

5187

1938

$B_3N_3H_6$ (r), $(CH_3)_2NH$ (r), B_2NH_7 (r,

Bauer S.H.

J. Am. Chem. Soc., 1938, 60, 524-30

J

C_2NH_7

$C_2H_5NH_2$

BP-1722-IV | 1953

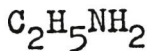
(7)

Collin F.

Bull. Soc. Chim.

Nelg., 1953, 62,

411-27



(2:)

V 5185

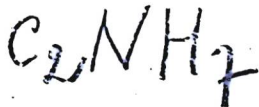
1953

Tannenbaum E., Coffin E.L.,
Harrison A.Y.

J. Chem. Phys., 1953, 21, N 2, 311-
318 (Ann)

The far ultraviolet absorption
spectra of simple alkyl amines

EX., 1954, N 1,
10160



60

1728

CH_3NH_2 , $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ ($\checkmark_i$) 1954

Hadni A.

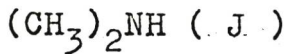
J.phys.et radium, 1954, 15, N 5,
375-376 ()

Filtres pour l'infrarouge
lointain et ...

PX., 1955, 5175

C_2NH_7

W



846

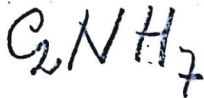
1956

Baba H., Omura J., Higasi K.,

Bull. Chem., Japan, 1956, 29, 4,
504-507

Ионизационные потенциалы некоторых ...

PX., 1957, № 6, 18131



Ю.И

1749

CH_3NH_2 , $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ (γ и, ¹⁹⁵⁶ смл. пост.)

Barceló J.R., Bellanato J.,
Spectrochim. acta, 1956, 8, N 1,
27-40 (англ.)

И изучению строения метильных ...



РХ., 1957, N 23, 73704

10

$C_2H_5NH_2$

H. Hurdzeler, Mark G.

1958

Inghram; J.D. Morrison.

1137

(J.P.)

"J. Chem. Phys."

1958, 28, n^o 1, 76-82.

BP-361-III
(C₂H₅) NH₂ (J) IV-7512 1959

Collin J.,
Canad. J. Chem., 1959, 37, p. 6,
1053-1055 (англ.)



Потенциалы ионизации метиламинов и
этиламинов, определенные методом электрон-
ного удара

РХ., 1959, № 24, 84806

Есть ф. к.

Ю. И.

M 1090
Vi, U. $(\text{CH}_3)\text{SiH}_2$, $(\text{CH}_3)_3\text{SiH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$,
 $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, $(\text{CH}_3)_3\text{N}$

1962

Fateley W.G., Miller F.A.,

Spectrochim. acta, 1962, 18, N 7, 977-993
Torsional frequencies in the far
infrared. II. Molecules with two or three
methyl rotors

Px., 1966, 175172

J

$\text{C}_2\text{H}_7\text{N}$

F

1962

IL- 8577

$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NNH}_2$, CH_3CN (Vi)

Pannetier G., Marsigny L., Gaydon A.G.,
Bremond M.

J.Chim-phys.et phys.-chim.biol.,
1962, 59, N 6, 568-577

Identification de ...

J

$(CH_3)_2NH$

Laurie V.W., Wallrab J.E.

Bull. am. Phys. Soc., 1963, 8, 327

Вращат.
ноч.УВ. частота и угловая скорость
с. сек/сек

	A	B	C	$\gamma_{\text{инв}}$
$(CH_3)_2NH$	34242,8	9334,57	8216,65	1323,1
$(CH_3)_2ND$	30228,2	9279,46	8006,85	53,9
CH_3CO_2NH	27974,2	8039,05	7183,59	1202,3

Лоренц. факт. 3,2 кака (мол)

1963

M 1242

М.П. $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$,
 $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, CH_3OCD_3 , CH_3SCD_3)

Perchard J.-P.

These doct-ingr. Fac. sci. Univ. Paris, 1963,
Luisant-Chartres, 1965, 36p
Contribution a l'etude par spectroscopie
infrarouge de quelques molecules gem-
dimethyles $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{CH}_3)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$,

PT., 1967, 1D231D

J

$\text{C}_2\text{H}_7\text{N}$

$(CH_3)_2NH$, $(CH_3)_2ND$ ($\nu_c, \nu_o, \nu_A, \nu_B, \nu_C$) (V_c, V_o, V₄₄) 1964.

Perchard J.P., Forel M.P., Josien M.L.
J. Chim. Phys., 1964, 61(5), 652-9.

III. Spectra of the dimethylamines.
 $(CH_3)_2NH$ and $(CH_3)_2ND$.

10 / Expt. Spectrosc. / CA, 1964, 61, 49, 10188d

М-445

1964

CH_3NH_2 ; $\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2$; (ν , см. нм)

Яковлев И.И., Шейнкер Ю.Н., Попов Е.М.
"Тр. Комисс. по спектроскопии АН
СССР", 1964, т. 3, вып. I, 10-18

Расчет нормальных колебаний метил-
амина

J
РР, 1965, 11 96

$\text{C}_2\text{H}_7\text{N}$

1965

 $(CH_3)_2NH$ C_2NH 7

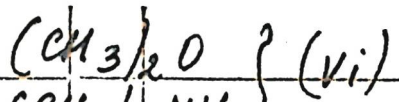
Infrared spectra and vibrational assignments in dimethylamines. M. J. Buttler and D. C. McKean (Univ. Aberdeen, Scot.). *Spectrochim. Acta* 21(3), 465-83(1965)(Eng). Ir spectra were obtained in the gaseous state and in glassy and cryst. phases at 78°K. for $(CH_3)_2^{14}NH$ and $(CH_3)_2^{14}ND$ between 3400 and 700 cm^{-1} . Some ir data were also obtained in the region below 1600 cm^{-1} for $(CH_3)_2^{15}NH$. The a'' NH bending mode is located in the crystal at 1525 cm^{-1} . It is not yet possible to identify the Me stretching and deformation modes, but the remaining vibrations can be satisfactorily assigned in the crystal spectra. The mols. in the crystal are H bonded and the a' NH bend is split into a wide doublet at 893 and 867 cm^{-1} . The NH stretching band, though broad, is apparently not split. The ^{14}N - ^{15}N frequency shifts are discussed. They do not provide an easy means of distinguishing vibration frequencies which are predominantly CN stretching modes.

RCSQ

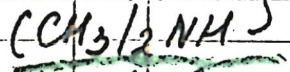
C.A. 1965.62.8

8527A-8528a

1965

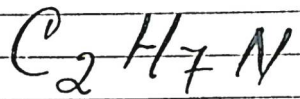


M1262



Chalmers D.D., McKean D.C.,
Spectrochim. Acta, 1965, 21,
N8, 1387-89

10



1965

M740

H_2O , CH_3OH , CH_3OCH , $HCHO$, $CHOOH$, CH_3COOH ,

NH_3 , $\underline{CH_3NH_2}$, $\underline{(CH_3)_2NH}$; (A)

Munson M.S.R.

J. Amer. Chem. Soc., 1965, 87, N 11,
2332-2336

Proton affinities and the methy. ...

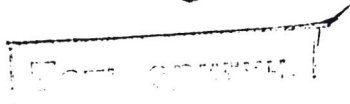
J

PK, 1966, 3 55

J

orig.

C_2H_7N



$(CH_3)_2NH$

Perchard J-P. 1965

$(CH_3)_2N^+$

(UK -
manip)

These doct. - inge. Fac. sci.
Univ. Paris 1963, Guisant-
Charles, 1965, 36 p.

C_2NH_7

Ученые-химики UK - манипуля-
ционные группы и проба-
ции по- мере
[see. $(CH_3)_2O$] III

1965

Microwave studies of ~~ethylamine~~ ethylamine. James Edward Wollrab
(Stanford Univ., Stanford, Calif.). *Univ. Microfilms* (Ann Ar-
bor, Mich.), Order No. 65-6361, 202 pp.; *Dissertation Abstr.*
26(1), 123(1965)(Eng). SNDC

 $(CH_3)_2NH$ C_2NH_7

C.A. 1965. 63. 12
1616549

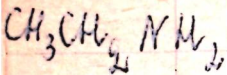
$C_2H_5NH_2$

1967

M. S. Chatterjee

82879j Microwave spectra of ethylamine molecule. D. K. Ghosh, A. Chatterjee, and A. K. Saha (Saha Inst. Nucl. Phys., Calcutta). *Indian J. Phys.* 41(6), 467-9(1967)(Eng). Over 60 microwave absorption lines of the asym. rotor $C_2H_5NH_2$ have been measured between 18.5 and 26.0 Gc. and their Stark effects have been detd. The large no. of observed lines is attributed to splitting due to both internal rotation in the mol. and to inversion doubling. E. O. Forster

C.A. 1968. 68. 18

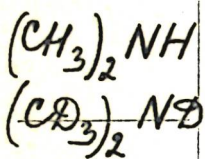


1967

5 Д371. Микроволновой спектр молекулы этиламина.
Ghosh D. K., Chatterjee A., Saha A. K. Microwave spectra of ethylamine molecule. «Indian J. Phys.», 1967, 41, № 6, 467—469 (англ.)

