

Броник И. Алмургу, Thornton V. 1951
И.К. Снегг J. Ch. Ph. 19, 1014.

C3/K8

И.К. Снегг ирландия и
своими. дуберозамизени

C₃H₈

1190

Microwave spectrum, structure, and dipole moment of propane. David R. Lide, Jr. (Natl. Bur. of Standards, Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 33, 1514-18(1960).—The microwave spectrum of ordinary propane and 5 isotopic species were measured and analyzed. The rotational consts. of C₃H₈ are 29,207.36, 8446.07, and 7458.98 Mc./sec., and the dipole moment is 0.083 D. In its equil. configuration the mol. has C_{2v} symmetry, with both Me groups staggered with respect to the CH₂ group. The complete structure was detd. by the substitution method. Important parameters are: $r(\text{C-C}) = 1.526 \text{ \AA.}$, $\angle \text{C-C-C} = 112.4^\circ$; in the CH₂ group, $r(\text{C-H}) = 1.096 \text{ \AA.}$, $\angle \text{H-C-H} = 106.1^\circ$; in the Me groups, $r(\text{C-H}) = 1.091 \text{ \AA.}$, $\angle \text{H-C-H} = 107.7^\circ$. The influence of the zero-point effects on the structure detn. was discussed; these were particularly bad for the Me group, probably because of its large vibrational amplitude.
Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1961, 55, 14.
16149 de

1960

C_3H_8

иВ спектр

иВ спектр

Lide D. R., Jr.,

J. Chem. Phys., 1960, 33, 1514 (N5)

иВ спектр, структурные и
гипертонный момент пропане
лучше известны:

$r(CC) = 1,526 \pm 0,002 \text{ \AA}$; $\angle CCC = 112,4^\circ \pm 0,2^\circ$.

CH_2 : $r(CH) = 1,096 \pm 0,002 \text{ \AA}$; $\angle HCH = 106,1^\circ \pm 0,2^\circ$

CH_3 : $r(CH) = 1,091 \pm 0,010$; $\angle HCH = 107,7^\circ \pm 1,0^\circ$

$\angle CCH_3 = 111,8^\circ \pm 1,0^\circ$; $\angle CCH_2 = 110,6^\circ$.

Уменьшение расстояния ме-
жду атомами.

1962

 C_3H_8

масса

нод.

пары

физ. свойства
тепота

Potential function of propane. Hiroaki Takahashi (Univ. Tokyo). *Nippon Kagaku Zasshi* 83, 978-80(1962). The normal vibration frequencies of propane were calcd. by using a modified Urey-Bradley field, in which interaction forces are included between 2 HCC angles at a position trans to each other. By using force consts. for ethane and ethane- d_6 , vibrational frequencies were calcd. for propane in agreement with observed ones within 3%.
Masaji Kubo

C.A. 1963. 58. 11

10873h

1962

13 Б142. Определение структуры простых углеводородов с помощью микроволновой спектроскопии. Lide D. R., Jr. Structure determinations on simple hydrocarbons by microwave spectroscopy. «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 3». Oxford — London — New York — Paris, Pergamon Press, 1962, 1165. Discuss., 1165 (англ.)

Краткое изложение доклада. Исследованы микроволновые спектры ряда изотопозамещенных молекул пропана, изобутана и пропилена, содержащих C^{13} и D. Для изобутана найдено $C-C$ 1,525 Å; $\angle CCC$ 111,2°; метильные группы ориентированы так, что молекула обладает симметрией C_{3v} . Для пропана $C-C$ 1,526 Å; $\angle CCC$ 112,4°. Для пропилена близость атомов углерода к главным осям инерции затрудняет определение структуры. Найдено, что длина связи $C=O$ такая же, как в этилене, и $\angle CCC$ 124,3°. Т. Бирштейн

 C_3H_8 C_4H_{10} C_3H_6

мд спектры

структура

х. 1963. 13

1969

 C_3H_8

Cineol

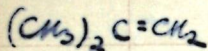
hydrocarbon.

23668 (IDO-16769) PROPANE VIBRATIONAL ANALYSIS. G. D. Marshall (Phillips Petroleum Co. Atomic Energy Div., Idaho Falls, Idaho). June 12, 1962. Contract AT(10-1)-205. 44p.

Using the group vibration method of McMurry, the normal frequencies and coordinates of propane and three of its symmetrical deuterium substituted compounds were obtained. The force constants used were taken from a variety of previous works on hydrocarbons. The results give reasonable agreements with the experimental frequency and mode assignments of others. (auth)

NSA-1962-16-18a

1963



мол энерг

Связки

Scharpen L. K., Laurie V. W.

J. Chem. Phys., 1963, 39, 1732 (N: 7)

Связки молекулы

$$r_{\text{C-C}} = 1,507 \text{ \AA}$$

$$r_{\text{C=C}} = 1,320 \text{ \AA}$$

$$r_{\text{C-H}} = 1,084 \text{ (мкм)}$$

$$r_{\text{C-H}} = 1,088 \text{ (мкм)}$$

$$\angle \text{HCH} = 107^\circ \text{ (мкм)}$$

$$\angle \text{HCH} = 118^\circ,5 \text{ (мкм)}$$

$$\angle \text{CCC} = 115^\circ,3$$

1915

2;
C₃H₈
1 Д291. ИК-спектр пропана. Gayles J. N., Jr, King W. T. The infrared spectrum of propane. «Spectrochim. acta», 1965, 21, № 3, 543—557 (англ.)

