

IR-spectroscopic manifestation of the diacetyl radical anion produced by irradiation of diacetyl in a dimethyl ether matrix at 7 K

Elizaveta V. Saenko, Dimitri N. Laikov and Vladimir I. Feldman

Supplementary data include computed total energies, conformational energies, ionization energies, vibrational frequencies and molecular geometries for diacetyl molecule and diacetyl radical anion.

Total Energy (au):

	neutral	neutral	anionic	detached	anionic	anionic
	trans	cis	trans	trans	cis	t.s.
MP2/L1	-305,709027		-305,699816	-305,692214		
MP2/L1a,L1	-305,799162	-305,789067	-305,815857	-305,782558	-305,802686	-305,764131
CCSD/L1a,L1	-305,831241		-305,848539	-305,810223		
MP2/L2a,L2	-305,975966	-305,965953	-305,996351	-305,959562	-305,983386	-305,944332
MP2/L3a,L3	-306,034618	-306,024580	-306,056539	-306,018400	-306,043703	-306,004696

Conformational Energy (kcal/mol):

	neutral	anionic	anionic
	cis - trans	cis - trans	t.s. - trans
MP2/L1a,L1	6,33	8,26	32,46
MP2/L2a,L2	6,28	8,14	32,64
MP2/L3a,L3	6,3	8,05	32,53

Ionization Energy:

Trans isomer				
	adiabatic		vertical	
	au	kcal/mol	au	kcal/mol
MP2/L1	-0,009211	-5,78	0,007602	4,77
MP2/L1a,L1	0,016695	10,48	0,033299	20,90
CCSD/L1a,L1	0,017298	10,85	0,038316	24,04
MP2/L2a,L2	0,020385	12,79	0,036789	23,09
MP2/L3a,L3	0,021921	13,76	0,038139	23,93

Vibrational Frequencies (MP2 level):

H3CCOCOCH3 trans

Mode	L1			L1a,L1			L2a,L2		
	Freq,	Mass,	IR Int,	Freq,	Mass,	IR Int,	Freq,	Mass,	IR Int,
1	56,57	3,36	8,547	51,22	4,03	10,867	53,98	4	11,012
2	124,77	1,06	0	130,19	1,04	0,013	127,95	1,05	0,013
3	128,57	1,09	0,045	130,69	1,06	0,001	128,99	1,06	0
4	240,72	3,63	15,005	240,93	3,64	15,69	239,29	3,62	15,824
5	356,67	3,52	4,614	344,36	3,49	5,847	343,5	3,45	6,047
6	366,82	3,37	0	365,42	3,37	0	363,72	3,33	0
7	531,88	5,97	0	523,64	6,33	0	526,49	6,37	0
8	541,59	3,18	36,967	542,16	3,34	38,062	540,79	3,29	39,153
9	630,95	2,1	0	615,84	2,18	0	616,44	2,13	0
10	690,39	3,51	0	697,49	3,59	0	703,53	3,53	0
11	912,32	2,35	25,006	920,83	2,3	22,087	925,23	2,23	20,053
12	967,6	1,44	5,879	970,04	1,43	3,52	965,12	1,44	3,94
13	1014,85	1,77	0	1017,79	1,73	0	1016,97	1,73	0
14	1076,66	2,13	0	1072,14	2,05	0	1070,41	2,09	0
15	1139,73	2,28	84,86	1143,34	2,25	67,374	1146,27	2,28	67,504
16	1295,96	3,17	0	1302,69	3,16	0	1308,47	2,73	0
17	1386,44	1,29	64,235	1399,09	1,29	50,923	1393,34	1,31	55,805
18	1394,24	1,5	0	1407,64	1,49	0	1405,6	1,63	0
19	1470,65	1,05	25,239	1476,89	1,07	0,013	1469,29	1,07	0,066
20	1471,13	1,06	0,001	1477,76	1,05	31,419	1469,55	1,05	30,543
21	1478,08	1,05	18,824	1482,81	1,05	18,166	1475,01	1,05	18,336
22	1483,04	1,05	0	1487,08	1,05	0,001	1479,73	1,05	0,001
23	1769,72	11,73	107,586	1712,75	9,35	0	1735,96	9,86	0,001
24	1775,71	10,45	0	1714,84	11,06	157,799	1738,07	11,4	168,413
25	3082,91	1,04	0,035	3064,74	1,04	0,783	3080,01	1,04	0,002
26	3082,98	1,04	1,051	3064,78	1,04	0,031	3080,2	1,04	0,544
27	3168,6	1,1	3,899	3147,28	1,1	0,047	3162,4	1,1	2,145
28	3168,74	1,1	0,001	3147,33	1,1	4,503	3162,51	1,1	0,002
29	3206,95	1,11	0,001	3189,23	1,1	0	3208,05	1,11	0,006
30	3207,37	1,1	9,325	3189,85	1,1	10,44	3208,58	1,11	7,838

