Академия наук СССР Научный совет по спектроскопии

А.В.Буренин, А.Н.Вальдов, В.М.Демкин Е.Н.Карякин, А.Ф.Крупнов, С.М.Щапин

ТАБЛИЦЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ
ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР СЕРООКИСИ УГЛЕРОДА ОС**S**

Таблици линий поглощения вращательного спектра сероокиси углерода ОС\$ охвативают область частот от 10 до 1200 ГГц (область длин волн от 3 см до 0.25 мм), что соответствует наиболее интенсивной части вращательного спектра этой молекулы. Таблицы содержат частоты и интенсивности более 6000 спектральных линий, расположенных в порядке возрастания частоты, в основе расчета которых лежат микроволновые измерения примерно 700 линий. Простой и характерный вид вращательного спектра ОС\$ и вноокая точность предсказания положения линий делают его удобным инструментом при калибровке спектральной аппаратуры и спектральных измерениях. Линии, включенные в таблицы, принадлежат 65 наиболее распространенным спектроскопическим разновидностям ОС\$ (т.е. различным колебательным состояниям различных изотопических комбинаций молекулы) при температуре 293 к и естественной концентрации изотопов.

Информация о каждой отдельной спектральной линии содержится в отдельной строке таблиц. Каждая строка разбита на шесть столбцов. Например,

1 2 3 4 5 6
32I 382.6607(74) I.89E-05 26-27 02/21 /0 I6 I2 34 II79.0
I столбец - частота линий в МПц. В скобках указана средне-

квадратичная погрешность в единицах последних приведенных цифр в значении частоты

32І 382.6607(74) \equiv 32І 382.6607 \pm 0.0074 МГц 2 столбец — коэффициент поглощения в максимуме линии в см $^{-1}$ при температуре 293°К и естественной концентрации изотопов.

Точность расчета интенсивности порядка 10%. Знак "Е" соответ-

 $I.89E-05 \equiv I.89 \text{ } 10^{-5} \text{ } \text{ } \text{cm}^{-1}$

3 столбец - квантовие числа полного момента количества движения, характеризующие начальное и конечное состояния молекулы

4 столбец - колебательное состояние молекули, записанное в стандартной для трехатомной молекулы форме ($V_1 V_2^{|e|\tau} V_3$) 02/2 $\mathbb D$ /0 \equiv 02^{2d} 0

$$02/2$$
 $1)$ $0 = 02^{2}$ 0

5 столбец - изотопическая комбинация молекулы. Первое, второе и третье числа указывают массовые числа изотопов кислорода, углерода и серы соответственно

$$16 \ 12 \ 34 \equiv \cdot ^{16}0^{12}c^{34}s$$

6 столбец - энергия нижнего уровня данного перехода, отсчитанная от основного состояния молекулы, в cm^{-1}

II78.0
$$\equiv$$
 I I78.0 cm^{-I}

Все молекулярные константы ОС\$, использованные для составления данных таблиц, приведены в Приложении.

	1	2	3	4	5	6
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	1 119 9391(47) 1 377 2955(62) 1 409 7103(15) 1 445 8364(78) 1 599 3844(43) 1 767 3375(32) 1 823 4613(21) 1 830 2924(18) 1 865 6640(16)	5 15E-10 2 04E-10 1 26E-08 7 85E-11 8 9E-10 2 52E-09 3 37E-09 4 77E-09 3 09E-07 1 84E-09	0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1	99/9 /9 19/9 /9 99/9 /9 92/9 /9 99/9 /9 99/9 /9 19/9 /9 99/9 /9	18 12 34 18 12 32 18 12 32 18 12 32 16 12 36 17 12 32 16 13 34 16 12 34 16 12 34	0 0 638 1 0 0 1035 9 0 0 0 0 847 8 0 0 1045 1
1 1 1	1 974 0153(44) 2 009 8272(15)	6 21E-10 8 53E-10 5 70E-08 3 38E-10 1 23E-09 1 66E-09 2 95E-10 8 22E-08 1 10E-07 5 63E-10	0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1 0-1	00/0 /0 10/0 /0 00/0 /0 02/0 /0 10/0 /0 20/0 /0 00/0 /0 10/0 /0 02/0 /0	16 13 33 16 12 33 16 12 33 16 12 33 16 13 32 16 13 32 16 12 32 16 13 32 16 13 32 16 13 32	0 0 853 7 0 0 1046 1 854 5 1710 6 2062 0 0 0 859 0 1016 5
1 1 1 2 2 2 2 2	2 162 9798(2) 2 168 7741(67) 2 200 3773(7) 2 229 539(18) 2 239 8523(94) 22 754 563(12) 22 819 3935(31) 22 848 6214(44) 22 871 2294(80) 22 891 649(15)	7 52E-06 6 93E-10 4 43E-08 2 46E-10 4 11E-09 1 63E-09 1 01E-07 8 06E-09 8 08E-09 6 27E-10	0-1 0-1 0-1 0-1 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2	00/0 /0 12/0 /0 02/0 /0 04/0 /0 00/0 /0 10/0 /0 01/1C/0 01/1D/0	16 12 32 16 12 32 16 12 32 16 12 32 18 12 34 18 12 32 18 12 32 18 12 32 18 12 32 18 12 32	0 0 1892 1 1047 0 2106 1 0 4 838 5 0 4 515 1 515 1 1036 3
	23 198 7402(85) 23 227 488(82) 23 534 6460(63) 23 564 032(32) 23 588 160(34) 23 666 8929(42) 23 660 5544(36) 23 673 451(20) 23 694 551(13) 23 698 283(17)	7 10E-09 5 58E-10 2 02E-08 1 59E-09 1 60E-09 2 69E-08 3 81E-08 2 27E-09 3 08E-09 2 28E-09	1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2	00/0 /0 01/1C/0 00/0 /0 01/1C/0 01/1D/0 00/0 /0 10/0 /0 01/1C/0 11/1C/0 01/1D/0	16 12 36 16 12 36 17 12 32 17 12 32 17 12 32 16 13 34 16 12 34 16 12 34 16 13 34	0 4 519 1 70 4 517 7 517 7 0 4 848 2 504 2 1361 3 504 2
	23 720 537(12) 23 731 2981(32) 23 760 4821(30) 23 784 7566(30) 23 804 9993(47) 23 814 763(77) 23 862,173(32) 23 938 227(10) 23 947 9994(88) 24 019 6239(31)	3 09E-09 2 47E-06 1 93E-07 1 94E-07 1 47E-09 1 12E-09 4 96E-09 4 55E-07	1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2 1-2	11/1D/0 00/0 /0 01/1C/0 01/1D/0 02/0 /0 03/1C/0 03/1D/0 00/0 /0 10/0 /0	16 12 34 16 12 33 16 12 33	1361 3 0 4 519 8 519 8 1045 5 1570 8 1570 8 0 4 854 1

