

Миллиметровый спектр уксусной кислоты (переходы А-типа)

В. В. Илюшин, Е. А. Алексеев, С. Ф. Дюбко, О. И. Баскаков*, С. В. Поднос*

Радиоастрономический институт НАН Украины,
Украина, 310002, Харьков, ул. Краснознаменная, 4

*Харьковский государственный университет,
Украина, 310170, Харьков, пл. Свободы, 4

Статья поступила в редакцию 18 ноября 1997 г.

В диапазоне $60 \div 155$ ГГц измерены частоты 316 вращательных переходов (А-типа) уксусной кислоты, относящихся к основному ($v_r=0$) и первому возбужденному ($v_r=1$) торсионным состояниям. Анализ спектра проводился с использованием метода внутренних осей при совместном описании переходов основного и возбужденного торсионных состояний. Полученный набор постоянных позволяет предсказывать частоты микроволновых переходов А-типа с экспериментальной точностью в диапазоне вращательных квантовых чисел $J \leq 30$ для $v_r=0$ и $J \leq 20$ для $v_r=1$.

У діапазоні 60-155 ГГц виміряно частоти 316 обертальних переходів (А-типу) оцтової кислоти, які належать основному ($v_r=0$) та першому збудженному ($v_r=1$) торсійним станам. Спектр аналізувався із застосуванням методу внутрішніх осей за сумісним описанням основного та першого збудженого торсійних станів. Отриманий набір сталих дозволяє передбачати частоти мікрохвильових переходів А-типу з експериментальною точністю у діапазоні обертальних квантових чисел $J \leq 30$ для $v_r=0$ та $J \leq 20$ для $v_r=1$.

Введение

Непрерывное совершенствование радиотелескопов миллиметрового диапазона радиоволн привело к возможности регистрации весьма слабых спектральных линий межзвездных молекул. Многие из таких линий принадлежат вращательным спектрам сравнительно тяжелых молекул, асимметричных волчков с заторможенным внутренним вращением. Типичными представителями таких молекул являются метанол, метилформат. Долгое время надежная идентификация многих линий этих молекул была невозможна из-за отсутствия достаточно точного предсказания частот переходов в миллиметровом диапазоне. И только благодаря лабораторным исследованиям их спектров как в основном, так и в возбужденных торсионных состояниях, стала возможна идентификация множества линий, обнаруженных в космическом радиоизлучении [1].

Молекула уксусной кислоты CH_3COOH состоит из тех же атомов и даже радикалов, что и молекула метилформата HCOOCH_3 , однако молекула CH_3COOH отсутствует в последней редакции (1991 года) списка обнаруженных в космосе молекул, распространяемого Национальным институтом стандартов США [2], хотя метилформат приводится в более ранней версии (1985 года) этого списка [3]. В то же время, в работах [1,4], посвя-

щенных наблюдениям Sgr B2 и Ori A, отмечалось, что большинство идентифицированных линий приходится на долю HCOOCH_3 . Лишь недавно появились сообщения о наблюдении нескольких линий уксусной кислоты в космосе [5]. Для объяснения этого феномена необходим анализ радиоастрономических наблюдений с привлечением многих неидентифицированных линий, а также лабораторные исследования спектра молекулы CH_3COOH в основном и возбужденных торсионных состояниях, которые могли бы дать достаточно точное предсказание частот переходов.

Внутреннее вращение в молекуле CH_3COOH характеризуется относительно низким барьером, и поэтому вращательный спектр уксусной кислоты представляет интерес не только для радиоастрономии, но и для спектроскопии как науки. Первичная идентификация была проведена в 1957 году [6]. В этой работе на основе измеренных частот восьми переходов ($J_{max}=9$), относящихся к основному торсионному состоянию, была определена высота барьера внутреннему вращению метильной группы. В дальнейшем набор измеренных переходов для основного торсионного состояния был расширен сначала до $J_{max}=12$ [7], затем до $J_{max}=15$ [8] и, наконец, до $J_{max}=30$ [9]. Следующим шагом в изучении спектра уксусной кислоты стало исследование первого возбужденного тор-

сионного состояния [10]. С целью определения структуры молекулы проводились измерения частот спектров изотопических производных уксусной кислоты [7-11]. Частотный диапазон исследований спектра CH_3COOH в работах [7-10] ограничен участками $8\div40$ ГГц и $130\div300$ ГГц. В промежутке между этими участками, где лежит окно прозрачности атмосферы, измерено всего несколько частот переходов уксусной кислоты [9]. Однако точность предсказания частот в указанных работах не восполняет этого пробела в экспериментальных данных.

В работах [8,9] рассматривались два теоретических подхода к описанию спектра уксусной кислоты - метод внутренних осей и метод главных осей. Показано, что использование метода внутренних осей дает описание экспериментального материала с меньшим стандартным отклонением. Основной упор в предыдущих исследованиях спектра уксусной кислоты делался не на точное описание измеренных частот переходов, а на определение структуры молекулы. Поэтому, хотя и отмечалось, что раздельное описание переходов А и Е типов может дать более точное предсказание частот [9], конечные наборы постоянных гамильтониана рассчитывались при совместной обработке А и Е переходов. В результате, при совместном описании основного и первого возбужденного торсионных состояний [9], это приводило к стандартному отклонению 2,2 МГц для возбужденного состояния при точности измерений в 0,1 МГц и точности предсказания частот основного состояния в 0,5 МГц. В радиоастрономии необходимо намного более точное предсказание частот переходов.

Целью данной работы являлось проведение лабораторных исследований вращательного спектра CH_3COOH и получение набора постоянных, который бы позволил достаточно точно предсказывать частоты переходов в микроволновом диапазоне.

Мы провели измерения частот вращательных переходов уксусной кислоты в диапазоне $60\div155$ ГГц, которые восполняют пробел в ранее полученных экспериментальных данных [7-10]. Для описания спектров основного и первого возбужденного торсионных состояний молекулы CH_3COOH использовался метод внутренних осей. С целью получения наилучшего предсказания частот, укладывающегося в рамки экспериментальной точности измерений, мы провели анализ вращательного спектра CH_3COOH , пожертвовав общностью совместного описания переходов А и Е типов. В этой статье мы представляем первую часть работы - описание микроволновых переходов А-типа. Следует отметить, что такой подход с раздельным рассмотрением А и Е переходов был ранее использован при описании спектра изомера уксусной кислоты - метилформата [12,13]. Результаты этих лабораторных исследований были ис-

пользованы в работе [4] при идентификации некоторых линий, зарегистрированных при радиоастрономических наблюдениях.