H3CCOCOCH3- trans

Mode	L1			L1a,L1			L2a,L2		
	Freq,	Mass,	IR Int,	Freq,	Mass,	IR Int,	Freq,	Mass,	IR Int,
1	117,6	1,01	0,011	75,12	1,08	1,12	75,75	1,08	0,931
2	128,24	1,06	0	96,66	1,06	0	99,26	1,06	0
3	136,56	3,52	8,663	127,43	3	11,061	127,57	3,05	10,932
4	277,13	3,28	20,183	270,75	3,45	19,255	268,5	3,45	19,093
5	375,59	3,15	0	370,75	4,43	2,908	370,54	4,4	3,084

6	393,51	4,46	3,957	374,27	3,27	0	371,64	3,27	0,009
7	496,46	3,52	12,542	499,14	3,51	19,239	498,13	3,48	19,399
8	579,25	5,51	0	561,77	5,98	0	563,53	6,01	0
9	602,01	2,8	0	583,7	2,96	0	587	2,86	0
10	709,91	3,79	0	711,52	3,67	0	716,13	3,59	0
11	909,02	2,47	6,083	925,67	2,28	6,178	932,67	2,21	5,096
12	992,94	1,68	0	995,74	1,63	0	997,81	1,64	0
13	1017,46	1,43	2,382	1019,71	1,4	0,236	1010,68	1,41	0,027
14	1025,51	1,69	0	1030,95	1,64	0	1025,62	1,67	0
15	1104,24	2,26	76,048	1111,12	2,34	60,775	1113,21	2,35	56,248
16	1308,99	1,62	0	1325,91	1,8	0,001	1322,24	1,54	0
17	1317,44	1,37	69,855	1343,05	1,43	90,685	1337,78	1,37	62,393
18	1365,5	2,84	0	1378,41	2,5	0	1381,65	3,09	0
19	1465,18	1,65	203,079	1417,84	4,36	418,798	1438,32	3,34	421,804
20	1492,14	1,11	0	1487,83	1,17	0,002	1481,19	1,16	0,005
21	1505,65	1,05	2,397	1497,26	1,12	22,193	1492,38	1,28	82,353
22	1506,02	1,05	0,001	1505,29	1,05	7,57	1496,21	1,05	7,388
23	1523,04	2,02	264,802	1505,48	1,05	0,046	1496,56	1,05	0,016
24	1667,78	8,78	0	1584,26	5,83	0	1603,89	7,13	0
25	3026,89	1,04	174,893	3020,28	1,04	137,122	3035,14	1,03	150,764
26	3030,72	1,04	0	3022,9	1,04	0	3037,96	1,04	0,001
27	3095,07	1,1	0	3089,95	1,1	0	3105,96	1,1	0,011
28	3095,24	1,1	119,836	3091,06	1,1	76,882	3106,8	1,1	76,002
29	3173,96	1,1	0,005	3149,65	1,1	0,001	3166,58	1,1	0,003
30	3174,13	1,1	42,527	3150,03	1,1	42,415	3166,97	1,1	39,962