✓ Измерен микроволн. спектр поглощения этиламина в области 18,5—26,0 кМгц. Приведены таблицы частот с указанием относит. интенсивностей полос и порядка штарковского расщепления. Большое число линий в спектре может быть связано с расщеплением за счет внутреннего вращения или инверсионного удвоения. Э. В. Б.

Ф. 1968. 5. 2



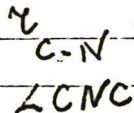
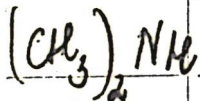
Moeller K.D. a gp. 1967

J. Chem. Phys., 47(8),
2609.

Far-infrared torsional
vibration spectra of
one-, two-, and three-
 (CX_3) top molecules.

(see C₂H₅Cl) III

1968



7322k) Electron diffraction study of gaseous dimethylamine and trimethylamine. Beagley, Brian; Hewitt, T. G. (Univ. Glasgow, Glasgow, Scot.). *Trans. Faraday Soc.* 1968, 64(10), 2561-70 (Eng). The mol. structures of dimethylamine and trimethylamine in the gas phase have been detd. accurately by electron diffraction. The C-N bond lengths in the two mols. are equal (1.455; reproducibility 0.002 Å.). This value is 0.010 Å. less than that obtained by Bartell in methylamine. The C-N-C angles are 111.8 and 110.6°, resp. (reproducibilities 0.6°).

RCTD

+1

C.A. 1969. 70. 2



$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

Синтез

ж. 1969. 9

1968
9 Б99. Электронографическое изучение газообразных диметиламина и триметиламина. Beagley B., Hewitt T. G. Electron diffraction study of gaseous dimethylamine and trimethylamine. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 10, 2561—2570 (англ.)

Методом газовой электронографии исследовано строение молекул $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$ (I) и $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ (II) по кривым $sM(s)$. При расшифровке структуры I сделаны следующие предположения: молекула имеет симметрию $C_s(m)$ связь N—H лежит в плоскости, образованной атомами углеродов и азота, конформация метильных групп друг относительно друга скошенная. Найдены следующие значения межъядерных расстояний, амплитуд и

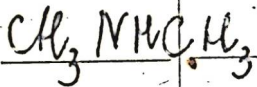
+1

X

углов: (V—H $1,00 \pm 0,02$, $0,05 \pm 0,02$, C—H $1,106 \pm 0,003$,
 $0,075 \pm 0,004$, C—N $1,455 \pm 0,002$, $0,046 \pm 0,001$, C...H(N)
 $1,99 \pm 0,02$, $0,05 \pm 0,02$, N...H(C) $2,133 \pm 0,006$,
 $0,090 \pm 0,006$, C...C $2,411 \pm 0,006$, $0,074 \pm 0,005$
 C...H(C) $2,703$, $0,13 \pm 0,01$, C...H C $3,386$, $0,14 \pm 0,03$
 (H в плоскости CNC), LCNC $111,8 \pm 0,6^\circ$, LCNH $107,0 \pm$
 $\pm 2^\circ$. LHCH $106,8 \pm 0,8$ NCH $112,0 \pm 0,8$. При расшиф-
 ровке II сделано предположение, что молекула обла-
 дает симметрией C_{3v} . Найдены следующие значения
 межъядерных расстояний, амплитуд и углов: C—H
 $1,111 \pm 0,005$, $0,081 \pm 0,005$, C—N $1,454 \pm 0,002$ $0,45 \pm$
 $\pm 0,003$, N...H(C) $2,107 \pm 0,011$, $0,097 \pm 0,010$, C...C
 $2,390 \pm 0,006$, $0,059 \pm 0,006$, C...H(C) $2,645$, $0,16 \pm 0,02$,
 C...H(C) $3,356$, $0,10 \pm 0,03$.

И. Ронова

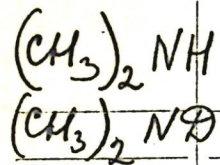
1968



Dellepiane G.,
Zurbi G.

Z. Naturforsch., 23a, n 10,
1661.

Средние асим. метилов
кислоты метилами-
на и диметилами-
на.
(см. CH_3NH_2) III



Vi ,
см. пост.

Dellepiane G., Zerbi G. ¹⁹⁸⁸

М. Слав. Мус., 48, №8, 3573.

Использование нормаль-
ных координат для
описания молекул. Рас-
стой. Т. фундаменталь-
ные координаты просты
описать. Иллюстрируем
нов. (см. CH_3NH_2) 14

1968

$C_2H_5NH_2$

Tsuboi M. u gr

V_i ;

V_o

Nippon Kagaku
Zasshi, 1968, 89, ~9,
821

[$Cu. CH_3NH_2$] III

XIV - 9790

1968

(CH₃)₂NH

8 Б221. Микроволновый спектр диметиламина. Wol-
rab James E., Laurie Victor W. Microwave spect-
rum of dimethylamine. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 11,
5058—5066 (англ.)

В диапазоне 8—44 Гц исследованы вращательные
спектры 12 изотопич. разновидностей молекулы
(CH₃)₂NH в основном колебательном состоянии. Иден-
тифицировано большое число линий переходов между
уровнями с небольшими значениями квантовых чисел
J и τ, из частот к-рых определены значения вращат.
постоянных всех молекул. Измерено инверсионное рас-
щепление Δ ряда линий и отмечена заметная зависи-
мость величины Δ от квантовых чисел. Из величины Δ
и частоты деф. кол. связи NH найден барьер инверсии
4,4 ± 1,1 ккал/моль, сравнимый с барьерами инверсии

Смешан

М. И.

Смешан-турн.
наращивание

X. 1969. 8

метиламина (4,8 ккал/моль) и аммиака (5,9 ккал/моль).
 Отмечены аномальные инверсионные расщепления ряда
 линий, обусловленные вращательно-инверсионным взаи-
 модействием и снятием случайного вырождения уровней
 1_{11}^- и 1_{10}^+ . Из квадрупольной СТС переходов $1_{10} \leftarrow 0_{00}$ и
 $1_{01} \rightarrow 1_{11}$ определены постоянные квадрупольной связи
 ядра N в 10 изотопич. молекулах, а из штарковского
 расщепления переходов $1_{10}^{\pm} \rightarrow 1_{11}^{\mp}$ и $1_{01}^{\pm} \rightarrow 1_{10}^{\pm}$ найдены
 компоненты дипольного момента $\mu_b = 0,295$, $\mu_c = 0,967 D$
 и полный дипольный момент $\mu = 1,01 D$. Из значений
 вращательных постоянных вычислены структурные
 параметры $(CH_3)_2NH$, $CN = 1,466$, $NH = 1,022$, $CH =$
 $= 1,09A$, $\angle CNC = 112,2^\circ$, $\angle HCH = 108,6^\circ$ и $\angle HNC =$
 $= 108,8^\circ$.

М. Р. Алиев

(CH₃)NH
2

XIV-9790

1988

(M.B. Cullis)

(56040e) Microwave spectrum of dimethylamine. Wollrab, James E.; Laurie, Victor W. (Stanford Univ., Stanford, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1968, 48(11), 5058-66 (Eng). Microwave spectra of 12 isotopic species of dimethylamine have been assigned for the ground vibrational state. Splittings arising from the inversion of the amino H have been observed, and an inversion barrier of 4.4 kcal./mole has been estd. From the rotational consts. the structural parameters have been calcd. and the conformation of the methyl groups has been detd. The structural parameters obtained are: $r(\text{CN}) = 1.466 \text{ \AA.}$, $r(\text{NH}) = 1.022 \text{ \AA.}$, $r(\text{CH}) (\text{av.}) = 1.09 \text{ \AA.}$, $\angle \text{CNC} = 112.2^\circ$, $\angle \text{HCH} (\text{av.}) = 108.6^\circ$, $\angle \text{HNC} = 108.8^\circ$. Evidence for an asym. methyl group is discussed. The ^{14}N nuclear quadrupole coupling consts. in the principal quadrupole axis system are $\chi_{xx} = 3.04 \text{ MHz.}$, $\chi_{yy} = 2.01 \text{ MHz.}$, and $\chi_{zz} = -5.05 \text{ MHz.}$, where the x axis is normal to the symmetry plane. Anal. of the Stark effect gave a dipole moment of 1.01 D.