ПРИЛОЖЕНИЕ

В основе таблиц лежат микроволновые измерения частот примерно 700 линий электродипольных переходов вращательного спектра молекулы остальные измерены авторами в субмиллиметровой области с относительной точностью 10^{-8} + 10^{-7} . Данные для каждой спектроскомической разновидности молекулы обрабатывались авторами в рам-ках модели [2]

$$E_{R} = B_{sop} \left[\Im(\Im + 1) - \ell^{2} \right] - \mathcal{D}_{sop} \left[\Im(\Im + 1) - \ell^{2} \right]^{2} + H_{sop} \left[\Im(\Im + 1) - \ell^{2} \right]^{3}$$

При этом решение обратной задачи (поиск вращательной константы $\mathtt{B}_{\mathtt{a}\check{\mathtt{m}}}$ и центробежных констант $igcap_{\mathtt{a}\check{\mathtt{m}}}$ и $\mathtt{H}_{\mathtt{a}\check{\mathtt{m}}}$, их среднеквадратичных погрешностей $\mathfrak{G}_{\mathtt{R}}$, $\mathfrak{G}_{\mathtt{D}}$, $\mathfrak{G}_{\mathtt{H}}$ и коэффициентов корреляции $K_{\mathtt{BD}}$, Кан , Кон) и прямой задачи (расчет частот поглощения электродипольных переходов и их среднеквадратичных погрешностей в области 10 - 1200 ГГц) проведено согласно алгоритму, изложенному в [3]. Интенсивности линий поглощения рассчитывались при температуре 293°К и естественной концентрации изотопов в приолижении лоренцевской столкновительной формы линии. Для полуширин всех линий использовалось одно значение параметра самоуширения $\Lambda \gamma =$ = 5.65 МГц/Торр. Именно этот параметр определяет точность расчета интенсивностей, равную примерно 10%. Данные о распространенности изотопов в природе взяти из [4]. Значения величини дипольного момента взяты из работы [1] . Значения гармонических частот W; и колебательных уровней энергии взяти из работи [5] Отсутствующие значения этих констант в необходимых случаях рас-СЧИТЫВАЛИСЬ.

1 197 284 (10)

3 28E-09 104-105 02/0 /0 18 12 32

Мелекулярные постоянные сероокиси углереда.

 $16_0 12_0 32_5$ $\omega_i = 875.7 \text{cm}^{-1}$, $\omega_2 = 523.62 \text{cm}^{-1}$, $\omega_3 = 2092.46 \text{cm}^{-1}$ $\mu \ (00^{9}0) = 0.71519(3)$ medañ, $\mu \ (01^{1}0) = 0.70433(3)$ medañ

_т	
	$K_{BD} = 0.8670$ $K_{BH} = 0.8150$ $K_{DH} = 0.9850$
$E_{V} = 520.41 \text{ cm}^{-1}$ $b_{B} = 3.719 \cdot 10^{-4} \text{MTr}$ $b_{D} = 3.749 \cdot 10^{-4} \text{KTr}$ $b_{H} = 1.108 \cdot 10^{-4} \text{ Tr}$	$K_{BD} = 0.9720$ $K_{BH} = 0.9320$ $K_{DH} = 0.9890$
$E_{V} = 520.41 \text{ cm}^{-1}$ $\theta_{B} = 3.715 \cdot 10^{-4} \text{MCH}$ $\theta_{D} = 3.720 \cdot 10^{-4} \text{KCH}$ $\theta_{H} = 1.094 \cdot 10^{-4} \text{ CH}$	$K_{BD} = 0.9747$ $K_{BH} = 0.9382$ $K_{DH} = 0.9896$
6 _B = 3.814·10 - мин 6 _D = 3.775·10-4КГн 6 _E = 1.106·10-4 Гн	$K_{BH} = 0.9720$ $K_{BH} = 0.9330$ $K_{DH} = 0.989I$
$\theta_{\rm H} = 3.786 \cdot 10^{-4} \text{MHz}$ $\theta_{\rm H} = 3.774 \cdot 10^{-4} \text{KTz}$ $\theta_{\rm H} = 1.107 \cdot 10^{-4} \text{Tz}$	$K_{BD} = 0.9750$ $K_{BH} = 0.9390$ $K_{DH} = 0.9899$
	$K_{BD} = 0.9750$ $K_{BH} = 0.9390$ $K_{DH} = 0.9899$
	D = 1.036 10 MM b = 1.535 · 10 ⁻⁵ Γπ E v = 520.41 cm ⁻¹ b = 3.719 · 10 ⁻⁴ Mm b = 3.749 · 10 ⁻⁴ Mm b = 1.108 · 10 ⁻⁴ Γπ E v = 520.41 cm ⁻¹ b = 3.715 · 10 ⁻⁴ Mm b = 3.720 · 10 ⁻⁴ Km b = 3.720 · 10 ⁻⁴ Km b = 1.094 · 10 ⁻⁴ Γπ E v = 1047 · 03 cm ⁻¹ b = 3.814 · 10 ⁻⁴ Mm b = 3.775 · 10 ⁻⁴ Km c = 1.106 · 10 ⁻⁴ Γπ E v = 859.04 cm ⁻¹ b = 3.786 · 10 ⁻⁴ Mm b = 3.786 · 10 ⁻⁴ Mm c = 1.107 · 10 ⁻⁴ Fπ E v = 1040.91 cm ⁻¹ b = 3.755 · 10 ⁻⁴ Km c = 3.759 · 10 ⁻⁴ Km