H3CCOCOCH3- cis

Mode	L1a,L1			L2a,L2		
	Freq,	Mass,	IR Int,	Freq,	Mass,	IR Int,
1	86,78	1,66	0,128	81,67	1,49	0,085
2	90,76	1,05	0,665	87,37	1,04	0,788
3	138,6	1,85	0,003	134,49	2,14	0,011
4	295,27	3,44	1,475	293,37	3,45	1,556
5	351,2	3,79	1,993	347,93	3,73	2,109
6	415,41	4,16	2,668	413,57	4,13	2,917
7	452,86	2,93	0,13	451,82	2,91	0,121
8	580,59	4,67	3,71	583,14	4,67	4,507
9	596,68	3,35	0,002	601,75	3,21	0,002
10	707,45	4,01	0,732	713,69	3,93	0,89
11	959,79	1,45	11,291	961,63	1,46	9,49
12	970,78	1,89	15,756	968,65	1,44	1,563
13	977,03	1,49	30,051	975,92	1,91	44,366
14	1009,49	1,6	0,281	1006,93	1,63	0,242
15	1086,26	3,21	11,405	1093,82	3,32	12,464
16	1269,4	5,73	145,255	1279,7	5,13	128,32

17	1353,83	1,26	1,518	1345,18	1,27	0,467
18	1366,24	1,26	22,043	1357,67	1,3	30,655
19	1456,98	2,62	351,617	1462,53	1,43	181,62
20	1489,79	1,09	27,4	1480,15	1,08	23,461
21	1496,48	1,23	70,62	1493,99	1,16	58,595
22	1505,83	1,05	0,886	1497,79	1,05	0,44
23	1513,73	1,23	58,135	1516,88	2,24	245,248
24	1625,65	7,68	324,994	1645,07	8,62	357,853
25	3007,13	1,04	32,501	3021,25	1,04	37,334
26	3008,66	1,04	56,42	3022,51	1,04	63,714
27	3082,23	1,1	70,688	3095,58	1,1	71,066
28	3087,77	1,09	5,65	3102,89	1,09	5,72
29	3130,89	1,1	62,354	3149,65	1,1	58,784
30	3133,8	1,1	13,404	3152,07	1,1	13,511

Molecular Geometry (Å):

H3CCOCOCH3 trans

MP2/L1:			
6	-0,56579	0,52437	0,00000
6	0,56579	-0,52437	0,00000
8	-0,29798	1,70711	0,00000
8	0,29798	-1,70711	0,00000
6	-1,96295	-0,03475	0,00000
6	1,96295	0,03475	0,00000
1	-2,6853	0,78101	0,00000
1	-2,10891	-0,672	-0,87599
1	-2,10891	-0,672	0,87599
1	2,6853	-0,78101	0,00000
1	2,10891	0,672	-0,87599
1	2,10891	0,672	0,87599

MP2/L1a,L1:			
6	-0,57328	0,51493	0,00000
6	0,57328	-0,51493	0,00000
8	-0,3044	1,7063	0,00000
8	0,3044	-1,7063	0,00000
6	-1,96954	-0,03635	0,00000
6	1,96954	0,03635	0,00000
1	-2,68579	0,78508	0,00000
1	-2,1153	-0,67403	-0,87716
1	-2,1153	-0,67403	0,87716
1	2,68579	-0,78508	0,00000
1	2,1153	0,67403	-0,87716
1	2,1153	0,67403	0,87716

CCSD/L1a,L1:			
6	-0,5755	0,51567	0,00000
6	0,5755	-0,51567	0,00000
8	-0,30968	1,69698	0,00000
8	0,30968	-1,69698	0,00000
6	-1,9772	-0,03768	0,00000
6	1,9772	0,03768	0,00000
1	-2,69211	0,7868	0,00000

1	-2,12529	-0,67363	-0,87946
1	-2,1253	-0,67363	0,87946
1	2,69211	-0,78681	0,00000
1	2,12529	0,67363	-0,87946
1	2,1253	0,67363	0,87946

MP2/L2a,L2:			
6	-0,57154	0,51423	0,00000
6	0,57154	-0,51423	0,00000
8	-0,30217	1,70138	0,00000
8	0,30217	-1,70138	0,00000
6	-1,96357	-0,03544	0,00000
6	1,96357	0,03544	0,00000
1	-2,67676	0,78202	0,00000
1	-2,10766	-0,67176	-0,87209
1	-2,10766	-0,67176	0,87209
1	2,67676	-0,78202	0,00000
1	2,10766	0,67176	-0,87209
1	2,10766	0,67176	0,87209

MP2/L3a,L3:			
6	-0,5712	0,51373	0,00000
6	0,5712	-0,51373	0,00000
8	-0,30153	1,69988	0,00000
8	0,30153	-1,69988	0,00000
6	-1,96167	-0,03528	0,00000
6	1,96167	0,03528	0,00000
1	-2,67404	0,7817	0,00000
1	-2,10501	-0,67151	-0,87117
1	-2,10501	-0,67151	0,87117
1	2,67404	-0,7817	0,00000
1	2,10501	0,67151	-0,87117
1	2,10501	0,67151	0,87117

