

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА
И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

УДК 539.193

КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СТРУКТУРА УФ-СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ АЦЕТОФЕНОНА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ© 2021 г. Л. А. Королева^{а,*}, К. С. Андриасов^а, А. В. Королева^б^а Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,
119991, Москва, Россия^б Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет,
119991, Москва, Россия

*e-mail: koroleva.msu@rambler.ru

Поступила в редакцию 26.11.2020 г.

После доработки 09.02.2021 г.

Принята к публикации 10.02.2021 г.

Впервые получен УФ-спектр поглощения паров ацетофенона в области 26900–28700 см⁻¹. Проведено полное отнесение 54 полос поглощения разрешенной колебательной структуры этого спектра; значение волнового числа 0–0-полосы равно 27279.3 см⁻¹. Найдены фундаментальные частоты в S₀- и S₁-состояниях: $\nu'' = 219$, $\nu' = 326$, $\nu' = 438$, $\nu' = 728$, $\nu' = 1186$ см⁻¹. С применением программы “NONIUS” построено несколько таблиц Деландра (ТД) для крутильного колебания исследуемой молекулы. Из ТД по программе ν_{00} определены гармонические частоты ω_e , коэффициенты ангармоничности x_{11} и частоты 0– ν -переходов крутильного колебания ацетофенона до высокого значения колебательного квантового числа $\nu'' = 6$ в S₀- и $\nu' = 2$ в S₁-состояниях. Частота крутильного колебания в S₀-состоянии: $\nu'' = 49.2 \pm 0.4$ см⁻¹; в S₁-состоянии $\nu' = 96.8 \pm 0.3$ см⁻¹.

Ключевые слова: заторможенное внутреннее вращение, крутильное колебание, таблица Деландра, частоты 0– ν -переходов, основное (S₀) и возбужденное (S₁) электронные состояния

DOI: 10.31857/S0044453721090090

Интерес к изучению заторможенного внутреннего вращения (ВВ) вокруг одинарной С–С-связи, находящейся в сопряжении с двойными С=C- и С=О-связями, в α, β -ненасыщенных карбонильных соединениях (I): R₁R₂C=CR₃–COR₄, где R₁ = R₂ = R₃ = H, CH₃; R₄ = H, CH₃, F, Cl, Br и в бензойных соединениях (II): C₆H₅–COR, где R = H, CH₃, F, Cl, Br наблюдается у различных групп исследователей в течение нескольких десятилетий [1–11]. Цель таких исследований, как и настоящей работы – определение частоты крутильного колебания и значений 0– ν -переходов этого колебания для изучаемой молекулы. В наших работах для достижения поставленной цели, связанной с изучением (ВВ) соединений рядов I и II, используется метод анализа разрешенной колебательной структуры полос $n-\pi^*$ -перехода УФ-спектра поглощения высокого разрешения паров исследуемых соединений. Достоинство применяемого метода – его информативность, так как колебательная структура УФ-спектров паров многих исследуемых соединений содержит около сотни полос поглощения (акрилоилфторид [10] и метакрилоилфторид [12]). Большинство из этих

полос поглощения соответствуют определенному переходу между уровнями энергии крутильного колебания основного (S₀) и возбужденного (S₁) электронных состояний. Вероятно, это связано с высокой заселенностью уровней энергии крутильного колебания.

Таким образом, в применяемом нами методе, в отличие от ИК-фурье-спектроскопии в дальней ИК-области и микроволновой спектроскопии, можно определять значения частот 0– ν -переходов крутильного колебания не только в основном (S₀), но и в возбужденном (S₁) электронных состояниях до высоких значений колебательного квантового числа ν . По полученным значениям частот 0– ν -переходов крутильного колебания в S₀- или в S₁-состоянии можно построить потенциальные функции одномерного внутреннего вращения (ПФВВ) вида:

$$V(\varphi) = 1/2 \sum V_n (1 - \cos n\varphi), \quad (1)$$

где φ – угол поворота одной группы атомов (“волчка”) относительно другой (“остова”). Для построения $V(\varphi)$ необходимо также использовать