Исследованы ИК-спектры C₃H₈, C₃D₈, (CD₃)₂CH₂, C₂H₅CD₃ в области 10 000—250 см⁻¹. В исследованных в-вах предложено отнесение 109 фундаментальных частот. Используя правило произведений Теллера — Редлиха, определили еще 4 фундаментальные частоты. Кроме того, удалось оценить 8 из 20 неактивных в ИК-области частот путем анализа обертонов и комбинационных полос.

ф. 1966. 12

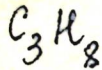
1965

C₃H₈

The infrared spectrum of propane. J. N. Gayles, Jr., and W. T. King (Brown Univ., Providence, R.I.). *Spectrochim. Acta* 21(3), 543-57(1965)(Eng). The ir spectra of C₃H₈, C₃D₈, (CH₃)₂CD₂, (CD₃)₂CH₃, and C₂H₅CD₃ were obtained over the spectral region from ~10,000 to 250 cm.⁻¹, by using both prism and grating spectrometers. From these data it was possible to assign 109 fundamentals of the 115 ir-active transitions in these 5 mols., and to est. the frequencies for 4 other fundamental transitions by use of the Teller-Redlich product rule. In addn., the frequencies for 8 of the 20 inactive fundamentals were estd. by analysis of the observed, and assigned, combination and overtone bands.

RCSQ

C.A. 1965. 62. 8
8527 d



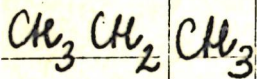
Nicholson A. J. C. | 1965

J. Chem. Phys., 43, n 4, 1171.

В-9-IV-12002
7)

Кривые эффективности
фотоионизации. II. По-
ные и истинные
структуры.

(см. нсе) III



Chupka W. A.,
Berkowitz J.

1967

J. Chem. Phys., 47(8), 2921.

Photoionization of ethane,
propane and n-butane
with mass analysis.

(coll. C_2H_6) III

C₃H₈

V₀

1967

59191z Internal rotation of propane from the microwave spectrum. Eizi Hirota, Chi Matsumura, and Yonezo Morino (Univ. Tokyo). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 40(5), -1124-30(1967) (Eng). The microwave spectrum of propane was observed in the first-excited states of the CH₃ torsion. Each transition was split into a symmetric triplet; the splittings were 14-19% larger for the (-) state than for the (+) state. The top-top interaction and its effect on the rotational spectra were treated by the perturbation theory, and the results were applied to the analysis of the triplet splittings. The two barrier parameters, V_3 and V_3'' , were thus detd. to be 3325 ± 20 and -170 ± 30 cal./mole, resp. V. Sutula

C. A. 1967. 67. 12

C_3H_8

пропан

имп.

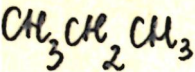
фотолиз

1967

4 Б803. Импульсный фотолиз пропана. Griffiths D. W. L., Back R. A. Flash photolysis of propane. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 10, 3913—3915 (англ.)

Исследуются первичные р-ции пропана (50 мм) при импульсном освещении в области 1590 Å. Показано, что под действием световых импульсов [интенсивность — $(2-15) \cdot 10^{21}$ фотон/сек·л] первичными р-циями являются: $C_3H_8 + h\nu \rightarrow H_2 + C_3H_6$, ($\sim 94\%$), $C_3H_8 + h\nu \rightarrow CH_4 + C_2H_4$ ($\sim 6\%$). Увеличение интенсивности вспышки приводит к фотолизу продуктов, например, пропилена. А. К. Чибасов

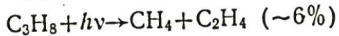
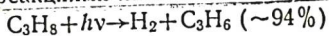
X. 1968. 4



1967

1 Д656. Импульсный фотолиз пропана. Griffiths
D. M. L., Back R. A. Flash-photolysis of propane.
«J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 10, 3913—3915 (англ.)

Исследуются первичные реакции пропана ($p =$
 $= 50$ мм рт. ст.) при импульсном освещении в области
1590 Å. Показано, что под действием световых импуль-
сов (интенсивность — $(2-15) \cdot 10^{21}$ фотонов $\cdot \text{сек}^{-1} \text{л}^{-1}$)
первичными реакциями являются:



Увеличение интенсивности вспышки приводит к фотоли-
зу продуктов, напр., пропилена.

А. К. Чибисов

ф. 1968. 12

C_3H_8

V_0

1967

Hoyland J.R.

Chem. Phys. Lett., 1 (6);
247-8.

Barriers to internal rotation in propane.

C.A. 1968. 62.2

6439a

1987

6439a Barriers to internal rotation in propane. James R. Hoyland (Battelle Mem. Inst., Columbus, Ohio). ~~Chem. Phys. Lett.~~ 1(6), 247-8(1967)(Eng). The results of ab initio calcs. of barriers to internal rotation in propane made by a bond orbital

contg. max. 0.5 vol. % of impurities up to 10,000 °C. is described. The av. difference of the mea-

C.A. 1968. 68. 2

1968

C₃H₈

bnypp. 6fauz

(01467n) Internal rotation in propane: reanalysis of the microwave spectrum and quantum-mechanical calculations. Hoyland, James R. (Battelle Mem. Inst., Columbus, Ohio). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(4), 1908-12 (Eng). Quantum-mech. calens. are carried out on various conformations of the propane mol. by using a Gaussian basis set and the Hartree-Fock-Roothaan formalism. These calens. indicate that internal rotation in propane can be adequately described by a simple equation of the form $E(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{2} V_0 (2 - \cos 3\alpha_1 - \cos 3\alpha_2) - \frac{1}{2} V_1 [1 - \cos 3(\alpha_1 + \alpha_2)]$ where α_1 and α_2 are the two angles describing the rotation of the two Me groups. The microwave spectrum of propane in the 1st excited torsional states reported by Hirota, Matsumura, and Morino was analyzed assuming this potential, leading to values for V_0 and V_1 of 3575 ± 100 and 310 ± 40 cal./mole, resp.