RCIO

C.A. 1988. 69. 14

C_2NH_4

1969

$(CH_3)_2NH$

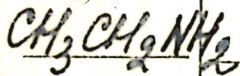
Тюнов Е. М. и др.

ж. структур. химии,

Di

1969, 10, № 6, 1119

$[C_2(CH_3)_3]_N$ II



2;
смет. постр;
у

Bodor N., et al. 1970

J. Amer. Chem. Soc.,

92, 13, 3854.

Основные составные
молекулы с σ-связями
X. Распространение по
двум группам
Шейфера по методу

по приобретению дюр.
деревообрабатывающим пере-
крывающим на соедине-
нии, соединяющие ают
иже Кислород.



$(CH_3)_2NH$

Cornford L. B. 1971

14 gk.

фэ-селектр

"Can. J. Chem.", 1971,

49, 27, 1135-1136

860-11X

$(C_{6H_5}CH_2NH_2)_{III}$

(CH₃)₂ NH

XIV-2354

1871

250 47753r Microwave spectra of the first-excited torsional states and barrier to internal rotation of dimethylamine. Wollrab, James E.; Laurie, Victor W. (McDonnell Douglas Res. Lab., McDonnell Douglas Corp., St. Louis, Mo.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(2), 532-9 (Eng). Rotational spectra in the 1st-excited torsional states of a no. of isotopic species of dimethylamine have been assigned. Internal rotation splittings were obsd. and have been used to calc. a barrier of 3.22 ± 0.02 kcal mole⁻¹. Inversion splittings differ significantly from those obsd. in the ground state spectra while ¹⁴N quadrupole effects are unchanged within exptl. error. RCJQ

C.A. 1971. 44. 10.

$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

$(\text{CH}_3)_2\text{ND}$

XIV-2354

1971

м.п.

50

ф. 1971. 68

6 Д446. Микроволновые спектры и барьер внутреннего вращения диметиламина в первом возбужденном колебательном состоянии. Wollrab James E., Laurie Victor W. Microwave spectra of the first-excited torsional states and barrier to internal rotation of dimethylamine. «J. Chem. Phys», 1971, 54, № 2, 532—539 (англ.)

Исследованы и отождествлены вращательные переходы в двух первых возбужденных колебательных состояниях молекул $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, $\text{CD}_3(\text{CH}_3)\text{NH}$, $\text{CD}_3(\text{CH}_3)\text{ND}$, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$. Расщепление, связанное с внутренним вращением, использовано для расчета барьера

внутреннего вращения, равного $V_3 = 3233 \pm 30 \text{ кал/моль}^{-1}$.
 Значение V_3 хорошо совпадает с данными ИК-спектроскопии. Обнаружено инверсионное расщепление, увеличивающееся с числом J в ряду $J_{0j} \rightarrow J_{1j}$. Отмечено, что расщепление $1_{01}^+ \rightarrow 1_{11}^-$ -перехода больше, чем $2_{02}^+ \rightarrow 2_{12}^+$ -перехода. Найдены постоянные квадрупольного взаимодействия.

Г. П

$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$ VH

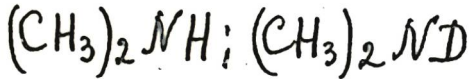
1972

7:

UK-check

119447k Low-temperature infrared study of association in dissolved dimethylamine. Bernard-Houplain, Marie C.; Sandorfy, C. (Dep. Chim., Univ. Montreal, Montreal, Que.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(7), 3412-17 (Eng). The fundamental, 1st, and 2nd overtone of the NH stretching vibration of Me_2NH were measured at temps. ranging from 22 to -190° , in solvents forming rigid glasses at low temps. The self-assocn. of Me_2NH was examd. At room temp. only monomers and dimers were found, while at low temp. a more highly assocd. species was also obsd. The overtones of the dimer were obsd. at low temps. and lead to normal anharmonicities.

C.A. 1972. 76. 20



1973

13 Б178. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния вторичных газообразных алифатических аминов $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$ и $\text{C}_2\text{H}_5\text{NHCH}_3$. G a m e t G., W o t t i H. Raman and infrared spectra of gaseous secondary aliphatic amines [$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{ND}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$ and $\text{C}_2\text{H}_5\text{NHCH}_3$]. «Spectrochim. acta», 1973, A29, № 1, 129—137 (англ.)

(Vi ч.и) Измерены ИК-(4000—200 cm^{-1}) и КР-спектры Me_2NH (I), Me_2ND (II), Et_2NH (III) и EtMeNH (IV) в газовой фазе (ИК- с высоким разрешением — спектральная ширина щели до 0,4 cm^{-1}). Предложено отнесение колебаний I—IV. Эксперим. значения частот I и II согласуются с величинами, рассчитанными ранее в приближении валентно-силового поля. Показано, что на вал.

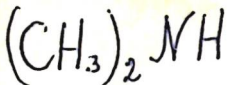
X. 1973. № 13

+2

A

кол. NH не влияют др. колебания. Отнесение колебаний III и IV основано на колебательном анализе алканов Снайдера и Шахтштейнера и на сравнении со спектрами диэтилового эфира, I и II. Расщепление $\nu(\text{NH})$ в спектре КР газа III связано с поворотной изомерией — транс-транс (3328) и транс-гош (3352 см^{-1}) формами. В ИК-спектре такого расщепления не наблюдается (широкая полоса 3340 см^{-1}). Для IV расщепление $\nu(\text{NH})$ наблюдается в ИК-спектре (3350 и 3378 см^{-1}). Частоты деф. кол. аминокгруппы в IV имеют промежут. значения между соотв. величинами в I и III.

Е. Разумова



1973

77565f Raman and infrared spectra of gaseous secondary aliphatic amines [dimethylamine, dimethylamine- d_1 , diethylamine, and ethylmethylaniline]. Gamer, G.; Wolff, H. (Phys.-Chem. Inst., Univ. Heidelberg, Heidelberg, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1973, 29(1), 129-37 (Eng). Improved knowledge of the vibrational frequencies of gaseous secondary aliph. amines was obtained by means of Raman and ir spectra, the latter with improved resolu. Better assignments of the CH deformation and CH stretching vibrations of gaseous Me_2NH and Me_2NO are given. The NH stretching vibration of gaseous Me_2NH hitherto insufficiently known due to its low ir intensity, was detd. unaffected by superposition of other vibrations. The splitting of the NH stretching vibration of gaseous Et_2NH due to rotational isomerism is smaller than previously assumed. It was detected only in the Raman spectrum. The band splitting for gaseous EtMeNH was obsd. in the ir spectrum.

(Vi)

C. A. 1973. 78 ~ 12

1973

 $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

6 Д348. ИК-спектры и спектры комбинационного
 рассеяния газообразных вторичных алифатических ами-
 нов $[(\text{CH}_3)_2\text{NH}, (\text{CH}_3)_2\text{ND}, (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$ и $\text{C}_2\text{H}_5\text{NHCH}_3]$.
 Gamet G., Wolff H. Raman and infrared spectra of
 gaseous secondary aliphatic amines $[(\text{CH}_3)_2\text{NH},$
 $(\text{CH}_3)_2\text{ND}, (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$ and $\text{C}_2\text{H}_5\text{NHCH}_3]$. «Spectrochim.
 acta», 1973, A29, № 1, 129—137 (англ.)

(2i).

Получены ИК-спектры поглощения и спектры комб.
 рас. газообразных диметил-, диэтил-, метилэтиламина
 в области $350—3500 \text{ см}^{-1}$. По отношению интенсивнос-
 тей полос поглощения и рассеяния и контурам ИК-по-
 лос с неразрешенной структурой произведено их отне-
 сение к основным и составным колебаниям и оберт-
 нам. В спектрах аминов с этильной группой наблюде-
 ны полосы, отнесенные к разным поворотным изомерам.
 Библ. 14. М. В. Тонков

Ф. 1973. № 6

(73)



$C_2H_5NH_2$

1973

Katsumato Shunji, et al.
"Bull. Chem. Soc. Jap."
1973, 46, NII, 339I-95.

