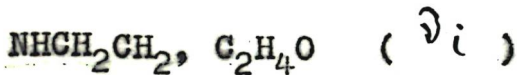


C_2NH_5

$(CH_2)_2NH$

5163

1950



Evans G.E., Hoffman T.
Proc. Iowa Acad. Sci., 1950, 57, 235-9

Infrared spectrum and ...

J



C_2NH_5

1957

5165

NHCH₂CH₂, CH₃NCH₂CH₂

(vi)

Hoffman H.T., Evans G.E., Glockler G.
J.A..Chem.Soc., 1951, 73, 3028-30

Infrared spectra of ...

J

C₂NH₅

1957

5171

✓ (C_2H_4NH , C_2H_4S)

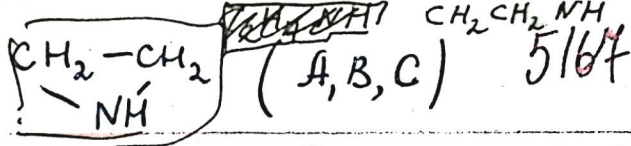
Thompson H.W. & Cave W.T.

Trans. Faraday Soc., 1951, 47, 951-7

Vibrational spectra of ...

J

C_2NH_5



1953

Johnson R.D., Myers R.Y., Gwinn W.D.

J. Chem. Phys., 1953, 21, N8, 1425 (amer.)

microwave spectrum and dipole moment of ethylenimine.

2

PYR, 1954, N10, 26703

10

5174

1953

C_2H_4NH (r, c-c, n⁴ CNI)

Turner T.E., Flora C., Kendrick W.M.,
Hicks B.L.

J.Chem.Phys., 1953, 21, N3, 564-5

Preliminary ...

C_2NH_5

J

~~$\text{NH} \text{---} \text{C}_2\text{H}_5\text{N}$~~
 ~~$\text{CH}_2 \text{---} \text{CH}_2$~~ (Vi, a, b, c, k) 5176 1953.

Wilcox W.S., Brannock K.C., De More W.,
Goldstein Y.H.

J. Chem. Phys., 1953, 21, N3, 563-564

(anne.)

The microwave spectrum and
general properties of ethylene
imine.

PJ/KX, 1954, N5, 1+734

10

2

CH₂ CH₂ NH

BØ-4998-IV | 1961

(7) Gallegos E., Kiser R. W.
J. Phys. Chem., 1961, 65,
N^o 7, 1177-82

C_2H_4NH .

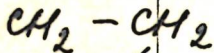
1961
Om IV - 5766

) An electron-diffraction investigation of the molecular structure of ethyleneimine. Masato Igarashi (Univ. Tokyo). *Bull. Chem. Soc. Japan* 34, 369-73(1961); cf. Turner, *et al.*, *CA* 50, 1469e.—The diffraction photographs were obtained using an r^2 rotating sector. The mol. intensity and radial distribution curve were calcd. The latter consists of peaks at 1.09, 1.49, and 2.19 Å. corresponding to bonded CH and NH, bonded CC and CN, and nonbonded N . . CH, C . . CH, and C . . . NH, resp. These peaks were analyzed into their components. Assuming the mean amplitude of both C—C and C—N bonds to be 0.05 Å., the most reasonable model arrived at by theoretical intensity, q , curves, and $q_{calc.}/q_{observed}$ ratios has C—C = $(1.48 \pm 2d) \pm 0.02$ Å. and C—N = $(1.49 \pm d) \pm 0.01$ Å., where $d = 0.05$ — mean amplitude. Also C—H = 1.08 ± 0.03 Å. and N—H = 1.05 ± 0.07 Å. None of the angles could be detd. unambiguously. The distances are in good agreement with microwave data, especially when a mean amplitude of 0.05 Å. is assumed. E. E. Richards

CA.1961, 55, 17.

1607106

Этиленовый



спектр в
матрице

засок М. Е.

Milligan D. E.

1963

164

JACS, 85, 278

ИК-исследование р-ций
 CH_2 и NH с C_2H_2 и C_2H_4 в
твёрдом аргоне.



1964

CH_3NCH_2
ф.
спектр

7 Д226. ИК-спектр N-метиленметиламина. Hinz, Jürgen, Curl R. F., Jr. Infrared spectrum of N-methylenemethylamine. «J. Amer. Chem. Soc.», 1964, 86, № 23, 5068—5070 (англ.)

Получены ИК-спектры твердых CH_3NCH_2 и CD_3NCH_2 при т-ре -196°C и их матриц в аргоне при 20°K в области $4000-400\text{ см}^{-1}$. Дана полная интерпретация спектров, хорошо согласующаяся с правилом произведений. Т. к. между спектрами твердых аминов и спектрами их матриц в аргоне не обнаружено существенной разницы, сделан вывод, что в твердых CH_3NCH_2 и CD_3NCH_2 межмолекулярные связи отсутствуют. Б. Жаданов

ф. 1965. 72

CH_3NCH_2
 CD_3NCH_2

chemistry

1964

Infrared spectrum of *N*-methylenemethylamine. Juergen Hihze and R. F. Curl, Jr. (Rice Univ., Houston, Tex.). *J. Am. Chem. Soc.* 86(23), 5068-70(1964)(Eng). The ir spectra of CH_3NCH_2 and CD_3NCH_2 were obtained in the region 400-4000 cm^{-1} with the amine as pure solid as well as in an Ar matrix. The fundamental vibrational frequencies were assigned completely. RCJC

C.A. 1965. 62.2

1210a

C_2NH_5

1964

CH_3NCH_3

Yardley J. T., Kinze J., Curl R. F.

J. Chem. Phys., 1964, 41, 2562 (Nº 8).

$CH_2=NCH_2$

ЛВБ снэгд

Равновесное конформационное
изменение с ЛВБ снэгд

1964

CH₃NCH₂

2

мв

✓ 7 Б154. Микроволновый спектр N-метилметилен-имина. Sastry K. V. L. N., Curl R. F., Jr. Micro-wave spectrum of N-methyl methylenimine. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 1, 77—80 (англ.)

Изучен вращательный спектр CH₃NCH₂ в области 7000—4000 Мгц. Идентифицирован ряд переходов b-типа. Для барьера внутреннего вращения метильной группы получена величина 1970 ± 25 кал/моль. Для некоторых переходов проанализированы компоненты квадрупольной тонкой структуры. Компоненты квадрупольного тензора χ_{ss} и χ_{aa} равны соответственно $3,2 \pm 0,2$ и $1,9 \pm 0,3$ Мгц. Из измерения эффекта Штарка найден дипольный момент $1,53 \pm 0,020$ D. Б. Л.

2.1965. 7

1964

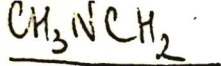
CH_3NCH_2
спектр

V 2 Д227. Микроволновый спектр CH_3NCH_2 . Сост-
г у К. V. L. N., Curl R. F., Jr. Microwave spectrum of
N-methyl methylenimine. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 1,
77—80 (англ.)

Изучен вращательный спектр CH_3NCH_2 в области 7—
49 кМгц при т-ре сухого льда. Первые 4 *Q*-ветви *b*-типа
переходов ($J_{0,1} \rightarrow J_{1,J-1}$) идентифицированы по эффекту
Штарка. Наблюдаемые линии имели тонкую квадруполь-
ную структуру. Изучены их интенсивности. Барьер внут-
реннего вращения CH_3 -группы, полученный из расщепле-
ния вращательных переходов, равен 1970 ± 25 кал/моль.
Определены компоненты квадрупольного тензора X_{cc} и
 X_{aa} соответственно равные $3,2 \pm 0,2$ и $1,9 \pm 0,3$ Мгц , и
электрич. дипольный момент, равный $1,53 \pm 0,02$ ед. Дебая.
Приведены длины связей C—N и C—H и углы HCH и
 CNC между связями. Библ. 11 назв.



ф. 1965. 2А



1964

m.b.
Curey

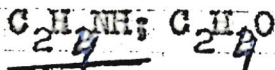
Microwave spectrum of N-methyl methylenimine. K. V. L. N. Sastry and R. F. Curl, Jr. (Rice Univ., Houston, Texas). *J. Chem. Phys.* 41(1), 77-80(1964). The rotational spectrum of CH₃NCH₂ was studied, 7000-49,000 Mc. Several *b*-type transitions were identified. The barrier to the internal rotation of the Me group is 1970 ± 25 cal./mole. Quadrupole fine structure components for several transitions were analyzed. The components of the quadrupole tensor χ_{cc} and χ_{aa} are 3.2 ± 0.2 and 1.9 ± 0.3 Mc., resp. The elec. dipole moment is 1.53 ± 0.020 debyes.

RCJQ

C. A. 1964 61 N3 26164

9828

1965

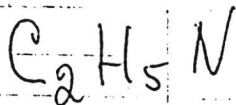


(vi)

Potts W.J.

Spectrochim. Acta, 1965, 21(3),
511-27

The fundamental vibration ...



1390 - M 499 - IV

1965

Tolles W. H., Gwinn W. D.

J. Chem. Phys., 1965, 42, 2253 (N:6)

Полюсоне кварцнаевоу свету и
нишому презеу барбера нолу сии
в змеломини

барбер 4200 см⁻¹ (внмн. презеу)

~~CH₂-CH₂~~

мнз

снелр

NH

C₂NH₃

1967

~~126732v~~ Low-temperature (90 and 10°K.) infrared absorption spectra of ethyleneimine. Jacques Le Brumant and Daniel Maillard (Lab. Phys. Exptl. Mol., Paris). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A, B* 265B(16), 853-5(1967)(Fr). The ir absorption spectra (4000-400 cm^{-1}) of $(\text{CH}_2)_2\text{NH}$ were obtained at 90 and 10°K., by a method previously described. The solid phase spectra showed doublets and triplets. The valence vibration N-H was lowered from 3225 to 3152 cm^{-1} with respect to the corresponding frequency in the liq. phase. GRJF

C.A. 1968. 68. 24

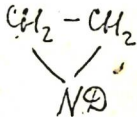
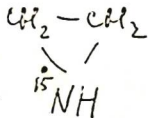
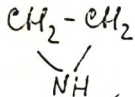
1917

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

11 Б190. ИК-спектры поглощения $(\text{CH}_2)_2\text{NH}$ при низких температурах (90 и 10° K). Le Brumant-Jacques, Maillard Daniel. Spectres d'absorption infrarouge de l'éthylène imine, à basse température (90 et 10° K). «C. r. Acad. sci.», 1967, 265, № 16, В 853—В 856 (франц.)

