrow \text{II} + \text{H}_2\text{O}$ (1) и $\text{III} \rightarrow \text{II} + \text{H}_2\text{S}$ (2). Найденные ПС обеих р-ций являются четырехчленными циклами, имеющими плоскость симметрии. Сопоставление оптимизированных геометрий исходных соединений и ПС показывает, что начальной стадией обеих р-ций является внутримолек. перенос атома Н от β -атома С к атому Х ($\text{X}=\text{O}$, либо S) уходящей группы. Получены след. значения энергий активации E_a и энтальпий реакции ΔH (ккал/моль, в скобках эксперимент) — р-ция (1): E_a 54,6, ΔH 29,8 (10,8); р-ция (2): E_a 50,0 (51,5), ΔH 39,0 (24,6). Рассчитанные ПС являются менее полярными, чем исходные I и III, что отличает их от рассчитанного ранее ПС дегидрохлорирования, оказавшегося более полярным, чем исходный хлористый этил.

Автореферат

C_2H_5OH

1979
14 Б95. Изучение методом масс-спектрометрии с полевой десорбцией при низких температурах ион-молекулярных и радикальных реакций в конденсированных слоях. Часть. I. Метанол. Gierlich H. H., Röllgen F. W. Ion—molecule and radical reactions in condensed layers studied by low temperature field ionization mass spectrometry. Part I. Methanol. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1979, 29, № 2, 125—135 (англ.)

масс-спектрометрия

2. 1979, № 14

Описан охлаждаемый ионный источник для исследования соединений методом полевой десорбции с использованием квадрупольного и магнитного масс-спектрометров. С использованием указанного источника ионов изучены ион-молек. и радикальные р-ции, протекающие при полевой ионизации метанола в конденс. поверхностных слоях при низких т-рах эмиттера ($163-165^{\circ}\text{K}$). Для изучения механизмов образования кластерных ионов использовались дейтеромеченые соединения, а в кач-ве гасителя радикалов применялся бензол. В случае ацетона обнаружены шестимерные кластеры, а в случае метанола — девятимерные. Влияние поверхности эмиттера на протекание хим. процессов не обнаружено. Полученные результаты согласуются с данными, полученными при изучении радиационно-хим. превращений метанола. Авторы полагают, что полевая ионизация при низких т-рах является прекрасным инструментом для изучения реакций в жидкостях.

Б. В. Розынов

$(CH_3)_2O$

ammua 9424

1979

U. S.

crucif

XIV-9205

92:138411r Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XVII. Dimethyl ether. Loyas, F. J.; Lutz, H.; Dreizler, H (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Washington, DC 20234 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1979, 8(4), 1051-107 (Eng). The microwave spectrum of Me_2O is crit. reviewed and supplemented through calcs. which include the contributions of internal rotation and centrifugal distortion in the mol. Hamiltonian. The primary objective of this review is to provide microwave spectral transitions applicable to mol. radio astronomy for the ground vibrational state rotational spectrum of the most abundant isotopic form of di-Me ether, $^{12}CH_3^{16}O^{12}CH_3$. While all measured rotational transitions are included, the predicted transition frequencies were limited to $J \leq 15$ in the range 1-300 GHz. In order to provide a complete summary of the lab. studies on di-Me ether, the rotational consts. of the less abundant isotopic species and excited torsional states are also tabulated and all reported rotational studies are referenced.

C.A. 1980. 92/116

CH_3OCH_3

оттиски 9424

1979

9 Д457. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. Ч. XVII. Диметилэфир. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XVII. Dimethyl ether. Lovas F. J., Lutz H., Dreizler H. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1979, 8, № 4, 1051—1107. (англ.)

Приведен критич. анализ опубликованных данных по микроволн. спектрам молекулы CH_3OCH_3 и ее изотопзамещенных. С учетом внутреннего вращения и кватричного центробежного искажения вычислены частоты всех вращательных переходов основного колебательного состояния CH_3OCH_3 с $J \leq 15$ в диапазоне 1—300 ГГц, которые могут быть использованы при поиске диметилэфира в межзвездной среде радиоастрономич. методами. Приведены таблицы молекулярных констант. М. Р. А.

м.п.; Д.

5076-17X

Ф 1980 №9

1979

аттмеч 9424
XIV-9205 CH_3OCH_3

17 Б253. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XVII. Диметиловый эфир. Lovas F. J., Lutz H., Dreizler H. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XVII. Dimethyl ether. «J. Phys. and Chem. Ref. Data» 1979, 8, № 4, 1051—1107 (англ.)

м.п.;

геометрия

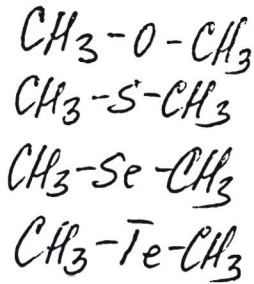
На основе всех доступных лит. данных табулированы вращательные переходы между 1 и 300 Гц диметилового эфира, CH_3OCH_3 , в основном и возбужденных колебательных состояниях для вращательных уровней с квантовым числом $J \leq 15$. Приведенные молек. постоянные получены с использованием гамльтониана, в котором

X 1980 N 14

учтены эффекты центробежного искажения и внутреннего вращения. Эти данные получены как для основного изотопич. образца диметилэфира, так и для его ^{13}C -, ^{18}O - и дейтеропроизводных. Приведены структурные параметры молекулы $r(\text{CO}) = 1,410(3) \text{ \AA}$, $r(\text{CH}_a) = 1,100(5) \text{ \AA}$, $r(\text{CH}_s) = 1,091(7) \text{ \AA}$, $\angle \text{COC} = 111,72(33)^\circ$, $\angle \text{OCH}_a = 110,83(33)^\circ$, $\angle \text{OCH}_s = 107,23(58)^\circ$, $\angle \text{H}_a\text{CH}_a = 108,73(50)^\circ$, $\angle \text{H}_a\text{CH}_s = 109,55(58)^\circ$ и удвоенный угол между осью метильной группы и b — главной осью молекулы $116,77(67)^\circ$. Дипольный момент молекулы равен $\mu_b = 1,302(1) \text{ D}$. Спектральные данные могут быть использованы при идентификации межзвездных молекул и радиоастрономич. наблюдениях.

С. Н. Мурзин

1979

8005
Дом.ч. 12 стр.геометрия
молекулы

Ж. 1979, № 8

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 микроволновых 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

$(CH_3)_2O$

[omnen 10218] 1980

Aue D.H. et al.

γ-излучение
орбиталь
группа
сущность

J. Amer. Chem. Soc.,
1980, 102, 5151-5154

Proton affinities and
photoelectron spectra...

сущ. $(CH_3)_2NH$; III

C_2H_5OH

1980

Carbo' R., et al.

Adv. Quantum. Chem.

Vol. 12. New York e. a.,
1980, 159 - 187.

(обзор)

Y; Ei; w.n.;

●
(сер. H_2CO ; III)

$OC(H_3)_2$

1980

Каматов Р. Т.

Докл. АН СССР, 1980, 254,
N4, 934-8.

Взаимосвязь
электроны
и потока
молекулярных

ссл. NF₃ - III

$(CH_3)_2O$

1980

гуг К.

Theor. chim. acta, 1980,
57, n2, 104-30.

реценз.
н. свари
(3)

св. Н₂ - II

CH3CH2OH

Оттиски 10199

1980

ными молекулами. Учен. зап.

12 Д461. Микроволновый вращательный спектр и внутреннее вращение гошизомера этилового спирта. Microwave rotational spectrum and internal rotation in gauche ethyl alcohol. Kakar Ramesh K., Quade Richard C. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 8, 4300—4307 (англ.)

Исследованы микроволн. спектры молекул CH3CH2OH, CH3CH2OD, CH2DCH2OH и CH2DCH2OD. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 8$ гошизомеров этих молекул в основном колебательном состоянии, а также расщепление линий, обусловленное внутренним вращением групп CH3 и OH. Определены значения вращательных постоянных и дипольного момента. Для барьера внутреннего вращения метильной группы получено значение $V_3 = 1331 \text{ см}^{-1}$, для параметров потенциала внутреннего вращения OH-группы значения $V_1 = 57$, $V_2 = 0,8$, $V_3 = 395 \text{ см}^{-1}$, для частоты туннелирования CH3CH2OH между двумя гошформами значение $96739,3 \text{ Мгц}$, а для разности энергии гош- и трансизомеров значение $41,2 \text{ см}^{-1}$.

М. Р. Алнев

М. В. Спирт

М. И.; Чо. X IV - 9364-139



Ф. 1980 № 12

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

от Миск 10/99 1980

8 Б268. Микроволновый вращательный спектр и внутреннее вращение в гош-этиловом спирте. K a - k a r R. K., Q u a d e C. R. Microwave rotational spectrum and internal rotation in gauche ethyl alcohol. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 8, 4300—4307 (англ.)