снелфол, V_i

● [сес. CH_3NH_2 ; III]

$C_2H_5NH_2$

1973

Ляст И.Ц.

"Ж. структур. химии" 1973, I4, №2, 340-344

Электр.
структ.

(сир. NH_3 ; III)

41004.1802

Ex-C, Ph, TC, Ch

 $(CH_3)_2NH$ (AP)
 2377 02
 $(CH_3)_3N$

1974

2537

Davis D. William, Rabalais J. Wayne. Model for proton affinities and inner-shell electron binding energies based on the Hellmann-Feynman theorem.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 17,

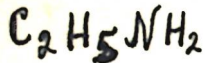
5305-5310

(англ.)

0205 пик

175' 1780 197

ВИНИТИ



1974

8 Д500. Расчет кривой инфракрасного спектра поглощения этиламина. Грибов Л. А., Носкова М. П., Крупеникова И. Н. «Оптика и спектроскопия», 1974, 36, № 4, 801—803

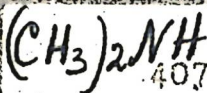
Произведен расчет ИК-поглощения газообразного этиламина. Частоты, формы колебания и интенсивности рассчитаны для 2 конформаций молекулы по известным из литературы структурным параметрам, которые при расчете были незначительно изменены. Полуширины полос оценены по эксперим. спектру. Сравнение с эксперим. данными позволяет сделать однозначный выбор модели. Частоты конформеров мало отличаются, а различия в интенсивностях велики, что подтверждает преимущество использования интенсивности ИК-полос по сравнению с частотами при конформационном анализе. Приведены силовые постоянные и электроопт. параметры этиламина. Библ. 11. М. В. Тонков

ν_i ; сил. пост.

ф. 1974. № 8

41004, 1801

Ch, Ex-Ch, TC



40771

02

1974

2535

Martin R.L., Shirley D.A., The relation
of core-level binding energy shifts to
proton affinity and Lewis basicity.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 17,
5299-5304

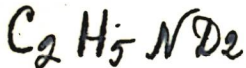
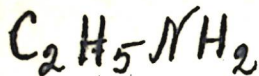
(abbr.)

0205

175 178 0 1 0 7

BRUNNEN

1974



и.н., етфурі.
и.к. спектр.

138906h Gauche trans rotational isomerism in ethylamine. Far-infrared spectra of ethylamine-d₂. Manocha, A. S.; Tuazon E. C.; Fateley, W. G. (Dep. Chem., Carnegie-Mellon Univ., Pittsburgh, Pa.). *J. Phys. Chem.* 1974, 78(8), 803-7 (Eng). The gauche-trans rotational isomerism of EtNH₂ in the vapor phase was studied by an anal. of the far-ir spectra of EtND₂ and CH₃CD₂ND₂. The potential function for internal rotation about the C-N bond, derived through a 1-dimensional approxn., is $2V(\alpha) = -303.2(1 - \cos \alpha) + 184.4(1 - \cos 2\alpha) + 734.7(1 - \cos 3\alpha) - 19.3(1 - \cos 6\alpha) \text{ cm}^{-1}$. The difference between the potential energy min. of the gauche and trans conformations is 104 cm^{-1} , the gauche being the more stable form.

C. A. 1974. 80. N24.



505191.2502

Ch, TC

90978 (24. ст. 94)

1974

 $C_2H_5NH_2$

X

3-8958

фретоуа. снхтр

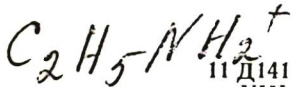
Ikuta Shigeru, Harada Katsunori, Yoshihara
 Kenji, Shiokawa Takanobu. Application
 of molecular orbital calculation to
 fragment ionization processes in ethanol
 and ethylamine. "Спектр бунсаки,
 Mass Spectrosc.", 1974, 22, N4, 239-244

(англ.)

348

9 5 3

0361 пик ВИНТИ



1974

11 Д141. Электронное строение ионизованных молекул. VIII. Этиламин. Krier C., Lorquet J. C., Berlingin A. The electronic structure of ionised molecules. VIII. Ethylamine. «Org. Mass Spectrom.», 1974, 8, Jan., 387—401 (англ.)

Электр.
статист.
расчет
по методу
кривых

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2 и модифицированном ППДП Фишера — Кольмара исследовано электронное строение катиона $\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2^+$ (I). Рассчитаны потенц. кривые для разрыва связей $\text{C}-\text{C}$ и $\text{C}-\text{N}$ и на основе полученных результатов подробно обсужден механизм фрагментации I в масс-спектрометре. Исследованы соответствующие перераспределения электронной плотности. Оба метода расчета приводят к выводу о близости силовых постоянных вал. кол. связей $\text{C}-\text{C}$ и $\text{C}-\text{N}$ в I. Потенц. барьеры разрыва связей $\text{C}-\text{C}$ и $\text{C}-\text{N}$ оценены в 1,6 и 1,8 эв соответственно.



ф. 1976 N 11

(эксперим. значения 0,9 и 4,2). Такое неудовлетворительное количественное согласие отнесено на счет плохой параметризации схемы Фишера — Кольмара (по ППДП/2 расчет не проводился). Полученные результаты сопоставлены с данными исследований в рамках принятой в органич. химии модели, оперирующей резонансными структурами, а также моделью Хирота, связывающей вероятность разрыва той или иной связи с электронной плотностью (ЭП) на данной связи, принимаемой равной ЭП высшей занятой МО нейтральной молекулы на данной связи. Детальный анализ распределения ЭП в I показал, что модель Хирота неверно передает это распределение, что обусловлено как рассмотрением только одной МО, так и некорректным переносом результатов с нейтральной молекулы на ион.

В. Л.

1974

$\text{NH}(\text{CH}_3)_2$

Вовна В.И.
Вилесов Ф.И.

(2)

"Оптика и спектроск."
1974, 36, N2, 436-38.



(см. NH_2CH_3 ; III)

11 B264. Спектры комбинационного рассеяния газов.

XVIII. Внутреннее вращение в этил-амине и этилами-
не- d_2 . Durig J. R., Li Y. S. Raman spectra of gases.

XVIII. Internal rotational motions in ethylamine and
ethylamine- d_2 . «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 10, 4110—
4113 (англ.)

Получены спектры КР газ. EtNH_2 (I) и EtND_2 (II)
в области $100\text{--}600\text{ см}^{-1}$. В I ~~переход~~ $1\rightarrow 0$ внутренне-
го вращения наблюдается при 258 см^{-1} , а $2\leftarrow 1$ при
 248 см^{-1} . Обе линии поляризованы, это означает, что
I имеет гош-конфигурацию (симметрия C_1). Вычислена
высота барьера $V=3,71$ ккал/моль, однако, при такой
высоте переход $2\leftarrow 1$ должен иметь частоту на 7 см^{-1}
меньшую, чем наблюдаемая. Это объясняется взаимо-
действием торсионных колебаний C—C и C—N . Для II
наблюдаются линии $250, 234, 216, 189$ и 193 см^{-1} , к-рые
отнесены к переходам $1\leftarrow 0, 2\leftarrow 1, 3\leftarrow 2, 4A\leftarrow 3A$
и $4E\leftarrow 3E$, соотв. Наблюдается линия 484 см^{-1} , обу-
словленная переходом $2\leftarrow 0$. II также имеет гош-струк-
туру. Высота барьера $V_3=3,591$ ккал/моль и $V_6=$
 $=1$ ккал/моль. Исходя из потенц. функции для II пред-
сказано значение частоты внутреннего вращения в
 $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{ND}_2$. Получено хорошее согласие с лит. дан-
ными. Обсуждаются различия в отнесении авторов и
имеющегося в лит-ре для транс-I. Сообщ. XVII см.
РЖХим, 1976, 7Б271. Б. Г. Антипов

$\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_2$

$\text{C}_2\text{H}_5\text{ND}_2$

Но, $\sqrt{I}$
считается

X 1976
N 11

1975

4-1089

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$

X-10 891

1975

спектры

К. Р.

(м.п.)