Получены ИК-спектры поглощения (4000—400 cm^{-1}) $(\text{CH}_2)_2\text{NH}$ в твердом состоянии при t -рах 90 и 10° K. Спектры, в основном, состоят из дублетных и триплетных полос. Выполнено отнесение наблюдавшихся частот, для чего использовались спектры $(\text{CH}_2)_2\text{NH}$ в газовой и жидкой фазах, а также спектры твердого р-ра $(\text{CH}_2)_2\text{NH}$ в $(\text{CH}_2)_2\text{ND}$.
Ю. М. Ладвищенко

X. 1968. 11



14 Б227. Колебательные спектры нормального, имин-дейтерированного и N^{15} -этилениминов. Mitchell R. W., Burr J. C., Jr, Merritt J. A. Vibrational spectra of normal, imine — deuterated and ^{15}N ethyleneimine. «Spectrochim. acta», 1967, A23, № 1, 195—207 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения нормального, имин-дейтерированного и N^{15} этилениминов в газ., жидком и твердом состояниях. Молекула этиленимина имеет симметрию C_s . Все 18 нормальных колебаний разрешены в ИК-спектрах поглощения и КР. 10 колебаний относятся к классу A' и 8 — к классу A'' . В спектре газа колебания класса A' должны иметь контур полосы типа B или C или гибридный контур типа $B+C$ в зависимости от того, изменяется дипольный момент перехода вдоль осей B или C или вдоль какого-то промежуточного направления в плоскости осей B и C . В соответствии с приведенным анализом ожидаемого спектра этиленимина полосы 777, 856, 997, 1090 и 1210 см^{-1} , имеющие от-

Х. 1967. 14

четливо выраженный гибридный контур типа $B+C$ в ИК-спектре газа отнесены к колебаниям класса A' , а полосы 1131, 1237 и 1268 см^{-1} , имеющие контур типа A — к колебаниям класса A'' . Полосы 904 и 1096 см^{-1} , сдвигающиеся при дейтерировании группы $N-H$ на 150 см^{-1} , отнесены к деф. кол. $\nu N-H$ классов A' и A'' соответственно. Полоса поглощения 820 см^{-1} , наблюдающаяся в ИК-спектре твердого этиленмина (в спектре КР 817 см^{-1}) отнесена к классу A'' . В соответствии с данными по поляризации полос в спектре КР и контурами полос в спектре газа проведено отнесение основных колебаний в спектрах имин-дейтерированного и N^{15} -этиленмина. Правильность отнесения контролировалась применением правила произведений Редлиха — Теллера.

Г. Кузьяни

C_2H_5N

1984

9 Д254. Колебательные спектры нормального, имин-дейтерированного и N^{15} -этилениминов. Mitchell R. W., Burr J. C., Jr, Merritt J. A. Vibrational spectra of normal, imine-deuterated and ^{15}N ethyleneimine. «Spectrochim. acta», 1967, A23, № 1, 195—207 (англ.)

Исследованы ИК-спектры C_2H_5N , C_2H_4ND и $C_2H_6N^{15}$ в газообразном, жидком и твердом состояниях. Полосы 777, 856, 997, 1090 и 1210 см^{-1} C_2H_5N , имеющие отчетливо выраженный гибридный контур типа $B+C$ в ИК-спектре газа, отнесены к колебаниям класса A' , а полосы 1131, 1237 и 1268 см^{-1} , имеющие контур типа A — к колебаниям класса A'' ; полосы 904 и 1096 см^{-1} , сдвигающиеся при дейтерировании группы $N-H$ на 150 см^{-1} , отнесены к деф. кол. ν_N -и классов A' и A'' соответственно. Полоса

ф. 1984-98

поглощения 820 см^{-1} , наблюдающаяся в ИК-спектре твердого $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}$ (в спектре КР 817 см^{-1}), отнесена к классу A'' . В соответствии с данными по поляризации полос в спектре КР и контурами полос в спектре газа проведено отнесение основных колебаний в спектрах $\text{C}_2\text{H}_4\text{ND}$ и $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}^{15}$. Правильность отнесения контролировалась применением правила произведений Редлиха — Теллера. Приведены спектры и таблицы частот. Библ. 8.

Г. Кузьяни

$(CH_2)_2NH$

Clark D.T.

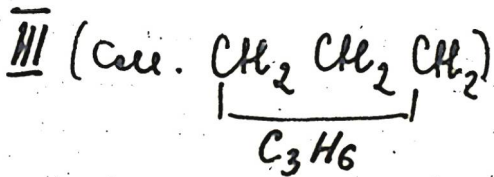
1968

(5)

Theoret. chim. acta, 10, 2, 111.

Рассмотрение циклопро-
пана, окиси этилена
и этиленгликоля мето-
дом МО с самосома-
совыми с включениями

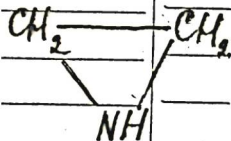
ниже возбужденного
состоянии.



1968

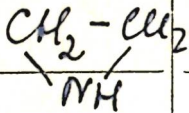
10 Б277. Главный тензор градиента поля азота, химическая связь и туннельный барьер протона в этиленимине. Кемп М. К., Flygare W. H. The nitrogen principal field gradient tensor, bonding, and barrier to proton tunneling in ethylenimine. «J. Amer. Chem. Soc.», 1968, 90, № 23, 6267—6272 (англ.).

Исследованы МВ-спектры этиленимина и этиленимина- D_1 . Определены постоянные квадрупольной связи ядра N^{14} в системе главных осей тензора градиента поля $\chi_{\alpha\alpha}=0,685\pm0,005$, $\chi_{\beta\beta}=3,004\pm0,09$ и $\chi_{\gamma\gamma}=-3,689\pm0,09$ Мгц, из к-рых найдены χ -постоянные в молек. системе осей $\chi_{xx}=0,685\pm0,005$, $\chi_{yy}=1,77\pm0,16$, $\chi_{zz}=-2,46\pm0,16$ и $\chi_{yz}=2,59\pm0,13$ Мгц (ось z перпендикулярна плоскости кольца, а ось y является биссектрисой



X. 1969. 10

угла CNC). Результаты использованы для определения гибридных орбит атома N. Показано, что модель Уолша удовлетворительно описывает электронное распределение у ядра N с sp^2 -орбитами, перпендикулярными плоскости CNC, согласно к-рой одна из sp^2 -орбит образует связь с H, вторая содержит неподеленную пару электронов, а третья участвует в образовании кольца. Четвертая орбита N является чистой p -функцией кольца, перпендикулярной к sp^2 -орбитам. Показано, что частота инверсии N меньше 15 кГц. Предложена простая модель барьера инверсии и получена ф-ла, связывающая высоту барьера с частотой инверсии и интервалами между колебательными уровнями. Найдена нижняя граница значения барьера $V=11,6$ ккал, близкая к энергии активации для инверсии N в тетраметилэтиленимине, найденной методом ЯМР. Резюме



V₀

A. Veillard, J. M. Lehn,
B. Munsch

1968

Theor. Chim., Paris. Theor.

Chim. Acta 9(3), 245-7 (1968) (Engl.)

Теоретический конформационный
анализ. Расчет ab initio SCF-
LCAO-MO инверсионных
барьеров в аммиаке и.

этилене

(см. NH₃ III)

1969

$(CH_2)_2 NH$

$(CH_2)_2 ND$

(спектр)

ф. 1969. 10Д

10 Д284. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния жидкого и твердого этиленимина. Сравнение со спектрами нормального этиленимина. Le Brumant Jacques. Spectres de diffusion Raman et d'absorption infrarouge de l'éthylène imine N-deutériée liquide et solide; comparaison avec les spectres de l'éthylène imine normale. «C. r. Acad. sci.», 1969, 268, № 22, B1424—B1427 (франц.)

Получены ИК-спектры $(CH_2)_2ND$ и $(CH_2)_2NH$ в области 400—4000 $см^{-1}$ в жидкой и твердой фазах и спектры комб. рас. этих в-в в области 50—3400 $см^{-1}$ при т-рах 80 и 293° К. Частоты полос, наблюдаемых этими двумя методами, хорошо согласуются. При переходе от жидкости к кристаллу многие полосы как ИК-, так и спектров комб. рас., расщепляются. Приведены частоты наблюдаемых полос, качественно оценены их интенсивности и поляризации. Замена норм. образца на дейтерированный вызывает сильное уменьшение частот 6 полос ИК-поглощения. Этот результат подтвержден изучением спектра комб. рассеяния. Библ. 3. М. В. Тонков

C_2H_5N

Snyder L. C.,
Basch H.

1969

таможе
р-ис
кв - мех.
расчет

J. Amer. Chem. Soc.,
1969, 91, 29, 2189.



$(C_{22}H_{14})_{III}$

C_2NH_5

CH_3CH_2-N

Сектор

номера.

1970

Franken Th. ugp

2. Wasserforsch,

1970, 25a, n 1, 151.

$(C_{25}CH_3-N)^{III}$

1970

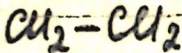
 $(CH_2)_2NH$

10 Д388. Сравнение ИК-спектров поглощения этилен-имина в матрицах из твердого аргона или азота ($10^\circ K$). Le Brumant Jacques. Comparaison des spectres d'absorption infrarouge de l'éthylène imine en matrices d'argon ou d'azote solide ($10^\circ K$). «C. r. Acad. sci.», 1970, 270, № 14, В898—В901 (франц.)