Таблица 1. Фундаментальные колебательные частоты ацетофенона в газовой фазе, найденные при анализе колебательной структуры УФ-спектра (см^{-1})

N^*	Симметрия	Отнесение [15]	Жидкость					Газ			УФ-спектр		
			ИК [15]	ИК [16]	КР [16]	ИК [17]	КР [17]	ИК [18]	ИК [19]	Микро-волнов. [13]	S_0	S_1	
1	a''	τ (torsion)							48	49.5	47.9	49	
2	a'	ν_{30}	226	225		220			220	219		219	
3	a'	$\delta C_{Ar}-C-C$	368	368	365	368	365						326
4	a''	$\gamma C=O$	467	468	464	468	465						438
5	a'	ν_{25}	730	730	731	731	731						728
6	a'	ν_{18}	1181	1180	1178	1178	1179						1186

N^* – номер колебания.

вращательную постоянную $F(\varphi)$ с разложением ее в ряд Фурье.

Настоящая работа посвящена изучению заторможенного внутреннего вращения паров ацетофенона: $C_6H_5-COCH_3$ ($R = CH_3$). Заторможенное внутреннее вращение рассматривается в рамках одномерной жесткой модели, когда при вращении вокруг $C-C$ -связи одной части молекулы COR (волчка) по отношению к оставшемуся остову (C_6H_5) изменяется только угол вращения φ . Частота крутильного колебания отделяется от других колебательных частот по симметрии и частоте: самая низкая частота симметрии a'' .

Микроволновое исследование молекулы ацетофенона проведено в работе [13]. Авторы для основного состояния рассчитали вращательные постоянные (МГц): $A = 3688.040(11)$, $B = 1215.048(1)$, $C = 919.919(1)$. Разностный дефект инерции, рассчитанный из дефекта инерции основного и крутильного возбужденного состояний, указывает на плоско-скелетное строение ацетофенона [13]. Все атомы молекулы, кроме двух атомов H метильной группы, лежат в плоскости. Группа симметрии C_s . В метильной группе (CH_3) один атом H находится в плоскости, второй – за плоскостью и третий – впереди плоскости. В более поздней работе [14] проведено также микроволновое исследование ацетофенона с помощью импульсного струйного преобразования Фурье. Для ацетофенона использовано изотопозамещение, что позволило получить точное структурное описание углеродного скелета. Экспериментальные результаты этой работы находятся в хорошем согласии с данными [13], а квантово-механический расчет методом MP2/6-311++G(2dt,2pd), проведенный авторами [14], близок ко всем экспериментальным величинам работ [13] и [14].

Ацетофенон – сложный объект для спектральных исследований, так как имеет высокую температуру кипения (202°C) и низкое давление паров

при комнатной температуре. Поэтому ИК- и КР-спектры в [15–17] получены и изучены в основном для жидкого состояния ацетофенона (табл. 1). Авторам [15] удалось получить некоторые полосы поглощения ИК-спектра исследуемого соединения в газовой фазе, но не во всем спектральном диапазоне исследования ($130-4000 \text{ см}^{-1}$). Частота крутильного колебания ацетофенона в газовой фазе найдена из ИК-спектров в дальней области: $48 \pm 2 \text{ см}^{-1}$ [18]; близкое значение (49.5 см^{-1}) получено из ИК-фурье-спектров в [19]. Значения частот крутильного колебания в основном (S_0) электронном состоянии, найденные в работах [18, 19], как и полученное из микроволнового спектра [13], приведены в табл. 1. Наряду с экспериментальными значениями колебательных частот ацетофенона, в работе [20] определены нормальные координаты этой молекулы, и с использованием валентного силового поля рассчитаны колебательные частоты. В [21] проведен квантово-механический расчет колебательных частот ацетофена с применением теории Хартри–Фока. Частота крутильного колебания (49.15 см^{-1} [21]) близка к ее экспериментальным значениям [13, 18, 19]; рассчитанные колебательные частоты [20, 21] близки к экспериментальным [15–17].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Перед съемкой УФ-спектра поглощения образец ацетофенона очищали от примесей путем обычной и холодной перегонки с замораживанием и вакуумной откачкой. УФ-спектры поглощения ацетофенона получали на приборе высокого разрешения ДФС-2. Снимали во втором порядке решеткой 2400 штрихов/мм с обратной линейной дисперсией $8.3 \text{ \AA}/\text{мм}$. В качестве источника сплошного излучения применяли лампу ДКСШ-1000. Использовали многоходовую (3 м) кварцевую кювету с рубашкой, по которой пропускали нагретое силиконовое масло. Давление паров из-