Molecular Geometry (Å):

H3CCOCOCH3 cis

MP2/L1a,L1:			
6	-0,7809	0,874	0,00000
6	0,7809	0,874	0,00000
8	-1,36548	1,93966	0,00000
8	1,36548	1,93966	0,00000
6	-1,49849	-0,45371	0,00000
6	1,49849	-0,45371	0,00000
1	-2,57483	-0,28127	0,00000
1	-1,21883	-1,03934	-0,88204
1	-1,21883	-1,03934	0,88204
1	2,57483	-0,28127	0,00000
1	1,21883	-1,03934	0,88204
1	1,21883	-1,03934	-0,88204

MP2/L2a,L2:			
6	-0,7788	0,87192	0,00000
6	0,7788	0,87192	0,00000
8	-1,36159	1,93414	0,00000
8	1,36159	1,93414	0,00000
6	-1,4925	-0,45247	0,00000
6	1,4925	-0,45247	0,00000
1	-2,56433	-0,28203	0,00000
1	-1,21241	-1,03578	-0,87687
1	-1,21241	-1,03578	0,87687
1	2,56433	-0,28203	0,00000
1	1,21241	-1,03578	0,87687
1	1,21241	-1,03578	-0,87687

MP2/L3a,L3:			
6	-0,77814	0,87076	0,00000
6	0,77814	0,87076	0,00000
8	-1,36002	1,93227	0,00000
8	1,36002	1,93227	0,00000
6	-1,49145	-0,45215	0,00000
6	1,49145	-0,45215	0,00000
1	-2,56225	-0,28092	0,00000

1	-1,21138	-1,03497	0,87629
1	-1,21138	-1,03497	-0,87629
1	2,56225	-0,28092	0,00000
1	1,21138	-1,03497	-0,87629
1	1,21138	-1,03497	0,87629

Molecular Geometry (Å):

H3CCOCOCH3- trans

MP2/L1:			
6	-0,51938	0,49866	0,00000
6	0,51938	-0,49866	0,00000
8	-0,3394	1,74607	0,00000
8	0,3394	-1,74607	0,00000
6	-1,94242	-0,06175	0,00000
6	1,94242	0,06175	0,00000
1	-1,9189	-1,15316	0,00000
1	-2,49047	0,29736	0,88087
1	-2,49047	0,29736	-0,88087
1	1,9189	1,15316	0,00000
1	2,49047	-0,29736	0,88087
1	2,49047	-0,29736	-0,88087

MP2/L1a,L1:			
6	-0,53788	0,48047	0,00000
6	0,53788	-0,48047	0,00000
8	-0,36878	1,74542	0,00000
8	0,36878	-1,74542	0,00000
6	-1,95373	-0,07056	0,00000
6	1,95373	0,07056	0,00000
1	-1,95292	-1,16306	0,00000
1	-2,48763	0,30292	0,88320
1	-2,48763	0,30292	-0,88320
1	1,95292	1,16306	0,00000
1	2,48763	-0,30292	0,88320
1	2,48763	-0,30292	-0,88320

CCSD/L1a,L1:			
6	-0,53649	0,4759	0,00000
6	0,53649	-0,4759	0,00000
8	-0,37157	1,73771	0,00000
8	0,37157	-1,73771	0,00000
6	-1,95937	-0,07012	0,00000
6	1,95937	0,07012	0,00000
1	-1,96708	-1,16374	0,00000

1	-2,49552	0,30247	0,88473
1	-2,49555	0,30252	-0,88473
1	1,96708	1,16374	0,00000
1	2,49554	-0,30251	0,88473
1	2,49552	-0,30248	-0,88473

MP2/L2a,L2:			
6	-0,53748	0,47981	0,00000
6	0,53748	-0,47981	0,00000
8	-0,36919	1,73944	0,00000
8	0,36919	-1,73944	0,00000
6	-1,94812	-0,0713	0,00000
6	1,94812	0,0713	0,00000
1	-1,94633	-1,15879	0,00000
1	-2,47957	0,3013	0,87876
1	-2,47957	0,3013	-0,87876
1	1,94633	1,15879	0,00000
1	2,47957	-0,3013	0,87876
1	2,47957	-0,3013	-0,87876