Получены ИК-спектры поглощения ($700-1500\text{ см}^{-1}$) этилен-имина— $(CH_2)_2NH$ (I) в матрицах из аргона, азота и аргона с примесью азота. Обнаружено удвоение всех полос в спектре I в аргоне (расщепление $6-9\text{ см}^{-1}$) на которое накладывается тонкая структура с расщеплением 2 см^{-1} . В спектре I в азоте расщепление наблюдается только для полос колебаний NH-группы. Предполагается, что структура полос имеет межмолекулярное происхождение. Произведены концентрационные измерения в диапазоне $0.4-2\%$ I. Л. Щерба

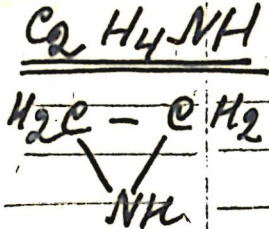
ф. 1970. 102

1970



C.A. 1970-73. 4

(19926k) Comparison of the infrared absorption spectra of ethylene imine in solid argon or nitrogen matrices (10°K). Le Brumant, Jacques (Phys. Exp. Mol., Fac. Sci., Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1970, 270(14), 898-901 (Fr). The ir absorbtion spectra were recorded of ethylene imine (I, 0.4-2%) in solid Ar, N₂, or Ar doped with 5% N₂. At low concns. of I in Ar, all vibrational bands were split (splitting 6-9 cm⁻¹) into 2 bands, and a fine structure (2 cm⁻¹) was superimposed. In N₂, only the bands corresponding to NH vibrations were split. Results suggest that splitting is due to intermol. phenomena. Differences in the spectra are due to differences in the nature of the sites occupied by I in Ar and N₂. FBIF



ν_0

Levy B., et al.

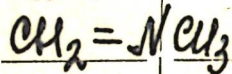
1970

Theor. Chim. Acta,

1970, 18, 2, 143.

(C₂H₄NH)II

C₂H₅N



1970

сил.
пост.

7 Д185. Колебательный спектр и силовое поле N-метилметиленимина. Попов Е. М., Желтова В. Н., Коган Г. А. «Ж. структурн. химии», 1970, II, № 1, 149—151

Рассчитано силовое поле N-метилметиленимина. Найдено, что постоянные группы N—CH₃ практически не отличаются от соответствующих постоянных в аминах. Постоянная связи C—N увеличивалась с 7,8 (в аминах) до 8,3. Силовая постоянная двойной связи C=N имеет значение 16,0.

ф. 1970. 7Д

~~C₂H₃NH~~

NHCH₂CH₂

л.и.

ном.ср. ра

X. 1972. 12

XIV-3649 1971

12 Б276. Определение структуры этиленimina методом замещения. Bak-Børgg, Skaarup Steen. The substitution structure of ethyleneimine. «J. Mol. Struct.», 1971, 10, № 3, 385—387 (англ.)

Исследованы микроволновые спектры молекулы этиленimina и 7 изотопич. модификаций этиленimina в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом центробежного искажения 2-го порядка по ф-ле Уотсона с 5 постоянными центробежного искажения. Определены вращательные и центробежные постоянные всех 7 изотопич. видов. В частности для незамещенной молекулы получено: $A=22736,12$, $B=21192,38$, $C=13383,07$ Мгц, $\Delta_{IK}=-51,7$, $\Delta_K=16,4$, $\delta_I=4,37$, $\delta_K=3,4$ Кгц. Из вращательных постоянных незамещенной молекулы и 5 монозамещенных молекул

методом Крайчмана вычислены структурные параметры этиленимина: $NH=1,016$, $NC=1,475$, $CC=1,481$, $C(2)-H(2)=1,084$, $C(2)-H(2')=1,083$ А, $CNC=60,25^\circ$, $HNC=109,31^\circ$, $HCH=115,72^\circ$, $H(2)CC=117,75^\circ$, $H(2)CN=118,26^\circ$, $H(2')CC=119,32^\circ$, $H(2')CN=114,27^\circ$. Вычисленные из этих параметров значения вращательных постоянных дизамещенных этиленимина согласуются с их эксперим. значениями. Найденные значения структурных параметров отличаются от лит. данных, полученных, как правило, из неполного набора вращательных постоянных. Показано, что плоскость HCH не перпендикулярна плоскости CNC , а образует с ней угол 87° .

М. Р. Алнев

NHCH_2CH_2
aziridine

Hsu Chang S.;
Chang I - Chen.

1973

(vi) "Spectrosc. Lett"
1973, 6, N1, 61-65

(cm. PHCH_2CH_2 ; II)

40301.7215
Ph, Ch, TE

$C_2H_4NH + K_2$
40892

7973

$C_2H_4NH + Xe$

43-3821

резюме. химия
Kawasaki Masahiro, Iwasaki Masahiro,
Tanaka Ikuzo.

Electronic states of imino radicals
formed from the vacuum-ultraviolet
photolysis of ethylenimine.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 12, 6328-6333

(англ.)

0056 перм

038 042

- 0 49

ВИНИТИ

41003.7303
Ch, TC

41197 02
 C_2H_4NH

1974
2531

Kawasaki Masahiro, Tanaka Ikuzo.
Emission of imino radicals in the $c^{1\Sigma}$
state formed from the photolysis of
ammonia, methylamine, and ethylenimine
at 123.6 nm.

"J. Phys. Chem.", 1974, 78, N 18, 1784-1789

(англ.)

0204 пик

189 191

0120

ВИНИТИ

C_2H_4NH

omni 4979

1974

Nakanishi H;
Yamamoto O.

AMP
услов.

Tetrahedron, 1974,
30, 2115-21.

C_2H_5N

*4-4808

1974

($A\bar{e}$)

17 Б1389. Фотоотщепление электронов от аннона (этилнитрена. Верхний предел сродства к электрону C_2H_5N . Richardson Jeffery H., Stephenson L. M., Brauman John I. Photodetachment of electrons from ethyl nitrene anion. An upper limit to the electron affinity of C_2H_5N . «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 3, 321—323 (англ.)

Методом ионного циклотронного резонанса исследован процесс фотоотщепления электрона от аннона $C_2H_5N^-$, получаемого при диссоциативном электронном захвате N-нитрозодиэтиламина. Измерены относительные поперечные сечения σ фотоотрыва с образованием нитрена: $C_2H_5N^- + h\nu \rightarrow C_2H_5N + e$ в интервале λ 480—600 нм (2,95—1,72 эв). Показано, что σ сильно падает с ростом λ . Оценен верхний предел ($1,87 \pm 0,16$ эв) сродства к электрону у нитрена в триплетном состоянии. А. Ш.

X. 1974 N 17

C_2H_5N

XU-4808

1974

(Ae^-)

9 Д400. Фотоотрыв электронов из аниона этилнитрена. Верхний предел величины сродства к электрону C_2H_5N . Richardson Jeffery H., Stephenson L. M., Brauman John I. Photodetachment of electrons from ethyl nitrene anion. An upper limit to the electron affinity of C_2H_5N . «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 3, 321—323 (англ.)

В области 420—720 нм изучен фотоотрыв электронов из этилнитрен-аниона; определены величины сечения процесса. Верхний предел значения сродства к электрону этилнитрена оценен равным $1,87 \pm 0,16$ эв. Библ. 12.
С. Ф. Б.

Ф. 1974. №9.

C_2H_5-N

C_2H_4O

кв. мет.
расчет

(+1)

Ф 1976 № 6



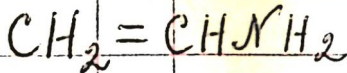
1975

6 Д165. Молекулярные комптоновские профили, рассчитанные с волновыми функциями метода МО ССП. II. Сравнение систем с трехчленными циклами C_3H_6 , C_2H_5N , C_2H_4O и их ациклических изомеров. Hirst David M., Liebmann S. Peter. Molecular Compton profiles from SCF—MO wavefunctions. II. Comparison of the three membered ring systems C_3H_6 , C_2H_5N , C_2H_4O with acyclic isomers. «Mol. Phys.», 1975, 30, № 6, 1693—1699 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций рассчитаны энергии и волн. ф-ции основного состояния (при равновесной эксперим. геометрии) трех систем с трехчленными циклами: циклопропана, азиридина и оксирана, а также соответствующих нециклич. изомеров этих систем. С полученными волн. ф-циями вычислены средние значения

операторов импульса p^n при $n = \pm 1, \pm 2$ и комптоновские профили $J(p)$ при $0 \leq p \leq 5,0$ ат. ед. Тестовый расчет формамида показал хорошую пригодность использованного базиса для расчета комптоновских профилей. Установлено, что различия в профилях для циклических и ациклич. изомеров лишь немного превышают величины эксперим. ошибок, характерных для современного эксперимента. Профили циклич. соединений несколько шире профилей соответствующих ациклич. изомеров, какие-либо характерные особенности, связанные с образованием циклов, отсутствуют. Показано, что при расчете профилей приближение локализованных орбиталей приводит к вполне приемлемым результатам, мало отличающимся от результатов неэмпирич. расчета. Ч. 1 см. РЖФиз, 1976, 2Д248.

Н. Ф. Степанов



XIV-6290 1975

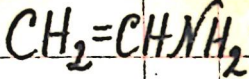
15 Б289. Пиролиз этиламина. I. Микроволновый спектр и молекулярные постоянные виниламина. Lo-vas Frank J., Clark Frank O., Tiemann Eberhard. Pyrolysis of ethylamine. I. Microwave spectrum and molecular constants of vinylamine. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 5, 1925—1931 (англ.)

Исследован МВ-спектр виниламина $\text{CH}_2=\text{CHNH}_2$, полученного в результате пиролиза этиламина, в области частот от 18 до 112 Гц для основного и 1-го возбужденного инверсионного колебательных состояний. Для обоих состояний определены вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и постоянные квадрупольного взаимодействия. В основном колебательном состоянии вращательные постоянные в

М. И.
Гавриш

Х. 1975 N 15

Мгц: $A=56312,9(190)$, $B=10034,756(58)$, $C=8564,930(60)$, постоянные ^{14}N ядерного электрич. квадрупольного взаимодействия в Мгц: $\chi_{aa}=2,20(22)$, $\chi_{bb}=1,95(18)$, $\chi_{cc}=-4,13(20)$. По эффекту Штарка 2-го порядка для трех переходов определены компоненты дипольного момента: $\mu_a=1,083\pm 0,008$, $\mu_b=0,37(+0,13, -0,37 D)$. При ряде предположений определены 2 из 13 структурных параметров. Для плоской конфигурации NH_2 : $r(\text{CN})=1,401\pm 0,040\text{A}$, $\text{CCN}=124,5^\circ\pm 2^\circ$, для пирамидальной конфигурации NH_2 : $r(\text{CN})=1,397\pm 0,040\text{A}$, $\text{CCN}=125,2^\circ\pm 2^\circ$. Из измерений относит. интенсивностей линий определено, что инверсионное состояние лежит выше основного на $65\pm 25\text{ см}^{-1}$. С. Н. Мурзин



м. н.
м. в. спектр

6220

39-117

Ф 1975-18

8 Д497. Пиролиз этиламина. Ч. I. Микроволновый спектр и молекулярные константы виниламина. Lovas Frank J., Clark Frank O., Tiemann Eberhard. Pyrolysis of ethylamine. I. Microwave spectrum and molecular constants of vinylamine. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 5, 1925—1931 (англ.)