02 ^{2d} 0 В _{эф} = 6I02.560 28 МГц Оэф= I.344 7070 КГц Н _{эф} = 2.779 6I·IO ⁻⁴ Гц	$E_{v} = 1040.91 \text{ cm}^{-1}$ $G_{b} = 3.755 \cdot 10^{-4} \text{ MTm}$ $G_{b} = 3.759 \cdot 10^{-4} \text{ KTm}$ $G_{b} = 1.107 \cdot 10^{-4} \text{ Tm}$	$K_{80} = 0.9750$ $K_{8H} = 0.9390$ $K_{DH} = 0.9899$
II ^{Ic} 0 Β _{θΦ} = 6072.079 22 ΜΓη Ω _{θΦ} = I.355 8436 ΚΓη ·H _{θΦ} =-I.239 I7·I0 ⁻⁴ Γη	$E_V = 1372.80 \text{cm}^{-1}$ $G_B = 8.227 \cdot 10^{-4} \text{ MTH}$ $G_D = 7.953 \cdot 10^{-4} \text{ KTH}$ $G_H = 2.259 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{Bh} = 0.9920$ $K_{BH} = 0.9790$ $K_{DH} = 0.9962$
II ^{Id} 0 Β _{9Φ} = 6078.93I I5 ΜΓη η _{9Φ} = 1.367 7923 ΚΓη Η _{9Φ} = 1.688 82·10 ⁻⁴ Γη	$E_{V} = I372.80 \text{cm}^{-1}$ $6 = I.023 \cdot I0^{-3} \text{ MIH}$ $6 = 9.576 \cdot I0^{-4} \text{ KIH}$ $6 = 2.67I \cdot I0^{-4} \text{ IH}$	$K_{BH} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9820$ $K_{DH} = 0.9969$
03 ³ 0 B _{9\tilde{\Phi}} = 6112.933 13 MT\tilde{\Phi} \mathfrak{\Omega_{\tilde{\Phi}}} = 1.452 1253 KT\tilde{\Phi} H _{9\tilde{\Phi}} =-1.534 20·10 ⁻³ T\tilde{\Phi}	$E_{\nu} = 1561.60 \text{cm}^{-1}$ $6 = 8.529 \cdot 10^{-4} \text{ MTr}$ $6 = 8.303 \cdot 10^{-4} \text{ KTr}$ $6 = 2.353 \cdot 10^{-4} \text{ Tr}$	$K_{BD} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9800$ $K_{DH} = 0.9958$
03 ^{Ic} 0 В _{эф} = 6102.442 68 МГц П _{эф} = 1.231 7722 КГц	$E_{v} = 1573.62 \text{ cm}^{-1}$ $6_{0} = 2.434 \cdot 10^{-3} \text{ MTr}$ $6_{0} = 7.589 \cdot 10^{-4} \text{ KTr}$	K ₈₀ = 0.9990
03 ^{Id} 0 В _{эф} = 6114.839 91 МГц Ф _{эф} = 1.245 5384 КГц Н _{эф} =-1.122 48·10 ⁻³ Гц	$E_{y} = 1573.62 \text{ cm}^{-1}$ $G_{B} = 1.274 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $G_{D} = 1.183 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $G_{H} = 3.284 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BH} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9840$ $K_{OH} = 0.997I$
20^{0} 0 $B_{9\tilde{\Phi}} = 6044.878$ 15 MTH $\eta_{9\tilde{\Phi}} = 1.361$ 7711 KTH $\eta_{9\tilde{\Phi}} = 7.638$ $33 \cdot 10^{-4}$ TH	$E_{v} = 1710.60 \text{ cm}^{-1}$ $G_{B} = 2.017 \cdot 10^{-3} \text{ MTr}_{L}$ $G_{D} = 1.950 \cdot 10^{-3} \text{ KTr}_{L}$ $G_{H} = 5.454 \cdot 10^{-4} \text{ Tr}_{L}$	$K_{80} = 0.9950$ $K_{8H} = 0.9870$ $K_{0H} = 0.9977$
I2 ⁰ 0 В _{эф} = 6084.389 22 МГц Фэф= 1.081 8329 КГц Н _{эф} = 2.528 01·10 ⁻³ Гц	$E_{v} = 1892.14 \text{ cm}^{-1}$ $6_{g} = 3.406 \cdot 10^{-3} \text{ MTh}$ $6_{g} = 3.135 \cdot 10^{-3} \text{ KTh}$ $6_{g} = 8.572 \cdot 10^{-4} \text{ Th}$ $- 133 -$	$K_{BN} = 0.9960$ $K_{BH} = 0.9890$ $K_{NH} = 0.9978$