Экспериментальная техника и методика измерений

Измерения спектров выполнены при помощи автоматизированного спектрометра миллиметрового диапазона [14]. В качестве источника излучения спектрометр использует синтезатор частоты ($50\div120$ ГГц), управляемый ЭВМ. Он предназначен для детального исследования спектров молекул со сверхвысоким разрешением. Синтез частот в миллиметровом диапазоне осуществляется двухступенчатым умножением частоты опорного синтезатора 390÷400 МГц в двух петлях фазовой автоподстройки частоты (ФАПЧ). Первой петлей ФАПЧ охвачен кристаллический генератор 3,4÷5,2 ГГц. На второй ступени умножения используется лампа обратной волны (ЛОВ) миллиметрового диапазона длин волн. Сменой ЛОВ и соответствующих элементов волноводного тракта перекрывается диапазон частот от 50 до 120 ГГц. Специальные исследования энергетического спектра синтезатора частоты показали, что ширина его линии генерации в рабочем диапазоне не превышает 1 кГц. Поскольку измерения ведутся с использованием частотной модуляции (ЧМ) излучения синтезатора, спектральное разрешение было ограничено ее частотой (125 кГц). Поэтому, по сравнению с [14], конструкция спектрометра была существенно изменена. Так, вместо избирательного усилителя 125 кГц в приемной системе установлен широкополосный (10÷300 кГц) малошумящий усилитель, что дает возможность в широких пределах изменять частоту модуляции. Это, в свою очередь, позволяет вводить частотную модуляцию не только в первую, но и во вторую петлю ФАПЧ и достигать наивысшего разрешения за счет очень малых индексов модуляции. Реально записывался промежуток времени в спектре SO_2 с шириной 0,015 МГц на частоте около 70 ГГц.

После модернизации аппаратуры и программного обеспечения спектрометра был полностью автоматизирован процесс ввода всех фазовых автоподстроек в синхронизм. На основе этой автоматизации создан обзорный режим спектрометра, особенностью которого является непрерывная запись спектров во всем рабочем диапазоне. Обзорные записи ведутся при сравнительно большом (50 кГц) шаге измерений и в достаточно высоком темпе (20 мс на точку). Таким образом, весь частотный диапазон спектрометра 50÷120 ГГц может быть записан за несколько дней. Обзорный режим особенно полезен на начальном этапе исследований, так как дает общую картину спектра. Недостатками обзорного исследования являются некоторое снижение точности измерений частот переходов (до 50÷150 кГц) и более низкое отноше-

ние сигнал/шум. Но так как за обзорным исследованием следуют выборочные детальные измерения, с этими недостатками можно мириться.

Полный спектр уксусной кислоты в рабочем диапазоне спектрометра был записан в обзорном режиме. Запись спектра велась с использованием однопроходной поглощающей кюветы [15] при комнатной температуре. Давление в кювете поддерживалось на уровне, обеспечивающем максимальную чувствительность. При этом ширина линий была близка к допплеровской и не превышала 0,3 МГц. Всего зарегистрировано 2770 переходов, принадлежащих различным состояниям CH_3COOH . Для повышения точности часть переходов была дополнительно измерена в режиме детального исследования при допплеровском уширении спектральных линий. Для расширения рабочего диапазона до 155 ГГц использовался удвоитель частоты.

Результаты и обсуждение

Из 2770 измеренных линий 316 идентифицированы как переходы А-типа. Из них 271 принадлежат основному и 45 - первому возбужденному торсионным состояниям. Частоты 78 переходов основного состояния измерены с повышенной (не хуже $\pm 0,015$ МГц) точностью. Так как предсказательная способность наборов постоянных, полученных в предыдущих работах [7-10] (особенно для состояния $v_t=1$), не позволяла провести однозначно идентификацию наших измерений, мы были вынуждены провести повторный анализ всех доступных из литературы [7-10] переходов А-типа для основного и первого возбужденного состояний. Мы использовали эффективный торсионно-вращательный гамильтониан, применявшийся ранее при описании спектра метанола [16]. Этот гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_{mlqf} J^{2m} \left[B_{mlqf} \left\{ J_z^l, (J_+^l + J_-^l) \right\} \langle p^q, \cos 3f \gamma \rangle + i C_{mlqf} \left\{ J_z^l, (J_+^l + J_-^l) \right\} \langle p^q, \sin 3f \gamma \rangle \right]$$

где J - оператор полного углового момента; γ - угол внутреннего вращения; p - соответствующий момент ($p = -i\partial/\partial\gamma$); m, l, t, q и f принимают положительные целые значения, и $l + t + q$ должно быть четным; B_{mlqf} и C_{mlqf} - действительные постоянные; и $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$. Фигурные скобки обозначают антикоммутатор.

Построение базиса для составления матрицы гамильтониана производилось в два этапа. На первом этапе решалась так называемая чисто торсионная задача и находились ее собственные функции. На втором этапе, когда производились точные расчеты, базис состоял из собственных

функций торсионной задачи и функций симметричного волчка. При расчетах матрица гамильтониана строилась в базисе четырех торсионных состояний.

Частоты идентифицированных переходов приведены в таблице 1. Для получения наиболее полного набора постоянных, описывающих переходы А-типа, в анализе были использованы также результаты измерений из работ [7-10]. Общее количество переходов, включенных в анализ, составляет 514. Использованные в обработке литературные данные также приведены в таблице 1, поскольку, в отличие от предыдущих работ [7, 9, 10], они описываются с экспериментальной точностью.

Различные наборы экспериментальных данных учитывались в обработке с весами, обратно пропорциональными квадратам точностей измерений, которые полагались равными приведенным в литературе [8, 9, 10]. Исключение составляли данные работы [7], точность которых полагалась равной 0,35 МГц. Основанием для этого послужило большое расхождение (вплоть до 0,7 МГц) этих данных с результатами работы [8], авторы которой даже провели повторные измерения частот некоторых переходов из работы [7]. Точность наших измерений полагалась равной 0,15 МГц для обзорного режима и 0,015 МГц для режима детальных исследований.

Многие линии представляли собой мультиплеты, обусловленные не полностью снятым К-вырождением, которые при экспериментальном исследовании не разрешались. В этих случаях частота линий ставилась в соответствие наиболее интенсивному переходу мультиплета, и если теоретически предсказанное расщепление превышало экспериментальную точность, то данному переходу приписывалась точность, равная рассчитанному расщеплению.