1975
5275

Получен микроволн. спектр молекулы виниламина ($\text{CH}_2=\text{CHNH}_2$), образованной при пиролизе этиламина ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$). Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 6$ в основном колебательном состоянии и в первом возбужденном состоянии инверсионного колебания аминогруппы. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных, постоянных квадрупольной связи ядра ^{14}N и дипольный момент виниламина. Для основного состояния получено: $A = 56312,9$, $B = 10034,75$, $C = 8564,93$ Мгц; $\tau_1 = 0,142$, $\tau_2 = 0,0133$, $\tau_3 = 4,75$, $\tau_{bbbb} = -0,0502$, $\tau_{cccc} = -0,0213$ Мгц; $\chi_{aa} = 2,20$, $\chi_{bb} = 1,95$, $\chi_{cc} = -4,13$ Мгц; $\mu_a = 1,083$, $\mu_b = 0,37$ ед. Дебая. По относит. интенсивности линий основного и возбужденного состояний оценена энергия возбужденного инверсионного состояния ($65 \pm 25 \text{ см}^{-1}$). Оценены значения длины связи CN (1,40 Å) и валентного угла CCN (124°).

М. Р. Алиев

C_2H_4NH

8 Д436. ВУФ-спектры этиленимина и триметиленимина. Clark Patricia A., Pickett Lucy W.

1976

The vacuum ultraviolet spectra of ethyleneimine and trimethyleneimine. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 5, 2062—2064 (англ.)

спектры
поглощ

Получены спектры поглощения в вакуумной УФ-области ($40\,000\text{--}60\,000\text{ см}^{-1}$) газообразных этиленимина (I) и триметиленимина (II) при давл. $0,047\text{--}0,133$ и $0,128\text{--}0,225$ мм рт. ст. соответственно. В спектре I обнаружены полосы $6,32$ и $7,15$ эв с силой осцилляторов f , соответственно, $0,003$ и $0,086$. Тонкая колебат. структура с расстояниями между полосами порядка $710 \pm 20\text{ см}^{-1}$ предположительно отнесена к симметричному деф. кол. кольца. У II обнаружена одна полоса $6,44$ эв с $f=0,047$. Методом ППДП—КВ выполнены расчеты энергии переходов изученных молекул, а также соединений ряда насыщенных алканов, эфиров и аминов с 3-х, 4-х и 5-членными кольцами. Библ. 18.

С. Ф. Б.

Фр. 1976. № 8.

C_2H_4NH

1976

(парем
сирпуки
кари.)

Fujimoto H, et al
Bull. Chem. Soc.
Jap. 1976, 49, No.
1508-11.

(see C_3H_6) III

$C_2H_5N^+$

1976

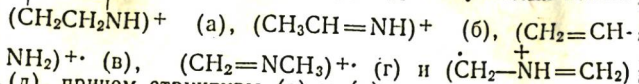
20 Б71. Исследования метастабильных ионов. VI. Установление строения ионов $C_2H_5N^{+}$ на основании характерной для них кинетической энергии. Holmes John L., Terlouw Johan K. Metastable ion studies. VI. The identification of C_2H_5N ion structures from their characteristic kinetic energy releases. «Can. J. Chem.», 1976, 54, № 7, 1007—1014 (англ.; рез. франц.)

Строение
ионов

В первой свободной от полей области (между ионным источником и электростатическим анализатором) масс-спектрометра с двойной фокусировкой исследован распад метастабильных ионов $C_2H_5N^{+}$, образующихся в результате фрагментации молек. ионов циклобутиламина, алкиламинов, пирролидинов, пиперидинов, азиридина и N,N-диметилформамида и их дейтероаналогов. На основании формы метастабильных ионов, отвечающих процессу $C_2H_5N^{+} \rightarrow C_2H_4N^{+} + H:$ и значений кинетич. энергии характерной для распадающихся ионов предложено

Л. 1976 № 20

ны следующие изомерные структуры изучаемых ионов:



В кач-ве стандартной принималась структура молек. иона азиридина (структура а/д), которая характерна и для ионов $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}^+$, образующихся при распаде диалкиламинов, пирролидинов и пиперидинов. В случае триалкиламинов, N-метилпиперидина и N,N-диметилформамида указанные ионы имеют структуру (г). В случае циклобутиламина и моноалкиламинов исследуемому иону приписывается структура (в), а для диэтиламина характерны структуры (в) и (б). Пред. сообщ. см. РЖХим. 1976. 5Б1195. Б. В. Розынов

$\text{CH}_2=\text{N}-\text{CH}_3$ ВФ-ХIV-9587

1977

14 Б274. Продукты пиролиза и микроволновые спектры легкого и тяжелого N-метилметиленимина. Bak B., Larsen N. W., Svanholt H. Pyrolytic production and microwave spectra of light and heavy N-methylmethylenimine. «Acta chem. scand.», 1977, A31, № 9, 755—758 (англ.)

Два изотопич. образца N-метилметиленимина $\text{CH}_2=\text{N}-\text{CH}_3$ (I) и $\text{CD}_2=\text{N}-\text{CD}_3$ (II) получены в кач-ве ~~продуктов пиролиза, соотв., $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$ и $(\text{CD}_3)_2\text{ND}$ на~~ кварцевой поверхности при т-ре 950° и давл. $30 \cdot 10^{-3}$ мм. Идентификация I и II выполнена по МВ-

спектрам в области частот от 17,5 до 40 Ггц. Для I и II, соотв., определены вращательные постоянные (в Мгц) $A=52527,265(120)$ и $34577,274(110)$, $B=10666,1008(290)$ и $8161,0836(270)$, $C=9377,3587(230)$ и $7191,1612(290)$, квартичные и секстичные постоянные центробежного искажения. Полученные данные могут быть использованы при исследованиях эмиссионного МВ-спектра I в межзвездном пространстве в области частот выше 40 Ггц.

С. Н. Мурзин

М.Н.



х. 1978, N14

C_2H_5N

БФ XIV-8679

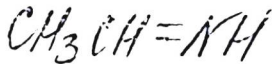
1977

Niessen W., et al.

Theor. Chim. Acta,
1977, 44, N1, 85-93.

(электрон.
строение)

(али. C_2H_4O ; III)



1980

21 Б251. Микроволновый спектр (Z)-этанимина. (Brown Ronald D., Godfrey Peter D., Winkler David A. The microwave spectrum of (Z)-ethanimine. «Austral. J. Chem.», 1980, 33, № 1, 1—7 (англ.)

м. в. спектр

Измерен в области частот от 18 до 76 ГГц. МВ-спектр Z-изомера этанимина, $\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$, в основном колебательном и 1-м возбужденном торсионном состояниях. Анализ спектров выполнен с учетом эффектов центробежного искажения и квадрупольного взаимодействия. Вращательные постоянные в основном и возбужденном колебательных состояниях, соотв., равны (Мгц) $A=49909$ (143) и 61030 (950), $B=9828,299$ (41) и $9826,400$ (161), $C=8650,257$ (43) и $8665,647$ (163). Из расщепления линий из-за эффекта внутреннего вращения метильной группы оценена величина барьера внутреннего вращения $V_3=1494$ (6) кал/моль и остальные

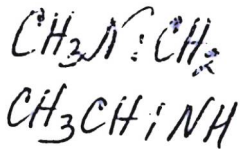
Х. 1980 № 21

параметры внутреннего вращения. Определены константы N-ядерного квадрупольного взаимодействия в основном и возбужденном колебательных состояниях, соотв., $\chi_{aa} = -3,676$ (35) и $-3,707$ (56) МГц, $\chi_{bb} = 0,552$ (16) и $0,569$ (26) МГц. Полученные значения χ_{aa} и χ_{bb} существенно отличаются от соотв-щих величин для метан-имина, в то время как значения χ_{cc} у обеих молекул близки по величине. По эффекту Штарка 2-го порядка для трех МВ-переходов определены компоненты дипольного момента в основном и возбужденном состояниях, соотв., $\mu_a = 2,380$ (2) и $2,377$ (2) D, $\mu_b = 0,445$ (93) и $0,829$ (63) D и результирующий полный дипольный момент молекулы $\mu = 2.42$ D.

С. Н. Мурзин

как

статья 5131 1977

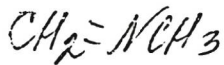


сил. мет,
мин; ди

Д. 1977
IV-10

10 Д499. N-метилметиленимин и этилиденимин: ИК-спектры газообразных и изолированных в матрице молекул, расчеты ab initio и термодинамические свойства. Stolkin I., Ha T.-K., Günthard Hs. H. N-methylmethyleneimine and ethylideneimine: gas- and matrix-infrared spectra, ab initio calculations and thermodynamic properties. «Chem. Phys.», 1977, 21, № 3, 327—347 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения ($200-4000 \text{ см}^{-1}$) газообразного $\text{CH}_3\text{N}:\text{CH}_2$ (I), полученного пиролизом N-триметилтексагидро-s-триазина, и изолированных в матрице из Ar при 4°K I и $\text{CH}_3\text{CH}:\text{NH}$ (II), полученного фотолизом $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{N}_3$ в матрице. Выполнен анализ норм. координат и проведены расчеты цис- и транс-конформаций молекул I и II и их изомеров $\text{CH}_2:\text{CHNH}_2$ и CH_2NHCN неэмпирич. методом ССП ЛКАО МО. Идентифицированы наблюдавшиеся полосы поглощения I и II, определены их силовые постоянные, рассчитаны термодинамич. параметры исследованных соединений. Библ. 34. С. Ф. Б.



