

NCEH₂

1952

⁸⁸⁸⁻⁴¹³
 NH_2Cl , NH_2NCl , NHCl_2 , NCl_3 (Vi, cupyrin 28a)

Moore G. E., Badger R. M.

J. Am. Chem. Soc., 1952, 74, 6076-80

The infrared spectra and structure of the
chloramines and nitrogen trichloride

1+4

C.A., 1953, 3697a

Н₂С₂
N H₂ D
N H₂ D₂
Синтетическое
параметры
расчет

1961.
Venkateswarlu K., Thirugana-
nasambandam P., Kalambra-
manian C.

Z. phys. Chem., (DDR), 1961, 218,
n 5-6, 310.

Синтетическое постоянное пара-
метрическое молекулы Ти-
на XYZ_2

X. 1964-2



$\text{NH}_2\text{Cl}^{35}$

XIII-783

1970

8 Б187. Микроволновый спектр и молекулярная структура монохлорамина. Lister D. G., Millen D. J. The microwave spectrum and molecular structure of monochloramine. «Chem. Commun», 1970, № 22, 1505—1506 (англ.)

Исследован МВ-вращательный спектр (переход $1_{01} \leftarrow 0_{00}$) изотопич. разновидностей $\text{NH}_2\text{Cl}^{35}$ (I), $\text{NH}_2\text{Cl}^{37}$ (II), NHDCl^{35} (III), NHDCl^{37} (IV), $\text{ND}_2\text{Cl}^{35}$ (V) молекулы монохлорамина. Монохлорамин приготавлился в ячейке волновода МВ-спектрометра при смешивании паров Cl_2O (~1 объем) с парами водн. р-ра аммиака (~5 объемов) при полном давлении 1 см. Определены вращательные постоянные $B+C$ 28063,51 (I), 27602,14 (II), 26213,10 (III), 25768,27 (IV) и 24599,80 Мгц (V), константы квадрупольного взаимодействия для ядра Cl $\chi_{aa} = -99,5$

во в.
стр-ра

М. И.

X. 1971. 8

(I), $-78,5$ (II), $-99,2$ (III), $-78,5$ (IV), $-99,8$ МГц (V)
и ядра N $\chi_{aa}=5,4$ (I, III), $5,5$ МГц (II). При использо-
вании комбинации вращательных постоянных
 $A=1/2(B+C)$, определенной из исследований ИК-спек-
тров высокого разрешения I и III (G. E. Moore,
R. M. Badger. J. Amer. Chem. Soc., 1952, 74, 6076), опре-
делены геометрич. параметры молекулы монохлорамина:
 $r(N-Cl)=1,750$, $r(N-H)=1,025$ А, $\angle NHC l=104^\circ$,
 $\angle HNH=99^\circ$, $\Phi=68^\circ$ (Φ — угол между биссектрисой
угла $\angle HNH$ и связью N—Cl). Инверсионное удвоение
в МВ-спектре I—V не обнаружено. А. П. Александров.

NH_2Cl

XIII - 783

1970

мол. спектр
структ.
М. Н.

5 Д361. Микроволновый спектр и молекулярная структура монохлорамина. Lister D. G., Millen D. J. The microwave spectrum and molecular structure of monochloramine. «Chem. Commun», 1970, № 22, 1505—1506 (англ.)

С помощью микроволн. спектроскопии исследованы $1_{01} \leftarrow 0_{00}$ -переходы 5 изотопич. образцов монохлорамина. Определены молекулярные параметры: $r(\text{N}-\text{Cl}) = 1,750$ и $r(\text{N}-\text{H}) = 1,025$ Å; $\angle \text{NHCl} = 104^\circ$ и $\angle \text{HNH} = 99^\circ$; угол между бисектором $\angle \text{HNH}$ и $\text{N}-\text{Cl}$ -связью равен 68° . Найлены постоянные квадрупольного взаимодействия для ядер Cl и N.