MP2/L3a,L3:			
6	-0,53757	0,4796	0,00000
6	0,53757	-0,4796	0,00000
8	-0,36846	1,73783	0,00000
8	0,36846	-1,73783	0,00000
6	-1,94614	-0,07163	0,00000
6	1,94614	0,07163	0,00000
1	-1,94266	-1,15829	0,00000
1	-2,4767	0,30109	0,87808
1	-2,4767	0,30109	-0,87808
1	1,94266	1,15829	0,00000
1	2,4767	-0,30109	0,87808
1	2,4767	-0,30109	-0,87808

Molecular Geometry (Å):

H3CCOCOCH3- cis

MP2/L1a,L1:			
6	-0,72469	0,89979	0,00861
6	0,72469	0,89979	-0,00861
8	-1,44288	1,93962	0,04658
8	1,44288	1,93962	-0,04658
6	-1,44203	-0,45947	-0,01490
6	1,44203	-0,45947	0,01490
1	-0,97108	-1,19288	-0,67998
1	-1,48868	-0,90659	0,98918
1	-2,46726	-0,28046	-0,35028
1	0,97108	-1,19288	0,67998
1	1,48868	-0,90659	-0,98918
1	2,46726	-0,28046	0,35028

MP2/L2a,L2:			
6	-0,72393	0,89699	0,00738
6	0,72393	0,89699	-0,00738
8	-1,43892	1,93326	0,04259
8	1,43892	1,93326	-0,04259
6	-1,43667	-0,45817	-0,01440
6	1,43667	-0,45817	0,01440
1	-0,96904	-1,18721	-0,67842
1	-1,47659	-0,9046	0,98480
1	-2,45924	-0,28026	-0,34266
1	0,96904	-1,18721	0,67842
1	1,47659	-0,9046	-0,98480
1	2,45924	-0,28026	0,34266

MP2/L3a,L3:			
6	-0,72384	0,8952	0,00765
6	0,72384	0,8952	-0,00765
8	-1,43683	1,93102	0,04340
8	1,43683	1,93102	-0,04340
6	-1,43634	-0,45801	-0,01470
6	1,43634	-0,45801	0,01470
1	-0,96693	-1,18751	-0,67538

1	-1,47969	-0,90177	0,98459
1	-2,45667	-0,27891	-0,34625
1	0,96693	-1,18751	0,67538
1	1,47969	-0,90177	-0,98459
1	2,45667	-0,27891	0,34625

Molecular Geometry (Å):

