

1185  
MW

**C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>BrO**

**2-(Bromomethyl)oxirane**  
Epibromohydrin

$r_0$	Å	$\theta_0$	deg
C(1)–C(2)	1.471 <sup>a)</sup>	C(1)–C(3)–H	109.45 <sup>a)</sup>
C(1)–O	1.436 <sup>a)</sup>	$\phi$ <sup>b)</sup>	58.125 <sup>a)</sup>
C(2)–O	1.436 <sup>a)</sup>	$\varphi$ <sup>c)</sup>	21.9 <sup>a)</sup>
C(1)–H	1.082 <sup>a)</sup>	<i>gauche</i> -1	
C(2)–H	1.082 <sup>a)</sup>	C(1)–C(3)–Br	109.73(109) <sup>g)</sup>
C(1)–C(3)	1.513 <sup>a)</sup>	$\tau_1$ <sup>d)</sup>	61.92(300) <sup>g)</sup>
C(3)–H	1.092 <sup>a)</sup>	$\tau_2$ <sup>e)</sup>	–75.04 (300) <sup>g)</sup>
<i>gauche</i> -1		<i>gauche</i> -2	
C(3)–Br	1.967(10)	C(1)–C(3)–Br	108.90(100) <sup>g)</sup>
		$\tau_1$ <sup>d)</sup>	–67.49(300) <sup>g)</sup>
<i>gauche</i> -2		$\tau_3$ <sup>f)</sup>	96.10(300) <sup>g)</sup>
C(3)–Br	1.926(10)	<i>cis</i>	
		C(1)–C(3)–Br	110.85(100) <sup>g)</sup>
<i>cis</i>		$\tau_1$ <sup>d)</sup>	173.10(300) <sup>g)</sup>
C(3)–Br	1.999(10)	$\tau_2$ <sup>e)</sup>	36.08(300) <sup>g)</sup>
		$\tau_3$ <sup>f)</sup>	–33.19(300) <sup>g)</sup>

<sup>a)</sup> Assumed.

<sup>b)</sup> Angle between H–C and the ring plane.

<sup>c)</sup> Angle between C(1)–C(2) and the HC(2)H plane and between C(2)–C(1) and the HC(1)C(3) plane.

<sup>d)</sup> Dihedral angle H–C(1)–C(3)–Br, adjusted to give best least-squares fit with observed rotational constants.

<sup>e)</sup> Dihedral angle O–C(1)–C(3)–Br.

<sup>f)</sup> Dihedral angle C(2)–C(1)–C(3)–Br.

<sup>g)</sup> Uncertainties were not estimated in the original paper.

Mohammadi, M.A., Brooks, W.V.F.: J. Mol. Spectrosc. **77** (1979) 85.

C<sub>1</sub> (*gauche*-1)  
C<sub>1</sub> (*gauche*-2)  
C<sub>1</sub> (*cis*)