RCJQ

C. A. 1968-69-24

C_3H_8

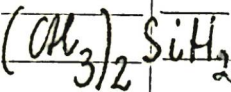
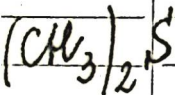
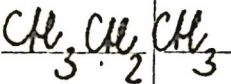
Hayland F. R.

1968

J. Amer. Chem. Soc., 90,
v 9, 2227.

Несимметрические расче-
ны, использующие
орбитали связей. I.
При- менение к
 CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 и
 C_3H_6 . (см. CH_4) III

1968



6 Д191. Определение высших силовых коэффициентов в потенциале внутреннего вращения молекул с двумя метильными группами. Trinkaus A., Dreizler H., Rudolph H. D. Bestimmung höherer Potentialkoeffizienten des Hinderungspotentials von Molekülen mit zwei Methylgruppen. «Z. Naturforsch.», 1968, 23 a, № 12, 2123—2124 (нем.)

Описание потенциала внутреннего вращения при помощи многих силовых коэф. для молекул данного класса сопряжено с рядом трудностей: малой интенсивностью переходов в более высоких крутильных состояниях, отсутствием надежных критериев при интерпретации вследствие более сильного расщепления мультиплетов и т.д. В данной работе описан расчетный метод, который делает возможным определение силовых коэф. более вы-

9. 1969. 6A

+2



сокого порядка. В качестве базиса для крутильной части применены собственные ф-ции системы из двух связанных волчков. Приведен общий вид оператора Гамильтона. На основе эксперим. данных для различных вращательных переходов в основном и возбужденном крутильном состоянии рассчитаны силовые коэф. V_3 и V_{12}' при членах вида $(1 - \cos 3\alpha_i)$ и $(\sin 3\alpha_i \cdot \sin 3\alpha_j)$ (α_i — угол кручения i -го волчка, $i, j = 1, 2$) для молекул пропана, диметилсульфида, диметилсилана. Е. Крайнов

C_3H_3

De La Vega J. R.

1969

n gp.

Int. J. Quant. Chem.

3, Sympos. n 3, Part I,
113.

Quant

80

(cell. C_2H_6) III

C₃H₈

1970

vi,

25

10 Д185. Измерение частот крутильных колебаний метильных групп в пропане методом неупругого рассеяния нейтронов. Grant David M., Pugmire Ronald J., Livingston Robert C., Strong Kenneth A., McMurtry Henry L., Brugger Robert M. Methyl libration in propane measured with neutron inelastic scattering. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 9, 4424—4436 (англ.)

Рассмотрены основы теории рассеяния медленных нейтронов на молекулах в газовой, жидкой и твердой фазах, в том числе рассеяния нейтронов под малыми углами или с малым изменением углового момента нейтрона при рассеянии. Экспериментально исследовано рассеяние медленных нейтронов на молекулах про-

ср. 1970. 10.9

пропана в газовой, жидкой и твердой фазах под малыми углами рассеяния. Из сечения рассеяния в зависимости от энергии нейтронов определены частоты крутильных колебаний метильных групп типа A_2 (217 ± 8) и B_2 ($265 \pm 8 \text{ см}^{-1}$), из которых вычислены значения барьера внутреннего вращения метильной группы $V_3 = -3680 \pm 190 \text{ кал/моль}$ и коэф. взаимодействия метильных групп $V_{33} = -280 \pm 130 \text{ кал/моль}$. Отмечено, что изменения частот крутильных колебаний пропана при переходе от газовой фазы к конденсированной малы.

М. Р. Алиев

C₃H₈

1972

23 Б97. Молекулярная структура пропана. Iijima
Takao. Molecular structure of propane. «Bull. Chem.
Soc. Jap.», 1972, 45, № 5, 1291—1293 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура
молекулы пропана. Найдены след. значения усреднен-
ных по колебаниям межъядерных расстояний (А) и
углов: $\angle(\text{C}-\text{C}) 1,532 \pm 0,003$, $\angle(\text{C}-\text{H}) 1,107 \pm 0,005$, $\angle \text{CCC}$
 $112 \pm 1^\circ$, $\angle \text{HCH} (\text{CH}_3) 107 \pm 3^\circ$. На основании данных о
колебательных и микроволновых спектрах, а также
электронографич. данных вычислены значения эффектив-
ных теометрич. параметров молекулы, соотв.щие абс.
нулю т-р: $\text{C}-\text{C}$ $1,533_7 \text{ А}$, $\text{C}-\text{H} (\text{CH}_3)$ $1,097_6 \text{ А}$, $\text{C}-\text{H}$
 (CH_2) $1,096_2 \text{ А}$, $\angle \text{CCC}$ $112,0^\circ$, $\angle \text{HCH}$ (CH_3) $107,9^\circ$,
 $\angle \text{HCH} (\text{CH}_2)$ $107,8^\circ$. Погрешность результатов прибли-
зительно 0,2%. В. Спиридонов

Струк-
тура

X-1972-23

1973

 C_3H_8 Christoffersen R.E,
et alрацем- "J. Am. Chem. Soc"
геометр. 1973, 95, N 26,

м. н.