Ф. 1971. 5Д

ClNH₂

XIII-783

1940

(59070d) Microwave spectrum and molecular structure of monochloramine. Millen, Douglas I.; Lister, D. G. (Christopher Ingold Lab., Univ. Coll. London, London, Engl.). *J. Chem. Soc. D* 1970, (22), 1505-6 (Eng). The $1_{01} \leftarrow 0_{00}$ transitions of 5 isotopic species of monochloramine were obsd. at -30° for samples prepd. in the waveguide cell, and Cl and N quadrupole coupling consts. are detd.: mol. parameters were $r_{N-Cl} = 1.780$, $r_{N-H} = 1.025$ Å; $\angle HNCI$ 104° , $\angle HNH$ 89° , ϕ (angle between bisector of $\angle HNH$ and the extension of N-Cl bond) = 68° .

DSJN

C.H. 1941. 74. 12

NH_2Cl

Lister D. G.
Millen D. J.

1971

лев. спектр;
десн. момент.

Trans. Faraday Soc.,
1971, 67 (Pt. 3), 601.

● $(\text{C}_{\text{eff. HOCe}})^{1/2}$

ClNH₂

XIII - 2298 - BP

1942

(Структ.
парам.)

11863z Molecular structure and nuclear quadrupole coupling constants of monochloroamine from microwave spectroscopy. Cazzoli, G.; Lister, D. G.; Favero, P. G. (Lab. Spettrosc. Mol., Univ. Bologna, Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 42(2), 286-95 (Eng). The rotational consts. B and C and the nuclear quadrupole coupling consts. of 6 isotopic species of ClNH_2 were obtained from low $J_{\mu_a R'}$ branch transitions. The r_e structure was detd. as: $r_{\text{N-H}} = 1.017 \pm 0.005 \text{ \AA}$, $r_{\text{N-Cl}} = 1.7480 \pm 0.0001 \text{ \AA}$, $\angle \text{HNCI} = 103^\circ 41' \pm 22'$, $\angle \text{HNH} = 107^\circ \pm 2^\circ$.

P. A. 1942. 44 2

30806.7237
Ch, Ph, SIS, TE

NH_2Cl

м. и

XI-3452

29864

45-1349

1973

Bendazzoli G.L., Lister D.G., Palmieri P.
SCF-MO calculations of some molecular
properties of the isoelectronic series
FCl, HOCl, NH_2Cl and CH_3Cl .

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1973, Part
2, 69, N 6, 791-797

(англ.)

0934

ВИНИТИ

906 906 09.24

м. и
FCl, HOCl, NH_2Cl , CH_3Cl

NH_2Cl

XIII-2246

1973

11 Д729. Вращательно-инверсионные переходы в микроволновом спектре монохлорамина и барьер инверсии аминогруппы. Cazzoli G., Lister D. G. Rotation-inversion transitions in the microwave spectrum of monochloroamine and the barrier to inversion of the amine group. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 45, № 3, 467—474 (англ.)

В диапазоне 8—40 Гц исследованы микроволн. спектры молекул $\text{NH}_2^{35}\text{Cl}$ и $\text{NH}_2^{37}\text{Cl}$ в их естественном содержании. По результатам предварительного расчета положения и интенсивности линий идентифицированы линии вращательно-инверсионных переходов с-типа R- и P-ветвей в основном колебательном состоянии. Для величины инверсионного расщепления основного состояния получено значение $\Delta_0 = 70$ Мгц ($\text{NH}_2^{35}\text{Cl}$). Из значений Δ_0 и ИК-частот $0 \rightarrow 1 = 1032$, $0 \rightarrow 2 = 2020$ cm^{-1} с использованием потенциала Маннинга и параболич. потенц. кривой с гауссовым барьером оценена величина барьера инверсии ($3500\text{—}5500$ cm^{-1}) М. Р. Алиев

Uo

2851-82

x. 1973 N 11

H_2NCl

Nakatsugi Hiroshi

1973

"J. Amer. Chem. Soc."

1973, 95, N. 2, 354-61.

ном.

сир.

"форма молекул в сел.
и возб. состояниях"

(см. BeH₂; III)

TX-5257

1976

HgH_2 , ClO_2 , SO_2Cl_2 , PH_2 , PF_3O ,
 NH_2Cl , SiH_2 , HCP , OCS , HNCS , CH_2FCl ,
 BCl_3 (nb. max. pressure)

Marsh F. J., Gordon M. S.