Измерены в области частот 10—52 ГГц МВ-крутильно-вращательные спектры гош-конформаций. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (I), $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ (II), $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{OH}$ (III) и $\text{CH}_2\text{DCH}_2\text{OD}$ (IV), в основном колебательном состоянии; III исследован при симм. (C) и асимм. (AC) положении метильной группы метила, а IV — при ее AC-положении. Анализ спектров выполнен в приближении жесткого волчка для эффективного гамильтониана с симм. и антисимм. подсостояниями. Для C- и AC-форм I—IV определены вращательные постоянные и постоянные подсостояний. Для симм. и антисимм. подсостояний I, соотв., вращательные постоянные равны (в МГц) $A=34015,81$ и $34331,86$, $B=9188,637$ и $9194,421$, $C=8099,983$ и $8100,850$. По эффекту Штарка для переходов a- и c-типа образца I определены компоненты

м. в. спектр

м. п.

X. 1981 N 8

XIV-9364-139

дипольного момента $|\mu_a| = 1,264(10) \text{ D}$, $|\mu_b| = 0,104(8) \text{ D}$, $|\mu_c| = 1,101(16) \text{ D}$. Разность энергий между гош- и транс-конформациями $E(\text{гош}) - E(\text{транс}) = 41,2(5,0) \text{ см}^{-1}$. Определены значения коэф. Фурье-разложения потенциала внутреннего вращения гидроксильной группы $V_1 = 57,0 \text{ см}^{-1}$, $V_2 = 0,8 \text{ см}^{-1}$, $V_3 = 395,0 \text{ см}^{-1}$.

С. Н. Мурзин

иции.
Ф.

CaM30M

Lucas W.A.P. et al

1980

(Vi)

J. Mol. Struct., 1980,
60, 333-6

CaM30M; III

C_2H_5OH

[номер 11010] 1980.

(ж., кр.)

Mammone J.F., et al.

Распад
инерт,
 P_i

J. Phys. Chem., 1980, 84
3130 - 34

при $P = 100$ кбар.



1980

9 Б239. Инфракрасный спектр формальдегида в матрице твердого азота. II. Спектр димера и структура димера. Nelander B. Infrared spectrum of formaldehyde in solid nitrogen. II. Dimer spectrum and dimer structure. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 3, 1034—1039 (англ.)

Изучены спектры ИК-поглощения димеров $(\text{H}_2\text{CO})_2$, $(\text{D}_2\text{CO})_2$ и H_2CO . D_2CO в тв. N_2 -матрицах. Спектр $(\text{H}_2\text{CO})_2$ специально измерен в Ag -матрице. Димеры получены за счет повышенных скоростей конденсации матрицы, а также контролируемой диффузии при повышении т-ры. Из анализа ряда полос димера в области колебаний ν_1 , ν_2 и ν_4 мономера установлена нецентросимм. структура. Обнаружены также значит. сдвиги вал. колебаний CH в высокочастотную сторону. На основании полученных результатов сделан вывод о сложной структуре димеров с эквивалентными мономерными фрагментами. Пред. сообщ. см. пред. реферат. О. Г. Гаркуша

спектр,
структура
и (vi)

X. 1981 № 9

C_2H_5OH

спирт
этилов.

Commen 10489 | 1980

Niki H., et al.

Chem. Phys. Lett.,
1980, 75 (3), 533-35

$(CH_3)_2O$

Commen 10458

1980

Tse L.-C.; et al.

теорет.
и эксперимент.
исследования
связи

Chem. Phys. Lett.,
1980, 75 (2), 350-56.

Сомини.
Фе; Ке.
Кв. мех.
рассчет

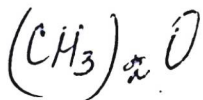
$(\text{CH}_3)_2\text{CO}$

1981

Del Bene Jarret E., et al.

Электрон. Chem. Phys. Lett., 1981,
европ. 81, N 2, 293-296.

●
(сеч. H_2CO ; III)

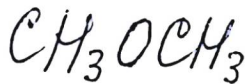


[omnux 12732] 1981

Fli3zar S., et al.

кб. екс.
паер.

Canad. J. Chem., 1981,
59, 1074-82



1981

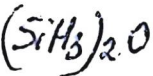
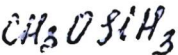
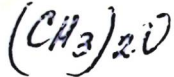
Pople J. A., et al.
Int. J. Quantum Chem.

V, parisi 1981, Quantum Chem.

Symp. N 15, 269-279.

(see NNO; III)

1981

Кв. мех.
расчет

ис, геометрия

②

X 1981 N 19

Б66. Теоретическое исследование барьеров внутреннего вращения в диметиловом эфире, метоксисилане, дисилоксане. Roelandt F. F., Van de Von-

del D. F., van der Kelen G. P. Theoretical study of the barriers to internal rotation in dimethyl ether, methoxysilane and disiloxane. «J. Mol. Struct.», 1981, 76, № 2 («Teochem», 1981, 1, № 2), 187-195, 1981 (англ.)

Неэмпирическими методами вычислены барьеры внутреннего вращения для CH_3OCH_3 (I), CH_3OSiH_3 (II) и $\text{SiH}_3\text{OSiH}_3$ (III). Описаны выбранные для расчета модели, представлена таблица геометрич. параметров молекул I—III, проанализированы ф-ции потенциальной энергии внутреннего вращения $V(\alpha_1, \alpha_2)$, где α_1 и α_2 — углы внутреннего вращения. Показано, что миним. базисный набор дает достаточно хорошее согласие с эксперим. данными для I и худшее для II и

III. Для предсказания правильных величин потенциалов для CH_3 и SiH_3 групп в II нужно использовать базисный набор спец. вида. Особое внимание было уделено влиянию геометрии молекул на оптимизацию величин барьеров внутреннего вращения.

Б. Н. Тарасевич

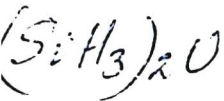
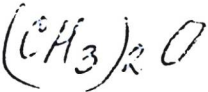
C_2H_5OH

1980
Tapia O., et al

paper
molek J. Phys Chem., 1980, 84,
N 20, 2646-52.

● (cr H₂O) III

1981



каб. ссс.х.
расчет, 110

(+2) ☒

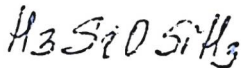
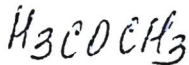
ф. 1981 №9

9 Д63. Теоретическое изучение барьеров внутреннего вращения в димети́лэфире, метокси́лане и дисилоксане. Theoretical study of the barriers to internal rotation in dimethyl ether, methoxysilane and disiloxane. Roelandt F. F., Van de Vondel D. F., Van der Kelen G. P. «J. Mol. Struct.», 1981, 76, № 2, («Teochem», 1981, 1, № 2), 187—195 (англ.)

Проведены неэмпирич. вычисления барьеров внутреннего вращения для CH_3OCH_3 , CH_3OSiH_3 и $\text{SiH}_3\text{OSiH}_3$. Показано, что результаты, полученные при использовании минимального базисного набора, достаточно хорошо согласуются с экспериментом для CH_3OCH_3 и в меньшей степени для $\text{SiH}_3\text{OSiH}_3$. Для корректного описания барьеров внутреннего вращения в CH_3OSiH_3 необходимо использование валентно расщепленного базисного набора. Исследовано влияние геометрич. оптимизации на барьеры внутреннего вращения. Вычислен-

ные значения параметров ф-ций потенц. энергии для исследованных в-в находятся в пределах $\sim 0,1$ — 1 ккал/моль.

Б. Д. Ф.



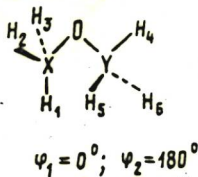
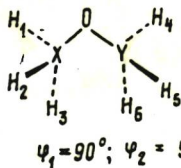
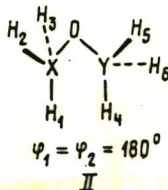
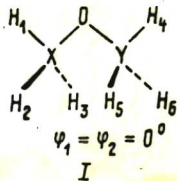
кв. мех.
расчет осн.
состояний,
геометрия

(+1) ☒

Х-1981. №16

16 Б64. Неэмпирический расчет относительных энергий конформаций молекулы H_3COCH_3 , H_3COSiH_3 , $\text{H}_3\text{SiOSiH}_3$. Щеголев Б. Ф., Беспалов В. Я. «Ж. структур. химии», 1981, 22, 1, 149—151.

Проведены неэмпирические расчеты методов МО ЛКАО ССП основных состояний молекул H_3COCH_3 (А), H_3COSiH_3 (В) и $\text{H}_3\text{SiOSiH}_3$ (С) в базисе ОСТ-3ГФ. Варьировались углы ХОУ (α) и углы вращения групп ХН_3 (φ_1 и φ_2). Для всех молекул исследованы конфор-



III

X, Y = C, Si

IV

мации I—IV. Рассчитанные углы α занижены по сравнению с эксперим., причем расхождение увеличивается при переходе от А к С. Как при эксперим., так и при теор. α наиболее выгодной оказывается конформация I, а наименее выгодной — II. Вычисленные дипольные моменты хорошо согласуются с эксперим. данными для А и В. Сравнение с экспериментом и др. теор. исследованиями показало, что расчет несколько переоценивает относит. энергии конформаций. При переходе от А к С относит. энергии конформаций II—IV уменьшаются. Обсужден анализ заселенностей по Малликену.

М. Гсфман

$(C/H)_2 O$

1980

Williams J.O., et al.