15 Д471. Спектры комбинационного рассеяния газов. Ч. XVIII. Вращательные состояния в этиламинe и этиламинe- d_2 . Durig J. R., Li Y. S. Raman spectra of gases. XVIII. Internal rotational motions in ethylamine and ethylamine- d_2 . «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 10, 4110—4113 (англ.)

Получены спектры комб. рас. ($100\text{--}600\text{ см}^{-1}$) газообразного этиламина (I) и его дейтеропроизводного (I- d_2) при возбуждении излучением $514,5\text{ нм}$ аргонового лазера мощностью $2,5\text{ вт}$. Зарегистрированы крутильные колебания метильной и аминной групп для основного и возбужденного состояний гошизомеров I и I- d_2 , а также обертоны крутильных колебаний ме-

Ф. 197Е, N. 5.

тильной группы. Вычисленные барьеры внутреннего вращения метильной группы I и I-d₂ составляют 3,71 и 3,59 ккал/моль соответственно. Предположено, что различие высоты барьеров обусловлено неодинаковым взаимодействием метильного и аминного вращательных движений. Определены константы потенц. ф-ции внутреннего вращения вокруг связи C—N в I-d₂: $V_1=279$ см⁻¹, $V_3=707$ см⁻¹ и $V_6=-12$ см⁻¹. Показано, что трансконфигурация I-d₂ более стабильна, причем минимум потенц. кривой гошизомера расположен на 207 см⁻¹ выше. Барьеры гошгош- и трансгошизомеризации I-d₂ равны 779 и 572 см⁻¹. Библ. 17. И. В. А.

$C_2H_5NH_2$

1975

Goetz Rainer.

(P)

Finn Chem Lett 1975,
(7-8) 204-7 (Ger)

(cu C_2H_5OH ; I)

51211.2505

90978

1975

Ch, TC

 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$ * 4-10587Ichikawa Hiroshi, Ogata Michihiko.

Potential energy curves of dissociation
and changes of unpaired electron in the
C-N and C-C cleavages of the ground-state
ethylamine ion. " Спирё бунсэки,

Mass Spectroscopy", 1975, 23, N 2, 157-160
(англ.)

481

0490

0507

ПМК

ВИНИТИ

50613.1882

TC, Ph, Ch

 $(CH_3)_2NH$
 30526GR(γ)

1975

x 4-8988

Kimura_Katsumi, Osafune Kazuteru. Sum rule consideration on valence orbital ionization energies in methyl amines.

"Mol. Phys.", 1975, 29, N 4, 1073-1083

(см: CH_3NH_2 ; III)
 0385 пик (англ.)

353 354

ВИНИТИ

51215.6779

Ch, Ph, TC

(И.К. и Раман эффект) 1975
54997 GR

$\text{H}_3\text{C-NH-CH}_3$ X 4-10903

Hamada Keinotsuke, Morishita Hirofumi.
The vibrational spectra and structures
of $\text{H}_3\text{C-X-CH}_3$ ($\text{X=O, CH}_2, \text{NH}$). "Z. Phys.
Chem." (BRD), 1975, 97, N 5-6, 295-299

(англ., рез. нем.)

0524 п.м.

ВИНИТИ

$(CH_3)_2NH$

1976

Ebel, S., et al.

Z. Naturforsch. 1976,
31b, N2, 178-89

(J)

(Call CH_3PF_3) III

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$

(ЛТГ: 3710)

1975

6 Д408. Внутреннее вращение в этиламинe: интерпретация с точки зрения задачи 2 волчков. Tsuboi Masamichi, Tamagake Keietsu, Hirakawa Akiko Y., Manocha A. S., Tuazon E. C., Fateley W. G. Internal rotation in ethylamine: a treatment as a two-top problem. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 12, 5177—5189 (англ.)

(110)

Получены спектры ИК-поглощения газообразных этиламинов различного изотопного состава по водороду при давл. 120—170 мм рт. ст. в слое 10 см в области 100—300 см^{-1} . Приведены спектры, частоты и отнесение наблюдаемых полос к крутильным колебаниям метильных групп молекул-изомеров, отличающихся ориентацией аминогруппы. Для гошформы наблюдается удвоение линий, связанное с расщеплением уровней двух эквив. положений за счет туннельного эффекта. Развита теория для внутреннего вращения молекул, содержащих два связанных асимметричных

Р-1976 №6

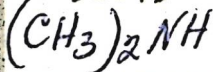
волчка. Определена система координат, получено выражение для кинетич. энергии и гамильтониана, рассчитаны уровни энергии, матричные элементы дипольного момента и интенсивности линий, соответствующих внутреннему вращению. По наблюдаемым частотам построена схема энергетич. уровней. Определены параметры потенциала внутреннего вращения и константы взаимодействия волчков. Разница в миним. энергиях транс- и гошизомера составляет 230 см^{-1} , более устойчивому изомеру отвечает трансформа. Ось внутреннего вращения аминогруппы составляет угол $4,5^\circ$ с осью N—C-связи. Библ. 9.

М. В. Тонков

60720.7547

Ph, Ch, TC

92073



1976

X4-13607

Ohkubo Katsutoshi, Azuma Yutaka,
Okada Masahide. A MINDO/2'-MO study of
the inversion barriers of some molecules
involving first-row atoms. "Bull. Chem.
Soc. Jap.", 1976, 49, N 5, 1397-1398

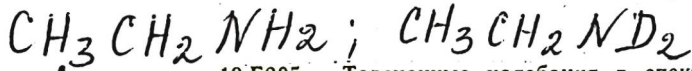
(АНГЛ.)

646 646

654

0662 ЛРК

ВИНИТИ



1976

19 Б205. Тorsiонные колебания в спектрах комбинационного рассеяния этиламинов. Manocha A. S., Fateley W. G. Torsional Raman spectra of ethylamines. «J. Raman Spectrosc.», 1976, 4, № 3, 227—229 (англ.)

Получены спектры КР газ. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$ (I) и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ND}_2$ (II) (давл. 55—700 мм) в области торсионных колебаний NH_2 - и CH_3 -групп $\sim 200\text{—}250\text{ см}^{-1}$ ($140\text{—}190\text{ см}^{-1}$ для дейтерированных образцов). Поляризация измерения в спектрах, а также сравнение со спектрами поглощения в длинноволновой ИК-области, показало, что в спектрах КР проявляются торсионные колебания только гош-изомеров (интенсивность неполносимм. колебаний транс-изомера мала). Произведено отнесение линий к различным типам переходов $\nu_{\text{NH}_2}, \nu_{\text{CH}_3}, \leftarrow \nu_{\text{NC}}, \nu_{\text{CH}_2}$ (в спектрах наблюдаются и «горячие» переходы). Наряду с торсионными колебаниями NH_2 , ND_2 и CH_3 -групп в спектрах II проявляется также торсионное колебание NHD -группы с частотой $\sim 191.0\text{ см}^{-1}$.

А. Бобров

(vi)

X. 1976, 19.

XV-13171
BP-7351-XIV

$C_2H_5NH_2$

~~45~~ 45-13171

1976

Вср - 7351-XIV

9 Д311. Крутильные спектры комбинационного рассеяния этиламинов. Manocha A. S., Fateley W. G. Torsional Raman spectra of ethylamines. «J. Raman Spectrosc.», 1976, 4, № 3, 227—229 (англ.)

В сравнении с ИК-спектрами поглощения изучены спектры комб. рас. ($1120-300\text{ см}^{-1}$) газообразных $C_2H_5NH_2$ и $C_2H_5ND_2$ при давл. до 700 мм рт. ст. Отождествлены частоты различных крутильных колебаний вращательных изомеров. Значения частот крутильных колебаний NHD найдены равными 206 см^{-1} для транс- и 191 см^{-1} для гом-конформаций. Библ. 4.

С. Ф. Б.

ф 1976 №9

60719.1991

TC, Ch

 $(CH_3)_2NH$

40771 (26)

1976

*5-13548

Skaarup Steen, Griffin Lawrence L.,
Boggs James E. Ab initio calculation of
structure and inversion di difluoramine
and dimethylamine.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1976, 98, N 11,
3140-3143 (АНГЛ.)

(см. F_2NH ; III)

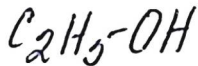
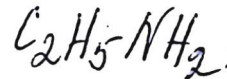
0659 лнк

629 635

6511

ВИНИТИ.

1976

Электр.
строк.