J. Mol. Struct., 1976, 31, N2, 345-357

NH₂Cl

Adams R.B.

1977

"J. Electron Spectrosc. and
Relat. Phenom.", 1977,
10, №3, 247-258.

кб. мех.
парей.

(см. HCl) 14

NH_2Cl

фотоэлектр.
спектр

(43) A

Ф. 1979. 2

2 Д350. Фотоэлектронные спектры хлораминов NH_2Cl , NHCl_2 , NCl_3 и метилхлораминов CH_3NHCl , CH_3NCl_2 и $(\text{CH}_3)_2\text{NCl}$. Colbourne D., Frost D. C., McDowell C. A., Westwood N. P. C. The photoelectron spectra of the chloramines NH_2Cl , NHCl_2 , NCl_3 and the methyl chloramines CH_3NHCl , CH_3NCl_2 , and $(\text{CH}_3)_2\text{NCl}$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 3, 1078—1085 (англ.)

Исследованы HeI-фотоэлектронные спектры NH_2Cl (I), NHCl_2 (II), NCl_3 (III), CH_3NHCl (IV), CH_3NCl_2 (V), $(\text{CH}_3)_2\text{NCl}$ (VI). Первые 4 вертикальные потенциала ионизации I—VI равны (в эВ): I—10,52, 11,92, 13,50, 15,72; II—10,56, 11,88, 12,39, 12,50; III—10,69, 11,66, 12,08, 13,02; IV—9,80, 11,52, 12,43, 13,68; V—9,31, 11,22, 11,93, 13,15; VI—10,01, 11,45, 11,96, 12,14. Фотоэлектронные спектры интерпретированы при помощи анализа колебательной структуры полос, путем сравнения спектров I—VI и родственных фосфорсодержащих соединений. Первая полоса в спектрах I—VI соответствует удалению электронов неподеленной пары азота. Обсуждено влияние заместителей на первый потенциал ионизации I—VI. Библ. 48.

Ю. В. Чижов

1978

NH_2Cl

отмечено 6543

1 Д315. Фотоэлектронные спектры хлорамина и дихлорамина. Livett M. K., Nagy-Felsobuki E., Peel J. B., Willett G. D. Photoelectron spectra of chloramine and dichloramine. «Inorg. Chem.», 1978, 17, № 6, 1608—1612 (англ.)

Исследованы HeI- и HeII-фотоэлектронные спектры хлорамина (I) и дихлорамина (II). Указанные соединения получены за счет реакции в газовой фазе аммиака с хлором. Вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) I, II равны (в эВ): I — 10,60; 11,95; 13,45; 15,70; 17,11; II — 10,52; 11,85; 12,40; 14,40; 16,17; 17,32. Обнаружена колебательная структура во второй фотоэлектронной полосе I — 840, 550 cm^{-1} , в третьей полосе I — 410 cm^{-1} и в первой полосе II — 560 cm^{-1} . Фотоэлектронные спектры интерпретированы с помощью неэмпирич. расчетов энергий МО, анализа колебательной структуры полос, а также сравнения с фотоэлектронными спектрами родственных соединений. Сделано заключение, что первые ПИ I, II связаны с удалением электронов с МО $10a'(n_N - n_{Cl})$ и $12a'(n_N - n_{Cl})$, вторые — $3a''(n_{Cl})$ и $9a''(n_{Cl})$. Библ. 20.

Ю. В. Чижев

Ф. 1949, N 1

$NClH_2$

commun 7204

1978

Weller Th; et al.

барьер
неверсии

Acta chim. Acad. Sci.

hungar., 1978, 98 (3)