Commu 7075-1 1978

Frost & C.; et al.

gross.
occup

y.
1

J. Electr. Spectr. and
Related Phenomena,
1978, 14, 379-90



$\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$ Commun 70757 1978

Frost D.C. et al

promoter
check;
(Y)

J. Electr. Spectrosc.
and Related Phenomena,
1978, 14, 379-90

CH_3NH_2

1978

89: 97236e Vibration-inversion-internal rotation-rotation Hamiltonian for methylamine. Kreglewski, M. (Inst. Chem., Adam Mickiewicz Univ., Poznan, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 72(1), 1-19 (Eng). A new vibration-inversion-internal rotation-rotation Hamiltonian for CH_3NH_2 was developed in which the inversion and internal rotation motions are removed from the vibrational problem by allowing the mol. ref. configuration to be the function of inversion (ρ) and internal rotation (τ) coordinates. The treatment is based on the idea of J. T. Hougen et al. (1970) who have studied the large amplitude bending motion of triat. mols. The inversion-internal rotation potential function $V(\rho, \tau) = a\rho^4 - b\rho^2 + c\rho^3 \cos 3\tau$ was used in which the coupling between the 2 large amplitude motions is taken into account. The inversion-internal rotation energy levels of CH_3NH_2 were calcd. with the used of the zeroth-order Hamiltonian for the zero value of the total angular momentum quantum no. *J.* The elec. dipole selection rules resulting from the symmetry classification of states were also discussed.

No

C.H. 1043, 29, N12



аммиак 6353

1978

Miller K., et al.

ракет
полетов,
Барберкневерсия

Helv. chim. acta,
1978, 61, (4)

1407-18

C_2H_5-N

Commun 8324 / 1979

Kb. mex.
fract,
E

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

$C_2H_3NH_2$

1979

8 Б132. Сродство к протону этилиденимина и ви-
ниламина. Ellenberger M. R., Eades R. A.,
Thomsen M. W., Farneth W. E., Dixon D. A.
Proton affinities of ethylidenimine and vinylamine. «J.
Amer. Chem. Soc.», 1979, 101, № 24, 7151—7154 (англ.)

Сродство
к протону

Методом нонного циклотронного резонанса установ-
лено, что сродство к протону для этилиденимина рав-
но $213,2 \pm 2$ ккал/моль относительно значения для NH_3 ,
равного 203,6 ккал/моль. Комбинацией этого сродства
с известной теплотой образования протонированной
частицы для теплоты образования (298 К) нейтр. ими-
на получено значение 2 ± 4 ккал/моль. Сродство к про-
тону для С-протонирования виниламина, вычисленное
неэмпирич. методом МО с двухэкспонентным базисным
набором, равно 220,2 ккал/моль. Подсчитано, что срод-
ство к протону для N-протонирования виниламина на
18,7 ккал/моль ниже, чем для С-протонирования. При-
ведены также рассчитанные значения сродства к про-
тону для аммиака, метиламина, диметиламина и три-
метиламина с использованием того же базисного на-
бора.

Резюме

X. 1980
N 8

C₂H₅N

1980

24 Б37. Расчеты эффективным методом молекулярных орбиталей, использующим точную кинетическую энергию. Harris F. E., Trautwein A., Delhalle J. Fake molecular-orbital calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 2, 315—318 (англ.)

Предложен полуэмпирич. метод МО для расчета электронного строения больших молек. систем. Вклады кинетич. энергии в матричные элементы фокиана F_{ij} предложено вычислять по точным ф-лам для одноэкспонентных орбиталей слейтеровского типа. Одноцентровые вклады потенциальной энергии в диагональные элементы являются параметрами метода (зависящими от эффективного заряда атома), а вклады в недиагональные элементы предложено вычислять с помощью параметров Слейтера—Кондона (для одноцентровых F_{ij}) и ф-лы Вольфсберга—Гельмгольца (для двух-

Кв. мех.
расчет

Заб. электр. в.

(47) X

Х. 1980 № 24

центровых F_{ij}). Двухцентровые двухэлектронные взаимодействия учтены в приближении Матага—Нишимо-то. Параметры метода подобраны так, чтобы воспроизвести полученные неэмпирич. ССП МО ЛКАО методом эффективные заряды и орбитальные энергии ϵ_i 37 малых молекул, содержащих атомы Н, С, N, О, F. Приведены рассчитанные ϵ_i занятых МО C_2H_5N , C_2H_4 , C_3H_4 , C_3O_2 , $CHONH_2$, NNO , FNO , F_2CO , находящиеся в удовлетворительном соответствии с ϵ_i , полученными неэмпирич. методом МО ЛКАО ССП. О. В. Гриценко

C_2H_5N

1980

Aug 12.

Supra class-
recomens
(4)

Theor. chim. acta.
1980, 57, NR, 107-30

cel. 172-III

$\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$ ВГ-ХIV-9224

1980

синтез,
м. в. е. шкль
м.и.

23 Б222. Пиролиз этиламина. II. Синтез и микроволновый спектр этилиденимина ($\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$). L o -
v a s F. J., S u e n g r a m R. D., J o h n s o n D. R.,
C l a r k F. O., T i e m a n n E. Pyrolysis of ethylamine.
II. Synthesis and microwave spectrum of ethylidenimine
($\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$). «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 4964—
4972 (англ.)

Измерены в области частот от 35 до 130 ГГц
МВ-спектры двух изомеров этилиденимина, $\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$, цис- (I) и транс- (II), в основном колебательном состоянии и I в первом возбужденном крутильном состоянии. Синтез I и II осуществлен в результате пиролиза этиламина или изопропиламина при т-ре 900° и при пиролизе тримера $(\text{CH}_3\text{CHNH})_3$ при т-ре 250°. Анализ спектров выполнен с учетом эффектов центробежного искажения, ^{14}N -ядерного квадрупольного

Х. 1980 №23

взаимодействия и внутреннего вращения метильной группы. Для I и II, соотв., вращательные постоянные в основном колебательном состоянии равны (в Мгц). $A=53120,528(80)$ и $49960,6(177)$, $B=9778,4950(106)$ и $9828,21(15)$, $C=8701,3167(166)$ и $8650,29(15)$. Высота барьера внутреннего вращения для I и II, соотв., равна $V_3=1,595$ и $1,475$ ккал/моль. Из эффекта Штарка второго порядка для двух переходов определены компоненты и полные дипольные моменты I и II, соотв., $\mu_a=0,834(23)$ и $2,408(14)$ D, $\mu_b=1,882(5)$ и $0,88(16)$ D и $\mu=2,058$ и $2,56$ D. Полученные данные использованы для определения возможной молек. структуры I и II. Сообщ. 1 см. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, 1925.

С. Н. Мурзин



ВФ-ХIV-9224 1980

12 Д470. Пиролиз этиламина. II. Синтез и микроволновый спектр этилиденимина ($\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$). Pyrolysis of ethylamine. II. Synthesis and microwave spectrum of ethylidenimine ($\text{CH}_3\text{CH}=\text{NH}$). Lovas Frank J., Suenram Richard D., Johnson Donald R., Clark Frank O., Tiemann Eberhard. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 4964—4972 (англ.)

Изучены микроволн. спектры (область 35—130 Гц) продуктов пиролиза этиламина и изопропиламина ($T \sim 900^\circ\text{C}$), а также тримера этилиденимина ($T \sim 500^\circ\text{C}$) при давлении $30\text{--}50 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. Исследование эффекта Штарка и анализ сверхтонкой структуры полос позволили выделить в спектрах полосы, относящиеся к различным вращательным переходам от цис(I)- и транс-этилиденимина (II). Оценены значения вращательных постоянных, постоянных центробежного растяжения, констант, сверхтонкого расщепления, дипольных моментов и барьеров заторможенного внутреннего вращения молекул I и II. Барьеры заторможенного внутренне-

М. И.

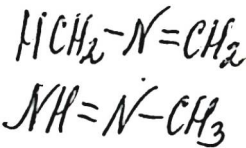
Ф. 1980 № 12

го вращения равны 557,8 и 551,1 см⁻¹ для I и II соответственно. Определены длины связей и углы между ними. Обсуждается механизм перехода этилиденимина из цисформы в более устойчивую трансформу.

В. В. Белякова

гся,
чине

1980



16 Б76. Теоретический подход к проблеме таутомерии триад $\text{HX}-\text{Y}=\text{Z} \rightleftharpoons \text{X}=\text{Y}-\text{ZH}$. II. Имины, гидразоны и оксимы ($\text{Y}=\text{N}$, $\text{Z}=\text{CH}_2$). Lhamyani-Chraïbi M., Gélizé-Duvigneau M., Arriau J., Elguero J. Approche théorique du problème de la tautomère des triades $\text{HX}-\text{Y}=\text{Z} \rightleftharpoons \text{X}=\text{Y}-\text{ZH}$. II. Cas des imines, hydrazones et oximes ($\text{Y}=\text{N}$, $\text{Z}=\text{CH}_2$). «Bull. Soc. chim. belg.», 1980, 89, № 1, 71—82 (франц.; рез. англ.)