3 Д92. Применение теории возмущений ССП к молекулярным расчетам. Santry David P. Application of SCF perturbation theory to molecular calculations. «Theor. chim. acta», 1976, 42, № 1, 67—75 (англ.)

Самосогласованная теория возмущений применена для построения приближенного решения уравнений метода ССП МО ЛКАО для молекулярной системы. Существенно используется валентное приближение ППДП/2 и предположение, что базис содержит только $1s$ -АО атомов H и по 4 (гибридных) sp -АО остальных атомов. Начальное приближение соответствует картине локализованных электронных пар (связей и неподделенных пар), причем в гамильтониане нулевого приближения учтено поляризационное электростатич. взаимодействие между локализованными парами. В качестве иллюстрации проведены расчеты потенц. кривой внутреннего вращения в пропане, электронного строения молекул $\text{C}_2\text{H}_5\text{X}$, $\text{X}=\text{NH}_2$, OH , F . Результаты сопоставлены с данными прямого расчета ССП для соответствующих

Ф. 1977
№ 3

①

молекул. Сделан вывод, что при учете членов до 3 порядка включительно предложенная методика обладает достаточной точностью и может быть использована для количеств. исследования электронного строения молекул.

А. Багатурьянц



$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

1977

10 БЗ9. Полная оптимизация геометрии молекул нитросоединений в приближении ППДП/2. Белик А. В., Шляпочников В. А. «Изв. АН СССР. Сер. хим.», 1977, № 12, 2798—2800 CH_3NO_2 $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

На примере молекул нитрометана, нитрамида и метилнитрамина показаны возможности использования метода ППДП/2 для расчета геометрич. параметров соединений в газовой фазе. Дано краткое обсуждение метода оптимизации и отмечены значит. «неточности» метода в оценке величин длин валентных связей. Проведено сопоставление полученных результатов с известными эксперим. данными и результатами расчетов в др. приближениях. Метод ППДП/2 рекомендован для оценки конформаций и расчета валентных углов в молекулах нитросоединений.

Автореферат

молекулы
геометрия

Х. 1978, N10

70623.7380
Ch, Ph, TC

(over 1197)
(CH₃)₂NH

1977
* 4-18880

Durig J.R., Griffin M.G., Groner P.

Analysis of torsional spectra of molecules with two internal C_{3v} rotors. 3.
Far-infrared and gas phase raman spectra of dimethylamine-d₀, -d₃, and -d₆.

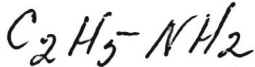
"J. Phys. Chem.", 1977, 81, N 6, 554-560 (англ.)

850 855

844 0903 ПКК

ВИНИТИ

850 855



1977

6 Д244. Исследование правил фрагментации в органической масс-спектрометрии методами МО. I. Этиламин как модельное соединение для разрыва связи в α -положении. Konishi Hideyuki, Nakata Hisao. An Examination of the Fragmentation Rules in Organic Mass Spectrometry by MO Methods. I. Ethylamine as a Model Compound for the α -Cleavage. «Синцуре бунсэки, Masc Spectrosc.», 1977, 25, № 3, 233—242 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ЧПДП исследовано электронное строение этиламина $C_2H_5NH_2$ катона $C_2H_5NH_2^+$, радикала $C_2H_5NH\cdot$ и катион-радикала $C_2H_5NH_3^+$, рассматриваемых как модельные соединения для исследования механизма разрыва связи в α -положении при масс-спектральных исследованиях. Рассчитаны распределения электронной и спиновой плотности, локализованные МО, различные индексы связей, потенц. кривые как ф-ции длин свя-

③

Ф. 1948, № 6

Электрон.
строение

зей С—С (остальные геометрич. параметры не варьировались). Обнаружено, что неспаренный электрон молекулярного иона играет существенную роль в процессе разрыва α -связи. Также важной для предсказания направления фрагментации является стабилизация переходного состояния благодаря эффектам сопряжения, для анализа которых удобно использование локализованных МО. Показано, что предложенный автором индекс связи — сумма электростатической и основной энергий — коррелирует с вероятностью разрыва связи лучше, чем двухцентровая компонента полной энергии.

В. Л. Лебедев



$(CH_3)_2NH$

[ammuch 8089]

1978.

номери.

написати,

раман спект

и.к. спектр

Durig J. R., et al.

Indian J. Pure
and Appl. Phys.

1978, 16, 325-93

$\text{NH}(\text{CH}_3)_2$

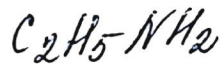
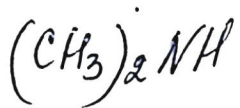
1948

40
исверсии

Weller T., Lockman R.

Acta Chim. Acad. Sci. Hung.,
1948, 98/3), 294-302.

(сис. NH_3 ; III)



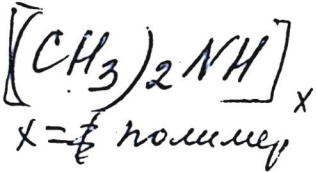
кв. дек.
факт,
 μ

Ammonia 10994 1979.

Leszczynski J.; et al.

Bull. acad. polon. sci

Ser. sci. chim., 1979, 27
(12), 951-62.



молекул.
структура

Lotus 8456 | 1979

Odutola J. A.; et al.

J. Amer. Chem. Soc.,
1979, 101 (17), 4787-92

С 2Н5 NH₂

исл. мик.
расчет

1979
3 Б56. Электронные индексы алкильных заместителей, участвующих в региоселективном метаболическом окислировании. Testa B., Mihailova D., Natcheva R. Electronic indices of alkyl substituents undergoing regioselective metabolic hydroxylation. «Eur. J. Med. Chem.-chim. ther.», 1979, 14, № 4, 295—299 (англ.; рез. франц., нем.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении ППДП/2, расширенным методом Хюккеля (PMX) и неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ (Б1) и 4-31ГФ (Б2) рассчитаны этиламин (I), пропиламин (II), катион II, изопропиламин, этиланилин, этилметилловый эфир (III), пропилметилловый эфир, изопропилметилловый эфир, фенетол, бутен-1 (IV), бутин-1 (V), этилбензол и пропионамид. Б2 использован только для I, III—V. Рассмотренные соединения либо участвуют сами, либо моделируют соединения, участвующие в

Х 1980.13

метаболич. окислировании. Орбитальные заселенности связей $C_{\alpha}-H$, $C_{\beta}-H$ и $C_{\gamma}-H$ и заряды на соотв-щих атомах C и H , рассчитанные различными методами, сопоставлены между собой и с эксперим. данными по региоселективности алифатич. окислирования, катализируемого монооксигеназой. Хорошая корреляция существует между региоселективностью р-ции и орбитальными заселенностями связей $C-H$. В отличие от неэмпирич. расчетов и РМХ, метод ППДП/2 не передает зависимость заряда атома C от его расстояния от атомов N , O , либо ненасыщ. атома C , в методе ППДП/2 этот заряд зависит лишь от числа геминальных атомов H . Полученные корреляции согласуются с предложенным ранее механизмом р-ции, предполагающим внедрение по связи $C-H$. В. Фаустов

Оттиск 10218

1980

2 Б100. Сродство к протону и фотоэлектронные спектры трехчленных гетероциклов. Aue Donald H., Webb Hugh M., Davidson William R., Vidal Mariano, Bowers Michael Goldwhite Harold, Vertal Lawrence E., Douglas John E., Kollman Peter A., Kenyon George L. Proton affinities and photoelectron spectra of three-membered-ring heterocycles. «J. Amer. Chem. Soc.», 1980, 102, № 16, 5151—5157 (англ.)

Для азирана (I), фосфирана (II), оксирана (III) и тинирана (IV), а также для их диметилowych аналогов Me_2NH (Ia), Me_2PH (IIa), Me_2O (IIIa) и Me_2S (IVa) проведены измерения сродства к протону (методом ионного циклотронного резонанса) и фотоэлектронных спектров (с возбуждением источником He-I). При интерпретации эксперим. данных использовались результаты неэмпирич. расчетов методом МО ЛКАО ССП в базисах ОСТ-3ГФ и ОСТ-4-31ГФ. Первый пик во всех спектрах отнесен к ионизации орбитали неподеленной пары; соотв-щие вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) равны 9,83; 9,75; 10,56 и 9,03 эВ для I—IV; 8,93; 9,10; 10,01 и 8,68 эВ для Ia—IVa. Стабилизация МО неподеленной пары в I—IV по сравнению с Ia—IVa

~~(CH₃)₂NH~~
(CH₃)₂NH
(CH₃)₂PH
(CH₃)₂O
(CH₃)₂S
гетероцикл.
спектр.