J. Mol. Struct., 1981, 26,
N1, 11-28

сб. мех.
перес.
мол. структуры

см. $C/H_3OH - II$

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

1982

16 Б122. Исследование донорно-акцепторного комплекса, образуемого между диметиловым эфиром и трифторидом бора, методом фотоэлектронной спектроскопии с возбуждением He-I. Achiba Yohji, Nomoto Katsunori, Kimura Katsumi. He I photoelectron spectroscopic study of the electron-donor-acceptor complex formed between dimethyl ether and boron trifluoride. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 5, 681—684. (англ.)

фотоэлектр.
спектр,
у

Измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ (I), BF_3 (II) и комплекса $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ (III), образуемого в газовой смеси. Значение 1-го потенциала ионизации (ПИ) в III составило 12,02 эВ, что более, чем на 2 эВ превышает величину 1-го ПИ в I. Увеличение ПИ в результате комплексообразования существенно больше увеличения ПИ в результате образования комплекса $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{HCl}$ но не достигает величины изменения ПИ (2,9—3,8 эВ) в комплексах аминов с II

12

X. 19-82, 19, N 16

и BH_3 . Методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций 4—31 ГФ рассчитано электронное строение I, II и III. Установлено, что высшей занятой МО в III является несвязывающая орбиталь O, перпендикулярная плоскости C—O—C, 2 занятой МО является псевдо- π -орбиталь группы CH_3 , а 3 МО является несвязывающая орбиталь O, локализованная в плоскости C—O—C. На основании данных расчетов проведена интерпретация эксперим. ФЭС. В предположении о линейной зависимости ПИ и орбитальных энергий определены значения первых ПИ в III, составившие 12,41; 13,77 и 14,13 эВ и хорошо согласующиеся с эксперим. ПИ 12,02; 13,80 и 14,10 эВ. И. А. Тополь



$C_2H_6O^+$

1982

24 Б52. Относительно природы «метокси»-катиона. Bouma Willem J., Nobes Ross H., Radom Leo. On the nature of the 'methoxy' cation. «Org. Mass. Spectrom.», 1982, 17, № 7, 315—317 (англ.)

В рамках ограниченного и неограниченного вариантов неэмпирич. метода ССП МО ЛКАО рассчитаны фрагменты поверхности потенциальной энергии (ППЭ) ионов $C_2H_6O^+$ и COH_3^+ и исследованы пути фрагментации иона $CH_3OCH_3^+$ (I). Геометрии локальных минимумов и переходных состояний (ПС) определялись минимизацией энергии и, соотв., градиента энергии в базисе 4—31 ГФ. Энергии полученных структур уточняли в базисах 6—31 ГФ и 6—31 ГФ** с учетом электронной корреляции в 3-м порядке теории возмущений Меллера — Плессета и энергий нулевых колебаний. В согласии с результатами более ранних работ оказалось, что синглетный метокси-катион CH_3O^+ (II) неустойчив и безактивационно переходит в оксиметильную структуру $HOCH_2^+$ (III). В триплетном состоянии структура II оказывается локально стабильной и имеет

ΔE, по темп.
поверхн.

(+1)

X. 1982, 19,
N 24

см. на об.

энергию на 387 кДж/моль выше, чем синглетный III. Наряду с известным ранее I на ППЭ $C_2H_6O^+$ найден новый локальный минимум, лежащий на 3 кДж/моль ниже I и отвечающий структуре $CH_2ONCH_3^+$ (IV). Длины связей H_2C^1-O и H_3C^2-O в IV равны 1,446 Å и 1,521 Å, соотв., по сравнению с 1,500 Å в I, а валентный угол $C^2OC^1-123,1^\circ$ (в I $127,7^\circ$). Изомеризация $I \rightarrow IV$ протекает по механизму 1,2-водородного сдвига с энергией активации 146 кДж/моль. В ПС мигрирующий атом Н удален от атомов C^1 и О на расстояния 1,348 Å и 1,245 Å, соотв., угол СОС составляет $126,2^\circ$. Ион IV легко распадается на III и метильный радикал (теплота реакции 33 кДж/моль). Из расчетов следует, что продукты фрагментации IV имеют избыток кинетич. энергии, что согласуется с имеющимися эксперим. данными. Проведенные расчеты др. путей распада I показали, что образование HSO^+ должно протекать в несколько стадий, первой из к-рых является разрыв связи СО и образование синглетного интермедиата со структурой, напоминающей ПС 1,2-отщепления H_2 , а завершающей стадией — элиминирование H_2 . Постулированное ранее отщепление H_2 из триплетного состояния должно идти со значит. активац. барьером.

В. Фаустов

COH_3^+

$(CH_3)_2O$

1982

Frost D.C., Lau W.M.,
et al.

I; J. Phys. Chem., 1982,
86, N10, 1917-1921.

(CH_3)(CH_3)O·BF₃; iii)

C_2H_5OH

Оттиск 13844

1982

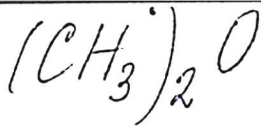
Muher M., Vogt J.,

Chem. Phys., 1982, 64,
N3, 399-411.

АР
(сводка
протоколов)
моллекуляр,
структура,
расчет.



(ссыл. H2; III)



1982

Hunt Robin L., Ault
Bruce S.

спектр
в
матрице

Spectrosc.: Int. J. 1982,
1(1), 45-61.

( атт. BF_3 ; III)

C_2H_5OH

1982

4 Д485. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XXI. Этанол (C_2H_5OH) и пропионитрил (C_2H_5CN). Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXI. Ethanol (C_2H_5OH) and propionitrile (C_2H_5CN). Lovas F. J. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1982, 11, № 2, 251—312 (англ.)

Обобщены и критически проанализированы литературные данные по микроволн. спектрам молекул этанола, этилцианида и их изотопич. разновидностей. Из опубликованных данных по частотам вращательных переходов вычислены значения вращательных постоянных, постоянных квартичного и секстичного центробежного искажения, параметров потенциала внутреннего вращения, дипольного момента и постоянных квадрупольной связи ядра азота (в C_2H_5CN). Полученные значения этих констант использованы при расчете частот всевозможных вращательных переходов с $J \leq 30$

М.П.

(4) ⊗

Ор. 1983, 18, № 4.

основного колебательного состояния этих молекул, попадающих на диапазон 1—300 ГГц. Вычислены также интенсивности переходов и все результаты приведены в виде таблиц, которые могут быть использованы при радиоастрономич. поиске этих молекул в межзвездной среде.

М. Р. Алиев

Этанол
 $C_2H_5 \cdot OH$

1982

1 8 Б277. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XXI. Этанол (C_2H_5OH) и пропионитрил (C_2H_5CN). Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXI. Ethanol (C_2H_5OH) and propionitrile (C_2H_5CN). Lovas F. J. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1982, 11, № 2, 251—312 (англ.)

Представлены сводные спектроскопич. данные по МВ-спектрам этанола, C_2H_5OH (I), и пропионитрила, C_2H_5CN (II), полученные на основе лаб. исследований вплоть до 1981 г. Измеренные и вычисленные частоты вращательных переходов до $J=25$ для I и до $J=30$ для II охватывают область частот 1—300 гГц. Наряду с МВ-данными для нормальных изотопич. образцов I и II в основном колебательном состоянии приведены имеющиеся данные для D, ^{13}C , ^{15}N , ^{18}O -изотопозамещенных образцов и образцов в возбужденных колебательных

м.п., $\bar{\nu}_i$,

(4) ~~17~~

Х. 1983, 19, N 8

Пропионитрил
 C_2H_5CN

состояниях. Анализ данных выполнен с использованием вращательного гамильтониана в представлении Уотсона с учетом кватернионного и секстичного центробежного искажения, внутреннего вращения и ядерного квадрупольного взаимодействия. Полученные результаты представляют интерес для молек. радиоастрономии.

С. Н. Мурзин

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ Дммиер 14927 1982

Энергии
ионизации,
относит.
интенсив.
(расчет и
эксперимент).

Niessen W., Cederbaum
et al., U.S.,
J. Electron Spectrosc.
and Relat Phenom.,
1982, ● 28, 45-78.

C_2H_5OH
 C_2H_5OD

1982

vi;

20 Б225. Исследование в далекой инфракрасной области этанолов и фторэтанолов, изолированных в низкотемпературных матрицах. Schrems O., Luck W. A. P. Far-infrared studies of ethanols and fluoroethanols trapped in lowtemperature matrices. Invited Papers from the 15 European Congress on Molecular Spectroscopy, Norwich, Sept., 1981. «J. Mol. Struct.», 1982, 80, 477—484 (англ.)

В области $10-420\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры поглощения C_2H_5OH , C_2H_5OD , C_2D_5OD , CFH_2CH_2OH , CF_3CH_2OH в Ag-, Kr-, Xe-, CH_4 - и N_2 -матрицах. Найдено, что частота вал. кол. Н-связи ν_o ($OH\cdots O$) лежит в области $100-160\text{ см}^{-1}$. При высоких М/А в спектрах наблюдаются в основном полосы крут. кол. (τ) групп OD, OH и CH_3 . Для этанолов, изолированных в Ag-, Kr- и Xe-матрицах, значения τ_{OD} , τ_{OH} и τ_{CH_3} составляют соотв. ~ 175 , 212 и $\sim 270\text{ см}^{-1}$. Спектр.