менялось от 50 до 400 мм рт. ст. Давление паров удавалось менять благодаря конструкции кюветы: от внутренней части кюветы отходил сборник вещества в виде небольшой пробирки. После откачивания кюветы до высокого вакуума с помощью замораживания сборника вещества жидким азотом собирали в него ацетофенон. Давление паров повышали при нагреве сборника ацетофенона силиконовым маслом. Время экспозиции меняли от нескольких минут до часов, так что в область нормального почернения попадали разные участки спектра. Спектры фотографировали на пленку КН-2. Спектры для ацетофенона удалось получить только из ампул "для спектроскопии", как и для бензоилхлорида. В области 26900–28700 см⁻¹ была получена хорошо разрешенная колебательная структура УФ-спектра паров ацетофенона с 54 полосами поглощения сильной и средней интенсивности. Для измерения волновых чисел полос поглощения паров ацетофенона снимали спектр железа.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

УФ-спектры поглощения ацетофенона изучались очень давно: в пятидесятые годы прошлого столетия [22–24]; спектры ацетофенона в газовой фазе были получены в длинноволновой области (9–13 полос поглощения). Как следует из обзорного спектра работы [23], наблюдаемый переход относится к π – π^* -переходу ацетофенона; волновое число 0–0-перехода равно 35375 см⁻¹ [22, 24]. Колебательная структура УФ-спектра поглощения исследуемого соединения позднее не изучалась. Очевидно, это связано с высокой температурой кипения и низким давлением паров ацетофенона, что вызывает трудности в эксперименте.

Нами впервые получена разрешенная колебательная структура УФ-спектра поглощения паров ацетофенона в области 26900–28700 см⁻¹. Полосы поглощения УФ-спектра паров ацетофенона отнесены к электронному переходу $S_0 \rightarrow S_1$ симметрии ${}^1A' - {}^1A''$ и, судя по интенсивности, к n – π^* -переходу по аналогии с молекулой бензальдегида и бензоилфторида [1, 5, 9, 25, 26]. Колебательная структура УФ-спектра ацетофенона, полученного в настоящей работе, состоит из широких полос C - и $(A + B)$ -типов. Перпендикулярные полосы C -типа имеют максимум на своем контуре; параллельные полосы $(A + B)$ -типа состоят из двух нешироких компонент, между которыми наблюдается провал. Начала полос обоих типов неизвестны. Однако, для определения частот колебаний в УФ-спектре поглощения используются разностные величины. Поэтому важно измерять полосы одного типа единообразно. Полосы C -типа измерялись нами по максимуму поглощения, $(A + B)$ -типа – по провалу на контуре.