i2 ^{2c} 0 Β _{9Φ} = 6087.230 I8 ΜΓη Ϳ _{3Φ} = 1.672 7I64 ΚΓη Η _{9Φ} =-2.868 79·I0 ⁻³ Γη	$E_{v} = 1886.91 \text{ cm}^{-1}$ $G_{b} = 3.359 \cdot 10^{-3} \text{ MTr}$ $G_{b} = 3.164 \cdot 10^{-3} \text{ KTr}$ $G_{m} = 8.830 \cdot 10^{-4} \text{ Tr}$	$K_{BD} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9860$ $K_{DH} = 0.9980$
12 ^{2d} 0 Β _{9Φ} = 6087.225 66 ΜΓη □ _{9Φ} = 1.385 3649 ΚΓη Η _{9Φ} =-1.346 06·10 ⁻³ Γη	$E_V = 1886.91 \text{ cm}^{-1}$ $G_b = 3.317 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $G_D = 3.050 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $G_H = 8.349 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BD} = 0.9949$ $K_{BH} = 0.9875$ $K_{DH} = 0.9979$
00^{0} I $B_{9\phi} = 6045.056 72 \text{ MTm}$ $0.3\phi = 1.320 1545 \text{ KTm}$ $0.3\phi = 1.068 70 \cdot 10^{-3} \text{ Im}$	$E_{V} = 2062.03 \text{ cm}^{-1}$ $G_{B} = 6.363 \cdot 10^{-3} \text{ MFH}$ $G_{D} = 5.828 \cdot 10^{-3} \text{ KFH}$ $G_{H} = 1.591 \cdot 10^{-3} \text{ FH}$	$K_{BD} = 0.9954$ $K_{BH} = 0.9870$ $K_{DH} = 0.9974$
04^{0} 0 $B_{3\phi} = 6114.770 67 MTH$ $3\phi = 0.556 8030 KTH$ $H_{3\phi} = -9.321 40 \cdot 10^{-3} TH$	$E_{V} = 2106.14 \text{ cm}^{-1}$ $G_{B} = 9.126 \cdot 10^{-3} \text{ MIH}$ $G_{J} = 9.150 \cdot 10^{-3} \text{ KIH}$ $G_{M} = 2.668 \cdot 10^{-3} \text{ IH}$	$K_{BD} = 0.9969$ $K_{BH} = 0.9910$ $K_{DH} = 0.9982$
04 ^{2c} 0 В _{эф} = 6II7.326 39 МГц Ј _{эф} = 1.987 6898 КГц Н _{эф} = 2.459 54 10 ⁻³ Гц	$E_V = 2100.12 \text{ cm}^{-1}$ $G_B = 6.388 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $G_D = 6.376 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $G_M = 1.913 \cdot 10^{-3} \text{ TH}$	$K_{BH} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9780$ $K_{DH} = 0.9948$
04^{2d}_{0} $B_{9\phi} = 6117.32092 MTh$ $D_{9\phi} = 1.2656569 KTh$ $H_{9\phi} = 1.03549 \cdot 10^{-3}Th$	$E_V = 2100.12 \text{ cm}^{-1}$ $G_b = 6.863 \cdot 10^{-3} \text{ MFH}$ $G_D = 6.447 \cdot 10^{-3} \cdot \text{KFH}$ $G_H = 1.834 \cdot 10^{-3} \cdot \text{FH}$	$K_{BH} = 0.9936$ $K_{BH} = 0.9820$ $K_{DH} = 0.9965$
04^{4} 0 $B_{9\phi} = 6123.204 67 MTH 1_{9\phi} = 1.471 0779 KTH H_{9\phi} = 4.375 39 \cdot 10^{-5} TH$	$G_b = 2.869 \cdot 10^{-3} \text{ MIH}$ $G_b = 2.750 \cdot 10^{-3} \text{ KIH}$ $G_m = 7.806 \cdot 10^{-4} \text{ IH}$	$K_{BD} = 0.9920$ $K_{BH} = 0.9800$ $K_{DH} = 0.9967$
21 ^{Ic} ₀ B _{aφ} = 6054.872 23 ΜΓη D _{aφ} = 1.391 9559 ΚΓη	$E_{V} = 2218.25 \text{ cm}^{-1}$ $G_{B} = 7.908 \cdot 10^{-3} \text{ MTm}$ $G_{D} = 4.547 \cdot 10^{-3} \text{ KTm}$ $- 134 -$	K _{BD} = 0.9900