8526-36.

● (смет. C_2H_4 ; III)

C₃H₈

1973

Trinkaus A;
Weizler H; Rudolph H.D.

(U₀)

"Z. Naturforsch",
1973, 28a, N 5, 750-58.

[ca (CH₃)₂S; III]

40108.7309
Ph, Ch, TE

C_3H_8

96201

1973

1569

Tuazon E.C., Manocha A.S., Fateley W.G.

On the evaluation of threefold
potential functions from far-infrared
data.

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 23, N 1, 63-68

(англ.) 0018

1019 1020 - 0 1 1

ВИНИТИ

C_3H_8

1974

Arriel J. Durup J. et al.

"J Phys. B. Atom. and Mol.

Phys." 1974, 7, №3, 406-414 (англ.)

энергия

Изучение возбужденных ионизованных состояний

и иониз.

состав

$(CH_4; \text{III})$



40715.1260

TC, Ph, CH, B

 C_3H_8

29864

(y)OL*

1974

4-5996

Potts Anthony W. — Streets David G.
 Photoelectron spectra of inner valence
 shells. Part I. Saturated hydrocarbons.
 "J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,
 Part 2, 70, N 5, 875-884

(ан т.)

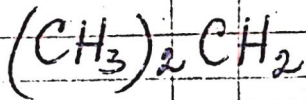
0151 N 5

128

134

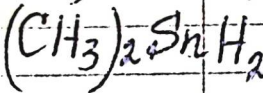
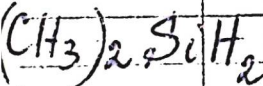
0 1 4 3

ВИНИТИ



XU-10566

1975



6 Б144. Силовые постоянные молекул $(\text{CH}_3)_2\text{XH}_2$ и частоты колебаний $(\text{CH}_3)_2\text{GeH}_2$. Божко Н. В., Тимошинин В. С., Шарков В. И. «Ж. прикл. спектроскопии», 1975, 23, № 4, 736—738

Проведено систематич. изучение частот колебаний молекул $(\text{CH}_3)_2\text{XH}_2$, где $\text{X}=\text{C}$, Si и Sn . Сделано предсказание частот колебаний $(\text{CH}_3)_2\text{GeH}_2$ и $(\text{CD}_3)_2\text{XD}_2$. Представлены новые данные по силовым постоянным ряда молекул указанного типа. Предпринята попытка использовать эксперим. данные по величинам барьеров заторможенного вращения групп CH_3 для вычисления крут. колебаний.

Резюме

сим-ност.

Si

X 1976 N 6

② ☒

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

Immune 3794 . 1976

кв. мет.
пар.

Poppinger Dieter,
Chem. Phys, 1976, 12, N1, 131.

C₃H₈

LX 13-18367/

1972

Dewar Michael J.S.

J. Amer. Chem. Soc.

1977. 99, N6, 1685-91

(paper.
red. exam.)

C_3H_8

1977

Haque W.

J. Chem. Phys., 1977,

67, N8, 3629-35.

Et; fmn

coll. CH₄-III

C_3H_8

Slanina Z, et.al. 1977

Collect Czech Chem.

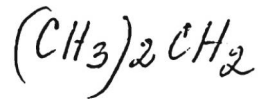
u.r.

Commun, 1977, 42(1) 1-15
(eng)

(ev NH_3 ; 2)

Pum 323





оттиск 5515

1977

Wangbo M-H,

Can. J. Chem, 1977,

55, 2778-2787.

расчет,
систем
молекуляр.
орбитали
по

C_3H_8 *annua* 6371 1978.

Blustin P.H., et al.

annua J. Chem. Soc. Faraday
Spec. II. Trans. II, 1978, 44 no,
982-93

C_3H_8

1948.

Caldwell J.W., Gordon M.S.

Li, J

Chem. Phys. Lett., 1948, 59, v3,
403-409.



(see. CH_4) 101

$(CH_3)_2CH_2$

Lommuca 8089

1978

номер,
наименова,
Российский
и.к. центр

Deerig J. R., et al.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1978,

16, 385-93

C3 H8 (отпуск / отпуск / отпуск) 106.39 | 1979

Трудов А.А., Дементьев В.А.

Маджар

написано

гидростат

Коллектив.

Секретарь

Маджарский государственный

университет г. Москва.

Секретарь М.А. Степанов

Науч. совет по энергетике,

1979, 9307.

C_3H_8

Common GOLF 1979

супермаркет,
поселок, г-н
Ковалев, с.м.м.

Melberg S., et al.

J. Mol. Struct., 1973

54, 215-39

C_3H_8

1980

Aug 12.

Myrica chrysi-
campestris
(2)

Theor. Chim. acta, 1980,
57, N2, 107-30

cell. H₂-III

$(CH_3)_2CH^\bullet$

1980

Leroy G., et al

кв. мех.
расчет

Nouv. j. chim., 1980,
4, N 6, 403-409.

$(CH_3^\bullet)_2$ III

C₃H₈

расчет
2H. жониз.
(у)

р. 1981. 12

2 Д123. Приближение замороженных орбиталей для расчета энергий ионизации с приложением к пропану. The frozen orbital approximation for calculating ionization energies with application to propane. Müller Wolfgang, Nager Christoph, Rosmus Pavel. «Chem. Phys.», 1980, 51, № 1—2, 43—48 (англ.)