X
(4)

X. 1982, 19, N 20

этанола в CH_4 и N_2 -матрицах значительно отличался. В частности в спектре N_2 матрицы наблюдали большой сдвиг полосы ν_{OH} (331 см^{-1}), к-рый связывают с сильным взаимодействием групп OH с N_2 , а в спектре CH_4 -матрицы — расщепление полосы ν_{OH} на две компоненты приблизительно равной интенсивности 246 и 277 см^{-1} .

В. М. Ковба



$(CH_3)_2O$

1982

Wesenberg G., et al.

pari
40

Int. J. Quantum Chem.
1982, 21, N2, 487-509.

●
(see. $(CH_3)_2CHF$; III)

C_2H_5OH

1983.

Klessinger Martin.

расчёт
E, 40; Int. J. Quantum. Chem.,
1983, 23, N 2: Proc. 4
Int. Congr. Quantum. Chem.,
Uppsala, 13-20, 1982,
532-542. ● (see CH_3F ; III)

C_2H_5OH

1983

Okubo K., Imai K.,
et al.

Электрон.
спектр

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

(св. $C_2H_5NH_2$; III)

C_2H_5OH

Дм. 17046

1983

1 Л288. Влияние внутреннего вращения групп $O-H$ на профили линии валентного колебания связи $O-H$ в спектре комбинационного рассеяния этанола в газовой фазе. Effect of the internal rotation of the OH group on the OH stretching vibrational Raman profile of ethanol in the gas phase. Schiel D., Richter W. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6559—6562 (англ.)

Проведен квантовомеханич. расчет частот и интенсивностей линий в спектре комб. рас. молекул этанола (I) в газовой фазе для вал. кол. связей $O-H$. Обсуждены наблюдаемые вариации профиля линии вал. кол. связи $O-H$ в спектрах I при изменении т-ры. Показано, что мера расщепления линии комб. рас. связи $O-H$, обусловленная соотношением гош и транс конформеров, может быть использована для оценки зависимости частоты вал. кол. связи $O-H$ от угла между связями в структуре I при эффективном взаимодействии вал. кол. и внутренних вращательных движений в I. Сделан вы-

расчет частот
и интенсив-
ностей в
спектре К.Р.

ф. 1984, 18, n1

вод, что увеличение интенсивности линии комб. рас-
вал. кол. связи $O-H$ I на промеж. частоте между ком-
понентами вращательных изомеров этих молекул с ро-
стом t -ры обусловлено вкладами колебательных пере-
ходов между возбужденными состояниями крутильных
движений в I.

И. В. А.

C_2H_5OH

1984

100: 147723e Molecular conformers in gas-phase ethanol: a temperature study of vibrational overtones. Fang, Howard L.; Swofford, Robert L. (Corp. Res. Cent., Stand. Oil Co. (Ohio), Warrensville Heights, OH 44128 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 105(1), 5-11 (Eng). Overtone absorption spectra are reported for EtOH vapor ($10,150-19,900\text{ cm}^{-1}$) measured by intracavity photoacoustic spectroscopy. The O-H overtones are composed of 2 subbands which are assigned as the transition of 2 conformers of the O-H bond in the trans or gauche position with respect to the Me group. From the temp. dependence of the O-H overtone intensity, the enthalpy difference was detd. between the conformers to be $0.7 \pm 0.1\text{ kcal/mol}$.

конформеры
в газ. фазе

c. A. 1984, 100, N 18

C_2H_5OH

$\nu_i, \Delta E,$

x. 1984, 19,
N 12

1984

12 Б1187. Молекулярные конформеры этанола в газовой фазе: температурное изучение колебательных обертонов. Molecular conformers in gas-phase ethanol: a temperature study of vibrational overtones. Fang H. L., Swofford R. L. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 5—11 (англ.)

Обертонные спектры поглощения газ. этанола ($10\,150\text{--}19\,900\text{ см}^{-1}$) изучены методом фотоакустич. спектроскопии. Использованы лазеры на красителях с накачкой Ag^+ и Kr^+ и акустич. приемник — микрофон. Спектральные данные и отнесение для обертонов $O-H$ и $C-H$ вал. кол. сведены в таблицу. Полосы $O-H$ состоят из двух подполос, что указывает на наличие двух конформеров, где $O-H$ связь находится в транс- или гош-положении относительно Me группы. Из т-рой зависимости определена разность энтальпий между конформерами ($0,7 \pm 0,1$ ккал/моль), причем более стабилен транс-конформер. Аналогично для 1- и 2-пропанолов получены разности энтальпий между конформерами: 0,4 ккал/моль (1-) и менее 0,2 ккал/моль (2-пропанол).

А. Л. Сидельковский

C_2H_5OH

DM 20 663/1984

10 Б1069. Расчеты неэмпирическим методом само-
согласованного поля этантиола и этанола. Ab Initio
self-consistent field MO colculations of ethanethiol and
ethanol. Ohsaku Masaru, Ichiishi Takehiro,
Imamura Akira, Hayashi Michiro. «Bull.
Chem. Soc. Jap.», 1984, 57, № 10, 2791—2796 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с исполь-
зованием базисных наборов ОСТ-3 ГФ и ОСТ-3* ГФ
проведены расчеты электронного и геометрич. строения
транс- и гош-конформеров молекул этантiola (I) и
этанола (II). Приведены оптимизированные значения
геометрич. параметров, заселенности связей и углы
ССХ (X=S, O) в молекуле $EtXH$ в ионах $EtXH_2^+$ и
 EtX^- , дипольные моменты молекул I и II в различных
конформациях и др. характеристики. Используемые ме-
тоды достаточно хорошо воспроизводят эксперим. гео-
метрии молекул I и II и относительный порядок ста-
бильностей транс- и гош-конформеров I и II. Разность
в $\angle CCH$ (X=S, O) в транс- и гош-конформерах объяс-
нена взаимодействием через пространство. И. Н. С!

геометр.,
структура,
расчет E

(4) ☒

X. 1985, 19, N 10

C_2H_5SH

$(CH_3)_2O$

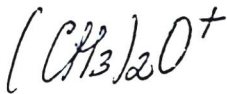
1984

Raghavachari Krishnan.

Picchem
Di;

J. Chem. Phys., 1984,
81, N 6, 2717-2722.

(cm. CH₄; III)



1984

24 Б1097. Химические реакции на кластерах. 3. Газофазная мономолекулярная диссоциация $(\text{CH}_3)_2\text{O}^+$ при ассоциации с кластерами аргона. Chemical reactions on clusters. 3. Gas-phase unimolecular decomposition of $(\text{CH}_3)_2\text{O}^+$ in association with argon clusters. Sta-
ce A. J. «J. Amer. Chem. Soc.», 1984, 106, № 16, 4380—4385 (англ.)

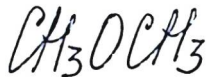
стабильность

Методом спектроскопии электронного удара с адиабатическим расширением смеси $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ с Ar получены кластерные ионы $[\text{Ar}_n \cdot (\text{CH}_3)_2\text{O}]^+$, где $n=1-21$. Молекула эфира в этих кластерах подвергается интенсивному внутримолекулярному распаду с образованием ионов $\text{Ar}_n \cdot \text{CH}_3\text{OCH}_2^+$ и $\text{Ar}_n \cdot \text{CHO}^+$. При этом не происходит разрушения Ar-кластера. Детальное исследование процессов фрагментации в кластерах различного состава показало, что энергии активации р-ций, приводящих к указанным выше ионам, составляют 1,01 и 2,2 эВ при константах скорости $1 \cdot 10^{-13}$ и $3 \cdot 10^{-12}$ сек $^{-1}$. При этом образование ионов происходит в результате одностадий-

X. 1984, 19, №24

ного элиминирования $\text{CH}_3\cdot$ и H_2 . Р-ция элиминирования $\text{CH}_3\text{O}\cdot$ не идет вследствие высокой энергии активации (3,6 эВ). На основании полученных экспериментальных данных сделаны след. выводы: 1) в больших кластерах возбуждение молекулы эфира передается по механизму переноса заряда, 2) возбужденные ионы эфира распадаются вследствие относительно малой скорости переноса внутренней энергии между компонентами Ag-кластера, и 3) атом кислорода внедряется в кластер. Высокой стабильности обладают ионы $\text{Ag}_n\cdot\text{CHO}^+$ с $n = 12$ и 18. Это позволяет предсказывать «магические» числа в кластерах Ag, а также поведение других (металлосодержащих) кластерных частиц. Сообщ. 2 см. Chem. Phys. Chem., 1983, 99, 470. Д. В. Загоревский





1984

8 Б1076. Строение молекулы диметилового эфира в газовой фазе из совместного анализа электронографических и микроволновых данных. Molecular structure of dimethylether as determined by a joint analysis of gas electron diffraction and microwave spectroscopic data. Tamagawa Koichi, Takemura Miwa-ko, Konaka Shigehiro, Kimura Masao. «J. Mol. Struct.», 1984, 125, № 1—2, 131—142 (англ.)