③ 18

X. 1981 N2

объяснена оттягиванием электронной плотности от атома X вследствие уменьшения угла CXC при замыкании цикла, что подтверждается неэмпирич. расчетами модельных соединений XH_k с различными значениями валентного угла. При замыкании цикла в I и II происходит доп. стабилизация, обусловленная увеличением s-характера МО неподеленной пары азота и фосфора. Следующая МО неподеленной пары в III и IV сильно взаимодействует с σ -МО. Обсуждены изменения всех ПИ валентных орбиталей в I—IV по сравнению с Ia—IVa. Увеличением s-характера МО неподеленной пары в гетероцикле объяснено также уменьшение сродства к протону в I, III, IV на 3—5 ккал/моль. Этот механизм подтверждается анализом различных вкладов в энергию протонирования на основе модельных неэмпирич. расчетов NH_4^+ и PH_4^+ при различных углах. Значительное понижение сродства к протону для II (на 23,2 ккал/моль) объяснено сильным увеличением валентного угла при протонировании.

М. Гофман

$(CH_3)_2NH$

1980

Aug 8.

Theor. Chem. Acta, 1980,
57, N3, 107-30

мерки
вазв; (9)
вазв; (9)

св. H₂-III

$\text{NH}(\text{CH}_3)_2$

1981

Eades R. A., et al.

Сродство
к протону
(ПС)

J. Phys. Chem., 1981,
85, N8, 981-986.

(см. NH_3 ; I)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$

Омск 13427 1982

1) 7 Д385. Микроволновый спектр транс-этиламина.
The microwave spectrum of trans-ethylamine. Fischer E., Botskor I. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 116—127 (англ.)

В диапазоне 15—50 ГГц исследованы микроволн. спектры молекул $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$ (I), $\text{I}-\text{ND}_2$ и $\text{I}-\text{NHD}$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 8$ в основном колебательном состоянии, а также квадрупольная сверхтонкая структура линий. Определены значения вращательных постоянных, дипольного момента и постоянных квадрупольной связи ядра азота.
М. Р. Алиев

М. Р.



(+2)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2 - \text{ND}_2$, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2 - \text{NHD}$

ср. 1982, 18, N 7.

$C_2H_5NH_2$

1982

Fleischhauer Jörg,
et al.

Ar^+ ;

Z. Naturforsch., 1982,
A37, N1, 46-50.

●
(cu. MNH_2 ; III)

$(CH_3)_2NH$

1982

Goddard John D.

номери,
сирежкі,
J, ΔE.

Can. J. Chem., 1982,
60, N 10, 1250-1255.

(сер. H_2NCH_2 ; III)

$(CH_3)_2 NH$

1982

Wesenberg G., et al.

pacieu Int. J. Quantum Chem.
40 1982, 21, N2, 487-509.

(cm. $(CH_3)_2 CHF$; III)

Этиламин

[Ommuck 14394] 1982

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$

Goddard J. D.,

Г, кв. мех,
расчет

Can. J. Chem., 1982,
60, N 10, 1250-1255.

Децимиланин

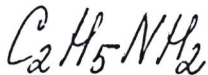
Уммуек 14394 1982

$(CH_3)_2NH$

Goddard J.D.,

У.к. лек-
прагм

Can. J. Chem., 1982,
60, N 10, 1250-1255.



1983

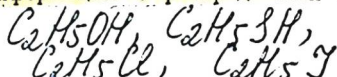
7 J1227. Электронная спектроскопия с пеннинговской ионизацией молекул C_2H_5X ($X=NH_2, OH, SH, Cl, J$). Реакционность орбиталей, локализованных на функциональных группах, при электрофильном воздействии метастабильных атомов гелия. Penning ionization electron spectroscopy of C_2H_5X ($X=NH_2, OH, SH, Cl, I$). Relative reactivity of orbitals localizing on functional groups upon electrophilic attack by metastable helium atoms. Ohno Kolchi, Imai Keltaro, Metsumoto Setsuo, Harada Yoshiya. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 2, 4346—4348 (англ.)

спектр

Получены спектры кинетич. энергии электронов, образующихся при ионизации метастабильными атомами $He^*(2^3S)$ ряда производных этана C_2H_5X ($X=NH_2, OH, SH, Cl, J$). В спектрах всех соединений присутствуют интенсивные полосы, отвечающие несвязывающим орбиталям, локализованным на атомных группах X. Эти полосы содержат информацию о распределении элект-

⊠ (44)

ср. 1984, 18, 17



ронной плотности соответствующих орбиталей. Подчеркнуто, что электронная спектроскопия с пеннинговской ионизацией позволяет наряду с изучением строения молекулярных орбиталей проводить более однозначную интерпретацию полос в фотоэлектронных спектрах.

В. А. Е.



$C_2H_5NH_2$

1983

9 Б1070. Электронные спектры пеннинговской ионизации C_2H_5X ($X=NH_2, OH, SH, Cl, I$). Относительные реакционные способности орбиталей, локализованных на функциональных группах, по отношению к электрофильной атаке метастабильных атомов гелия. Penning ionization electron spectroscopy of C_2H_5X ($X=NH_2, OH, SH, Cl, I$). Relative reactivity of orbitals localizing on functional groups upon electrophilic attack by metastable helium atoms. Ohno K., Imal K., Matsumoto S., Harada Y. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 22, 4346—4348 (англ.)

Электронно-
спектр

Для ряда замещенных этанов C_2H_5X ($X=NH_2, OH, SH, Cl$ и I) в газовой фазе измерены электронные спектры пеннинговской ионизации (ЭСПИ) с возбуждением метастабильными атомами He (2^3S) и фотоэлектронные спектры (ФЭС) с возбуждением излучением He-I. Относит. интенсивности пиков в ЭСПИ и ФЭС существенно различаются. В ЭСПИ вероятность ионизации МО при



X. 1984, 19, 29

$C_2H_5OH, C_2H_5SH, C_2H_5Cl,$
 C_2H_5I

электрофильной атаке Не падает при переходе: 1) от несвязывающих МО к связывающим; 2) от π -МО к связывающим σ -орбиталям; 3) от МО, локализованных на атомах с меньшей электроотрицательностью, к МО, локализованным на атомах с большей электроотрицательностью. Обнаруженные закономерности согласуются с приближенным правилом отбора для ЭСПИ, сформулированным авторами ранее («J. Am. Chem. Soc.», 1983, 105, 4555): активность в ЭСПИ выше для тех МО, у которых велика электронная плотность на периферии молекулы. Сделан вывод, что относит. интенсивности полос в ЭСПИ соотв-щих несвязывающим орбиталям, могут служить отличительными признаками для орбиталей, локализованных на определенных функциональных группах, при аналитич. исследованиях и при отнесении ФЭС.

О. А. Басченко

$C_2H_5NH_2$

1984

100: 182413a The microwave spectrum of gauche-ethylamine. Fischer, E.; Botskor, I. (Dep. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 104(2), 226-47 (Eng). The microwave spectrum of the ground state of the normal species of gauche-EtNH₂ and that of -NHD, -NDH, as well as -ND₂ isotopic species were measured and assigned. The ground state splits into 4 substates due to 2 internal large amplitude motions: inversion (s and a) and internal rotation (o and e) about the CN axis. Intersystem transitions due to tunneling as well as vibrational-rotational perturbations affect not only the absorption frequencies but also the Stark effect and quadrupole hyperfine structure. The rotational consts. for the 2 sym. inversion states (s) were fitted for the normal species as (all values in MHz) $A^s = 32,423.470 \pm 0.184$, $B^s = 8942.086 \pm 0.039$, and $C^s = 7825.520 \pm 0.048$, and $A^{so} = 32,378.733 \pm 0.182$, $B^{so} = 8940.906 \pm 0.052$, and $C^{so} = 7825.551 \pm 0.042$ with the interaction consts. $Q_a^s = 151.12 \pm 0.52$ and $Q_b^s = 44.4 \pm 7.0$. The antisym. inversion states (a) were fitted as $A^a = 32,423.347 \pm 0.142$, $B^a = 8942.027 \pm 0.029$, and $C^a = 7825.525 \pm 0.031$, and $A^{ao} = 32,378.720 \pm 0.142$, $B^{ao} = 8940.984 \pm 0.029$, and $C^{ao} = 7825.573 \pm 0.031$ with the interaction consts. $Q_a^a = 167.10 \pm 0.31$, $Q_b^a = 48.1 \pm 5.4$. The energy splitting due to inversion was detd. (in MHz) as $\Delta\nu_{inv} = 1\,391.39 \pm 0.19$ and that due to internal rotation as $\Delta\nu_{tors} = 1170.58 \pm 0.18$. The cis-barrier sepg. the 2 equiv torsional states was 690 cm⁻¹, and the inversion barrier between the inversion states was calcd. as 1400 cm⁻¹.