Выражение для волновых чисел всех возможных колебательных переходов данного электронного перехода (т.е. системы полос) имеет вид [27]:

$$v = v_e + G'(v'_1, v'_2, v'_3, \dots) - G''(v''_1, v''_2, v''_3, \dots),$$

где $v_e = T'_e - T''_e$. Подставив выражения для колебательных термов, получим [27]:

$$v = v_e + \sum_i \omega'_i(v'_i + 1/2) + \sum_i \sum_{k \geq i} x'_{ik}(v'_i + 1/2) \times \\ \times (v'_k + 1/2) - \sum_i \omega''_i(v''_i + 1/2) + \\ + \sum_i \sum_{k \geq i} x''_{ik}(v''_i + 1/2)(v''_k + 1/2). \quad (2)$$

На практике бывает удобнее пользоваться энергиями уровней по отношению к энергии самого низкого колебательного уровня в каждом состоянии [27]:

$$v = v_{00} + \sum_i \omega_i^{\circ'} v'_i + \sum_i \sum_{k \geq i} x_{ik}^{\circ'} v'_i v'_k - \\ - \sum_i \omega_i^{\circ''} v''_i + \sum_i \sum_{k \geq i} x_{ik}^{\circ''} v''_i v''_k - \dots, \quad (3)$$

где

$$\omega_i^{\circ} = \omega_i + x_{ii} + 1/2 \sum_{i \neq k} x_{ik}, \\ v_{00} = v_e + 1/2 \sum_i \omega_i^{\circ'} + 1/4 \sum_i \sum_{k \geq i} x_{ik}^{\circ'} - \\ - 1/2 \sum_i \omega_i^{\circ''} - 1/4 \sum_i \sum_{k \geq i} x_{ik}^{\circ''}.$$

Здесь штрих соответствует возбужденному электронному состоянию, а два штриха – основному. Обычно крутильная частота ω_i намного меньше других и легко отделяется от них. В такой ситуации ее можно рассматривать в приближении ангармонического осциллятора:

$$\omega_{v_0} = v \omega_e + v(v+1)x_{ii} + v\delta = v\omega_{v_0} + v(v+1)x_{ii}, \quad (4)$$

где $\delta = 1/2(x_{i1} + x_{i2} + \dots)$, $\omega_{v_e} + \delta = \omega_{v_0}$. Так как колебательная структура n – π^* -перехода ацетофенона высокоинформативна, из ее анализа можем получить богатую информацию о значениях частот 0– v -переходов крутильных колебания в обоих электронных состояниях до высоких значений колебательных квантовых чисел v'' и v' .

В результате анализа колебательной структуры УФ-спектра поглощения высокого разрешения паров ацетофенона в настоящей работе было определено волновое число 0–0-полосы, равное 27279.3 см⁻¹, близкое к полученным в работах [28–30] (27280, 27286, 27279 см⁻¹), в которых изучался n – π^* -переход $S_0 \rightarrow S_1$ по спектрам возбуждения флуоресценции ацетофенона в сверхзвуковой струе. Кроме того, полученное нами значе-

Таблица 2. Волновые числа полос поглощения УФ-спектра паров ацетофенона (см^{-1})