геометрия,
структура

Электроннографически повторно изучено строение молекулы CH_3OCH_3 . Структурный анализ включал 6 вращательных констант, взятых из лит., для незамещ. и полностью дейтерированной молекулы. Пересчет вращат. констант на нужный базис осуществлен с учетом теории, принимающей во внимание внутр. вра-

х. 1985, 19, № 8

шение метил.ных групп («J. Mol. Spectrosc.», 1972, 44, 88). Получены след. значения геометрич. параметров (расстояния r_g , углы r_{av}): C—O 1,415(1) Å, C—H_{ср} 1,118(2), валентные углы СОС 111,8(2°), НСН_{ср} 109,2(2). Ось симметрии C_3 метильной группы отклонена от направления связи C—O на угол $3,6 \pm \pm 1,7^\circ$, а торсионный угол метильных групп равен $2 \pm \pm 11^\circ$ (в ходе анализа испытаны модели с разной ориентацией метильных групп). Неэмпирический расчет методом МО ЛКАО ССП с оптимизацией геометрии градиентным методом (базис аналогичен 4—31 ГФ) подтверждает наибольшую устойчивость шахматной конформации одновременно для обеих метильных групп. Проведено сравнение со строением родственных молекул.

В. Мاستрюков

$(CH_3)_2O$ [Om. 20970]

1984

Tsuboyama A., Takes.

молекула. hita K., Konaka S.,
суперм., et al.

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

C_2H_5OH

1984

3 Б1129. Масс-спектры этанола и его дейтероаналогов. ~~Mass spectra of ethanol and its deuterio analogues.~~ Tureček František, Hapuš Vladimír. «Org. Mass Spectrom.», 1984, 19, № 9, 423—427 (англ.)

Пиролизом ($800^\circ/2 \cdot 10^{-6}$ мм) 5-норборненола и его дейтеропр-ных получены $CH_2=CHOH$, $CH_2=CHOD$, $CH_2=CDOH$ и $Z-CHD=CHOH$. Наиболее интенсивные фрагменты в масс-спектрах этих соединений отвечают потере $H\cdot$, $CH_3\cdot$ и $CHO\cdot$. Анализ спектров дейтеромеченных аналогов показал, что элиминирование H-атома на 68% проходит из гидроксигруппы, на 25% — от

(9)

X. 1985, 19, N3.

C_1 -атома и на 7% от C_2 -атома. Потере H из гидроксигруппы предшествует миграция H-атома от CH - к CH_2 -группе, к-рая является лимитирующей стадией процесса. Потеря $H:(D:)$ из $CH_2=CHOD$, сопровождается небольшим изотопным эффектом (1,07), к-рый возрастает до 1,28 при переходе к $CH_2=CDOH$. Измерение энергии появления (ЭП) ионов $C_2H_2DO^+$ (из 1-D-пр-ного) дает величину 11,32 эВ, что отвечает крит. энергии потери водорода, на 90 кДж/моль превосходящей термодимич. порог образования CH_3CO^+ и H:. Из данных по измерению ЭП ионов CDO^+ установлен барьер изомеризации молек. ионов $CH_2=CDOH$ в CH_3CDO^+ (1121 кДж/моль). Определена энергия ионизации $CH_2=CHON$ ($9,22 \pm 0,03$ эВ). Описан синтез исходных дейтеромеченных порбортенолов и приведены данные их спектров ПМР.

Д. В. Загоревский

CH_3OCH_3

1985

Bower-Jenkins Philippa E.,
Cooper David L., et al.

ab initio
Pacrem.

J. Phys. Chem., 1985, 89, 111;
5 Amer. Conf. Theor. Chem.
Grand Teton Nat. Park, Wyo.,
June 15-20, 1984, 2195-2197.

(Cw. CO-N_2 ; III)

CH_3OCH_3

DM-2414

1985

Klimikowski V. G., Slam K.,
et al.,

geomorp.,
ab initio
pacem

J. Mol. Struct., 1985,
122, N1-2, 67-74.

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

1986

20 Б1087. Влияние базисного набора на величины конформационных энергий малых органических сольватов в водных растворах. The influence of the basis set on the evaluation of conformational energies for small organic solutes in aqueous solutions. Alagona G., Bonaccorsi R., Ghio C., Tomasi J. «J. Mol. Struct. Theochem», 1986, 137, № 3—4, 263—277 (англ.)

С целью изучения влияния кач-ва базисного набора (БН) на величины барьеров конформац. переходов и дипольных моментов (ДМ) проведены неэмпирич. расчеты молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{CHFON}(\text{S})$, $\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OF}$ с использованием базисных наборов: ОСТ-3ГФ (БН1), 3-21ГФ (БН2), 4-31ГФ (БФ3). Влияние гидратации учтено в рамках континуальной модели сольватации, предложенной авторами («J. Chem. Phys.», 1981, 55, 117). Установлено, что наиболее подходящим для конформац. исследований является БН2; его применение привело к наилучшему согласию с эксперим. данными. При расчете ДМ более предпочтительным оказался БН3.

Л. Г. Горб

Барьеры конформ.
переходов.

Х. 1986, 19, № 20

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

1986

Bower-Jenkins
Philippa E., Richards
W. Graham.

волевые

функции, J. Chem. Soc. Chem.
commun. Commun., 1986, N2,
● 133-135.

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

CH_3OCH_3

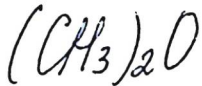
1986

№ 9 Л196. Топологические и симметричные особенности потенциала внутреннего вращения в молекулах с двумя ротаторами. Topological and symmetry features of internal rotation potential in molecules with two rotors. Gomez P., Fernandez M., Sese L., Botella V. «J. Mol. Struct.», 1986, 142: Mol. Spectros. and Mol. Struct. 1985. Proc. 17 Eur. Congr. Mol. Spectros., Madrid, 8—13 Sept., 1985. Pt B, 315—318 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП по программе GAUSSIAN-80 с базисом «дубль дзета+поляризационные ф-ции» рассчитана потенц. поверхность внутреннего вращения метильных групп в молекуле CH_3OCH_3 и проведено разложение поверхности в двойной ряд Фурье по двум углам вращения. С целью уменьшения точек конфигурац. пространства, в которых необходимо рассчитать потенц. поверхность, исследованы ее свойства симметрии по отношению к полной группе молекулярной симметрии. Проведен также анализ топологич. структуры потенц. поверхности на основе теории Морса. Найдены и классифицированы критич. точки поверхности. — Е. П. Смирнов

($V_{\text{вр}}$)

ср. 1986, 18, 29



1986

104: 193559m Topological and symmetry features of internal rotation potential in molecules with two rotors. Gomez, P.; Fernandez, M.; Sese, L.; Botella, V. (Fac. C. Quim., Univ. Complutense, Madrid, Spain 28040). *J. Mol. Struct.* 1986, 142, 315-18 (Eng). For the Me_2O mol., the potential-energy surface (PES) was studied by ab-initio calcns. with a double-zeta plus polarization basis set. By means of mol.-symmetry and topol. analyses, the crit. points (max., min., and saddle points) of the PES, and the potential barriers to internal rotation were defined.

no метел.
no верхн.,
теор. расч.

C.A. 1986, 104, N 22

C_2H_6O

1986

6 Л204. Распределения оптической силы осцилляторов для изомеров C_2H_6O и C_3H_8O в ВУФ-области. VUV-optical oscillator strength distributions of C_2H_6O and C_3H_8O isomers. Koizumi Hitoshi, Hironaka Katsuyuki, Shinsaka Kyoji, Arai Shin, Nakazawa Hidenobu, Kimura Atsushi, Hatano Yoshihiko, Ito Yoshiro, Zhang Yunwu, Yagishita Akira, Ito Kenji, Tanaka Kenichiro. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 8, 4276—703 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Измерены сечения фотопоглощения изомеров C_2H_6O (этиловый спирт, диметиловый эфир) и C_3H_8O (*n*-пропиловый и изопропиловый спирты, этил-метиловый эфир) в вакуумной ВУФ-области (30—130 нм). Полученные сечения имеют максимум в области 70—80 нм. В коротковолн. области (до 50 нм) сечения совпадают для всех изомеров и равны сумме сечений составляющих их атомов. В длинноволн. области наблюдаются особенности, зависящие от молекулярной структуры изомеров, а в сечениях диметилового и этил-метилового эфиров обнаружена в области 70—100 нм колебательная структура.

М. А.

М.А.

41

ср. 1987, 18, № 6

$[C_2H_6O]^+$

1986

13 Б1069. Изомерные дистонические и Н-мостиковые структуры катион-радикалов $[C_2H_6O]^+$. Isomeric distonic and H-bridged $[C_2H_6O]^+$ radical cations. Postma R., Ruttink P. J. A., Van Baar B., Terlouw J. K., Holmes J. L., Burgers P. C. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 5, 409—415 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с варьированием всех независимых степеней свободы в базе 4—31 ГФ и уточнением энергий стационарных точек в базе 6—31 ГФ** с учетом взаимодействия одно- и двухкратно возбужденных конфигураций рассчитаны изомерные структуры ф-лы $C_2H_6O^+$: $:CH_2CH_2OH_2^+$ (I), $CH_2-CH \cdots H \cdots OH^+$ (II), $CH_3CHON_2^+$ (III), $CH_3CH_2OH^+$ (IV), $CH_2ONCH_3^+$ (V), $CH_3OCH_3^+$ (VI), а также переходные состояния (ПС) р-ций изомеризации I→II (1) и вырожденной 1,2-миграции H_2O в I (2). Относит. энергии равновесных структур (кДж/моль, в скобках эксперим. значе-

изомер-,
структура, E
ΔH

18 (11)

х. 1986, 19, № 13

$[C_2H_6O]^+$ (ΔH)

ния): I 0,0; II 38; III 11; IV 31 (46); V 49; VI 42 (48). Активационные барьеры реакций (1) и (2) равны соотв. 45 и 7 кДж/моль. Тепловой эффект диссоциации $I \rightarrow \text{CH}_2\text{CH}_2^{\cdot+} + \text{H}_2\text{O}$ 83 кДж/моль. Масс-спектрометрически для I определена энтальпия образования 732 кДж/моль. В. И. Фаустов

C_2H_5OH

(om. 24 569)

1986

Siam K., EWbank J.D., et al.,

geomorphic J. Mol. Struct. Theochem.
1986, 139, N1-2, 83-99.