H3CCOCOCH3- Transition State

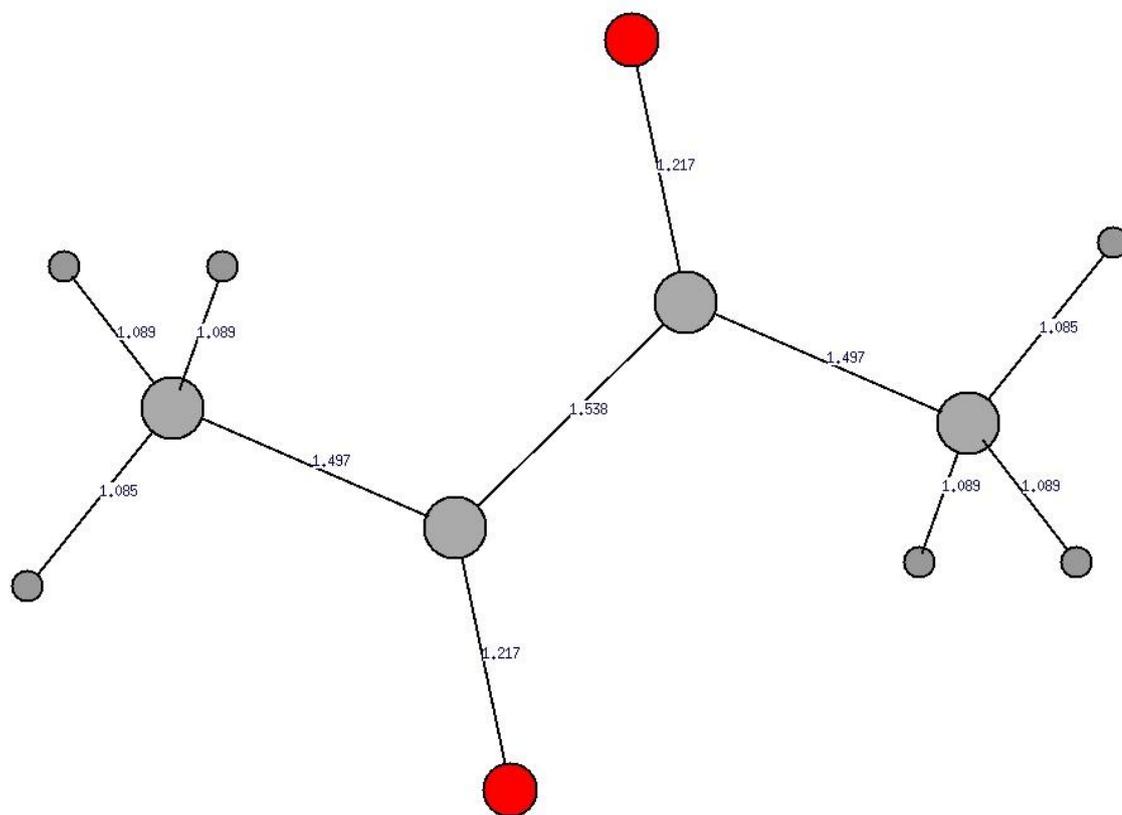
MP2/L1a,L1:			
6	-0,74394	0,77574	0,38137
6	0,67381	0,9253	-0,09626
8	-1,36732	1,58992	1,06231
8	0,72146	1,4605	-1,29858
6	-1,47396	-0,4662	-0,14316
6	1,58384	-0,26344	0,18278
1	-1,31476	-0,53029	-1,22492
1	-1,03812	-1,36518	0,30953
1	-2,54243	-0,42125	0,08939
1	1,498	-0,62186	1,21986
1	1,37865	-1,11814	-0,49287
1	2,62477	0,03489	0,01056

MP2/L2a,L2:			
6	-0,74324	0,77215	0,37996
6	0,66896	0,915	-0,10840
8	-1,35799	1,58503	1,06282
8	0,71293	1,43779	-1,30720
6	-1,47287	-0,46417	-0,14024
6	1,58233	-0,25921	0,18510
1	-1,33165	-0,51375	-1,22027
1	-1,02142	-1,36027	0,28935
1	-2,53208	-0,42927	0,11182
1	1,49914	-0,6051	1,22045
1	1,37945	-1,11827	-0,47974
1	2,61645	0,04009	0,00634