кв. эск.
расчет,
молекуляр.
геометрия

Выполнены расчеты с полной оптимизацией геометрии полуэмпирич. методами ППДП/2 и ВКВЛО таутомерных пар $\text{HX}-\text{N}=\text{CH}_2$ (I) $\rightleftharpoons$ $\text{X}=\text{N}-\text{CH}_3$ (II), где $\text{X}=\text{CH}_2$ (а), NH (б), O (в). Геометрич. параметры, найденные методом ППДП/2, приводятся в статье; отмечается, что метод ВКВЛО дает близкие результаты, но длины связей систематически превышают получаемые в ППДП/2-расчетах. Найдено, что s-транс-конформер (относит. связи N—O) формальдоксима (Iв) более стабилен, чем s-цис. Длина связи C=N в Ia—Iв очень слабо зависит от заместителя X. Атом азота амногруппы гидразона 1б имеет неплоскую конфигурацию. Оба использованных расчетных метода дают для Iв длину связи N—O, заниженную более чем на 0,1 Å, и

(+1) M

2 1980 № 16

неправильно предсказывают относит. стабильность пар изомеров I и II, отдавая предпочтение, соотв., азометану (IIб) и нитрозометану (IIв). Методом ППДП/2 оптимизирована геометрия анионов $-XNCH_2$ (III); найдено, что они структурно ближе к I, чем к II. Ионизация сопровождается увеличением угла XNC. Анализируются распределения заряда и порядки связей в I—III. Построены карты электростатич. потенциала анионов IIIa—IIIв; обнаружены потенциальные ямы вблизи атома C вне плоскости XNC и вблизи гетероатомов в плоскости XNC. Величины потенциала как на большом расстоянии ($\sim 2,5$ Å) от соотв. атома, как и в точках минимумов свидетельствуют в согласии с экспериментом о предпочтительности протонирования по гетероатомам N, O.

В. Я. Беспалов



1980

Pross A., et al

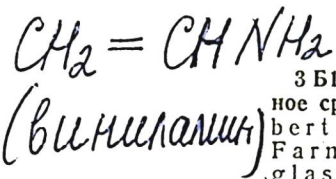
Кв. мех.
расчет,
структура

J. Amer. Chem. Soc., 1980,
102, n 7, 2253-2259.



с см CH_3BH_2 ; III

1981



3 Б111. Электронное строение виниламина. Протонное сродство и конформационный анализ. Eades Robert A., Weil David A., Ellenberger Mark R., Farneth William E., Dixon David A., Douglass Charles H. Electronic structure of vinylamine. Proton affinity and conformational analysis. «J. Amer. Chem. Soc.», 1981, 103, № 18, 5372—5377 (англ.)

Электрон.
строение

Методами ССП МО ЛКАО в валентном приближении ЧУДДП и неэмпирически в базисе ОСТ-3ГФ и двухэкспоненциальных базисах без учета и с учетом поляризац. p - и d -АО проведены расчеты различных конформаций виниламина (I), этилидинимина (II) и метиленимина (III). Оптимизация геометрич. параметров проводилась методом ЧСДДП. Анализом энергетич. градиентов, полученных в двухэкспоненциальном базисе подтверждено, что атом N в I должен иметь пирамидальную структуру, при этом, однако, II на 5,2 ккал/моль более стабилен, чем I. Проведены

X. 1982, 19, № 2.

расчеты различных протонированных форм I—III и приведены величины их протонного сродства (ПС), к-рые составляют (относительно NH_3) —20,1; —14,9 и —4,6 ккал/моль соотв. Разница в энергиях С- и N-протонированных форм I составила 18,3 ккал/моль, причем 1-я форма оказалась более стабильной. Рассчитаны барьеры вращения и инверсии I. В иминиевых ионах найдена значит. делокализация положит. заряда к α -атому С. Рассчитаны величины P_t ионизации (ПИ) и дипольных моментов I—III. Из рассчитанных значений ПС и ПИ оценены величины сродства I—III к атому Н.

И. Абрини

C_2H_4NH

ст. 13155

1981

4 Д118. Расчет силового поля азиридина, N-хлор- и N-бромазиридина. Force field calculations on aziridine, N-chloro- and N-bromo-aziridine. Kalcher K., Kosmus W., Faegri K., Jr. «Spectrochim. acta», 1981, A37, № 10, 889—893 (англ.)

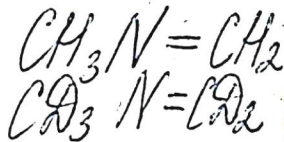
см. пост.

Выполнен анализ норм. координат циклич. молекул C_2H_4NX ($X=H, Cl, Br$); приведены выражения для внутренних координат симметрии. По литературным данным для частот колебаний вычислены силовые постоянные общего валентного силового поля и силового поля Юри — Бредли. М. Р. Алиев

ⓧ
(+2)

C_2H_4NCl • C_2H_4NBr

ф. 19.82, 18, № 4.



1984

9 Б1244. Анализ эффектов центробежного искажения и внутреннего вращения во вращательных спектрах N-метилметанимина- d_0 и d_5 . Centrifugal distortion and internal rotation analysis of the rotational spectra of N-methylmethanimine d_0 and d_5 . Demaison J., Burgie J., Denis J. M., Van Eijck B. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 2, 250—260 (англ.)

В диапазоне 8—240 ГГц исследованы МВ-спектры молекул $\text{CH}_3\text{N}=\text{CH}_2$ и $\text{CD}_3\text{N}=\text{CD}_2$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 40$ в основном колебательном состоянии, а также туннельное А—Е-расщепление и квадрупольная СТС линий. Определены значения вращат. и квартичных центробежных постоянных, барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3 = 713,7 \text{ см}^{-1}$) и постоянных квадрупольной связи ядра азота.

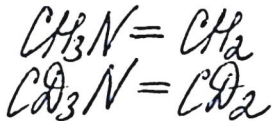
Е. В. Алиева



М.П., Ви,

X. 1985, 19, № 9

1984



4 Л145. Анализ эффектов центробежного искажения и внутреннего вращения в вращательных спектрах *N*-метилметанимина- d_0 и d_5 . Centrifugal distortion and internal rotation analysis of the rotational spectra of *N*-methylmethanimine d_0 and d_5 . Demaison J., Burie J., Denis J. M., Van Eijck B. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 2, 250—260 (англ.)

В диапазоне 8—240 ГГц исследованы МВ-спектры молекул $\text{CH}_3\text{N}=\text{CH}_2$ и $\text{CD}_3\text{N}=\text{CD}_2$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 40$ в основном колебательном состоянии, а также туннельное $A-E$ -расщепление и квадрупольная СТС линий. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных, барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3=713,7 \text{ см}^{-1}$) и постоянных квадрупольной связи ядра азота. М. Р. Алиев

м.п., ν_i ,

ф. 1985, 18, п. 4.

$\text{NH}_3 - \text{C}_2\text{H}_2$

ДМ. 18850

1984

10 Л180. Структура димера $\text{NH}_3 - \text{ацетилен}$. The structure of NH_3 -acetylene. Fraser G. T., Leopold K. R., Klempner W. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 4, 1423—1426 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молекулярных пучках получены микроволн. спектры в области 5—11 ГГц образованных в пучке димеров $\text{NH}_3 - \text{C}_2\text{H}_2$. Приведены измеренные с точностью ~ 10 кГц частоты линий и их отнесение к вращательным переходам симметричного волчка. По эффекту Штарка на линии $J=1-0$ измерен дипольный момент димера. Найдены вращательная постоянная B_0 , константы центробежной деформации и квадрупольного расщепления по ядру ^{14}N . Эти величины использованы для определения геометрии комплекса и основной частоты его валентного колебания. Найденная линейная структура комплекса и равновесное расстояние согласуются с результатами расчетов электронной структуры комплексов. Дано сравнительное рассмотрение свойств аналогичных комплексов. Библ. 23. М. В. Т.

спектр,
геометр.,
структура,
и.п.

ср. 1984, 18, N10

NH_3 — комплекс

am. 18850 1984

17 Б1259. Структура комплекса NH_3 -ацетилен. The structure of NH_3 -acetylene. Fraser G. T., Leopold K. R., Klempner W. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 4, 1423—1426 (англ.)

Методом электр. резонанса в молек. пучке измерен в области частот 5—11 ГГц вращат. спектр слабосвязанного молек. комплекса NH_3 — ацетилен в основном колебат. состоянии. Идентифицировано 10 компонент СТС трех вращат. переходов комплекса. Анализ спектра выполнен в рамках модели симм. волчка с учетом квадратичного центробежного искажения и ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия. Определены вращательная постоянная $B_0 = 2724,567(5)$ МГц, постоянные центробежного искажения $D_j = 7,14(70)$ кГц, $D_{JK} = 894(3)$ кГц и постоянная квадрупольного взаимодействия $eQq_{\text{aa}} = 3,137(18)$ МГц. По эффекту Штарка для двух сверхтонких компонент перехода $J=0-1$ определен дипольный момент комплекса $\mu = 1,9871(16)$ D.

м.п.

x. 1984, 19, № 17

В предположении, что структуры NH_3 и ацетилена сохраняются при образовании комплекса, рассчитаны усредненные структурные параметры. Комплекс обладает симметрией C_{3v} с расстоянием между центрами масс NH_3 и ацетилена $4,063(4)$ А. При этом C_3 -ось NH_3 и C_∞ -ось C_2H_2 наклонены относительно a -оси комплекса, соотв., на $23,2(3)$ и 15° . Длина Н-связи $\text{N}\cdots\text{H}$ комплекса оценена как $2,333(4)$ А. Определенные из МВ-данных значения структурных параметров согласуются с результатами структурного расчета (Frisch M. J. и др., «J. Chem. Phys.», 1983, 78, 4063). Результаты сопоставлены с данными для родственных комплексов с водородной связью $\text{N}\cdots\text{H}$ на основе NH_3 и HCN . С. Н. Мурзин

$\text{NH}_3 \cdot \text{C}_2\text{H}_2$

OM. 18850 1984

100:111388k The structure of ammonia-acetylene. Fraser, G. T.; Leopold, K. R.; Klemperer, W. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(4), 1423-6 (Eng). The microwave spectrum of the weakly bound complex $\text{NH}_3\text{-C}_2\text{H}_2$ was measured by mol.-beam elec. resonance spectroscopy. A spectrum characteristic of a sym. top was obsd. and the spectroscopic consts. were detd. The obsd. spectrum is consistent with an axially sym. complex in which the C_2H_2 H bonds to the NH_3 with a H bond length of 2.33 Å.

структура,
из спектра

C.A. 1984, 100, N14

Um. 19958)

1984

$C_2NH_5^+$

C_2NH_5

Lien M.H., Hopkin-
son A.C.,

ab initio
pacem

Can. J. Chem., 1984,
62, N 5, 922-925.

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

DM.