H_3 CDCH₃ [Дм. 27342]

1987

экстр.
строй.
равновес.
геолем)
гидрам.
св-ва

Игнатев И.С., Щербаков Б.Ф.
(представлено акад. М.М. Шифрином)

Докл. АН СССР, 1987, 296,
N 1, 143 - 147.

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

1987

Rodriguez, C.F.;

Hopkinson, A.C.

теор. расч.
структ.
сход.

THEOCHEM 1987, 37(1-2)

55-68

(cell. CH_3NH_2 ; III)

V13)20 com. 30736 "a" 1988

Duncan J. L., McKean A. C.

сферич-
резонанс.
постоян.
ангармон.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. Pt II, 1988, 84,
N 9, 1423-42.

$(CH_3)_2O$

От 29280

1988

9 Д55. Неэмпирический анализ молекулярной геометрии и силовых полей в ряду H_3XOXH_3 ($X=C, Si$). The ab initio analysis of molecular geometry and force fields in H_3XOXH_3 ($X=C, Si$) series. Ignat'ev I. S. «J. Mol. Struct.», 1988, 172, 139—149 (англ.)

Неэмпирическим градиентным методом ССП с использованием базисов 4—21ГФ (для $X=C$) и 3—3—21ГФ (для $X=Si$), дополненных d -ф-циями атомов Si и O, рассчитаны геометрич. параметры и силовые поля молекул диметилового эфира, силилметилового эфира и дисилоксана. Использовались масштабные множители, перенесённые из метокси- и силоксигрупп. Подробно обсуждаются причины изменения длины связей C—H и Si—H в ряду приведенных молекул. При этом учитывалось смещение неподелённых пар электронов атомов Si и O и взаимодействие валентно не связанных атомов. Дано отнесение линий в спектрах ИК-поглощения изучаемых молекул.

В. А. Морозов

М. П.

(7) ☒

Ф. 1988, 18, №9

$(SiH_3)_2O$

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

И. П.

29280

(72) ☒

Х. 1988, 19, N21

1988
7 21 Б1145. Неэмпирический анализ геометрии и силовых полей в ряду молекул H_3XOXH_3 ($\text{X}=\text{C}, \text{Si}$). The ab initio analysis of molecular geometry and force fields in H_3XOXH_3 ($\text{X}=\text{C}, \text{Si}$) series. Ignatyev I. S. «J. Mol. Struct.», 1988, 172, 139—149 (англ.)

Методом Хартри—Фока в базисе 4-21ГФ для элементов первого периода и 3-3-21ГФ для кремния с включением поляризац. d -ф-ций на атомах кремния и кислорода выполнена полная оптимизация геометрии и рассчитаны обобщенные валентно-силовые поля молекул диметилового эфира (I), силилметилового эфира (II) и дисилилоксана (III). Из эксперим. частот колебаний молекул I и II и их дейтеропроизводных получены эмпирич. масштабирующие множители для силовых полей I—III. С масштабированным силовым полем решена прямая колебат. задача для III и проведено отнесение эксперим. частот колебаний этой молекулы.

Ю. Н. Панченко

$\text{CH}_3\text{OSiH}_3, (\text{SiH}_3)_2\text{O}$

H_3COCH_3

DM 29280

1988

109: 99137d The ab initio analysis of molecular geometry and force fields in H_3XOXH_3 ($X = C, Si$) series. Ignat'ev, I. S. (Inst. Silic. Chem., 199034 Leningrad, USSR). *J. Mol. Struct.* 1988, 172, 139-49 (Eng). The force fields of di-Me ether, silyl Me ether, and

disiloxane were detd. by the ab initio gradient method using 4-211 (for the first row elements) and 3-3-21G (for Si) basis sets augmented with d-functions on Si and O atoms. Equil. structures obtained in the set which includes d-functions, indicate that Me group CH bond length asymmetry decreases and silyl group asymmetry increases in silyl Me ether. This is confirmed by the anal. of IR spectra. Methoxy and siloxy group scale factors for both basis sets were adjusted on exptl. frequencies of di-Me and silyl Me ether isotopomers. The basis set without d-functions gives satisfactory description of these spectra. Siloxy group scale factors were transferred into the ab initio force field of disiloxane and the assignment, based on this field, is discussed.

meop. pac
rem

(7) ☒

C. A. 1988, 109, N 12.

$H_3SiOSiH_3$

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

(DM 31577)

1988

15 Б1245. Возбужденные состояния транс-этилового спирта при помощи микроволновой спектроскопии. Excited states of trans ethyl alcohol by microwave spectroscopy // Sasada Y. // J. Mol. Struct.— 1988.— 190.— С. 93—97.— Англ.

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 8—40 ГГц с точностью 0,05 МГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов транс-этилового спирта, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (I) и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OD}$ (II), в трех возбужденных состояниях торсионных кол. гидроксильной группы, ССО изгибных кол. и торсионных кол. метильной группы. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона с учетом квартичного центробежного искажения и $A-E$ расщепления вращат. переходов. Для I и II, соотв., определены вращат. постоянные в первых возбужденных

М.П.

(H) X

Х. 1989, N 15

состояниях для гидроксильной группы $A=33432,22(4)$ и $34291,78(11)$, $B=9217,393(23)$ и $8728,440(57)$, $C=8127,054(21)$ и $7702,815(53)$, (в МГц), ССО-колебаний и метильной группы. Величина барьера заторможенного внутр. вращения метильной группы для I и II, соотв., равна $3397(34)$ и $3366(73)$ кал/моль.

С. Н. Мурзин

C_2H_5OH
 C_2H_5OD

Om 31577

1988

7 Л112. Изучение возбужденных состояний транс-этанола методом микроволновой спектроскопии. Excited states of trans ethyl alcohol by microwave spectroscopy / Sasada Yoshiaki // J. Mol. Struct.— 1988.— 190.— С. 93—97.— Англ.

С использованием штарковского микроволн. спектрометра измерены вращательные спектры трех низших колебат. состояний транс-этанола C_2H_5OH и C_2H_5OD , соответствующих крутильному колебанию гидроксильной группы, деформ. колебанию CCO и крутильному колебанию метильной группы. Наблюдавшиеся линии отнесены к b -типам переходов Q - и R -ветвей. Проведен вращательный анализ полученных спектральных данных, определены вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и структурные параметры молекул. С использованием найденных структурных параметров по величине $A-E$ -расщепления переходов в возбужденном крутильном колебании метильной группы определена высота барьера для заторможенного вращения,

М.А.

ср. 1989, № 7

равная 3397 ± 34 кал/моль для C_2H_5OH и $3366 \pm$
 ± 73 кал/моль для C_2H_5OD . В. А. Морозов

GAH5 DM

AM. 30892

1988

Slee T., Larouche A., Badler

R. F. W.,

Empykmyp.
napaemmpu

J. Phys. Chem. 1988, 92,
N 22, 6219-6227.

Properties of Atoms in Molecules:
Dipole moments ● and substituent
Effects in Ethene and

Carbonyl compounds.

$(CH_3)_2O$ (DM. 31924) 1988

Suto M., Ye Ch., et al.,

Y. Chem. Phys., 1988,
89, n10, 6555-6557.

ромодис-
солуауи

$CH_3O(\tilde{A}-\tilde{X})$ fluorescence from
photo • dissociation of

dimethyl ether.

C_2H_5OH

1988

Xie Gaoyang, Yang
Ziwei.

(Do)
масс-
спектр

Ханьцзе Шижие 1988,
29(6), 272-3.

(сери. CH_4 ; III)

C_2H_5OH

1989

/ 111: 122882v Calculations of the infrared and vibrational circular dichroism spectra of ethanol and its deuterated isotopomers. Dothe, Hoang; Lowe, Marian A.; Alper, Joseph S. (Dep. Chem., Boston Univ., Boston, MA 02215 USA). *J. Phys. Chem.* 1989, 93(18), 6632-7 (Eng). The scaled quantum mech. force field method together with the P.J. Stephens (1985) formalism for the evaluation of rotational strengths was used to calc. IR and vibrational CD (VCD) spectra of EtOH and its deuterated isotopomers. For the IR spectra, agreement between the calcd. and exptl. spectra is good; the root-mean-square deviation between the calcd. and exptl. frequencies for all 12 isotopomers is 15 cm^{-1} . The calcd. VCD spectra are in good agreement with the exptl. ones when the evaluation of the rotational strengths is carried out using the distributed origin gauge. Both the IR and VCD results confirm the earlier conjecture that the gauche conformer predominates over the trans, even though the trans has a slightly lower SCF energy.