№	ω_i	Отнесение	№	ω_i	Отнесение
1	26870.8	$2_1^0 1_4^0$	28	27572.0	$4_0^1 1_3^0$
2	26923.3	$2_1^0 1_5^0$	29	27578.4	$4_0^1 1_5^0$
3	26963.2	$2_1^0 1_2^0$	30	27605.1	3_0^1
4	26998.4	1_6^0	31	27619.2	$4_0^1 1_2^0$
5	27011.2	$2_1^0 1_1^0$	32	27651.6	$3_0^1 1_1^0$
6	27017.4	$2_1^0 1_5^0$	33	27667.6	$4_0^1 1_1^0$
7	27042.8	1_5^0	34	27701.8	$3_0^1 1_0^0$
8	27060.4	2_1^0	35	27717.2	4_0^1
9	27088.1	1_4^0	36	27747.3	$3_0^1 1_1^2$
10	27095.2	1_6^0	37	27762.5	$4_0^1 1_3^2$
11	27107.6	$2_1^0 1_3^2$	38	27771.7	$5_0^1 1_5^0$
12	27134.4	1_3^0	39	27796.5	$3_0^1 1_2^0$
13	27157.2	$2_1^0 1_0^0$	40	27809.8	$4_0^1 1_2^2$
14	27181.7	1_2^0	41	27813.7	$4_0^1 1_0^0$
15	27230.0	1_1^0	42	27824.8	$5_0^1 1_6^0$
16	27279.3	0_0^0	43	27862.7	$5_0^1 1_3^0$
17	27326.8	1_1^1	44	27910.4	$5_0^1 1_2^0$
18	27370.6	$3_0^1 1_5^0$	45	27958.1	$5_0^1 1_1^0$
19	27376.1	1_0^1	46	28007.2	5_0^1
20	27415.1	$3_0^1 1_4^0$	47	28054.8	$5_0^1 1_1^1$
21	27421.0	1_1^2	48	28103.8	$5_0^1 1_0^1$
22	27460.8	$3_0^1 1_3^0$	49	28198.2	$5_0^1 1_2^2$
23	27471.1	1_2^0	50	28274.5	$6_0^1 1_4^0$
24	27507.7	$3_0^1 1_2^0$	51	28416.1	$6_0^1 1_1^0$
25	27526.0	$4_0^1 1_0^0$	52	28465.3	6_0^1
26	27534.1	$4_0^1 1_6^0$	53	28562.4	$6_0^1 1_0^1$
27	27556.1	$3_0^1 1_1^0$	54	28657.3	$6_0^1 1_2^0$

Примечание: $N_v^{v'}$ – N соответствует номеру колебания в табл. 1; v'' – колебательное квантовое число основного (S_0) электронного состояния, v' – колебательное квантовое число возбужденного (S_1) электронного состояния.

ние волнового числа 0–0-полосы подтверждается фундаментальными колебательными частотами в ИК- и КР-спектрах основного (S_0) электронного состояния и фундаментальными частотами возбужденного (S_1) состояния, найденными в настоящей работе при анализе колебательной структуры УФ-спектра (табл. 1). Частоты возбужденного состояния ацетофенона нашей работы совпадают с определенными в [28, 30], а также подтверждаются нами построением от них таблиц Деландра (ТД) таких же, как от 0–0-полосы.

Для построения таблиц Деландра использовали программу NONIUS. По программе NONIUS находили прогрессии и секвенции по повторяющимся интервалам. Определили прогрессии и секвенции по частотам 49 и 97 см^{-1} . Частота крутильного колебания ацетофенона в основном (S_0) электронном состоянии, полученная в настоящей работе, составляет $49.2 \pm 0.4 \text{ см}^{-1}$, близка к полученной в работах [13, 18, 19] и несколько больше, чем в [29] (45 см^{-1}). Для возбужденного электронного состояния S_1 частота крутильного колебания неизвестна; полученное в настоящей работе значение составляет $96.8 \pm 0.3 \text{ см}^{-1}$. Поиск среди всех 54 волновых чисел УФ-спектра ацетофенона по программе “NONIUS” прогрессий, которые являются строками и столбцами (ТД), и секвенций – диагональных элементов этой таблицы, привел к построению надежных таблиц Деландра. В таблицах Деландра, которые строятся от 0–0-полосы и от фундаментальных частот, выполняется равенство значений частот одинаковых переходов крутильного колебания во всех строках (частоты переходов крутильного колебания в основном электронном S_0 -состоянии). В столбцах ТД также выполняется равенство уже других значений частот одинаковых переходов крутильного колебания (частоты переходов крутильного колебания в возбужденном электронном состоянии S_1).