Полученный из анализа набор постоянных приведен в таблице 2. Стандартное отклонение для наших измерений в режиме детальных исследований составляет 0,013 МГц (за исключением двух неразрешенных мультиплетов с большим расщеплением) и в обзорном режиме - 0,086 МГц. Экспериментальные данные работы [7] описываются со стандартным отклонением 0,142 МГц, работы [8] - 0,049 МГц и работы [10] - 0,106 МГц. Стандартное отклонение для измерений работы [9] - 0,049 МГц - превышает экспериментальную точность (0,030 МГц). Это связано с большим количеством неразрешенных мультиплетов в этих данных. В то же время изолированные переходы описываются с экспериментальной точностью. Таким образом, полученный набор постоянных позволяет предсказывать частоты микроволновых переходов А-типа с экспериментальной точностью в диапазоне квантовых чисел $J \leq 30$ для $v_t=0$ и $J \leq 20$ для $v_t=1$.

Таблица 1.

Вращательные переходы спектра уксусной кислоты.
(Переходы A-типа)

Измеренная частота, МГц	Литература	J'	Ka'	Kc'	J''	Ka''	Kc''	Точность, МГц	Разница (изм. - теор.), МГц	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9
$v_i=0$										
8560,830	[7]	2	1	1	2	2	0	0,350	0,234	
12398,510	[7]	3	1	2	3	2	1	0,350	0,131	
12983,740	[7]	3	2	1	3	3	0	0,350	0,191	
12989,920	[7]	2	0	2	2	1	1	0,350	0,011	
13381,170	[7]	4	2	2	4	3	1	0,350	-0,072	
14577,350	[7]	9	6	4	9	6	3	0,350	0,144	
16539,590	[7]	5	3	2	5	4	1	0,350	0,123	
16741,550	[7]	0	0	0	1	1	1	0,350	0,058	
18264,480	[7]	2	1	2	2	2	1	0,350	-0,123	
18807,860	[7]	6	3	3	6	4	2	0,350	0,116	
19357,760	[7]	4	3	1	4	4	0	0,350	-0,068	
19483,600	[7]	5	2	3	5	3	2	0,350	0,027	
20209,130	[7]	8	5	4	8	5	3	0,350	-0,067	
20357,640	[7]	7	4	3	7	5	2	0,350	-0,050	
21463,320	[7]	4	1	3	4	2	2	0,350	-0,124	
21463,320	[7]	3	2	2	3	3	1	0,350	0,146	
22057,880	[7]	11	7	5	11	7	4	0,350	-0,060	
22082,550	[7]	6	4	2	6	5	1	0,350	0,354	
23540,200	[7]	3	0	3	3	1	2	0,350	-0,016	
24587,210	[7]	8	5	3	8	6	2	0,350	-0,099	
24920,660	[7]	1	1	1	2	0	2	0,350	0,115	
24949,230	[7]	9	5	4	9	6	3	0,350	0,000	
25240,590	[7]	8	4	4	8	5	3	0,350	0,016	
25548,110	[7]	7	4	4	7	4	3	0,350	0,316	
25740,890	[7]	4	3	2	4	4	1	0,350	-0,020	
25897,530	[7]	3	1	3	3	2	2	0,350	0,099	
26858,001	[8]	1	0	1	2	0	2	0,100	-0,034	
26923,910	[7]	5	4	1	5	5	0	0,350	-0,146	
27159,170	[8]	4	2	3	4	3	2	0,100	-0,032	
27394,080	[8]	1	0	1	2	1	2	0,100	0,007	
27444,940	[8]	10	6	4	10	7	3	0,100	0,023	
27518,940	[8]	7	3	4	7	4	3	0,100	-0,102	
29391,570	[8]	5	3	3	5	4	2	0,100	-0,036	
29522,530	[8]	7	5	2	7	6	1	0,100	0,017	
29926,570	[7]	6	3	4	6	3	3	0,350	0,169	
30521,370	[8]	6	2	4	6	3	3	0,100	0,048	
30675,950	[8]	11	6	5	11	7	4	0,100	0,013	
30954,530	[8]	5	4	2	5	5	1	0,100	-0,121	
31143,750	[8]	12	7	5	12	8	4	0,100	0,044	
31347,250	[8]	9	6	3	9	7	2	0,100	0,008	
32721,790	[8]	6	4	3	6	5	2	0,100	-0,051	
32832,620	[8]	10	5	5	10	6	4	0,100	0,055	
32931,540	[8]	11	7	4	11	8	3	0,100	0,008	
33023,710	[8]	5	1	4	5	2	3	0,100	-0,051	
34487,750	[8]	4	0	4	4	1	3	0,100	0,005	
34722,940	[8]	6	5	1	6	6	0	0,100	-0,040	
34836,490	[8]	13	8	5	13	9	4	0,100	0,104	

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
34863,001	[8]	9	5	5	9	5	4	0,100	-0,029
35120,000	[8]	4	1	4	4	2	3	0,100	-0,038
35236,120	[8]	5	2	4	5	3	3	0,100	0,076
35848,420	[8]	6	3	4	6	4	3	0,100	-0,020
36065,350	[8]	14	8	6	14	9	5	0,100	-0,007
36411,110	[8]	9	4	5	9	5	4	0,100	-0,030
36681,380	[8]	2	1	2	3	0	3	0,100	-0,002
36778,550	[8]	2	1	2	3	1	3	0,100	0,032
37127,290	[8]	7	5	3	7	6	2	0,100	-0,071
37217,410	[8]	2	0	2	3	0	3	0,100	-0,011
37263,900	[8]	7	4	4	7	5	3	0,100	-0,006
37314,540	[8]	2	0	2	3	1	3	0,100	-0,016
37583,000	[8]	15	9	6	15	10	5	0,100	0,112
37726,120	[8]	13	7	6	13	8	5	0,100	-0,010
37802,830	[8]	8	6	2	8	7	1	0,100	0,014
39494,260	[8]	8	4	5	8	4	4	0,100	-0,012
39569,810	[8]	1	1	0	2	2	1	0,100	-0,057
39713,110	[8]	8	5	4	8	6	3	0,100	0,028
39746,860	[8]	10	7	3	10	8	2	0,100	0,043
39982,940	[8]	8	3	5	8	4	4	0,100	-0,028
67842,200		15	11	4	15	12	3	0,150	-0,088
68000,900		12	10	2	12	11	1	0,150	-0,108
68026,900		4	2	3	5	1	4	0,150	0,077
68066,400		21	14	7	21	15	7	0,150	0,067
68153,200		4	2	3	5	2	4	0,150	0,063
68215,700		12	10	3	12	11	2	0,150	-0,066
68602,300		17	11	7	17	12	6	0,150	0,014
68673,800		4	1	3	5	1	4	0,150	0,169
68800,000		4	1	3	5	2	4	0,150	0,054
68942,900		5	1	5	6	0	6	0,150	0,051
68945,100		5	0	5	6	1	6	0,150	0,042
69003,200		14	6	8	14	7	7	0,150	-0,011
69652,840	[9]	23	15	8	23	16	7	0,030	-0,010
69821,720	[9]	22	12	10	22	13	9	0,030	0,046
69848,370	[9]	17	12	5	17	13	4	0,030	-0,016
69870,720	[9]	16	9	8	16	10	7	0,030	0,002
70225,600		18	10	9	18	10	8	0,150	-0,024
70234,060	[9]	17	10	8	17	11	7	0,030	-0,003
70234,800		15	8	8	15	9	7	0,150	0,065
70371,700		15	11	5	15	12	4	0,150	-0,021
70617,300	[9]	21	14	7	21	15	6	0,030	0,051
70762,140	[9]	19	13	6	19	14	5	0,030	0,024
70830,700		15	7	8	15	9	7	0,150	0,074
71020,600		14	7	8	14	8	7	0,150	0,006
71120,300		13	6	8	13	6	7	0,150	0,078
71179,400		13	5	8	13	6	7	0,150	0,044
71220,900		14	6	8	14	8	7	0,150	0,040
71324,000		18	9	9	18	10	8	0,150	0,087
71599,440	[9]	18	11	8	18	12	7	0,030	0,030
72890,800		12	4	8	12	6	7	0,150	0,090
73122,770	[9]	18	12	7	18	13	6	0,030	0,013
73585,700		11	4	8	11	4	7	0,150	0,002
73588,900		11	3	8	11	4	7	0,150	0,043
73664,800		11	4	8	11	5	7	0,150	-0,002
73891,400		4	3	2	5	2	3	0,150	0,018
74042,000		3	2	1	4	3	2	0,150	0,086