20472

1984

6 Б1049. Расчет неэмпирическим методом ССП+КВ барьера внутреннего вращения $\text{CH}_2 - \text{X} - \text{CH}_2$. Ab initio SCF+CI calculation of rotational energy barriers in $\text{CH}_2 - \text{X} - \text{CH}_2$ species. Volatron F. «Can. J. Chem.», 1984, 62, № 8, 1502—1505 (англ.; рез. фр.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны барьеры внутреннего вращения (БВВ) метиленовых групп вокруг связей $\text{C} - \text{X}$ у $\text{CH}_2 - \text{X} - \text{CH}_2$ с $\text{X} = \text{NH}$, O и CH_2 . Оптимизация геометрии проведена в базисе $6-31\text{G}$ с учетом КВ 3×3 , в к-рое включены три синглетные конфигурации, построенные из двух граничных орбиталей. Энергии оптимизированных структур, вычислены в базисе $4-31\text{G}$ с учетом КВ. В КВ учтено несколько однократно возбужденных конфигураций (S -пространство), из них построена матрица КВ и вычислены многодетерминантные волновые функции, вклад всех остальных однократно и двухкратно возбужденных конфигураций учивывали во 2-м порядке теории возмущений. Если при этом обнаруживалось, что какая-то конфигу-

расчет по

1985, 19, № 6

х. 1985, 19, № 6

$\text{CH}_2 - \text{O} - \text{CH}_2$, $\text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2$

рация сильно взаимодействует с первоначально отобранными (выше порогового значения), то ее включали в S -пространство и всю процедуру учета КВ повторяли (см. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, 5745). Получены следующие значения БВВ: для $X=NH$ 36,1, для $X=O$ 20,6 и для $X=CH_2$ 1,1 ккал/моль. Вычисленные БВВ слабо зависят от учета взаимодействия с конфигурациями, не включенными в S -пространство, и от размера самого S -пространства.

К. Я. Буршейн



$\text{CH}_3 - \text{CH} = \text{NH}$ [Om. 25358]

1985

Al-Baldawi N. M.,
Sharskal M.,

Результаты
исследования
структуры и
оптических
свойств
соединения.

Chim. acta tuzc., 1985,
13, N1, 41-58.

NH_3-HCCN

011 31 135 1985

№ 22 Б1372. Микроволновые и инфракрасные характеристики некоторых слабосвязанных комплексов NH_3 . Microwave and infrared characterization of several weakly bound NH_3 complexes. Fraser G. T., Nelson D. D. Jr., Charo A., Klemperer W. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 6, 2535—2546 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методами электрич. резонанса в молек. пучке в обл. частот 65—91 000 кГц и 3,75—23,0 ГГц, ИК-спектроскопии в обл. частот 920—990 см^{-1} и 1020—1092 см^{-1} и микроволнового — ИК двойного резонанса изучены ван-дер-ваальсовы комплексы NH_3-HCCN (I), NH_3-HCN (II), NH_3-CO_2 (III), $(\text{NH}_3)_2$ (IV), $(\text{ND}_3)_2$ (V), $\text{Ar}-\text{NH}_3$ (VI), NH_3-OCS (VII) и $\text{NH}_3-\text{N}_2\text{O}$ (VIII). С учетом ранее выполненных исследований определены вращат. постоянные и дипольные моменты для I: $B = 2724,567$ (4) МГц, $\mu = 1,9871$ (16) D, для IV: $(B + C)/2 = 5110,0$ (5) МГц, $\mu = 0,74$ (2) D, для V: $(B + C)/2 = 4190,3$ (3) МГц, $\mu = 0,57$ (1) D и для VI оцен.

(М.П.)

(+7)

х. 1986, 19, № 22

ка дала $B \approx 2,5$ ГГц. Определены частоты ИК-переходов фотодиссоциации для I, III, VII и VIII, соотв., 984,4(9), 987,1(2), 981,5(1,5) и 980(2) см^{-1} . Из этих данных оценена энергия диссоциации комплексов не более 2,8 ккал/моль. С. Н. Мурзин

C₂H₅N

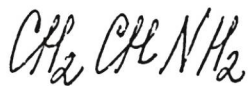
com. 22 200

1985

Улатохин С. А., Грибов Л. А.
и др.,

алгоритм
определен.
равновесия
геометрии

ис. структур. химии,
1985, 26, № 42-47.



(OM. 24580)

1986



Marriott S., Topsom
R.D.

Mol. Struct. Theo-

chemistry

chem., 1986, 139,

N 1-2, 101-107.

CH_2NCH_3

(DM-26066)

1987

ab initio
(pariem)

(+2) Δ

C.A. 1987, 106, N24

106: 202002v The electronic structure of methylenoamine compounds (CH_2NCH_3 , CH_2NNH_2 , CH_2NOH , and CH_2NF). Armstrong, D. R.; Walker, G. T. (Dep. Pure Appl. Chem., Univ. Strathclyde, Glasgow, UK G1 1XJ). *THEOCHEM* 1987, 34(3-4), 369-89 (Eng). Ab initio geometry optimization calcns. were carried out on CH_2NCH_3 , CH_2NNH_2 , CH_2NOH and CH_2NF using 6-13G and 6-31G** basis sets. Three of the 4 species possess a plane of symmetry while CH_2NNH_2 prefers a non-planar geometry with the amino N adopting sp^3 hybridization. The CN bond length remains almost const. at 1.25 Å with an accompanying bond index of 2.2 for all 4 species. The CNR angle decreases and the related inversion energy at N increases as the R group becomes more electroneg. The charge on N decreases as the R group changes from CH_3 to F and the energy of protonation at N correspondingly decreases from 230 to 194 kcal mol⁻¹. A slight pos. charge is present on the imino C atoms and the stabilizing energy of hydride ion addn. to the imino C atom lies between 23.7 kcal mol⁻¹ and 47.4 kcal mol⁻¹.

CH_2NCH_3

00.26066 1987

6 Д111. Электронная структура CH_2NCH_3 , $\text{CH}_2\text{N}-\text{NH}_2$, CH_2NOH и CH_2NF . The electronic structure of CH_2NCH_3 , CH_2NNH_2 , CH_2NOH and CH_2NF . Armstrong D. R., Walker G. T. «J. Mol. Struct. Theorchem», 1987, 149, № 3—4, 369—389 (англ.)

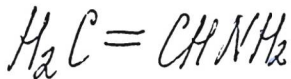
Проведены неэмпирич. расчеты по оптимизации геометрии молекул CH_2NCH_3 , CH_2NNH_2 , CH_2NOH и CH_2NF с использованием базисов 6—31ГФ и 6—31ГФ**. Три из четырех молекул обладают плоскостью симметрии, тогда как CH_2NNH_2 имеет неплоскостную геометрию с sp^3 -гибридизацией amino-N. Длина CN связи остается почти постоянной при 1,25 Å с индексом связи 2,2 для всех четырех молекул. Угол CNR уменьшается, и относит. энергия инверсии на N возрастает с ростом электроотрицательности группы R. Заряд на N уменьшается, когда группа R меняется от CH_3 до F, и энергия протонирования на N соответственно уменьшается от 230 до 194 ккал·моль⁻¹. Слабый положит. заряд присутствует на атоме углерода иминогруппы, а энергия стабилизации при добавлении гидридного иона к иминогруппе лежит между 23,7 и 47,4 ккал/моль. Л. Д. Б.

М.П.

✓

(73)

ср. 1987, 18, № 6



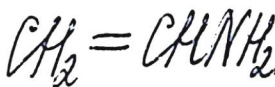
(Om. 27 178)

1987

(ν_0)

107: 66929u The inversion-torsion motion in vinylamine. Brown, R. D.; Godfrey, P. D.; Kleiboemer, B. (Dep. Chem., Monash Univ., Clayton, 3168 Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 124(1), 21-33 (Eng). A combined semirigid-bender anal. of vibrational satellite shifts in the microwave spectrum and previously published IR data resolved the ambiguity of the inversion potential in $\text{H}_2\text{C}=\text{CHNH}_2$. The mol. is nonplanar in its equil. configuration. In the motion between the 2 potential min. of the NH_2 group, the H undergo an inversion-torsion motion during which the *syn*-H is always closer to the CCN plane than is the *anti*-H. The barrier height is 390 cm^{-1} and the potential min. are at bending angles of 46.4° from the plane. The large-amplitude-motion treatment predicts the hitherto unobserved 1^+-0^- band to lie at 340 nm^{-1} and 269 cm^{-1} in $\text{H}_2\text{C}=\text{CHNH}_2$ and $\text{H}_2\text{C}=\text{CHND}_2$, resp.

C: A. 1987, 107, N 8



ОМ, 27172

1987

12 Б1262. Векторные и торсионные колебания аминогруппы в винилиамине. Amino wagging and torsion vibrations of vinylamine. Hamada Y., Sato N., Tsuboi M. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 124, № 1, 172—178 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($800-10 \text{ см}^{-1}$) $\text{CH}_2 = \text{CHNH}_2$ (I) и $\text{CH}_2 = \text{CHND}_2$ в газ. фазе с разрешением $0,25 \text{ см}^{-1}$. Синтез I осуществлен путем пиролиза н-пропиламина при 800°C . Обнаружено, что векторные и торсионные колебания аминогруппы расщеплены на две компоненты из-за большой амплитуды инверсии аминогруппы. 2 полосы при 580 и 570 см^{-1} в спектре I отнесены к торсионному кол. $\text{C}=\text{C}$. Неэмпирич. методом вычислена двумерная потенциальная ф-ция векторных и торсионных координат. Оптимизация дает высоты барьеров внутреннего вращения: 1650 и 2090 см^{-1} для цис- и транс-положений группы NH_2 . Это намного ниже величин 2350 и 2550 см^{-1} , полученных из частоты вращения 333 см^{-1} для I. Эффективная величина барьера внутреннего вращения составляет в I $2400 \pm 200 \text{ см}^{-1}$, а барьера инверсии $-70 \pm 100 \text{ см}^{-1}$. Е. Р. Разумова

М.А.

Х. 1988, 19, N 12

$CH_2 = CHNH_2$ OM 27 172 1987

1 Л153. Верные и крутильные колебания аминогрупп виниламина. Amino wagging and torsion vibrations of vinylamine. Hamada Yoshiaki, Sato Nobuo, Tsuboi Masamichi. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 124, № 1, 172—178 (англ.)