При анализе колебательной структуры УФ-спектров поглощения паров ацетофенона было установлено, что с такими же значениями частот 0– v'' - и 0– v' -переходов крутильного колебания, как в ТД от 0–0-полосы, строятся информативные таблицы Деландра с началами, отстоящими от 0–0-полосы на величину $\Delta\omega_i$, равную -219 , $+326$, $+438$, $+728$ и $+1186 \text{ см}^{-1}$. Полосы поглощения, отстоящие от 0–0-полосы ацетофенона на эти величины в сторону уменьшения волновых чисел (-219) относятся к фундаментальным частотам этой молекулы в S_0 -состоянии, а в сторону увеличения волновых чисел к фундаментальным частотам в S_1 -состоянии (табл. 1). Для ацетофенона были построены ТД от 0–0-полосы, $v'' = 219 \text{ см}^{-1}$, $v' = 326 \text{ см}^{-1}$, $v' = 438 \text{ см}^{-1}$, $v' = 728 \text{ см}^{-1}$, $v' = 1186 \text{ см}^{-1}$ (табл. 2). (ТД) от 0–0-полосы и $v' = 326 \text{ см}^{-1}$ приведены табл. 3 и 4. Для определения значений частот 0– v -переходов крутильного колебания, гармонических частот ω_c и коэффициентов ангармоничности x_{11} этого колебания в обоих электронных состояниях применялась разработанная нами программа v_{00} . Значения частот одинаковых переходов 0– v'' крутильного колебания, гармонических частот ω_c и коэффициентов ангармоничности x_{11} этого колебания в основном (S_0) электронном состоянии, полученные из таб-

Таблица 3. Таблица Деландра от 0–0-полосы ацетофенона

ν'	ν''						
	0	1	2	3	4	5	6
0	16	15	14	12	9	7	4
1	19	17					10
2	23	21					

Примечание. Номера полос поглощения в табл. 3, 4 соответствуют их номерам в табл. 2.

Таблица 4. Таблица Деландра от $\nu' = 326 \text{ см}^{-1}$ ацетофенона

ν'	ν''						
	0	1	2	3	4	5	6
0	30	27	24	22	20	18	
1	34	32					
2	39	36					

лиц Деландра от 0–0-полосы, $\nu'' = 219 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 326 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 438 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 728 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 1186 \text{ см}^{-1}$ находятся в хорошем согласии (табл. 5). В трех таблицах Деландра: от 0–0-полосы, $\nu' = 438 \text{ см}^{-1}$ и $\nu' = 728 \text{ см}^{-1}$ близкие значения частот 0– ν'' -переходов крутильного колебания в основном (S_0)

электронном состоянии наблюдаются до высокого значения колебательного квантового числа $\nu = 6$ (табл. 5). Многократность повторения значений частот одинаковых 0– ν'' -переходов крутильного колебания как внутри одной таблицы Деландра, так и в нескольких ТД обеспечивает надежность определения их значений 0– ν'' в S_0 -состоянии. Значения частот одинаковых 0– ν' -переходов крутильного колебания, гармонических частот ω_e и коэффициентов ангармоничности x_{11} этого колебания в возбужденном (S_1) электронном состоянии, полученные из шести таблиц Деландра: от 0–0-полосы, $\nu'' = 219 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 326 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 438 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 728 \text{ см}^{-1}$, $\nu' = 1186 \text{ см}^{-1}$, находятся в хорошем согласии до колебательного квантового числа $\nu = 2$ (табл. 6). Многократность повторения значений частот одинаковых переходов в нескольких ТД до $\nu = 2$ также обеспечивает надежность их определения в S_1 -состоянии.

Информативность колебательной структуры полос $n-\pi^*$ -перехода УФ-спектра поглощения паров ацетофенона, полученного нами впервые, позволила определить 0–0-переход молекулы и фундаментальные частоты не только в S_0 -, но и в S_1 -состоянии. Вследствие высокой заселенности уровней энергии крутильного колебания исследуемой молекулы удалось построить таблицы Деландра, из которых определены значения частот 0– ν -переходов крутильного колебания в элек-

Таблица 5. Частоты переходов крутильного колебания и значения ω_e , x_{11} для ацетофенона в основном (S_0) электронном состоянии, полученные из нескольких таблиц Деландра УФ-спектра (см^{-1})