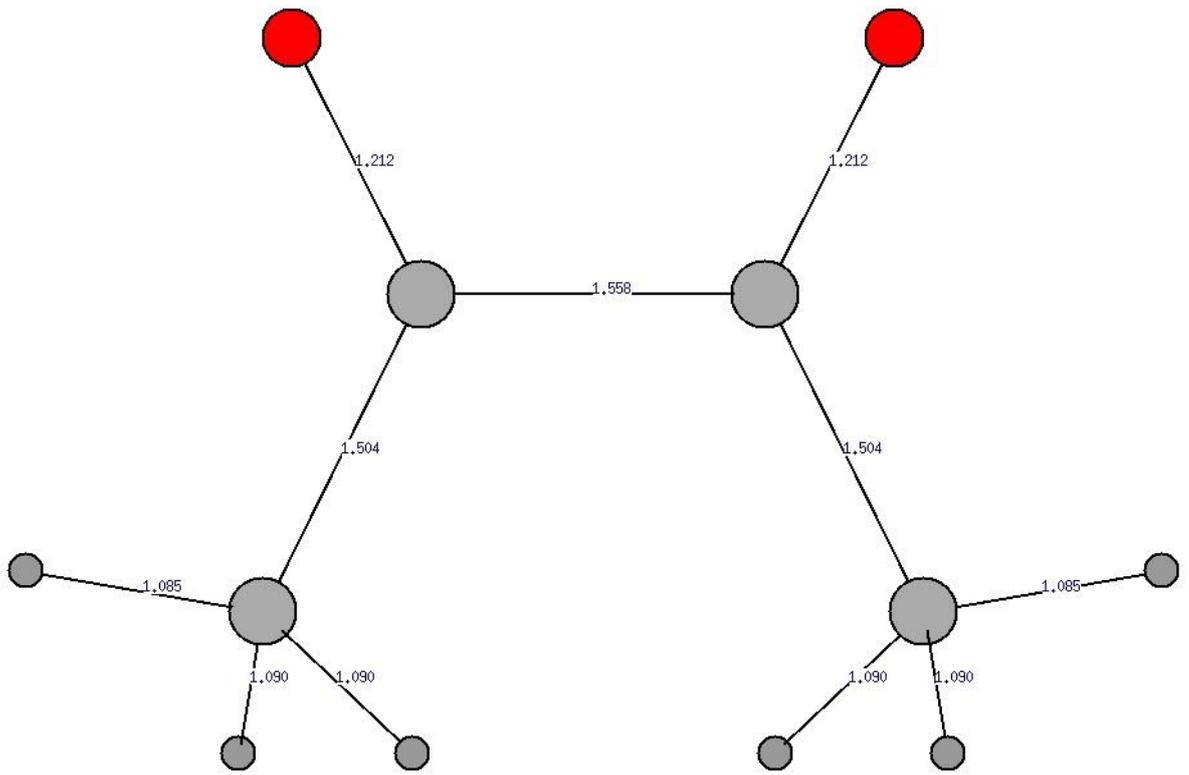
MP2/L3a,L3:			
6	-0,74289	0,77079	0,37879
6	0,66771	0,91031	-0,11290
8	-1,35278	1,58416	1,06326
8	0,71203	1,43233	-1,30886
6	-1,47346	-0,46312	-0,13963
6	1,58229	-0,25866	0,18585
1	-1,33359	-0,51203	-1,21914

1	-1,02182	-1,35868	0,28866
1	-2,53115	-0,42672	0,11434
1	1,49721	-0,60153	1,22073
1	1,38163	-1,11898	-0,47839
1	2,61482	0,04214	0,00730