(UK)

C.A. 1989, 111, N 14

$(CH_3)_2O^{+}$

1989

12 Б1104. Квантовохимическая интерпретация различия в полевой фрагментации молекулярных ионов деметилового эфира и диметилсульфида / Лобанов В. В., Филелеева Л. И., Самченко И. П., Алексанкин М. М. // Теор. и эксперим. химия.— 1989.— 25, № 1.— С. 76—82.— Рус.

Методом МЧПДП/3 проведено сканирование Пв потенциальной энергии (ППЭ) молек. положит. ионов деметилового эфира и диметилсульфида. На ППЭ этих катион-радикалов кроме минимумов, отвечающих равновесным структурам, обнаружено еще по одному локальному минимуму, к-рые отнесены к циклич. структурам. Выявленные различия в пространственном строении циклич. структур катион-радикалов $(CH_3)_2O^{+}$ и $(CH_3)_2S^{+}$ позволили объяснить установленные в масс-спектре особенности полевой фрагментации этих молек. ионов. Прослежено влияние внешнего эл. поля ионного источника на стадии циклизации и фрагментации рассматриваемых катион-радикалов.

Резюме

41 X. 1989, N 12

C_2H_6O

(OM. 32778)

1989

Guo H., Karplus M.,

J. Chem. Phys., 1989,
91, N 3, 1719-1733

geomemp.,
meopem-
pacem

Basis set and polarization
function edge ● cts on optimi-
zed geometries and harmo-

not frequencies at the second-
order Nyquist - Plesset pertur-
bation level.

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

1989

Zagar C.O., Musaev S.A.
et al.,

On the Investigation of
Internal Rotations in the
 $\text{CH}_3 \text{CH}_2 \text{OH}$ and $(\text{CH}_3)_2 \text{CHOH}$.

28

Eleventh Colloquium On High
Resolution Molecular Spectro-
scopy, Giessen, September 18-22,
1989, A1, L8.

C_2H_5OH

1989

111: 240192t Molecular structure of ethyl and propyl alcohols in the ground electronic state. Ippolitov, I. I.; Lirmak, Yu. M.; Terpugova, A. F.; Chernov, D. E. (Tomsk. Gos. Univ., Tomsk, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fiz.* 1989, 32(7), 83-8 (Russ). The structure and energetic parameters are calcd. by ab initio methods. The dissoen. energies are evaluated for instantaneous and adiabatic sepn. of the OH radical. An estn. is given of the dissoen. rate ratio at high pressure.

спуск,
рацем

(H) C_3H_7OH


C.A. 1989, 111, N 26

C₂H₅OH

Фурье
УВ спектры
М.П.

1989

11 Б1374. Контроль процесса перехода от менее устойчивого к более устойчивому конформеру или изомеру для трех молекул, имеющих конформеры и двух различных молекулярных димеров, имеющих изомеры. Control of relaxation from less stable to more stable conformer or isomer in 3 molecules having conformers and 2 different molecular dimers having isomers / Ruoff R. S., Klots T., Hajduk P., Emilsson T., Gutowsky H. S. // 12th Int. Symp. on Mol. Beams, Perugia, May 29—June 2, 1989: Abstr. pap.— Perugia, [1989]. — С. 320—323.— Англ.

Исследованы фурье-микроволновые спектры этанола (I), изопропанола (II), этилформиата (III), димеров HFDF и DFHF (IV) и димера CO₂—HCN (V) с использованием в кач-ве носителя различных инертных газов — гелия, аргона, неона, криптона и их смесей различного состава. Обсуждено влияние типа носителя на релаксационные процессы, происходящие в I—V, связанные с процессами перехода от менее устойчивого к более устойчивому конформеру в I—III или изомеру в IV—V, барьеры интерконверсии для к-рых между низкоэнергетическими

73

Х. 1990, N 11.

C₃H₈O, (HFDF)₂, (DFHF)₂

тич. и высокоэнергетич. формами лежат ниже 400 см^{-1} .

Г. М. Курамшина.



trans —

[Om 34944]

1990

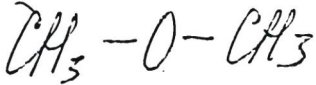
$C_{24}H_{50}O$

Go F., Bethardy G.A.,
Perrey D.S.,

J. Phys. Chem. 1990,
94, N16, 6153-6156

Rotationally Mediated

Intramolecular Vibrational
redistribution in Jet-Cooled
trans-Ethanol at 2990 cm^{-1}



(DM 34373)

1990

, 113: 87258p The millimeter and submillimeter-wave spectrum of dimethyl ether. Neustock, W.; Guarnieri, A.; Demaison, J.; Wlodarczak, G. (Inst. Phys. Chem., Univ. Kiel, Kiel, Fed. Rep. Ger.). Z. Naturforsch., A: Phys. Sci. 1990, 45(5), 702-6 (Eng). The anal. is reported of the rotational spectrum of dimethyl ether measured between 60 and 400 GHz. Rotational and quartic centrifugal distortion consts. are given. Internal rotation splittings are analyzed with the IAM method. The value of I_x is compared to the values obtained for similar mols.

АНАЛИЗ
Галсам.
Смешан,
Галсам-
ночно и др.

C.A. 1990, 113, N 510

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (DM 34759) 1990

Shaw R. A., Wieser H., et al.,

J. Amer. Chem. Soc., 1990,
112, N14, 5401-5410.

Vibrational Optical Activity of
(S)-1-d-Etha●nol.

C₆H₅OH

[DM 34957]

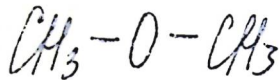
1990

Von Nagy-Felsobuki E.I.,
Kimura K.,

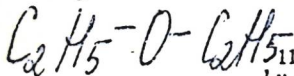
Ap,
ab initio
pacem

J. Phys. Chem. 1990,
94, N21, 8041-8044.





1991



114: 256112q Electronic states of some simple ethers studied by vacuum ultraviolet absorption and near-threshold electron energy-loss spectroscopy. Bremner, Lisa J.; Curtis, Martin G.; Walker, Isobel C. (Dep. Chem., Heriot-Watt Univ., Edinburgh, UK EH14 4AS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1991, 87(8), 1049-55 (Eng). Vacuum UV absorption spectra (250-105 nm, 5-11.8 eV) and near-threshold electron energy-loss spectra (0 eV- E_{th}) were recorded for di-Me ether (1), di-Et ether (2), THF (3), 1,4-dioxane (4) and 3,4-dihydropyran (5). For the satd. compds. 1-4, the low-lying electronically excited states are predominantly Rydberg in nature, selectively mixed with valence-excited states. Also, the lowest triplet state in each of the satd. mols. is within 0.5 eV of the $1n\sigma$ 3s state. The spectra of 5 resemble those of unsatd. hydrocarbons; its lowest triplet state ($3\pi\pi^*$) is ~4.2 eV.

Результаты
электронных
состояний

С.А. 1991, 114, 226



1992

4 Б1027. Оптимизация геометрии и электронная структура молекул H_3AXAH_3 . Geometry optimization and electronic structures of molecules H_3AXAH_3 /Wang Zhi-Zhong, Shen Er-Zhong // Chin. J. Chem .—1992 .—10 ,№ 1 .—С. 1—4 .—Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисе ОСТ-3ГФ проведены расчеты с оптимизацией геометрии молекул H_3AXAH_3 ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$; $\text{A}=\text{C}, \text{Si}$). Энергии и электронные структуры пересчитаны (при фиксир. геометрий) в базисах 4-31ГФ и 6-31ГФ. Результаты расчетов геометрии, дипольных моментов и ионизац. потенциалов сопоставлены с лит. эксперим. данными. Найдено, что базис 6-31 ГФ по сравнению с ОСТ-3ГФ приводит к вдвое большим абс. значениям зарядов. В целом полученное в базисе 6-31 ГФ распределение зарядов атомов сильно отличается от расчетов в базисе ОСТ-3ГФ.

Э. Д. Герман

м.п. -

K

45

X. 1993, № 4

$(CH_3)_2O$

1993

Chen Xuejun, Zheng
Yanyou et al.

сирок-
тура

Wuli Huahe Xuebao
1993, 9(2), 281-7.

● (сир. SF₆ ; III)

1993

F: (CH₃)₂O

P: 3

1B165. Сравнительное теоретическое изучение диметилэфира, диэтилэфира, изопропилметилэфира и их полностью фторированных аналогов. A comparative theoretical study of dimethyl ether, diethyl-ether, isopropyl methyl ether and their perfluorinated analogs / Fontaine M., Delhalle J., Defranceschi M., Bourin J. M. M. // J. Mol. Struct. - 1993. - 300, Dec. - С. 607-617. - Англ.