0– ν'' переход	ν_{00}	$\nu'' = 219$	$\nu' = 326$	$\nu' = 438$	$\nu' = 728$	$\nu' = 1186$	Средние значения
0–1	49.3	49.2	49.0	49.6	49.1	49.2	49.2 ± 0.4
0–2	97.6	97.2	97.4	98.0	96.8	97.4	97.4 ± 0.6
0–3	144.9	144.0	144.3	145.2	144.3	144.6	144.6 ± 0.6
0–4	191.2	189.6	190.0	191.2	190.4	190.8	190.5 ± 0.9
0–5	236.5	234.5	234.8	235.4	235.5		235.3 ± 1.2
0–6	280.8			279.6	279.6		280.0 ± 0.8
ω_e	50.3	50.4	50.5	50.8	50.1	50.2	50.4 ± 0.4
$-x_{11}$	0.5	0.6	0.6	0.6	0.5	0.5	0.6 ± 0.1

Таблица 6. Частоты переходов крутильного колебания и значения ω_e , x_{11} для ацетофенона в возбужденном (S_1) электронном состоянии, полученные из нескольких таблиц Деландра УФ-спектра (см^{-1})

0– ν' переход	ν_{00}	$\nu'' = 219$	$\nu' = 326$	$\nu' = 438$	$\nu' = 728$	$\nu' = 1186$	Средние значения
0–1	97.0	96.8	96.7	96.5	96.6	97.1	96.8 ± 0.3
0–2	191.6	191.2	191.4	190.6	191.0	192.0	191.3 ± 0.7
ω_e	99.4	99.2	98.7	98.9	98.8	99.3	99.1 ± 0.4
$-x_{11}$	1.2	1.2	1.0	1.2	1.1	1.1	1.1 ± 0.1