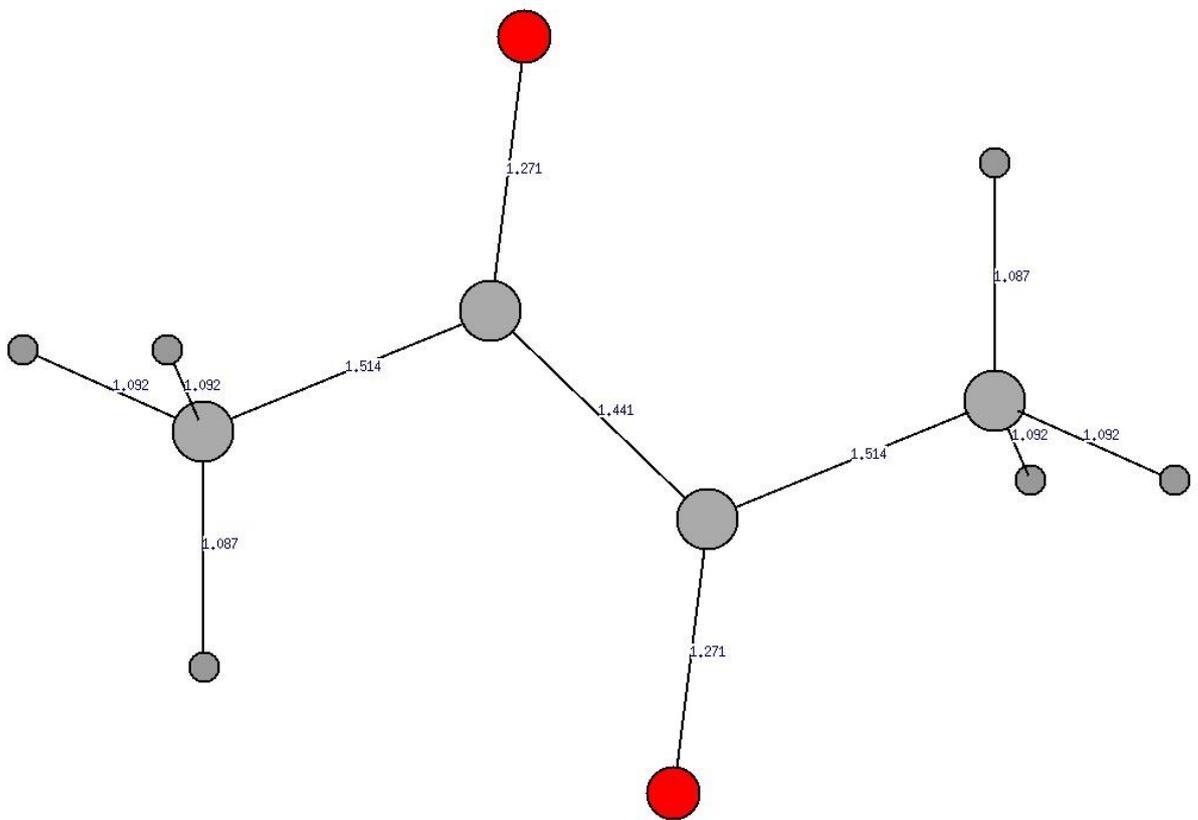
H3CCOCOCH3 trans



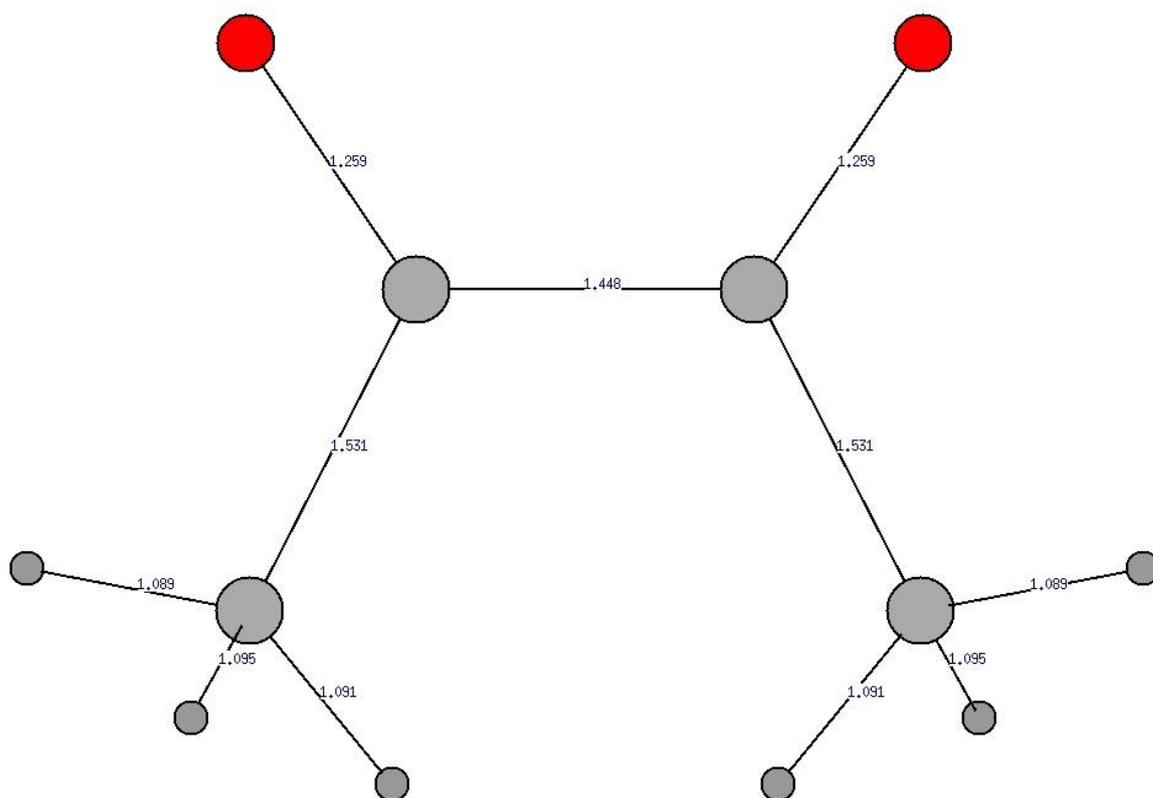
H3CCOCOCH3 cis



H3CCOCOCH3- trans



H3CCOCOCH3- cis



H3CCOCOCH3- transition state