	$\mu = 863.896$ $\mu = 863.896$ $\mu = 863.896$ $\mu = 0.71541(3)$ $00^{0}0$	ω_{2}^{-1} , $\omega_{2}^{0} = 522.83 \text{cm}^{-1}$, $\omega_{3}^{0} = 522.83 \text{cm}^{-1}$, $\omega_{4}^{0} = 0.72 \text{cm}^{-1}$	$\omega_{_{\! 3}}^{}=2091.77$ см $^{-1}$
	В _{эф} = 5932.834 47 МГп О _{эф} = 1.242 1288 КГп Н _{эф} = 6.705 91·10 ⁻⁵ Гп	$E_{V} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $\theta_{B} = 8.102 \cdot 10^{-4} \text{ MFH}$ $\theta_{C} = 7.191 \cdot 10^{-4} \text{ KFH}$ $\theta_{H} = 1.906 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	$K_{BH} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9830$ $K_{OH} = 0.9967$
	01 ^{Ic} 0 В _{эф} = 5940.128 09 МГц Ф _{эф} = 1.260 2071 КГц Н _{эф} = 4.358 33·10 ⁻⁵ Гц	$E_{V} = 519.58 \text{ cm}^{-1}$ $\theta_{B} = 7.684 \cdot 10^{-4} \text{ MFH}$ $\theta_{Q} = 6.980 \cdot 10^{-4} \text{ KFH}$ $\theta_{H} = 1.876 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	$K_{B\Phi} = 0.9929$ $K_{BH} = 0.9800$ $K_{\Phi H} = 0.996I$
4662	01 ^{Id} 0 В _{эф} = 5946.196 73 МГц О _{эф} = 1.263 9661 КГц Н _{эф} = 3.470 13·10 ⁻⁵ Гц	$E_{V} = 519.58 \text{ cm}^{-1}$ $6_{B} = 7.684 \cdot 10^{-4} \text{ MFH}$ $6_{C} = 6.980 \cdot 10^{-4} \text{ KFH}$ $6_{H} = 1.876 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	$K_{BD} = 0.9929$ $K_{BH} = 0.9800$ $K_{DH} = 0.996I$
	10 [©] 0 В _{ЭФ} = 5915.148 71 МГц Ф _{ЭФ} = 1.264 8950 КГц Н _{ЭФ} =-2.388 70·10 ⁻⁴ Гц	$E_V = 847.84 \text{ cm}^{-1}$ $b_B = 9.076 \cdot 10^{-4} \text{ MFH}$ $b_D = 8.237 \cdot 10^{-4} \text{ KFH}$ $b_H = 2.212 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	K _{BO} = 0.9929 K _{BH} = 0.9800 K _{OH} = 0.996I
	02 ⁰ 0 В _{эф} = 5951.258 I7 МГц Ф _{эф} = 1.042 8475 КГц Н _{эф} = 1.542 7I·IO ⁻³ Гц	$E_V = 1045.13 \text{ cm}^{-1}$ $\phi_8 = 1.188 \cdot 10^{-3} \text{ MUT}$ $\phi_0 = 1.074 \cdot 10^{-3} \text{ KUT}$ $\phi_H = 2.880 \cdot 10^{-4} \text{ TT}$	$K_{BO} = 0.9919$ $K_{BH} = 0.9780$ $K_{OH} = 0.9959$
	02 ^{2c} 0 В _{эф} = 5953.389 99 МГц О _{эф} = 1.506 4145 КГц Н _{эф} =-1.291 60·10 ⁻³ Гц	$E_{V} = 1039.36 \text{ cm}^{-1}$ $\phi_{B} = 1.188 \cdot 10^{-3} \text{ MFH}$ $\phi_{CD} = 1.078 \cdot 10^{-3} \text{ KFH}$ $\phi_{H} = 2.900 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	$K_{BQ} = 0.9919$ $K_{BH} = 0.9780$ $K_{QH} = 0.9959$
	022d ₀ B _{3∯} = 5953.389 49 MΓπ O _{3∯} = I.28I 9992 KΓπ H _{3∯} = I.035 85·I0 ⁻⁴ Γπ	$E_V = 1039. 36 \text{ cm}^{-1}$ $6_B = 1.188 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $6_C = 1.078 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $6_H = 2.900 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BO} = 0.9919$ $K_{BH} = 0.9780$ $K_{OH} = 0.9959$

II ^{Ic} 0 B _{θΦ} = 5923.645 4I ΜΓη Ω _{θΦ} = 1.296 4984 ΚΓη H _{θΦ} = I.539 II·IO ⁻³ Γη	$E_{v} = 1361.14 \text{ cm}^{-1}$ $\theta_{s} = 3.378 \cdot 10^{-3} \text{ MPr}_{t}$ $\theta_{s} = 3.029 \cdot 10^{-3} \text{ KTr}_{t}$ $\theta_{s} = 8.025 \cdot 10^{-4} \text{ Tr}_{t}$	$K_{DD} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9810$ $K_{OH} = 0.9963$
II ^{Id} ₀ B _{ΘΦ} = 5930.142 08 MΓη D _{ΘΦ} = 1.303 8167 KΓη H _{ΘΦ} = 9.850 60·10 ⁻⁴ Γη	$E_v = 1361.14 \text{ cm}^{-1}$ $G_b = 3.245 \cdot 10^{-3} \text{ MTh}$ $G_b = 2.942 \cdot 10^{-3} \text{ KTh}$ $G_b = 7.834 \cdot 10^{-4} \text{ Th}$	$K_{\text{SM}} = 0.9930$ $K_{\text{SH}} = 0.9820$ $K_{\text{OH}} = 0.9965$
03 ³ 0 B _{9∯} = 5963.518 48 MTn Q _{9∯} = 1.394 3467 KTn H _{9∯} = 1.161 92·10 ⁻³ In	$E_v = 1559.28 \text{ cm}^{-1}$ $6_b = 7.752 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $6_0 = 6.732 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $6_H = 1.733 \cdot 10^{-3} \text{ TH}$	$K_{BH} = 0.9960$ $K_{BH} = 0.9890$ $K_{OH} = 0.9978$
03 ^{Ic} 0 Β _{9Φ} = 5953.697 95 ΜΓτ η _{9Φ} = 1.180 5129 ΚΤτ	$E_v = 1570.65 \text{ cm}^{-1}$ $g_8 = 1.953 \cdot 10^{-2} \text{ MTH}$ $g_9 = 1.012 \cdot 10^{-2} \text{ KTH}$	K ₉₀ = 0.9987
03 ^{Id} 0 В _{эф} = 5965.550 38 МГц Д _{эф} = I.I9I 7697 КГц	$E_v = 1570.65 \text{ cm}^{-1}$ $\theta_b = 8.056 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $\theta_b = 4.369 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$	$K_{80} = 0.9940$