Отмечено, что в приближении замор. женных орбиталей при расчете потенциалов ионизации корреляционные эффекты учитываются для неперестроенных при

ионизации (замороженных) ССП орбиталей, что позволяет ограничиться одним интегр. преобразованием для всех ионных состояний и делает точность учета корреляционных эффектов в методе промежуточной между методами независимых и связанных электронных пар. По этому методу в базисе гауссовских ф-ций 7s3p/3s, сгруппированном в 5s3p/3s, рассчитаны потенциалы ионизации пропана (симметрия C_{2v}). Обнаружено хорошее согласие с данными других неэмпирич. расчетов (в том числе по теореме Купманса и с учетом энергий перестройки орбиталей при ионизации) и эксперим. данными. 3 первых потенциала ионизации в фотоэлектронном спектре пропана отнесены к ионизации ²B₁(2b₁), ²A₁(6a₁) и ²B₂(4b₂). В. Л. Лебедев

7980

C_3H_8

1980

Verwoerd W.S.

Кв. мех.
расчет
гид. свей

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, 18, 16, 1449-63.

● (see CH_4) III

C_3H_8

1981

Breuerl Y., et al

J. chim. phys. et phys.-chim.
biol., 1981, 78, n° 2, 119-125

Vi

● (Cet H₂) III

C_3H_8

Lammieu 12732 | 1981

Fliszar S., et al.

Кв. мех.
расчет

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

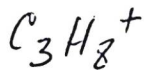
$H_2C(CH_3)_2$ [Dmmeu 11479] 1981.

Glidenwell C., et al.

molecul.

receptors

J. Mol. Struct., 1981,
72, 209-216



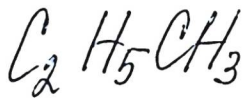
ommien 12108 1981.

Iwasaki M, et al.

ЭСР

спектр
близкие

J. Amer. Chem. Soc;
1981, 103 (12), 3591-92



1983
Klessinger Martin,
Int. J. Quantum. Chem.,
1983, 23, N2: Proc. 4
pacrui E, Int. Congr. Quantum
Uo; Chem., Uppsala, 13-20,
1982, 532 - 542.

( C₂H₃F; III)

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

1983

Павлючко А. Ч.,
Трудов Л. А.

теор.
расчѣт

Оптика и спектро-
скопия, 1983, 54, N 4,
644-649.

(см. CH_3CH_3 (этан), III)

C_3H_8

1983

Pulay Peter.

pacruer
 E_c ;

Chem. Phys. Lett.,
1983, 100, N2, 151-154.

(● cur. H_2O_2 ; III)

C₃H₈

1984

8 Л139. Интенсивности полос поглощения пропана и модельные параметры полос от 680 до 1580 см⁻¹ при температурах от 296 до 200 К. Propane absorption band intensities and band model parameters from 680 to 1580 cm⁻¹ at 296 and 200 K. Giver Lawrence P., Varanasi Prasad, Valero Francisco P. J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1984, 31, № 3, 203—213 (англ.)

ИК-спектры

Получены ИК-спектры (1580—680 см⁻¹) молекул C₃H₈ (I) в газовой фазе при т-рах от 296 до 200 К. Измерены профили и интенсивности ИК-полос I. Проведено сопоставление ИК-спектров I и аналогичных:

ф. 1984, 18, N 8

спектров молекул I в атмосфере Титана. Отмечено уменьшение полуширины и увеличение интенсивности Q-ветвей ИК-полос I при понижении т-ры. В рамках модельной структуры определены дипольные моменты связей и коэф. поглощения ИК-полос I. Отмечено, что расхождение теоретич. оценок и наблюдаемых параметров ИК-полос I не превышало 3% за исключением перекрывающихся ИК-полос ν_7 и ν_{20} I. Библ. 15.
И. В. А.

$C_3H_8^+$

[om. 23413]

1984

Равновесн.
геометр.
и сверх-
тонк.
взаимо-
действ.

Lunell S., Huang W. B.,

Faraday Discuss. Soc.,
1984, 78, 35-47

C_3H_8

1984

Raghavachari Krishnan.

Pacrem
Vi;

J. Chem. Phys., 1984,
SI, N6, 2717-2722.

● (C₂H₄; III)

C₃H₈

Микр. вол.

М. П., 16

ф. 1986, 18,
N 2

~~21774~~ 1985
2 Л165. Определение высоты барьера внутреннего вращения по спектру основного состояния. Барьер метильной группы пропана. Determination of a high barrier hindering internal rotation from the ground state spectrum. The methylbarrier of propane. Bestmann G., Lalowski W., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1985, A40, № 3, 271—273 (англ.)

Методом микроволн. фурье-спектроскопии, в области 8—26 ГГц, получен вращательный спектр основного состояния пропана при $t_{ре} = -40^{\circ}C$ и давл. (1—2) · 10⁻³ мм рт. с. Измерены частоты 34 мультиплетных линий вращательного спектра. В рамках метода внутренних осей исследовано мультиплетное расщепление вращательных линий, обусловленное внутренним вращением (ВВ) метильных групп. В результате анализа рассчитаны вращательные постоянные для основного состояния определена высота барьера ВВ метильных групп. Рассчитан момент инерции метильной группы, найдены углы между осями инерции и осями ВВ и другие параметры ВВ пропана. Показано, что угол между осями ВВ метильных групп пропана составляет $(109,7 \pm \pm 0,17)^{\circ}$. В. К.