(46 cmxmp)

C. A. 1984,
100, N 22

$C_2H_5NH_2$

1984

Meyne E., Raabe G., et al.

теор. Z. Naturforsch. A: Phys.
практич. Phys. Chem., Kosmophys.
1984, 39A(6), 593-5.

(ср. MNH_2 ; III)

$(CH_3)_2NH$

1984

u yozmonjansu:

102:53222e Calculation of the vibrational spectrum of dimethylamine and its deuterated derivatives. Muldagaliyev, Kh. Kh.; Pesterev, V. I.; Agashkin, O. V. (Inst. Khim. Nauk., Alma-Ata, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1984, 58(11), 2390-3 (Russ). The fundamental frequencies and shapes of vibration were calcd. for 4 isotopic analogs of dimethylamine: Me_2NH , Me_2ND , $MeCD-NH$, and $MeCD-ND$. The results agreed with exptl. data according to IR and Raman spectra of the various aggregate states. Good agreement was found between obsd. and calcd. frequencies. The interpretations of several bands were made more precise.

(Di)

lek, ckr,
pachem

C. A. 1985, 102, N6.

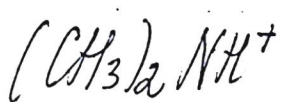
$(\text{CH}_3)_2\text{NH}(\text{D})$

1984

5 Б1197. Расчет колебательного спектра диметиламина и его дейтеропроизводных. Мулдагалиев Х. Х., Пестеров В. И., Агашкин О. В. «Ж. физ. химии», 1984, 58, № 11, 2890—2893

Рассчитанные частоты и формы колебаний для 4-х изотопных аналогов диметиламина $(\text{CH}_3)_2\text{NH}(\text{D})$, и $\text{CH}_3\text{CD}_3\text{NH}(\text{D})$ сопоставлены с эксперим. материалом, относящимся к ИК- и КР-спектрам разных агрегатных состояний. Стандартное валентно-силовое поле хорошо описывает наблюдаемые спектры. Автореферат

Х. 1985, 19, 45



[DM-25289]

1986

$(CH_3)_3N^+$ Bonazzola L., Leray N.,
Roncin J., et al.,

суперкритическая,
ab initio
расчеты
J. Phys. Chem., 1986, 90,
N 22, 5573-5578.

$C_2H_5NH_2$

1986

45 Б1136. Строение гош- и транс-конформеров этиламина по данным газовой электронографии. Molecular structure of the gauche and trans conformers of ethylamine as studied by gas electron diffraction. Hamada Yoshiaki, Tsuboi Masamichi, Yamanouchi Kaoru, Kuchitsu Kozo. «J. Mol. Struct.», 1986, 146, 253—262 (англ.)

Электронографически изучено строение гош- и транс-конформеров относительно связи C—N молекулы $CH_3CH_2NH_2$ с привлечением лит. данных МВ-спектроскопии. В совместном анализе использованы также результаты неэмпирич. расчетов с базисом 4-31 G(N*). Получены след. расстояния r_g и углы r_z : C—H_{ср} 1,107(6), далее для транс- и гош-конформеров, соотв., C—N 1,470(10) и 1,475(10), C—C 1,531(6) и 1,524(6), LCCN 115,0(33) и 109,7(3)°. Из содержания транс-конформера ($46 \pm 10\%$) найдена разность энтальпий $\Delta H (г-т) = 306(200)$ кал/моль. В. С. Мастрюков

(и.п.)

Х. 1987, 19, 15

$C_2H_5NH_2$

[OM. 25118]

1986

Iwata S.,

Ap, Chem. Phys., 1986, 108,
ab initio; N.3, 441-449.

$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

Om. 25438

1986

(*ab initio*
pacem)

105: 197380q *Ab initio* SCF and UMP/2 description of the N-methyl substitution effect on CH and OH bond dissociation energies in methylamine and hydroxylamine: discrepancy with experiment. Kysel, O.; Mach, P. (Cent. Chem. Res., Polym. Inst., 842 36 Bratislava, Czech.). *THEOCHEM* 1986, 32(3-4), 333-7 (Eng). The effect of the N-Me substituents was studied on the C-H bond energy in Me_2NH by the theor. method which incorporates electron correlation by the UPM2 (Unrestricted Moeller-Plesset) approach. For comparison, the N-Me substitution effect on the OH bond energy in the isoelectronic system N-methylhydroxylamine was also studied.

C.A. 1986, 105, ~22

C_2H_7N

(om. 24569)

1986

Siam K., Ewbark J. D.,
et al.

reunite J. Mol. Struct. Theo-
chem. 1986, 139, 1-2,
● 83-99.

$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{NH}_2$ om. 28586 } 28586 } 1987

Sato N., Hamada Y.,
Tsuboi M.,

Vi, and.
no cm.,
lek u meop.
pavem

Spectrochim. Acta,
1987, 43A, N 7,
943-954.

$[C_2H_7N]^+$ Am. 26752

1987

Yates B.F., Radom L.,

empirical Org. Mass Spectrom.,
1987, 22, N7, 430-436.

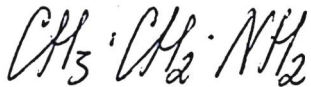
$(CH_3)_2NH$ [om-30736,,a"] 1988

Duncan J. L., McKean D. C.
et al.,

сферич-
резонанс.
постоян.
ингармон.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. Pt II 1988, 84, N 9,

1423-42.



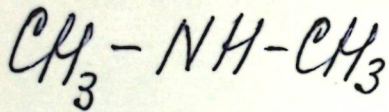
(DM-29591)

1988

конформационная,
структурная
и
стабильная.

Durig J.R., Groner P.,
et al.,

J. Mol. Struct.,
1988, 173, 1-16.



1990

Engeln R.,
Reuss J. et al.

Chem. Phys. Lett. 1990,
170 (2-3), 206-10.

u.n.

(see. $\text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_3$; III)

F: (CH₃)₂NH

P: 3

21B1122. Неэмпирические расчеты структуры спектров нежестких молекул. Применение к метиламину и диметиламину. Ab initio calculations of structures of spectra of non-rigid molecules. Applications to metylamine and dimethylamine / Smeyers Y. G., Senent M. L., Villa M. // WATOC'96: 4{th} Word Congr. Theor. Orient. Chem., Jerusalem, July 7-12, 1996: Program and Abstr. - [Tel Aviv], 1996. - С. 61. - Англ.

(9s3p1d/4s3p1d), Na - (12s8p1d/6s4p1d), K - (14s11p3d/9s8p3d), F (9s5p1d/4s2p1d). Согласно расчетам у изученных молекул равновесными являются плоские циклические структуры симметрии D[2h] (у M[2]F[2]) и C[2v] (у MM'F[2]). Линейные конфигурации M-F-M'-F (симметрии C['БЕСКОНЕЧН''ню']) на 70-190 кДж/моль менее

ТМХ, 1998, 121.

1996

122010

стабильны, чем циклические; у всех молекул, за исключением М-Г-К-Г, они отвечают локальным минимумам на поверхности потенциальной энергии. На примере рассмотренных молекул обсуждена роль корреляционных эффектов в неэмпирических расчетах геометрии, силовых полей и характеристик ИК спектров молекул с высокой полярностью хим. связей. Теор. силовые поля молекул представлены в канонической форме в системе избыточных естественных колебательных координат. Изучены закономерности силовых полей молекул $MM'F[2]$. Результаты неэмпирических расчетов сопоставлены с имеющимися в литературе эксперим. данными о строении и колебательных спектрах рассмотренных молекул. Библ. 30.



теорет.
расчет
сп-н,
стабильн.

²⁰⁰⁰
Schegolev B.F. et al.,
Russ. J. Org. Chem.
2000, 36 (7), 955-59