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
74140,677		19	12	8	19	13	7	0,015	-0,009
74280,800		10	2	8	10	3	7	0,150	0,102
74298,800		10	3	8	10	4	7	0,150	-0,006
74503,300		17	12	6	17	13	5	0,150	0,016
74780,800		9	1	8	9	2	7	0,150	0,001
74784,200		9	2	8	9	3	7	0,150	0,026
74870,000		13	11	2	13	12	1	0,150	-0,129
74956,000		13	11	3	13	12	2	0,150	-0,147
75142,034		8	0	8	8	1	7	0,015	-0,019
75142,472		8	0	8	8	2	7	0,015	-0,025
75195,300		17	9	9	17	9	8	0,150	0,019
75579,700		16	9	7	16	11	6	0,150	0,070
75609,000		17	8	9	17	9	8	0,150	0,077
75750,400		16	12	4	16	13	3	0,150	-0,040
76229,983		4	3	2	5	3	3	0,015	0,004
76271,900		21	11	10	21	12	9	0,150	0,018
76706,300		12	11	1	12	12	0	0,250	-0,198
76715,000		12	11	2	12	12	1	0,250	-0,206
77824,700		19	11	9	19	12	8	0,150	0,006
77888,800		20	13	8	20	14	7	0,150	-0,015
78099,600		18	10	9	18	11	8	0,150	-0,003
78403,600		20	12	9	20	13	8	0,150	0,007
78443,100		16	8	9	16	8	8	0,150	-0,011
78507,300		18	13	5	18	14	4	0,150	0,057
78580,900		19	13	7	19	14	6	0,150	0,088
78583,800		16	7	9	16	8	8	0,150	-0,033
78927,382		17	9	9	17	10	8	0,015	-0,010
78956,471		5	2	4	6	1	5	0,015	0,004
78977,443		5	2	4	6	2	5	0,015	0,002
79082,801		5	1	4	6	1	5	0,015	0,020
79103,752		5	1	4	6	2	5	0,015	-0,004
79198,000		18	9	9	18	11	8	0,150	0,107
79280,700		15	12	3	15	13	2	0,150	-0,102
79341,100		17	8	9	17	10	8	0,150	0,065
79473,400		18	10	8	18	12	7	0,150	0,010
79518,600		15	12	4	15	13	3	0,150	-0,178
79594,889		6	1	6	7	1	7	0,030	0,016
79595,152		6	0	6	7	0	7	0,030	0,000
79880,700		4	4	1	5	4	2	0,150	0,026
80020,600		16	8	9	16	9	8	0,150	0,059
80080,000		21	13	9	21	14	8	0,150	0,027
80161,300		16	7	9	16	9	8	0,150	0,037
80233,948		4	2	2	5	2	3	0,015	0,000
80326,700		20	14	6	20	15	5	0,150	0,107
80562,100		15	7	9	15	7	8	0,150	-0,021
80605,000		15	6	9	15	7	8	0,150	0,061
80728,700		24	17	7	24	18	6	0,150	0,236
80934,400		18	13	6	18	14	5	0,150	0,071
81158,100		15	7	9	15	8	8	0,150	0,087
81200,900		15	6	9	15	8	8	0,150	0,070
81553,700		20	10	10	20	11	9	0,150	0,065
81644,500		14	12	2	14	13	1	0,150	-0,131
81677,900		14	12	3	14	13	2	0,150	-0,130
82004,300		14	6	9	14	6	8	0,150	0,035
82015,800		14	5	9	14	6	8	0,150	0,064
82204,600		14	6	9	14	7	8	0,150	0,069
82572,553		4	2	2	5	3	3	0,015	0,008
82731,300		21	14	8	21	15	7	0,150	0,055