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

1985

20 Б1287. Определение высоты барьера заторможенного внутреннего вращения из спектра в основном состоянии. Барьер вращения метильной группы в пропане. Determination of a high barrier hindering internal rotation from the ground state spectrum. The methylbarrier of propane. Bestmann G., Lalowski W., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1985, A40, № 3, 271—273 (англ.).

Вращател.
постоян.

На чувствительном МВ-фурье-спектрометре высокого разрешения измерена в области частот 8—26,5 ГГц торсионная ТС вращат. переходов пропана в основном торсионном состоянии. Отнесение переходов с высокими значениями J выполнено с учетом центробежного искажения. Наряду с разрешенными переходами АА, ЕЕ, ЕА и АЕ в спектре измерены запрещенные переходы $ЕЕ^*$ и $ЕА^*$. Определены вращат. постоянные для переходов АА в МГц: $A=29207,526$, $B=8445,962$, $C=7459,001$, высота барьера внутр. вращения метильной

Х. 1985, 19, № 20

CH_2 (110)

группы $V_3=3,166$ (27) "ккал/моль," приведенная вращат. постоянная внутреннего вращения $F=183,99$ (121) ГГц и структурные параметры внутр. вращения. Угол между осями внутреннего вращения $109,7$ (12) $^\circ$ согласуется с вычисленным из структурных МВ-данных. С. Н. Мурзин



1985

C₃H₈

OF 21724

22 Б1253. Вращательный спектр пропана. Анализ центробежного искажения. The rotational spectrum of propane centrifugal distortion analysis. Bestmann G., Dreizler H., Vacherand J. M., Boucher D., van Eijck B. P., Demaison J. «Z. Naturforsch.», 1985, A40, № 5, 508—510 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре в обл. частот 6,4—26,5 ГГц (точность 10—20 кГц) и миллиметровом (ММ) спектрометре в обл. частот 140—300 ГГц (точность 30—150 кГц) измерен вращат. спектр пропана в основном колебат. состоянии. МВ- и ММ-спектры измерены, соотв., при т-рах —40° С и —60° С и давл. $< 2 \cdot 10^{-3}$ и 0,02 мм. Наличие большого числа переходов с высокими значениями $J \leq 41$ позволило впервые определить параметры центробежного искажения молекулы пропана. Анализ спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А — представлении с учетом 5 квартичных и 4 секстичных постоянных центробежного искажения. Вращат. постоянные в основном состоянии равны (в МГц): $A = 29207$, 48149 , $B = 8445$, 96770 , $C = 7459$, 00196 .

С. Н. Мурзин

и л., и;

X. 1985, 19, N 22

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

21724

1985

11 Л153. Вращательный спектр пропана. Анализ центробежного искажения. The rotational spectrum of propane: centrifugal distortion analysis. Bestmann G., Dreizler H., Vacherand J. M., Boucher D., van Eijck B. P., Demaison J. «Z. Naturforsch.», 1985, A40, № 5, 508—510 (англ.)

В диапазонах 6,4—26,5 и 140—300 ГГц исследован МВ-спектр поглощения слабополярной молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ ($\mu=0,085$ ед. Дебая); в сантиметровом диапазоне применялся фурье-спектрометр. Идентифицированы линии 90 вращательных переходов с $J \leq 41$ основного колебательного состояния, а также туннельное А—Е-расщепление линий с низкими J . Определены значения вращательных постоянных и постоянных квартичного и частично секстичного центробежного искажения: $A=29207,481$, $B=8445,967$, $C=7459,002$ МГц; $\Delta_J=7,1929$, $\Delta_{JK}=-26,967$, $\Delta_K=159,845$, $\delta_J=1,3969$, $\delta_K=3,0585$ кГц; $\Phi_{JK}=0,0296$, $\Phi_{KJ}=-1,423$, $\Phi_K=5,52$, $\Phi_J=0,00368$ Гц.

М. Р. Алиев

и.п., геометр.
структура

ср. 1985, 18, N11

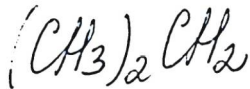
$\text{CH}_3 \text{CH}_2 \text{CH}_3$

1985

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

ab initio
pccrern.

J. Phys. Chem., 1985, 89, 111;
5 Amer. Conf. Theor. Chem.
Grand Teton Nat. Park, Wyo.,
June 15-20, 1984, 2195-
-2197. (see CO-N₂; III)



1986

13 Б1088. Анализ молекулярного, подобия в терминах плотности валентных электронов. Molecular similarity in terms of valence electron density. Bowen-Jenkins Philippa E., Richards W. Graham. «J. Chem. Soc. Chem. Commun.», 1986, № 2, 133—135 (англ.)

Волновые
функции,
расчет

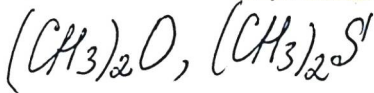
Неэмпирическим методом ССП в базисе 4-31 ГФ рассчитаны волновые ф-ции молекул $(\text{CH}_3)_2\text{X}$ ($\text{X}=\text{CH}_2$, O , S , соотв., I—III). Вычислены индексы Карбо электронного подобия пар частиц I—III, $R_{AB} = \sqrt{\rho_A \rho_B} d\tau / [\int \rho_A^2 d\tau \int \rho_B^2 d\tau]^{1/2}$, где $\rho_A \rho_B$ — электронные плотности. Расчет показал, что I ближе к II, чем к III, что противоречит концепции бионизостеричности CH_2 и S. Найдено, что это противоречие можно устранить, если исключить из расчета вклады остовных электронов атомов C, O и S.