тронных S_0 - и S_1 -состояниях до высокого колебательного числа в S_0 -состоянии. Многократность повторения значений частот одинаковых $0-v$ -переходов крутильного колебания как внутри одной таблицы Деландра, так и в нескольких ТД обеспечивает надежность определения их значений в обоих электронных состояниях. Такая надежность в значениях $0-v$ -переходов крутильного колебания обеспечивает в дальнейшем точное построение ПФВВ и определение барьеров внутреннего вращения в обоих электронных состояниях молекулы ацетофенона.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Hollas J.M., Gregorek E., Goodman L. // J. Chem. Phys. 1968. V. 49. № 4. P. 1745.
<https://doi.org/10.1063/1.1670302>
- Глебова Л.А., Марголин Л.Н., Пентин Ю.А., Тюлин В.И. // Журн. структур. химии. 1976. Т. 17. № 4. С. 703.
<https://doi.org/10.1007/BF00753447>
- Глебова Л.А., Абраменков А.В., Марголин Л.Н. и др. // Там же. 1979. Т. 20. № 6. С. 1030.
<https://doi.org/10.1007/BF00753193>
- Durig J.R., Church J.S., Compton D.A.C. // J. Chem. Phys. 1979. V. 71. № 3. P. 1175.
<https://doi.org/10.1063/1.438463>
- Глебова Л.А., Пентин Ю.А., Тюлин В.И. // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 1980. Т. 21. № 1. С. 22.
- Balfour W. // J. Mol. Spectr. 1980. V. 84. № 1. P. 60.
[https://doi.org/10.1016/0022-2852\(80\)90238-6](https://doi.org/10.1016/0022-2852(80)90238-6)
- Durig J.R., Berry R.J., Groner P. // J. Chem. Phys. 1987. V. 87. P. 6303.
<https://doi.org/10.1063/1.453460>
- Durig J.R., Li Y., Jin Y. // Mol. Phys. 1997. V. 91. P. 421.
<https://doi.org/10.1080/002689797171319>
- Королева Л.А., Тюлин В.И., Матвеев В.К., Пентин Ю.А. // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 2000. Т. 41. № 1. С. 16
- Koroleva L.A., Tyulin V.I., Matveev V.K., Pentin Yu.A. // Spectrochimica Acta A.: Mol. and Biomol., Spectros. 2014. V. 122. P. 609.
<https://doi.org/10.1016/j.saa.2013.11.038>
- Koroleva L.A., Abramenkov A.V., Krasnoshchekov S.V. et al. // J. Mol. Struct. 2019. V. 1181. P. 228.
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.12.065>
- Королева Л.А., Матвеев В.К., Королева А.В., Пентин Ю.А. // Журн. физ. химии. 2018. Т. 92. № 3. С. 415.
<https://doi.org/10.7868/S0044453718030111>
- Onda M., Kohama Y., Suga K., Yamaguchi I. // J. Mol. Struct. 1998. V. 442. P. 19.
[https://doi.org/10.1016/S0022-2860\(97\)00067-7](https://doi.org/10.1016/S0022-2860(97)00067-7)
- Lei J., Zhang J., Feng G. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2019. V. 21. P. 22888.
<https://doi.org/10.1039/c9cp03904j>
- Gambi A., Giorgianni S., Passerini A. et al. // Spectrochimica. Acta A. 1980. V. 36. P. 871.
[https://doi.org/10.1016/0584-8539\(80\)80036-5](https://doi.org/10.1016/0584-8539(80)80036-5)
- Green J.H.S., Harrison D.J. // Ibid. 1977. V. 33. P. 583.
[https://doi.org/10.1016/0584-8539\(77\)80051-2](https://doi.org/10.1016/0584-8539(77)80051-2)
- Mboss W.D., Zundel G. // Ibid. 1970. V. 26A. P. 1097.
[https://doi.org/10.1016/0584-8539\(70\)80013-7](https://doi.org/10.1016/0584-8539(70)80013-7)
- Miller F., Fateley W.G., Witkowski R.E. // Ibid. 1967. V. 23A. P. 891.
[https://doi.org/10.1016/0584-8539\(67\)80016-3](https://doi.org/10.1016/0584-8539(67)80016-3)
- Durig J.R., Bist H.D., Furic K. et al. // J. Mol. Struct. 1985. V. 129. № 1–2. P. 45.
[https://doi.org/10.1016/0022-2860\(85\)80191-5](https://doi.org/10.1016/0022-2860(85)80191-5)
- Sett P., Chattopadhyay S., Mallick P.K. // J. Raman Spect. 2000. V. 31. P. 177.
[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-4555\(200003\)31:3<177::AID-JRS509>3.0.CO;2-K](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4555(200003)31:3<177::AID-JRS509>3.0.CO;2-K)
- Tememee N.M.A.L. // J. Kerbala University. 2013. V. 11. № 3. Scientific. P. 315.
- Imanishy B.S., Semba K., Ito M., Anno T. // Jap. Bull.Ch.Soc. Jap. 1952. V. 25. № 3. P. 150.
- Vanselow R.D., Duncan A.B.F. // J. Am. Chem. Soc. 1953. V. 75. № 4. P. 829.
<https://doi.org/10.1021/ja01100a020>
- Vapat R.N. // Indian J. Phys. 1957. V. 32. № 5. P. 30.
- Глебова Л.А., Пентин Ю.А., Тюлин В.И. // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 1980. Т. 21. № 2. С. 125.
- Королева Л.А., Тюлин В.И., Матвеев В.К., Пентин Ю.А. // Там же. 1999. Т. 40. № 1. С. 9.
- Herzberg G. Electronic Spectra and Structure of Polyatomic Molecules. М.: Mir, 1969.
- Kamei S., Okuyami K., Abe H. et al. // J. Phys. Chem. 1986. V. 90. P. 93.
<https://doi.org/10.1021/j100273a022>
- Tomer J.L., Spangler L.H., Pratt D.W. // J. Am. Chem. Soc. 1988. V. 110. P. 1615.
<https://doi.org/10.1021/ja00213a041>
- Ohmori N., Suzuki T., Ito M. // J. Phys. Chem. 1988. V. 92. P. 1086.
<https://doi.org/10.1021/j100316a019>