Миллиметровый спектр уксусной кислоты (переходы А-типа)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
82979,800		22	14	9	22	15	8	0,150	0,015
83042,700		13	4	9	13	5	8	0,150	0,080
83099,200		13	5	9	13	6	8	0,150	0,085
83170,800		17	13	4	17	14	3	0,150	0,007
83382,400		13	12	1	13	13	0	0,150	-0,052
83732,500		17	13	5	17	14	4	0,150	0,025
83815,200		12	3	9	12	4	8	0,150	0,046
84405,700		11	2	9	11	3	8	0,150	0,035
84408,800		11	3	9	11	4	8	0,150	0,051
84723,600		20	14	7	20	15	6	0,150	0,082
84857,300		10	1	9	10	2	8	0,150	-0,024
85116,400		19	10	10	19	10	9	0,150	0,034
85199,200		9	1	9	9	2	8	0,150	-0,015
85319,300		13	3	10	13	4	9	0,150	0,111
85399,000		19	9	10	19	10	9	0,150	-0,039
85633,100		22	13	10	22	14	9	0,150	-0,044
85760,900		21	12	10	21	13	9	0,150	-0,031
86180,200		16	13	3	16	14	2	0,150	-0,076
86278,800		16	13	4	16	14	3	0,150	-0,027
87083,300		23	15	9	23	16	8	0,150	0,110
87594,900		21	11	10	21	13	9	0,150	-0,052
87639,600		19	14	6	19	15	5	0,150	0,018
87761,300		19	10	10	19	11	9	0,150	0,050
87823,700		5	3	3	6	2	4	0,150	0,026
87985,400		18	9	10	18	9	9	0,150	0,082
88043,900		19	9	10	19	11	9	0,150	-0,022
88082,500		18	8	10	18	9	9	0,150	0,038
88355,400		15	13	2	15	14	1	0,150	0,015
88368,100		15	13	3	15	14	2	0,150	0,063
88418,600		5	3	3	6	3	4	0,150	0,005
88919,300		3	3	1	4	4	0	0,150	0,027
88953,500		5	4	2	6	3	3	0,150	0,110
89083,600		18	9	10	18	10	9	0,150	-0,008
89180,800		18	8	10	18	10	9	0,150	0,048
89653,269		6	2	5	7	1	6	0,015	-0,001
89656,428		6	2	5	7	2	6	0,015	0,003
89674,200		6	1	5	7	1	6	0,150	-0,044
89677,403		6	1	5	7	2	6	0,015	0,004
89951,500		17	8	10	17	8	9	0,150	0,022
89981,800		17	7	10	17	8	9	0,150	0,044
90023,900		14	13	1	14	14	0	0,150	0,165
90024,900		14	13	2	14	14	1	0,150	0,091
90162,300		5	2	3	6	2	4	0,150	0,029
90246,249		7	0	7	8	1	8	0,034	-0,008
90286,300		18	14	4	18	15	3	0,150	0,152
90365,105		17	8	10	17	9	9	0,015	-0,015
90533,000		18	14	5	18	15	4	0,150	0,123
90757,200		5	2	3	6	3	4	0,150	0,009
91380,700		16	6	10	16	7	9	0,150	0,084
91512,900		16	7	10	16	8	9	0,150	0,014
91521,300		16	6	10	16	8	9	0,150	-0,038
93965,400		13	3	10	13	4	9	0,150	0,044
93968,000		13	4	10	13	5	9	0,150	0,082
94006,922		23	13	11	23	14	10	0,015	-0,014
94481,700		26	18	9	26	19	8	0,150	-0,028
94499,300		12	2	10	12	3	9	0,150	-0,029
94499,900		12	3	10	12	4	9	0,150	0,080
94875,426		5	4	2	6	4	3	0,015	-0,003

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
94921,900		11	2	10	11	3	9	0,150	-0,024
95064,000		21	10	11	21	11	10	0,150	0,142
95243,000		22	12	11	22	13	10	0,150	-0,037
95252,400		10	1	10	10	2	9	0,150	0,040
95256,700		23	12	11	23	14	10	0,150	-0,005
96707,300		21	11	11	21	12	10	0,150	0,067
99296,800		19	9	11	19	9	10	0,150	0,008
99317,900		19	8	11	19	9	10	0,150	0,100
99328,500		8	8	1	9	7	2	0,150	-0,039
99487,600		6	3	4	7	2	5	0,150	0,105
99579,500		19	9	11	19	10	10	0,150	0,036
99608,100		6	3	4	7	3	5	0,150	0,111
99704,900		18	15	4	18	16	2	0,150	0,047
100082,421		6	2	4	7	2	5	0,015	0,005
100202,917		6	2	4	7	3	5	0,015	0,007
100306,537		7	2	6	8	1	7	0,015	0,008
100306,975		7	2	6	8	2	7	0,015	0,003
100309,697		7	1	6	8	1	7	0,015	0,014
100310,131		7	1	6	8	2	7	0,015	0,004
100706,727		18	8	11	18	8	10	0,015	-0,021
100712,793		18	7	11	18	8	10	0,015	-0,019
100803,885		18	8	11	18	9	10	0,015	-0,007
100809,939		18	7	11	18	9	10	0,015	-0,017
100897,456		8	0	8	9	1	9	0,015	0,011
100990,400		28	21	8	28	22	7	0,150	-0,016
101027,900		6	5	2	7	4	3	0,150	0,022
101045,000		21	16	5	21	17	5	0,150	-0,194
101823,100		17	7	11	17	7	10	0,150	0,088
101824,600		17	6	11	17	7	10	0,150	0,021
101853,400		17	7	11	17	8	10	0,150	0,110
101855,000		17	6	11	17	8	10	0,150	0,143
101948,000		16	9	8	16	10	6	0,150	-0,002
102457,700		29	23	7	29	24	6	0,150	0,083
102728,400		16	5	11	16	6	10	0,150	0,007
102736,483		16	6	11	16	7	10	0,015	-0,004
102809,700		8	7	1	9	6	4	0,150	0,015
102875,700		4	3	1	5	4	1	0,150	-0,047
103468,299		5	4	1	6	4	2	0,015	0,004
103469,476		15	4	11	15	5	10	0,070	-0,008
103471,507		15	5	11	15	6	10	0,070	0,016
104026,800		20	16	4	20	17	4	0,150	-0,064
104077,739		14	3	11	14	4	10	0,020	-0,004
104078,172		14	4	11	14	5	10	0,020	0,004
104078,600		24	13	12	24	14	11	0,150	0,068
104574,992		13	2	11	13	3	10	0,084	0,032
104616,100		23	11	12	23	12	11	0,150	0,168
104978,405		12	1	11	12	2	10	0,020	-0,011
105302,600		11	0	11	11	1	10	0,150	0,072
105738,600		23	12	12	23	13	11	0,150	0,082
105865,700		23	11	12	23	13	11	0,150	-0,001
106230,800		6	4	3	7	3	4	0,150	0,122
106876,900		22	10	12	22	11	11	0,150	0,073
107122,066		5	3	2	6	4	3	0,015	0,008
107339,700		22	11	12	22	12	11	0,150	0,026
107384,200		22	10	12	22	12	11	0,150	0,086
108201,931		6	4	3	7	4	4	0,015	0,006
108606,800		21	10	12	21	10	11	0,150	0,045
108621,200		21	9	12	21	10	11	0,150	0,081