В. Я. Беспалов

(+2)

X

X. 1986, 19, N 13



C₃H₈

(Im. 27804) 1987

107: 164198z The harmonic force field of propane. Gough, K. M.; Murphy, W. F.; Raghavachari, Krishnan (Div. Chem., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(6), 3332-40 (Eng). The quadratic vibrational force field of propane was obtained by scaling calcd. ab initio force fields to fit well detd. vibrational frequencies from the Raman and IR spectra of gaseous propane-h₈, propane-d₈, 1,1,1,2,3,3,3-propane-d₇, and the 2 rotational isomers of 1,1,2,2,3,3,3-propane-d₇. Two different ab initio force fields were investigated, one using Hartree-Fock theory (HF/6-31G*) and the other including electron correlation effects by means of 2nd-order Moller-Plesset perturbation theory (MP2/6-31G*). The scaled MP2/6-31G* force field gives a significantly better fit of the exptl. frequencies, esp. for those involving contributions from the CC stretching coordinate.

(Calc. no cm.)

c.A. 1987, 107, N18

$C_8H_8^+$

Om. 27875

1987

Knight L. B., Jr., Arrington C. A.
et al.,

6 mem-
pulse

J. Amer. Chem. Soc., 1987,
109, N18, 5521-5523.

C_3H_8

(DM. 29391)

1988

Cheng-Phillips A.,

всего 17-
177

J. Chem. Phys., 1988,

всего 177

88, N 3, 1764-1774.



C_3H_8

[Om. 33375, "a"]

1989

Reaction.
homeries.

Bowles R. F., Tildesley D. F.,
et al.,

J. Chem. Soc., Faraday
Trans. 2, 1989, 85(9),

1505- ● 1517

C3H8

1989

111: 30481k Tunable diode laser spectra and assignment of the 748 cm^{-1} band of propane. Gassler, G.; Reissenauer, B.; Huettner, W. (Abt. Chem. Phys., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *Z. Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1989, 44(4), 316-24 (Eng). The rotational structure of the 748 cm^{-1} c-type CH_2 -rocking fundamental of propane was analyzed using tunable diode laser techniques. On grounds of a low-resoln. Fourier transform spectrum and of the known ground-state rotational and centrifugal-distortion consts., some 700 transitions were measured and assigned in several regions of the band. The upper-state consts. detd. in this way allow the prediction of rovibrational frequencies to within 0.003 cm^{-1} , covering quantum states up to $J = 50$ and $K_a = 20$. The band appears unperturbed.

ok exp.
bcs. chem

C.A. 1989, 111, NY

C₃H₈

(Om. 32778)

1989

Buo H., Karplus M.,

J. Chem. Phys., 1989, 91,
N3, 1719 - 1733.

конечн.,
интерм.
расчет

Basis set and polarization
function effects on optimi-
zed geometries and harmo-

0.001

nic frequencies at the second-
-order Møller-Plesset
perturbation level.

C3H8

1990

114: 199157J FTIR study of tricarbon hydrides in solid argon
at 10 K. Huang, Jun Wooi (Texas Christian Univ., Fort Worth, TX
USA). 1990. 155 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No.
DA9027791. From *Diss. Abstr. Int. B* 1991, 51(8), 3392.

1. 114: 199157J

C.A. 1991, 114, N20

$C_3H_8^+$

1990

113:12312t Configuration interaction calculations in the propane radical cation, $C_3H_8^+$. Lunell, Sten; Feller, David; Davidson, Ernest R. (Dep. Quantum Chem., Uppsala Univ., S-75120 Uppsala, Swed.). *Theor. Chim. Acta* 1990, 77(2), 111-22 (Eng). Proton isotropic hyperfine coupling consts. have been calcd. for three low-energy nuclear conformations on the ground state potential surface of the propane cation, using a multireference singles and doubles CI (MR-SDCI) wave function. The lowest point found on the potential surface had C_{2v} symmetry and the electronic wave function at this point had 2B_2 symmetry. At this point, the largest isotropic coupling const. is calcd. to be 88.6 G, which is in fair agreement with the exptl. value of 98 G obtained in the an SF_6 matrix at 4 K. No support is found for a "long-bond" ground state of lower symmetry than C_{2v} . Another C_{2v} min. on the ground state potential energy surface was found at which the wave function had 2B_1 symmetry. At this point, two large coupling consts. of 198 G and 35 G were calcd. A C_{2v} stationary point was also found on the ground state potential surface at which the wave function had 2A_1 symmetry. At this point, couplings of 86 G and 25 G were obtained. None of these agree closely with the other exptl. result of couplings at both 190-110 G and 50-52.5 G which was obtained in freon matrixes. It is suggested that the latter spectra might correspond to a dynamical av. of two distorted $^2A'$ states in C_s symmetry.

компьютера

C.A. 1990, 113, N 2

C3H8

DM 35112

1990.

Shelton D.P.,

Phys. Rev. A 1990, 42,
N5, 2578-2592.

Nonlinear-optical suscep-
tibilities of ● gases measu-

red at 1064 and 1319 nm.