 $160^{13}0^{32}$ s , $w_4 = 871.15 \text{ cm}^{-1}$, $w_2 = 508.03 \text{ cm}^{-1}$, $w_3 = 2037.45 \text{ cm}^{-1}$, μ (00°0)= 0.71531(3) geomatically μ (01¹0)= 0.70480(3) geomatically

00°0 Β _{θΦ} = 606I.924 79 ΜΓη η _{θΦ} = 1.298 9II9 ΚΓη Η _{θΦ} = 2.646 66 IO ⁻⁴ Γη	$E_{v} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $G_{b} = 3.337 \cdot 10^{-4} \text{ MTH}$ $G_{b} = 3.375 \cdot 10^{-4} \text{ KTH}$ $G_{H} = 1.003 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BH} = 0.9690$ $K_{BH} = 0.9260$ $K_{DH} = 0.9880$
0Ι ^{Ic} 0 Β _{3Φ} = 6068.657 70 ΜΓη Ω _{3Φ} = I.3I5 4675 ΚΓη Η _{3Φ} =-I.IO3 ΟΙ ΙΟ ⁻⁴ Γη	$E_v = 504.96 \text{ cm}^{-1}$ $G_b = 8.234 \cdot 10^{-4} \text{ MFH}$ $G_b = 7.960 \cdot 10^{-4} \text{ KFH}$ $G_H = 2.261 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$ $- 136 -$	$K_{BM} = 0.9920$ $K_{BH} = 0.9790$ $K_{NH} = 0.9962$

	0Ι ^{Id} 0 Β _{ΘΦ} = 6075.165 73 ΜΓη] _{ΘΦ} = 1.320 002Ι ΚΓη Η _{ΘΦ} =-8.443 82·10 ⁻⁵ Γη	$E_{v} = 504.96 \text{ or}$ $6_{b} = 8.001 \cdot 10^{-6}$ $6_{b} = 7.738 \cdot 10^{-6}$ $6_{H} = 2.200 \cdot 10^{-6}$	KIT	K _{BM} = 0.9918 K _{BM} = 0.9780 K _{BM} = 0.9959
	02 [©] 0 В _{эф} = 6079.243 I6 МГц В _{эф} = 1.086 77I2 КГц Н _{эф} = 3.254 94·I0 ⁻³ Гц	$E_{v} = 1016.45 \text{ (b)}$ $6 = 2.972 \cdot 10^{-1}$ $6 = 2.657 \cdot 10^{-1}$ $6 = 7.169 \cdot 10^{-1}$	мін 3 кгн 4 гн	K _{BM} = 0.9860 K _{BM} = 0.9630 K _{DM} = 0.9930
4662	10 [©] 0 Β _{9Φ} = 6043.941 33 ΜΓη] _{9Φ} = 1.332 2608 ΚΓη Η _{9Φ} = 8.575 84·10 ⁻⁴ Γη	$E_{v} = 854.48 \text{ cm}$ $G_{b} = 1.756 \cdot 10^{-5}$ $G_{b} = 1.655 \cdot 10^{-5}$ $G_{b} = 4.597 \cdot 10^{-5}$	міц 3 кгц 4 гц	$K_{BD} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9810$ $K_{DH} = 0.9963$
	II ^{Ic} 0 В _{эф} = 6052.075 99 МГц] _{эф} = 1.360 7438 КГц	$E_{v} = 1352.70$ $6 = 9.833 \text{ IO}$ $6 = 5.350 \text{ IO}$	3 KI'H	K _{BD} = 0.9869
	II ^{Id} O В _{эф} = 6059.142 ОІ МГц Д _{эф} = 1.371 7554 КГц	$E_{v} = 1352.70$ $6_{b} = 9.833 \cdot 10^{-1}$ $6_{b} = 5.350 \cdot 10^{-1}$	MIT	$K_{BD} = 0.9869$
	16 ₀ 12 ₀ 33 (00 ⁶ 0)=0.71596(18	B) деба й ,	(0I ^I 0)=0	.70 44 I(7) деба і
	00 [©] 0 В ф 6004.916 15 МГц В ф 1.270 6284 КГц Н ф 2.635 64 10 ⁻⁵ Гц	$E_{V} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $G_{D} = 7.901 \cdot 10^{-1}$ $G_{D} = 7.315 \cdot 10^{-1}$ $G_{D} = 1.976 \cdot 10^{-1}$	4 KI'm	K _{BD} = 0.9940 K _{BH} = 0.9840 K _{DH} = 0.997I
	01 ^{Ic} 0 В _{эф} = 6012.265 41 МГц В _{эф} = 1.290 6349 КГц Н _{эф} = 4.213 59·10 ⁻⁴ Гц	$ \phi_{B} = I.074 \cdot I0^{-1} \phi_{B} = I.0I0 \cdot I0^{-1} \phi_{H} = 2.748 \cdot I0^{-1} $	о кіп	$K_{BH} = 0.9932$ $K_{BH} = 0.9840$ $K_{DH} = 0.9975$
		TOR		

