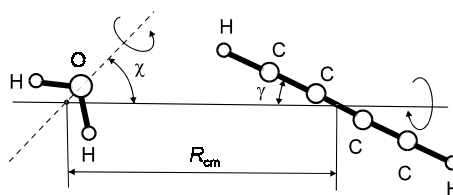


For  $\chi = 0^\circ$ <sup>a)</sup>,  $\gamma = 0^\circ$ <sup>a)</sup>:

	H <sub>2</sub> O · HCCCCCH	HDO · HCCCCCH	D <sub>2</sub> O · HCCCCCH
$r_0(R_{\text{cm}})$ [Å]	5.205(5) <sup>b)</sup>	5.229(5) <sup>b)</sup>	5.250(5) <sup>b)</sup>
$r_0(R_{\text{hyd}})$ <sup>c)</sup> [Å]	2.188(5) <sup>b)</sup>	2.184(5) <sup>b)</sup>	2.180(5) <sup>b)</sup>

For  $\chi = 37.1^\circ$ <sup>a)</sup>,  $\gamma = 8.5^\circ$ <sup>a)</sup>:

	H <sub>2</sub> O · HCCCCCH	HDO · HCCCCCH	D <sub>2</sub> O · HCCCCCH
$r_0(R_{\text{cm}})$ [Å]	5.214(5) <sup>b)</sup>	5.237(5) <sup>b)</sup>	5.258(5) <sup>b)</sup>
$r_0(R_{\text{hyd}})$ <sup>c)</sup> [Å]	2.197(5) <sup>b)</sup>	2.193(5) <sup>b)</sup>	2.188(5) <sup>b)</sup>
$k_s$ [md Å <sup>-1</sup> ] <sup>d)</sup>	0.0741	0.0730	0.0746
$\nu_s$ [cm <sup>-1</sup> ] <sup>e)</sup>	97	95	94

<sup>a)</sup> Assumed.<sup>b)</sup> Uncertainty was not estimated in the original paper.<sup>c)</sup>  $R_{\text{hyd}}$  is the distance between the diacetylene hydrogen and the water oxygen.<sup>d)</sup> Stretching force constant of the intermolecular bond.<sup>e)</sup>  $\nu_s = (2\pi c)^{-1}(k_s/\mu)^{1/2}$ .Matsumura, K., Lovas, F.J., Suenram, R.D.: J. Mol. Spectrosc. **144** (1990) 123.