Миллиметровый спектр уксусной кислоты (переходы А-типа)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
108797,400		21	10	12	21	11	11	0,150	-0,001
108811,800		21	9	12	21	11	11	0,150	0,034
109914,414		4	3	2	5	4	1	0,015	-0,009
110013,500		20	9	12	20	9	11	0,150	0,046
110017,800		20	8	12	20	9	11	0,150	0,087
110079,600		20	9	12	20	10	11	0,150	0,036
110083,900		20	8	12	20	10	11	0,150	0,077
110179,800		4	4	0	5	5	1	0,150	0,068
110358,200		7	3	5	8	2	6	0,150	0,013
110379,600		7	3	5	8	3	6	0,150	0,121
110478,700		7	2	5	8	2	6	0,150	0,019
110500,000		7	2	5	8	3	6	0,150	0,028
110763,500		21	17	4	21	18	3	0,150	0,062
110954,591		8	1	7	9	2	8	0,060	-0,016
111097,500		4	4	1	5	5	0	0,150	-0,069
111164,300		19	8	12	19	8	11	0,150	0,005
111165,500		19	7	12	19	8	11	0,150	0,056
111185,300		19	8	12	19	9	11	0,150	-0,003
111186,500		19	7	12	19	9	11	0,150	0,048
111548,533		9	0	9	10	1	10	0,015	0,012
111964,000		4	2	2	5	4	2	0,150	-0,151
112122,600		18	6	12	18	7	11	0,150	0,043
112128,400		18	7	12	18	8	11	0,150	0,059
112152,800		6	3	3	7	3	4	0,150	0,082
112744,100		6	5	2	7	5	3	0,150	0,110
112786,400		10	4	7	10	5	5	0,150	0,093
112925,900		17	5	12	17	6	11	0,150	0,028
112927,500		17	6	12	17	7	11	0,150	0,122
113000,200		6	6	1	7	6	2	0,150	0,068
113600,800		16	4	12	16	5	11	0,150	0,072
113601,100		16	5	12	16	6	11	0,150	0,034
113939,100		6	6	0	7	6	1	0,150	0,058
114124,000		6	3	3	7	4	4	0,150	0,035
114166,400		15	4	12	15	5	11	0,150	0,034
114638,100		14	3	12	14	4	11	0,150	0,072
115028,900		13	2	12	13	3	11	0,150	0,013
115350,100		12	0	12	12	1	11	0,150	-0,002
132249,620		10	1	9	11	2	10	0,030	0,030
132850,030	[9]	11	0	11	12	0	12	0,030	-0,054
139043,729		7	4	3	8	5	4	0,015	0,018
140122,904		24	9	15	24	10	14	0,130	0,014
140124,828		24	10	15	24	11	14	0,130	0,046
141069,978		23	8	15	23	9	14	0,015	-0,007
141070,530		23	9	15	23	10	14	0,080	0,033
141775,588		9	4	6	10	3	7	0,015	-0,006
141794,206		9	4	6	10	4	7	0,015	-0,014
141876,737		9	3	6	10	3	7	0,015	0,003
141895,361		9	3	6	10	4	7	0,015	0,001
142313,624		10	3	8	11	2	9	0,075	0,026
142314,168		10	2	8	11	3	9	0,075	-0,022
142636,446		21	6	15	21	7	14	0,080	-0,004
142897,659		11	1	10	12	2	11	0,015	-0,004
143281,081		20	5	15	20	6	14	0,040	0,003
143500,502		12	0	12	13	1	13	0,015	-0,004
143847,045		19	4	15	19	5	14	0,040	0,067
144342,658		18	3	15	18	4	14	0,040	0,013
144775,560	[9]	17	3	15	17	3	14	0,030	-0,014
145152,380	[9]	16	1	15	16	2	14	0,030	-0,009

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
151267,499		24	9	16	24	10	15	0,015	-0,011
152044,756		23	7	16	23	8	15	0,015	-0,011
152420,470		10	4	7	11	3	8	0,015	0,013
152423,607		10	4	7	11	4	8	0,015	-0,008
152439,102		10	3	7	11	3	8	0,015	0,018
152442,241		10	3	7	11	4	8	0,015	-0,001
152736,210	[9]	22	7	16	22	7	15	0,070	0,016
152874,980		9	4	5	10	4	6	0,015	-0,007
152954,186		11	2	9	12	3	10	0,100	-0,050
153251,752		9	4	5	10	5	6	0,015	-0,003
153350,865		21	5	16	21	6	15	0,100	0,000
153545,698		12	1	11	13	2	12	0,015	-0,009
153896,637		20	5	16	20	6	15	0,040	0,017
154150,570	[9]	13	0	13	14	0	14	0,030	-0,061
154380,491		19	4	16	19	5	15	0,040	0,082
154808,278		18	3	16	18	4	15	0,040	0,003
154827,800	[9]	8	5	3	9	5	4	0,030	0,014
206168,760	[9]	16	3	14	17	3	15	0,030	-0,030
206782,030	[9]	17	2	16	18	2	17	0,030	0,015
207396,240	[9]	18	0	18	19	0	19	0,040	0,025
211775,950	[9]	30	9	22	30	9	21	0,140	-0,122
212384,830	[9]	29	8	22	29	8	21	0,130	-0,101
212954,320	[9]	28	7	22	28	7	21	0,110	-0,104
213488,020	[9]	27	6	22	27	6	21	0,100	0,011
213988,500	[9]	26	5	22	26	5	21	0,060	0,068
214458,180	[9]	25	4	22	25	4	21	0,060	0,067
214899,110	[9]	24	2	22	24	3	21	0,100	0,036
215313,000	[9]	23	2	22	23	2	21	0,030	-0,059
216207,500	[9]	16	3	13	17	3	14	0,030	0,005
216811,750	[9]	17	3	15	18	3	16	0,040	-0,023
217428,120	[9]	18	1	17	19	1	18	0,030	0,005
218044,210	[9]	19	0	19	20	0	20	0,040	0,019
226844,490	[9]	17	3	14	18	4	15	0,030	-0,006
227454,460	[9]	18	3	16	19	3	17	0,040	0,013
228073,690	[9]	19	2	18	20	2	19	0,030	-0,053
228691,709	[9]	20	1	20	21	0	21	0,030	0,036
236006,990	[9]	15	7	9	16	6	10	0,030	0,002
236015,420	[9]	15	7	9	16	7	10	0,030	-0,020
236891,540	[9]	17	5	13	18	5	14	0,040	0,001
238096,640	[9]	19	2	17	20	2	18	0,040	0,003
280028,240	[9]	22	3	19	23	3	20	0,030	-0,009
280660,250	[9]	23	2	21	24	2	22	0,100	-0,025
281293,930	[9]	24	1	23	25	1	24	0,030	0,051
281922,010	[9]	25	0	25	26	0	26	0,030	0,022
288272,670	[9]	18	9	10	19	8	11	0,030	0,048
288293,590	[9]	18	9	10	19	9	11	0,030	-0,040
288390,740	[9]	18	8	10	19	9	11	0,030	-0,034
289435,480	[9]	21	5	16	22	5	17	0,030	0,055
290037,560	[9]	22	4	18	23	4	19	0,070	0,036
290663,780	[9]	23	3	20	24	3	21	0,030	-0,001
291299,550	[9]	24	2	22	25	2	23	0,100	-0,018
291936,100	[9]	25	1	24	26	1	25	0,030	-0,009
292566,460	[9]	26	0	26	27	0	27	0,030	0,015
$v_r=1$									
17790,870	[10]	8	5	3	8	6	2	0,100	-0,098
18620,260	[10]	11	8	3	11	9	2	0,100	-0,148