- I37 -

0Ι ^{ΙΦ} 0 Β _{9Φ} = 60Ι8.473 67 ΜΓη Θ _{9Φ} = 1.293 0820 ΚΓη Η _{9Φ} =-1.383 ΙΦ·ΙΟ ⁻⁵ Γη		$K_{80} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9820$ $K_{OH} = 0.9968$
10°0 Β _{θΦ} = 5987.010 22 ΜΓη Φ _{θΦ} = 1.297 1162 ΚΓη Η _{θΦ} = 3.448 23·10 ⁻⁴ Γη		$K_{BO} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9840$ $K_{OH} = 0.9969$
02 ⁰ 0 B _{θΦ} = 6023.478 54 ΜΓη Φ _{θΦ} = 1.070 9803 ΚΓη H _{θΦ} = 2.433 55·10 ⁻³ Γη	$ b_{B} = 4.704 \cdot 10^{-3} \text{ MTH} $ $ b_{D} = 4.393 \cdot 10^{-3} \text{ KIH} $ $ b_{H} = 1.213 \cdot 10^{-3} \text{ IH} $	$K_{80} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9840$ $K_{OH} = 0.9970$
$02^{2c}0$ $B_{3\phi} = 6025.733 93 MTH$ $0_{3\phi} = 1.551 2017 KTH$ $H_{3\phi} = 2.053 94 \cdot 10^{-3} TH$	$b_{B} = 4.831 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $b_{Q} = 4.495 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $b_{H} = 1.239 \cdot 10^{-3} \text{ TH}$	$K_{BO} = 0.9950$ $K_{BH} = 0.9860$ $K_{OH} = 0.9972$
$02^{2d}0$ $B_{9\phi} = 6025.723 63 MTH$ $D_{9\phi} = 1.315 7110 KTH$ $D_{\phi} = 1.359 06 \cdot 10^{-3} TH$	$b_{B} = 4.364 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $b_{D} = 4.128 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $b_{H} = 1.148 \cdot 10^{-3} \text{ TH}$	$K_{BD} = 0.9950$ $K_{BH} = 0.9850$ $K_{OH} = 0.9968$
$^{18}0^{12}0^{32}$ \$, $W_{i} = 854.13$ $\mu (00^{0}0) = 0.714500$	(4) дебай, μ (01 ¹ 0)=0.	ω ₃ =2055.86 см ^{-I} 70367(4) дебай
$00^{\circ}0$ $B_{9\tilde{\Phi}} = 5704.857 \ 44 \ \text{MTH}$ $0_{9\tilde{\Phi}} = 1.133 \ 1884 \ \text{KTH}$ $H_{9\tilde{\Phi}} = 5.167 \ 54 \cdot 10^{-5} \ \text{TH}$	$E_{V} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $b_{B} = 7.802 \cdot 10^{-4} \text{ MTH}$ $b_{D} = 6.418 \cdot 10^{-4} \text{ KTH}$ $b_{H} = 1.563 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BO} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9810$ $K_{OH} = 0.9964$
0Ι ^{Ic} 0 Β _{aφ} = 57Ι2.Ι62 26 ΜΓη Φ _{aφ} = Ι.Ι50 889Ι ΚΓη Η _{aφ} = 4.588 7Ι·ΙΟ ⁻⁴ Γη	$E_{V} = 514.91 \text{ cm}^{-1}$ $\theta_{B} = 1.122 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $\theta_{Q} = 9.705 \cdot 10^{-4} \text{ KTH}$ $\theta_{H} = 2.435 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$ $- 138 -$	$K_{B\Phi} = 0.9860$ $K_{BH} = 0.9650$ $K_{\Phi H} = 0.9932$

	$0I^{\text{Id}}0$ $B_{9\phi} = 5717.814\ 26\ \text{MTh}$ $D_{9\phi} = 1.153\ 5498\ \text{KTh}$ $H_{9\phi} = 2.222\ 03\cdot 10^{-4}\ \text{Th}$	$E_v = 514.91 \text{ cm}^{-1}$ $6_0 = 2.023 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $6_0 = 1.670 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $6_0 = 4.055 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BD} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9840$ $K_{DH} = 0.9970$
	$10^{\circ}0$ $B_{9\check{\phi}^{=}}$ 5688.650 04 MT η $D_{9\check{\phi}^{=}}$ 1.152 9056 KT η	$E_{v} = 838.14 \text{ cm}^{-1}$ $6_{B} = 3.132 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $6_{D} = 1.628 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$	K _{BD} = 0.9480
8	02°0 Β _{9Φ} = 5722.920 I6 ΜΓη D _{9Φ} = 0.978 025I ΚΓη	$E_{v} = 1035.89 \text{ cm}^{-1}$ $6_{B} = 3.909 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $6_{D} = 2.297 \cdot 10^{-3} \cdot \text{KTH}$	K _{BD} = 0.8470
	$02^{2c}0$ $B_{9\tilde{\Phi}} = 5725.029 5I MTH$ $D_{9\tilde{\Phi}} = 1.355 3I03 KTH$	$E_{v} = 1.863 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $G_{b} = 1.863 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $G_{c} = 1.626 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$	К _{вр} = 0.6680
	$02^{2}d_{0}$ $B_{9\phi} = 5725.027 07 MT_{H}$ $D_{9\phi} = 1.172 0748 KT_{H}$	$E_{v} = 1029.99 \text{ cm}^{-1}$ $6 = 1.474 \cdot 10^{-3} \text{ MFH}$ $6 = 1.536 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$	K _{BD} = 0.6250
	16 ₀ 13 _C 34 _{\$}		
	00 ⁰ 0 Β _{θΦ} = 59ΙΙ.733 Ι2 ΜΓη Β _{θΦ} = Ι.237 86Ι3 ΚΓη Η _{θΦ} =-Ι.639 80·ΙΟ ⁻⁶ Γη	$E_{v} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $6 = 1.082 \cdot 10^{-3} \text{ MFH}$ $6 = 9.602 \cdot 10^{-4} \text{ KFH}$ $6 = 2.528 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	$K_{BD} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9810$ $K_{DH} = 0.9962$
	$0I^{\text{Ic}}0$ $B_{a\phi}^{=} 5918.370 \ 18 \ \text{MTm}$ $D_{a\phi}^{=} 1.254 \ 2034 \ \text{KTm}$ $H_{a\phi}^{=} 8.702 \ 89 \cdot 10^{-5} \ \text{Im}$		$K_{BD} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9810$ $K_{DH} = 0.9953$
	$0I^{\text{Id}}_0$ $B_{\mathbf{a}\dot{\Phi}} = 5924.578\ 27\ \text{MTm}$ $D_{\mathbf{a}\dot{\Phi}} = 1.261\ 1706\ \text{KTm}$ $H_{\mathbf{a}\dot{\Phi}} = 8.808\ 51\cdot 10^{-4}\ \text{Tm}$	6 = 4.394·IO ⁻³ MTH 6 = 3.918·IO ⁻³ KTH 6 = I.034·IO ⁻³ TH	K _{BD} = 0.9930 K _{BH} = 0.9810 K _{DH} = 0.9962