C_3H_8

[Dm. 34030]

1990

Газовый
комп.
м. п.
град.,
список

Vormann K., Dreizler H.;
et al.,

Z. Naturforsch. 1990,
90, 45A, N 8, 989-994

Methyl Internal Rotation

Fine Structure in the
Ground State Rotational
Spectrum of Gauche Butane

C₃H₈

1992

7 Б1095. Обратное взаимоотношение между длиной связи и валентным углом. Часть 4. Неэмпирическое исследование A₃H₈ (A=C, Si, Ge). Inverse «bond length/bond angle» relationship .Part 4 .Ab initio study of A₃H₈ (A= C, Si, Ge) /Mastryukov V. S., Samdal S. //J. Mol. Struct. — 1992 .— 268 ,№ 4 .— С. 395—399 .— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисного набора 6-31 ГФ** изучено электронное и геометрич. строение молекул A₃H₈ (A=C, Si) (для A=Ge расчеты проведены с использованием базиса 3-21 ГФ*) и проанализировано изменение длины связи A—H с изменением угла AAA. Показано, что увеличение угла AAA в интервале от ~100° до ~120° приводит к практически линейному уменьшению длин связей A—H. Получены линейные ур-ния, связывающие длину связи A—H и угол AAA.

И. Н. Сенченя

Электронное
и
геометр.
строение

(42) 



Si₃H₈, Ge₃H₈

X. 1994, № 7

C₃H₈

1992

117: 76967a Inverse "bond length/bond angle" relationship. Part 4. Ab initio study of A₃H₈ (A = C, Si, Ge). Mastryukov, V. S.; Samdal, S. (Dep. Chem., Moscow State Univ., Moscow, Russia 117234). *J. Mol. Struct.* 1992, 268(4), 395-9 (Eng). There is a close similarity in the behavior of both the Si-Si and Ge-Ge bond distances with changes of the A-A-A bond angle. However, the C-C bond distance shows a clear min. and the variation of the C-C bond distance is over a larger range than the Si-Si and Ge-Ge bond distances. Elongated C-C and Si-Si bonds at bond angles below A-A-A = 90° are consistent with the long distances which are known for corresponding four-membered rings.

(ab initio calc-
22M)

Si₃H₈, Ge₃H₈

(42) ☒

C.A. 1992, 117, N8

1996

F: C₃H₈⁺

P: 3

14Б171. Сравнительное изучение катион-радикалов этана и пропана методом функционала плотности (B3LYP) и неэмпирическими методами высокого уровня. Comparative study of ethane and propane cation radicals by B3LYP density functional and high-level ab initio methods / Zuilhof Han, Dinnocenzo Joseph P., Reddy A. Chandrasekhar, Shaik Sason [Journal of Physical chemistry] // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 39. - С. 15774-15784. - Англ.

Место хранения ГПНТБ

РМХ. 1997

F: (CH₃)₂C₂

P: 3

131:122347 Low temperature Raman study of dimethylacetylene. Grosev, V. Mohacek; Furic, K. (Ruder Boskovic Institute, Zagreb, Croatia). J. Mol. Struct., 482-483, 653-659 (English) 1999

From low temp. Raman spectra from 10 to 170 K of polycryst. dimethylacetylene (DMA), two stable and two metastable cryst. phases were detected. One can be identified with a previously reported metastable ph Prasad, R. Kopelman, Chem. phys. Lett. 20(1973) 513-516] and can be obsd. 10 to 75 K, when it transforms into another metastable phase. This one, turn, transforms at 115 K into the stable C₂/m phase. To enable better assignment

C.A. 1999, 131

of the obsd. internal modes, esp. those involving Me group, ma isolation of DMA at 10 K was performed. In the recorded Raman spectra at ratios of 1:100, 1:50 and 1:25, the strongest bands obsd. are of als symm Besides them, the authors were able to detect bands at 218 and 1040 cm^{-1} symmetry, which are only IR active when no intermol. interactions are pre The Raman spectrum of DMA as a thin solid film was also recorded. The ba positions are found not to deviate significantly in comparison with the s of the matrix isolated sample, and thanks to the better signal to noise r several addnl. bands were detected. Among those is the .nu.8 at 1147 cm^{-1} a4s symmetry.

F: C₃H₈

P: 3

1999

132:40798

Orbital momentum profiles and binding energy spectra for the complete valence shell of propane.

Zheng, Y.; Pang, W. N.; Shang, R. C.; Chen, X. J.; Brion, C. E.; Ghanly, T. K.; Davidson, E. R. Department of Physics, Tsinghua University

Beijing 100084, Peop. Rep. China J.

Chem. Phys., 111(21), 9526-9535 (English) 1999 The orbital momentum profiles and binding energy spectra for the complete valence shell of propane are reported. The expt. has been performed using a high energy resolu. ($\Delta E = 0.95$ eV FWHM) multichannel (e,2e) electron momentum spectroscopy spectrometer at an impact energy of 1200 e plus the binding energy. The measured binding energy spectra are compared and

C.A. 2000, 132

consistent with PES data available in the literature and also with the predictions of Hartree-Fock, Green's function and MRSD-CI methods. A state splitting observed in the inner valence energy spectra due to electron correlation and ion relaxation effects is confirmed by MRSD-CI calculations. The experimental momentum profiles have been compared with calculations obtained using the target Hartree-Fock method with a minimum basis set and also a very large basis set. Density functional theory calculations using B3LYP functionals as well as large basis set MRSD-CI calculations are also reported. The agreement between theory and experiment for the shape of the orbital electron momentum distributions is generally good.