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
18978,900	[10]	7	4	3	7	5	2	0,100	0,008
19238,340	[10]	6	5	2	6	6	1	0,100	0,027
20000,560	[10]	6	3	3	6	4	2	0,100	0,134
20666,180	[10]	5	2	3	5	3	2	0,100	0,105
20987,890	[10]	4	1	3	4	2	2	0,100	0,014
21568,960	[10]	4	2	3	4	3	2	0,100	-0,118
21987,840	[10]	5	3	3	5	4	2	0,100	-0,131
22322,460	[10]	13	9	4	13	10	3	0,100	0,158
22355,470	[10]	10	8	2	10	9	1	0,100	0,089
22536,090	[10]	7	6	2	7	7	1	0,100	0,043
22582,840	[10]	6	4	3	6	5	2	0,100	-0,134
22614,300	[10]	12	9	3	12	10	2	0,100	0,181
22684,010	[10]	12	8	4	12	9	3	0,100	-0,159
23492,260	[10]	7	5	3	7	6	2	0,100	-0,067
24341,080	[10]	14	10	4	14	11	3	0,100	0,133
24425,850	[10]	11	7	4	11	8	3	0,100	-0,139
24966,520	[10]	8	6	3	8	7	2	0,100	0,079
25345,020	[10]	1	1	1	2	0	2	0,100	0,019
25775,660	[10]	1	0	1	2	1	2	0,100	-0,032
26521,020	[10]	10	6	4	10	7	3	0,100	-0,136
26898,700	[10]	8	7	2	8	8	1	0,100	-0,129
27334,760	[10]	9	7	3	9	8	2	0,100	0,096
27750,210	[10]	16	11	5	16	12	4	0,100	0,199
27939,730	[10]	15	10	5	15	11	4	0,100	0,007
28246,130	[10]	9	5	4	9	6	3	0,100	0,037
29251,660	[10]	13	10	3	13	11	2	0,100	-0,065
29338,210	[10]	8	4	4	8	5	3	0,100	0,069
29472,460	[10]	15	11	4	15	12	3	0,100	0,026
29659,260	[10]	11	9	2	11	10	1	0,100	-0,071
29700,710	[10]	4	0	4	4	1	3	0,100	-0,101
29732,200	[10]	4	1	4	4	2	3	0,100	-0,152
29772,210	[10]	9	8	1	9	9	0	0,100	-0,032
29867,900	[10]	7	3	4	7	4	3	0,100	-0,084
29913,780	[10]	5	1	4	5	2	3	0,100	0,038
30008,500	[10]	6	2	4	6	3	3	0,100	0,009
30036,010	[10]	5	2	4	5	3	3	0,100	-0,051
30251,850	[10]	14	9	5	14	10	4	0,100	-0,037
30358,150	[10]	6	3	4	6	4	3	0,100	0,028
30688,080	[10]	7	4	4	7	5	3	0,100	-0,070
30856,001	[10]	17	12	5	17	13	4	0,100	-0,126
30899,780	[10]	10	8	3	10	9	2	0,100	0,013
31024,550	[10]	8	5	4	8	6	3	0,100	-0,174
31139,260	[10]	13	9	5	13	9	4	0,100	0,054
31425,060	[10]	9	6	4	9	7	3	0,100	-0,135
32095,780	[10]	10	7	4	10	8	3	0,100	-0,061
32359,020	[10]	9	8	2	9	9	1	0,100	-0,201
32767,500	[10]	18	12	6	18	13	5	0,100	-0,160
33285,180	[10]	13	8	5	13	9	4	0,100	-0,087
33433,560	[10]	11	8	4	11	9	3	0,100	0,190
33595,930	[10]	19	14	5	19	15	4	0,100	0,013
34913,560	[10]	12	8	5	12	8	4	0,100	0,142
35101,790	[10]	17	11	6	17	12	5	0,100	0,134
35827,360	[10]	11	9	3	11	10	2	0,100	-0,258
35928,600	[10]	12	9	4	12	10	3	0,100	0,095
35930,540	[10]	12	7	5	12	8	4	0,100	0,066
36224,800	[10]	2	1	2	3	0	3	0,100	-0,058
36270,370	[10]	2	0	2	3	1	3	0,100	-0,047
37300,760	[10]	11	7	5	11	7	4	0,100	-0,119

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
37430,430	[10]	10	9	1	10	10	0	0,100	0,288
37850,620	[10]	16	12	4	16	13	3	0,100	-0,023
38205,400	[10]	14	11	3	14	12	2	0,100	-0,024
38283,880	[10]	5	0	5	5	1	4	0,100	-0,081
38287,960	[10]	5	1	5	5	2	4	0,100	-0,137
38292,010	[10]	12	10	2	12	11	1	0,100	0,042
38696,950	[10]	6	1	5	6	2	4	0,100	0,043
38702,200	[10]	20	16	4	20	17	3	0,100	0,020
38717,700	[10]	6	2	5	6	3	4	0,100	0,014
38749,015	[10]	10	5	5	10	6	4	0,100	-0,123
38821,030	[10]	10	9	2	10	10	1	0,100	0,067
38932,980	[10]	16	10	6	16	11	5	0,100	0,065
39040,930	[10]	7	2	5	7	3	4	0,100	-0,032
39117,610	[10]	7	3	5	7	4	4	0,100	0,059
39172,590	[10]	20	15	5	20	16	4	0,100	-0,016
39191,290	[10]	9	4	5	9	5	4	0,100	-0,066
39241,240	[10]	8	3	5	8	4	4	0,100	-0,012
39468,110	[10]	8	4	5	8	5	4	0,100	0,048
39754,700	[10]	9	5	5	9	6	4	0,100	-0,087
39962,240	[10]	10	6	5	10	7	4	0,100	-0,106
67374,100		12	5	8	12	6	7	0,150	-0,143
67758,700		13	5	8	13	6	7	0,150	-0,091
67783,800		13	6	8	13	7	7	0,150	-0,009
67926,900		14	6	8	14	7	7	0,150	-0,041
68271,400		5	0	5	6	1	6	0,150	0,021
74493,700		4	3	2	5	2	3	0,150	0,060
74950,800		3	3	0	4	4	1	0,150	-0,171
75134,400		11	3	9	11	4	8	0,150	0,168
75233,400		4	2	2	5	3	3	0,150	0,039
76030,400		12	3	9	12	4	8	0,150	0,044
76031,000		12	4	9	12	5	8	0,150	0,127
76746,000		13	4	9	13	5	8	0,150	-0,243
76748,100		13	5	9	13	6	8	0,150	-0,186
77271,800		14	6	9	14	6	8	0,150	-0,053
77272,300		14	5	9	14	6	8	0,150	-0,073
77279,000		14	6	9	14	7	8	0,150	0,042
77590,700		15	6	9	15	7	8	0,150	0,042
77610,400		15	7	9	15	8	8	0,150	0,132
78944,100		6	0	6	7	1	7	0,150	0,023
84265,200		12	3	10	12	4	9	0,150	0,210
85454,700		6	4	2	7	4	4	0,150	-0,091
85522,700		5	3	3	6	2	4	0,150	0,033
85670,700		5	2	3	6	3	4	0,150	0,134
85952,200		4	3	1	5	4	2	0,150	-0,181
87257,700		16	6	10	16	7	9	0,150	0,099
87263,300		16	7	10	16	8	9	0,150	0,202
87558,500		6	2	5	7	1	6	0,150	0,092
87559,200		6	1	5	7	2	6	0,150	0,074
89615,800		7	0	7	8	1	8	0,150	-0,026
94651,500		14	4	11	14	5	10	0,150	0,004
95362,600		5	3	2	6	4	3	0,150	-0,013
95797,500		4	4	0	5	5	1	0,150	-0,008
96321,600		6	3	4	7	2	5	0,150	0,241
96346,400		6	2	4	7	3	5	0,150	0,243
96397,300		16	5	11	16	6	10	0,150	-0,051
96397,800		16	6	11	16	7	10	0,150	0,039
100286,700		8	0	8	9	1	9	0,150	0,072
102646,900		14	2	12	14	3	11	0,150	0,180