PMX 1997

$(CH_3)_2CO$

1993

118: 179032s An ab initio structural and spectroscopic study of acetone- an analysis of the far-infrared, torsional spectra of acetone- h_6 and - d_6 . Smeyers, Y. G.; Senent, M. L.; Botella, V.; Moule, D. C. (Inst. Estruct. Mater., CSIC, Madrid, Spain 28006). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(4), 2754-67 (Eng). The far-IR torsional spectra of acetone $(CH_3)_2CO$ and $(CD_3)_2CO$ were detd. from ab initio calcs., and the main features of the exptl. data assigned. For this purpose, the potential energy surface for the double Me rotation was detd. with fully relaxed geometry into the RHF and RHF + MP2 approxns. using a 6-31G(p,d) basis set. The energy values, as well as the kinetic parameters obtained from the optimized geometry, were fitted to double Fourier expansions as functions of the rotational angles in 7 terms. The torsional solns. were developed on the basis of the symmetry eigenvectors of the G_x nonrigid group, which factorize the Hamiltonian matrix into 16 boxes. The energy levels and torsional wave functions for each symmetry species were then obtained diagonalizing each block sep. Intensities were obtained from the calcd. elec. dipole moment variations and the nuclear

UK chemp,
(Pi)

C.A. 1993, 118, N 18

statistical wts., and were combined with the torsional frequencies to predict the spectra. The calcd. band patterns show a multiple structure and reproduce the main features of the exptl. data. The torsional bands of the IR active r_{17} mode were found to be clustered into quartets, ($A_1 \rightarrow A_2$, $G \rightarrow G$, $E_1 \rightarrow E_1$, $E_3 \rightarrow E_4$), for the $v = 0 \rightarrow 0 \rightarrow v = 1$ fundamental, and ($A_2 \rightarrow A_1$, $G \rightarrow G$, $E_1 \rightarrow E_1$, $E_4 \rightarrow E_3$) for the $v = 1 \rightarrow v = 2$ first sequence transitions. The $G \rightarrow G$ transitions were found to be the more intense. The correlation between the calcd. and obsd. spectra allows for an assignment of the major bands.



ab initio
pacrēm
2e/4

1994

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

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



1995

F: C₂H₅OH

P: 3

1B1253. Спектроскопия обертонов метилового, этилового спиртов и цианидов. Overtone spectroscopy of methyl, ethyl alcohols and cyanides / Prasad V. J., Rai S. B. // Indian J. Phys. B. - 1995. - 69, N 5. - С. 471-476. - Англ.

В области 5500-16 000 см⁻¹ получены ИК-спектры метанола, этанола, метил- и этилцианида. Их спектры в области 15 900-17 550 см⁻¹ получены с помощью метода тепловой линзы. Измеренные частоты отнесены к обертонам с $\nu=2-6$ колебаний С-Н и О-Н и использованы для вычисления нулевых частот колебаний, постоянных ангармоничности и энергий диссоциации этих связей. Обсуждено влияние Н-связей.



Ришх 1997

1995

F: CH₃OCH₃

P: 3

8Б184. эмпирическое исследование деформационно-торсионно-торсионного спектра для диметилового эфира CH₃OCH₃ и CD₃OCD₃. An ab initio determination of the bending-torsion-torsion spectrum of dimethyl ether, CH₃OCH₃ and CD₃OCD₃ / Senent M. L., Moule D. C., Smeyers Y. G. // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 15. - С. 5952-5959. - Англ. эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31ГФ(d, p) с учетом электронной корреляции в рамках МП2 и МП4 рассчитана трехпараметрич. поверхность потенциальной энергии (деформация валентного угла СОС и повороты обеих метильных групп) для Me[2]О и его пердейтеропроизводного. Вариационное решение трехпараметрич. деформационно-торсионного гамильтониана привело к намного лучшему описанию колебательных х-к, чем при использовании двухпараметрич. модели.

Р. Ж. Х. N 8, 1996

CH_3OCH_3

1995

- 8 Б184. Неэмпирическое исследование деформационно-торсионно-торсионного спектра для диметилового эфира CH_3OCH_3 и CD_3OCD_3 . An ab initio determination of the bending-torsion-torsion spectrum of dimethyl ether, CH_3OCH_3 and CD_3OCD_3 / Senent M. L., Moule D. C., Smeyers Y. G. // J. Chem. Phys. — 1995. — 102, № 15. — С. 5952—5959. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31ГФ(d, p) с учетом электронной корреляции в рамках МП2 и МП4 рассчитана трехпараметрич. поверхность потенциальной энергии (деформация валентного угла СОС и повороты обеих метильных групп) для Me_2O и его пердейтеоропроизводного. Вариационное решение трехпараметрич. деформационно-торсионного гамильтониана привело к намного лучшему описанию колебательных х-к, чем при использовании двухпараметрич. модели. Н. Л.

Х. 1996, № 8

F: C₂H₅OH

P: 3

17B1287. Микроволновый вращательный спектр гош-этилового спирта в ОН-торсионных возбужденных состояниях. Microwave rotational spectrum of Gauche ethyl alcohol in excited states of the -OH torsion / Fu Su Chun, Quade C. R. // J. Mol. Spectrosc. - 1996. - 175, 2. - С. 390-394. - Англ.

На микроволновом спектрометре в области частот 17,0-72,5 ГГц измерен вращат. спектр гош-CH[3]CH[2]OH для двух подсостояний первого возбужденного ОН-торсионного состояния. Отнесение линий в приближении модели жесткого волчка оказалось невозможным. Анализ спектра выполнен с использованием редкой модели асимм.-асимм. молекулы, благодаря чему уточнены значения параметров потенциальной энергии ОН-торсионного движения $V[1]=45,3$, $V[2]=13,0$ и $V3=370,0$ см⁻¹.

Рмх 1997

1996

F: C₂H₅OH

P: 3

17B1288. Миллиметровый и субмиллиметровый спектр гош-этилового спирта. The millimeter- and submillimeter-wave spectrum of gauche-ethyl alcohol / Pearson J. C., Sastry K. V. L. N., Herbst E., De Lucia F. C. // J. Mol. Spectrosc. - 1996. - 175, 2. - С. 246-261. - Англ.

На миллиметровом и субмиллиметровом спектрометре в области частот 51-505 ГГц с точностью около 100 кГц измерен вращательно-торсионный спектр гош-изомера этилового спирта. Идентифицировано свыше 1000 переходов между вращательными уровнями в гош-подсостояниях основного ОН-торсионного состояния. Анализ спектра выполнен с использованием модельного гамильтониана для двух состояний. Библ. 36.

РМХ 1997

CH₃CH₂OH

1996

124: 214885v Microwave rotational spectrum of gauche ethyl alcohol in excited states of the -OH torsion. Su, Chun Fu; Quade, C. Richard (Dep. Phys., Mississippi State Univ., Mississippi State, MS 39762 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 175(2), 390-4 (Eng). The microwave rotational spectrum of gauche CH₃CH₂OH has been identified and assigned for the two substates of the first excited state of the -OH torsion. Since $\mu_b \approx 0$ by accident, only a-dipole transitions have been assigned. It was not possible to observe the c-dipole transitions since the tunneling frequency between the two substates is expected to be on the order of 1.7 THz. The assigned lines do not give a rigid rotor fit. The spectrum has been calcd. using the IAM program of Liu for asym.-asym. mols., which was of little use in the anal. However, it has been necessary to det. improved potential energy coeffs. for the -OH torsion with the result $V_1 = 45.3 \text{ cm}^{-1}$, $V_2 = 13.0 \text{ cm}^{-1}$, and $V_3 = 370.0 \text{ cm}^{-1}$.

francis-
enck

C.A. 1996, 124, N16

131:9872 Ethanol force fields: A molecular dynamics study of polarization effects on different phases. Gonzalez, M. A.; Enciso, E.; Bermejo, F. J.; Bee, M. (Institut Laue Langevin, BP 156, Grenoble F-38042, Fr.). J. Chem. Phys., 110(16), 8045-8059 (English) 1999

We have studied two simple approaches to consider thermodyn. state dependent electrostatic interactions for mol. modeling of different phases of ethanol: the addn. of an isotropic point polarizability located in the oxygen, and a self-consistent calcn. of the effective dipole moment at each thermodyn. state. We have performed mol. dynamics simulations in order to investigate the thermodyn. properties, structure and dynamics of the

C. A. 2000

liq. phase at three exptl. densities, as well as in the monoclinic crystal and at crit. conditions. In order to rationalize the effects of changing the dipole moment of the mols., simulations with a nonpolarizable model for ethanol were also performed. The results show that a nonpolarizable model with an effective dipole moment is able to reproduce most of the static and dynamic properties of the condensed phases of ethanol, while the need to take into account the real dipole moment of the isolated mol. by using a polarizable model is more evident in the low-d. states. ~~the polarizable model is more appropriate for the low-density states.~~

F: C2H5OH

P: 3

133:315045 A Note on Internal Rotation-Rotation
Interactions in Ethyl Alcohol. Quade, C.

Richard Department of Physics, Texas Tech University
Lubbock, TX 79409, USA J. Mol. Spectrosc.,

203(1), 200-202 (English) 2000. A model for

the Hamiltonian for internal rotation-rotation
interactions was proposed for an assignment and
identification up to and beyond 1 THz of the
torsional-rotational spectrum of Et alc. The model
is easily parameterized, works for all J and K,
includes the effects from nonrigidity and
centrifugal distortion, handles the trans-gauche

interaction, and is useful for prediction as well as
anal.

2000

[Om. 41513]

2002

Kent M. Ervin and
Vincent F. De Turi,
 $D_{298}(\text{C}_2\text{H}_5\text{O-H})$
J. Phys. Chem. 2002,
A106, 9947-9956.