Изучены длинноволн. ИК-спектры ($650-300\text{ см}^{-1}$) молекул виниламина (I) и его дейтерированных аналогов в газовой фазе с разрешением $\sim 0,25\text{ см}^{-1}$. Методом ab initio рассчитаны параметры равновесной структуры I. В рамках модели асимметричного волчка для I определены частоты верных и крутильных колебаний аминогрупп в I. Обнаружено, что ИК-полосы этих колебаний I имеют дублетную структуру вследствие взаимодействия деформационных колебаний I и инверсионного движения аминогруппы с большой амплитудой. Найдены величины потенц. барьеров для инверсионного движения и крутильного колебания в I, равные 700 ± 100 и $2400 \pm 200\text{ см}^{-1}$ соответственно. И. В. А.

М. П.

ср. 1988, 18, №1

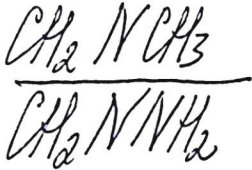
$H_2C:CHNH_2$

Om. 27 172 1987

/-107: 86338d Amino wagging and torsion vibrations of vinylamine. Hamada, Yoshiaki; Sato, Nobuo; Tsuboi, Masamichi (Fac. Pharm. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 124(1), 172-8 (Eng). Far-IR spectra of $H_2C:CHNH_2$ and $H_2C:CHND_2$ were obsd. in the gas phase at 0.25 cm^{-1} resolu. Each of the NH_2 wagging and torsion energy levels was split into 2 by a large amplitude inversion motion of the NH_2 group. Barrier height for the inversion was estd. as $\sim 700 (\pm 100)\text{ cm}^{-1}$ and that for the internal rotation $2400 (\pm 200)\text{ cm}^{-1}$.

(V_o)

C.A. 1987, 107, N10



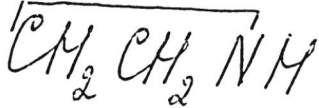
(DM. 31 343)

1988

Ertl P.,

структура,
изомериз-
мизм

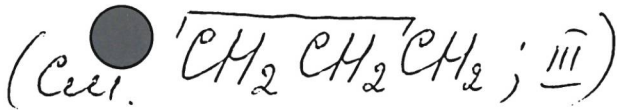
Collect. Czechosl. Chem.
Commun., 1988, 53, N 12,
2986 - 2994.



1988

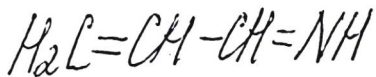
Simandiras E.D.,
Amos R.D., et al.

U. 17. J. Amer. Chem. Soc., 1988,
110, N 5, 1388 - 1393.





1989



Krause H., et al.,

High Resolution Microwave
CW Spectroscopy of Imines
and Nitrates in Exterior
Magnetic Fields.

Eleventh Colloquium On
High Resolution Molecular
Spectroscopy, Birssen,
September 18-22, 1989, A-1,
FS.

ННГНЧ
(азиредик)
и др.

[Ом. 32275]

1989

Земовьев К.А.,

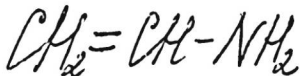
Ив. Тимирязев. С-Х.

см. Акад. 1989, № 4, 179 -

лост. 184.

Квасово - хмель и скнет раслет

Спектральных параметров молекул
тривалентных азотсодержащих
гетероциклов в системе зави-
симых естественных координат

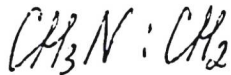


1990

113: 141166c Submillimeter-wave spectrum, far-infrared spectrum, and inversion potential of vinylamine. Brown, R. D.; Godfrey, P. D.; Kleibomer, B.; Pierlot, A. P.; McNaughton, D. (Dep. Chem., Monash Univ., Clayton, 3168 Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 142(2), 195-204 (Eng). The rotational spectra between 18 and 355 GHz of the Coriolis-coupled 0⁺ and 0⁻ inversion states of vinylamine were assigned and fit to give values of the rotational consts., Coriolis coupling const. (μ_{br}), and inversion splitting (ΔE). The value of $\Delta E = 45.481(74) \text{ cm}^{-1}$ was confirmed by measurement of the far-IR spectrum of vinylamine. The rotational data were combined with the frequencies of the IR transitions of the amino wagging vibrations in a large amplitude motion anal. to give a barrier to inversion of 356 cm^{-1} with min. at bending angles of 50.8° .

UK chemp,
M.N.

C.A. 1990, 113, N 16



1992

117: 78992d High-resolution diode laser spectroscopy of the ν_{16} band of N-methylmethylenimine. Yu, Gang; Duxbury, Geoffrey (Dep. Phys. Appl. Phys., Univ. Strathclyde, Glasgow, UK G4 0NG). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 155(1), 105-14 (Eng). High-resoln. IR diode laser spectroscopy of mol. discharges through amines and diamines was carried out. The IR spectrum of the ν_{16} band of the short-lived species $\text{CH}_3\text{N}:\text{CH}_2$ (N-methylmethylenimine) was recorded at the 10- μm region with a resoln. of 0.002 cm^{-1} . Over 100 vibration-rotational transitions belonging to the ν_{16} (CH_2 rocking) fundamental band of $\text{CH}_3\text{N}:\text{CH}_2$ were assigned near the band center at 1026 cm^{-1} . The rotational consts. of the excited state of this C-type band were detd. by using a least-squares fitting program with a std. deviation of less than 0.001 cm^{-1} .

(216)

H. C. C. 1992, 117, 105-14

C.A. 1992, 117, 105-14

$H_3CCH=NH$ [Dm 38206] $CNH_2CCH=NH$ 995
 $CH_5CCH=NH$
 $NH_4CCH=NH$ Jen - Fong dir, Cheng - Chang
Wu, et al.

ab initio
param. J. Phys. Chem., 1995, 99,
16903 - 16908

Ab Initio study on the

Imine-Enamine Tautomerism of
the α -substituted Imines
($XH_2CCH=NH$, $X=H, BH_2, CH_3, NH_2,$
 OH, F, Cl, CN, NO)

F: CH₃CN

P: 3

1999

131:204842 Calculation of highly excited
vibrational energy levels of CH₃ molecule by non-
linear quantum theory. Zhu, Jun; Gou, Qing-quan
(Departme of Applied Physics, Sichuan University,
Chengdu 610064, Peop. Rep. China) Phys. Sin.
(Overseas Ed.), 8(6), 430-433 (English) 1999

A three-parameter nonlinear dynamical model,
i.e., the quantized discret self-trapping equation,
was used to calc. the highly excited CH stretchin
vibrational energy levels of the liq. phase CH₃CN
mol. in the electronic state up to $n=7$. The calcd.
results show that the exptl. energy levels c well
described by the model.

2000

F: C2H2-NH3

P: 3

132:127988 The Acetylene-Ammonia Dimer as a
Prototypical C- H.cntdot..cntdot..cntdot.N
Hydrogen-Bonded System: An Assessment of Theor
Procedures. Hartmann, Michael; Radom, Leo

Research School of Chemistry, Australian
National University Canberra 0200, Australia

J. Phys. Chem. A, 104(5), 968-973 (English)

2000 The effect of a variety of theor. methods
(HF, B3-LYP, MP2, QCISD, and CCSD(T)) and basis
sets (from 6-31G(d) to 6-311+G(3df,2p)) on the
calcd. geometry and dimerization energy of the
acetylene-ammonia dimer

HCCH.cntdot..cntdot..cntdot.NH3 is examd. The
dimer has C3v symmetry with acetylene acting as the

C.A. 2000, 132

hydrogen bond donor. Our highest level calcns. (CCSD(T)/6-311+G(3df,2p) including BSSE correction) predict an equil. cont distance $r(\text{H.cntdot}..\text{cntdot}..\text{cntdot}.\text{N})$ of 2.280 Å and an equil. binding e .DELTA.Ee of 14.1 kJ mol⁻¹. Incorporation of a scaled B3-LYP/6-311+G(3df zero-point vibrational correction leads to .DELTA.E0 = 9.3 kJ mol⁻¹. The expensive CCSD(T)/6-311+G(3df,2p)//B3-LYP/6-311+G(3df,2p) procedure repro these benchmark energies and is therefore recommended for general applica small hydrogen-bonded systems. For larger hydrogen-bonded systems, the s. less expensive B3-LYP/6-311+G(3df,2p)//B3-LYP/6-311+G(d,p) procedure is recommended, and this yields .DELTA.E0 = 7.8 kJ mol⁻¹ for the acetylene-a dimer.

F: c-C₂H₄NH

P: 3

2000

132:85340 The millimeter- and submillimeter-wave spectrum and the dipole moment of ethylenimine.

Thorwirth, S.; Muller, H. S. P.; Winnewisser, G.
I. Physikalisches Institut, Universitat zu
Koln Koln D-50937, Germany J. Mol. Spectrosc.,
199(1), 116-123 (English) 2000 The rotational
spectrum of ethylenimine (aziridine, c-C₂H₄NH) was
studied in selected regions from 118 to 950 GHz using
the Cologne terahertz spectrometer. About 320 lines
were measured spanning the quantum nos. 2 .ltoreq. J
.ltoreq. 59 and 0 .ltoreq. Kc .ltoreq. 50. All lines
were fit together with previously published data to
yield refined ground state consts. such as A =
22,736.19294(31) MHz, B = 21,192.46114(31) MHz, and C
= 13,383.16401(30) MHz and centrifugal distortion

C.A. 2000, 132

consts. that permit accurate frequency predictions. FTMW measurements were performed at the ETH Zurich to redetermine the dipole moment, to improve ^{14}N -quadrupole-coupling consts., as well as to det. ^{14}N -spin-rotation coupling consts. The most reliable values for the components of the dipole moment are $\mu_b = 0.97(12)$ D and $\mu_c = 1.357(25)$ D detd. by the Stark- and addnl. intensity measurements of appropriate b- and c-type transitions. Also, we performed quantum chem. calcns. of the dipole moment of ethylenimine that confirm these exptl. results.

This three-membered ring mol. is of potential astrophys. interest.