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
105004,400		6	4	3	7	3	4	0,150	0,201
105455,400		6	3	3	7	4	4	0,150	0,183
106014,700		17	5	12	17	6	11	0,150	0,090
106669,800		18	7	12	18	8	11	0,150	-0,033
107021,900		5	4	1	6	5	2	0,150	-0,054
108938,800		8	1	7	9	2	8	0,150	0,171
110956,501		9	0	9	10	1	10	0,015	-0,005

Таблица 2.

Параметры эффективного гамильтониана молекулы CH_3COOH
(переходы A-типа)

Параметры	Значения
B_{00001} см ⁻¹	173,03567 (1380)
B_{00002} см ⁻¹	-4,61678 (1630)
B_{00020} см ⁻¹	5,602502 (173)
B_{01010} см ⁻¹	0,8182782 (195)
B_{10000} МГц	7399,8317 (170)
B_{00200} МГц	1037,7999 (268)
B_{02000} МГц	2406,6638 (219)
B_{01100} МГц	-75,8512 (827)
B_{10001} МГц	10,0946 (294)
B_{00201} МГц	5,7236 (262)
B_{10002} МГц	4,9337 (229)
B_{01120} МГц	-0,85654 (742)
B_{10200} кГц	-1,753925 (212)
B_{00220} кГц	-46,12 (181)
B_{01210} кГц	-8,441 (309)
B_{03100} кГц	-5,3719 (737)
B_{12000} кГц	-12,0652 (172)
B_{03010} кГц	-37,185 (554)
B_{00310} кГц	12,412 (342)
B_{02200} кГц	5,9124 (248)
B_{00400} кГц	-2,186337 (124)
B_{00330} кГц	-0,1263 (224)
B_{22000} Гц	0,21942 (420)
B_{13010} Гц	3,359 (143)

Примечание:

- Значения параметров огрублены до такого количества значащих цифр, которые искажают рассчитанные частоты не более чем на 10 кГц.
- Погрешность определения параметров соответствует одному стандартному отклонению.

Литература

- S.E. Cummins, R.A. Linke and P. Thaddeus. The Astrophysical Journal Supplement Series. 1986, **60**, 819-878.
- F.J. Lovas. 'NIST: Recommended Rest Frequencies for Observed Interstellar Molecular Microwave Transitions - 1991 Revision'. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/micro/html/intro.html>.
- F.J. Lovas. J. Phys. Chem. Ref. Data. 1986, **15**, No. 1.
- G.A. Blake, E.C. Sutton, C.R. Masson, and T.G. Phillips. The Astrophysical Journal Supplement Series. 1986, **60**, pp. 357-374.
- K. Kawaguchi. Fifteenth colloquium on high resolution molecular spectroscopy, September 1997, Glasgow.
- W.J. Tabor. J. Chem. Phys. 1957, **27**, pp. 974-975.
- L.C. Krisher and E. Saegebarth. J. Chem. Phys. 1971, **54**, pp. 4553-4558.
- B.P. van Eijck, J. van Opheusden, M.M.M. van Schaik and E. van Zoeren. Journal of Molecular Spectroscopy. 1981, **86**, pp. 465-479.

9. J. Demaison, A. Dubrulle, D. Boucher, J. Burie and B.P. van Eijck. Journal of Molecular Spectroscopy. 1982, **94**, pp. 211-214.
10. B.P. van Eijck and F.B. van Duijneveldt. Journal of Molecular Spectroscopy. 1983, **102**, pp. 273-288.
11. W. Caminati, F. Scappini and G. Corbelli. Journal of Molecular Spectroscopy. 1979, **75**, pp. 327-332.
12. G.M. Plummer, E. Herbst, F.C. De Lucia and G.A. Blake. The Astrophysical Journal Supplement Series. 1984, **55**, ?, 633.
13. G.M. Plummer, E. Herbst, F.C. De Lucia and G.A. Blake. The Astrophysical Journal Supplement Series. 1986, **60**, pp. 949-961.
14. E.A. Alekseev. Turkish Journal of Physics. 1995, **19**, No. 11, pp. 1457 -1461.
15. E.A. Alekseev, S.F. Dyubko, V.V. Ilyushin and S.V. Podnos. Journal of Molecular Spectroscopy. 1996, **176**, pp. 316-320.
16. O.I. Baskakov, M.A. Pashaev. Journal of Molecular Spectroscopy. 1992, **151**, pp. 282-291.

**Millimeter Wave Spectrum of Acetic Acid
(A-Type Transitions)**

**V. V. Ilyushin, E. A. Alekseev, S. F. Dyubko,
O. I. Baskakov, and S. V. Podnos**

Frequencies of 316 rotational transitions (A-type) of acetic acid belonging to the ground ($v_t=0$) and first excited ($v_t=1$) torsion states were measured in the frequency range between 60 and 155 GHz. The analysis of the spectrum was carried out for simultaneous fitting of the ground and first torsionally excited states using Internal Axis Method. Obtained set of constants allows to predict frequencies of microwave A-type transitions within experimental accuracy in the range of rotational quantum numbers $J \leq 30$ for $v_t=0$ and $J \leq 20$ for $v_t=1$.