- I39 -

$17_012_032_0$

00 ⁰ 0 В _{ЭФ} = 5883.671 I7 МГц П _{ЭФ} = 1.210 0447 КГц Н _{ЭФ} =-2.817 50·10 ⁻⁴ Гц	$E_{v} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $6 = 1.608 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $6 = 1.422 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $6 = 3.720 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	$K_{BD} = 0.9950$ $K_{BH} = 0.9870$ $K_{DH} = 0.9976$
0Ι ^{Ic} 0 Β _{θΦ} = 589Ι.0Ι5 35 ΜΓη D _{θΦ} = Ι.2Ι6 6747 ΚΓη Η _{θΦ} =-3.007 ΙΙ·ΙΟ ⁻³ Γη		K _{BD} = 0.9950 K _{BH} = 0.9880 K _{DH} = 0.998I
OI ^{Id} O Β _{ΘΦ} = 5897.047 46 ΜΓη D _{ΘΦ} = 1.257 9295 ΚΓη Η _{ΘΦ} = 6.183 47·10 ⁻³ Γη		K _{BD} = 0.9960 K _{BH} = 0.9900 K _{DH} = 0.9983
$16_0 12_0 36_s$, $w_i = 837.8$ cm	-I w ₂ = 518.9 cm ^{-I} , w ₃ =	2092.0 cm ^{-I}
00 ⁰ 0 Β _{9Φ} = 5799.694 59 ΜΓη D _{9Φ} = 1.191 0752 ΚΓη H _{9Φ} = 5.941 37·10 ⁻⁴ Γη	$E_{V} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $G_{b} = 2.154 \cdot 10^{-3} \text{ MTm}$ $G_{b} = 1.892 \cdot 10^{-3} \text{ KTm}$ $G_{m} = 4.944 \cdot 10^{-4} \text{ Tm}$	$K_{BD} = 0.9940$ $K_{BH} = 0.9850$ $K_{DH} = 0.9973$
0Ι ^{Ιc} 0 Β _{ΘΦ} = 5806.879 3Ι ΜΓη Β _{ΘΦ} = 1.204 7463 ΚΓη	$6_{B} = 2.060 \cdot 10^{-2} \text{ MTm}$ $6_{B} = 1.108 \cdot 10^{-2} \text{ KTm}$	K _{BD} = 0.9970
$^{18}0^{12}c^{34}s$		
00 ⁰ 0 В _{эф} = 5559.971 73 МГц В _{эф} = 1.081 4025 КГц Н _{эф} = 8.126 42·10 ⁻⁴ Гц	$E_{V} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $G_{B} = 2.369 \cdot 10^{-3} \text{ MTH}$ $G_{D} = 1.822 \cdot 10^{-3} \text{ KTH}$ $G_{H} = 4.193 \cdot 10^{-4} \text{ TH}$	K _{BD} = 0.9930 K _{BH} = 0.98I0 K _{DH} = 0.9965
	- I40 -	

 $16_013_033_5$

4662	00 [©] 0 В _{эф} = 5984.566 90 МГц Д _{эф} = 1.269 2676 КГц Н _{эф} = 9.299 07 10 ⁻⁴ Гц	$E_{v} = 0.00 \text{ cm}^{-1}$ $6 = 2.532 \cdot 10^{-3} \text{ MFH}$ $6 = 2.341 \cdot 10^{-3} \text{ KFH}$ $6 = 6.325 \cdot 10^{-4} \text{ FH}$	$K_{BD} = 0.9930$ $K_{BH} = 0.9820$ $K_{BH} = 0.9869$
	$H_{9\phi}^{-2} = 9.299 \ 07 \ I0^{-4} \ T_{\pi}$	$6_{\rm H}^{2} = 6.325 \cdot 10^{-4}$ Гц	$K_{DH} = 0.9969$

Литература

- Artur A.Maki, J. Phys. and Chem. Ref. Data, 2, 221 (1974);
 N.W.Larsen, B.P.Winnewisser, Z. Naturforsch, 29A, 1213 (1974).
- W.Gordy, R.L.Cook, "Microwave Molecular Spectra", Wiley (Interscience), New York (1970).
- 3. A.F.Krupnov, A.V.Burenin, in "Molecular Spectroscopy: Modern Research", vol. 2, K.N.Rao, ed., 93, Academic Press (1976); A.B.Буренин, А.Ф.Крупнов, А.Б.Ягнетинский, Известия ВУЗов, Радвоўшзика, 17, 1136 (1974).
- 4. C.W.Mathews, K.N.Rao, in "Molecular Spectroscopy: Modern Research", K.N.Rao and C.W.Mathews, ed., 357, Academic Press (1972).
- 5. Anne Ford, J.G.Smith, D.H.Wiffen, Mol. Phys., 29, 1685 (1975).

Т-18868 подп. в печать 29/10 - 79 г.

Эак. 4662 Тир. I50 экз. Объем 9 п.л.

Отпечатано в Московской типографии Б 9 Союзполиграфпрома, Волочаевская, 40