297 - 302

NH_2Cl

1979

молекул.
геометрия

Г. кв. мех.
расчет

№Б127. Теоретическое исследование фотоэлектронного спектра NH_2Cl . So Suk Ping. Theoretical study of the photoelectron spectrum of NH_2Cl . «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 7, 1047—1049 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП проведены неэмпирич. расчеты молекулы хлорамина NH_2Cl и иона NH_2Cl^+ в миним. базисе ОСТ-3Г (для атомов Н взят двухэкспонентный базис). Волновые ф-ции и энергии для оптимизированных геометрий вычислены также в двухэкспонентном базисе ОСТ-4Г. Вычисленная равновесная геометрия NH_2Cl хорошо согласуется с эксперим. данными (в скобках): $r(\text{N—H}) = 1,042\text{Å}$ (1,017), $r(\text{N—Cl}) = 1,801\text{Å}$ (1,748), углы HNCI $104,12^\circ$ ($103^\circ 47'$) и HNH $104,44^\circ$ (107°). Согласно расчетам, ион NH_2Cl^+ в основном состоянии имеет плоскую структуру с $r(\text{N—H}) = 1,050\text{Å}$, $r(\text{N—Cl}) = 1,771\text{Å}$, углы HNCI $120,17^\circ$,

Х. 1980 № 4

$\lambda_{\text{HHH}} 119,66^\circ$. Сделан вывод, что 1-й потенциал ионизации NH_2Cl соответствует разрыхляющей орбитали, состоящей в основном из АО атомов азота и хлора. Этот вывод подтверждается анализом заселенностей. Неспаренный электрон в NH_2Cl^+ локализован в основном на $\text{AON}2p_x$ (перпендикулярной плоскости иона). Т. обр., при ионизации меняется гибридизация азота и разрыхляющая $\text{MO } 10a'$ (в плоскости) переходит в почти чистую АО $\text{N}2p_x$. Проведен анализ 6 верхних уровней NH_2Cl и результаты сопоставлены с лит. данными фотоэлектронной спектроскопии (Colbourne D. и др. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, 3574).

М. Гофман

NH_2Cl

фотоэл.
спектр

ср. 1980. №2

1979

ЗД 183. Теоретическое изучение фотоэлектронного спектра NH_2Cl . Theoretical study of the photoelectron spectrum of NH_2Cl . So Suk Ping. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 7, 1047—1049 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП рассчитана молекула NH_2Cl (I) и ее положит. ион (II). Оптимизация геометрии проводилась в минимальном базисе СТО—3ГФ, а окончательный расчет энергий и волн. ф-ций в двойном базисе экспоненц. СТО-4ГФ. Получены следующие геометрич. параметры I (в скобках эксперим. данные; длины связей в Å): $r_{\text{NH}}=1,042$ (1,017), $r_{\text{NCl}}=1,801$ (1,748), $\angle \text{HNCI}=104,12^\circ$ ($103^\circ 47'$) и $\angle \text{HNN}=104,44^\circ$ (107°). Ион II в основном состоянии плоский с параметрами: $r_{\text{NH}}=1,050$, $r_{\text{NCl}}=1,771$, $\angle \text{HNCI}=120,17^\circ$ и $\angle \text{HNN}=119,66^\circ$. В рамках теоремы Купманса проведено отнесение фотоэлектронного спектра I. Критически рассмотрены работы других авторов по его интерпретации. Библ. 23. Е. П. Смирнов

1979

NH₂ClY; monog.
empyri.

91: 201343s Theoretical study of the photoelectron spectrum of chloramine. So, Suk Ping (Chin. Univ. Hong Kong, Shatin, Hong Kong). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1979, 75(7), 1047-9 (Eng). Ab initio LCAO MO calcns. showed that [NH₂Cl]⁺ is planar in its ground state with bond lengths N-H and N-Cl of 1.050 and 1.771 Å, resp., and ∠HNCI and ∠HNH 120.17 and 119.66°, resp. The calcd. ionization potentials of the 1st 6 bands of NH₂Cl are in reasonable agreement with those obsd. The reported description of the orbital assocd. with the 1st band of the photoelectron spectrum is questionable.

C.A. 1979, 9, N24

$\text{NH}_2 \text{Cl}$

1980

Montabone M.-C., et al.

Mol. Phys., 1980, 40, N6,
1503-7.

св. мех.
рас.

см. $\text{CH}_3 \text{Cl}$ - III

NH_2Cl

1987

Cummins P. L.,
Bacskey G. B., et al.

ab initio
paper

Chem. Phys. 1987,
115(3), 325-37.

($cv.$  N_2-HF ; III)

Cl₂NH

[OM-29224] 1988

Destro R., Merati F.,
et al.

Cl-N Chem. Phys. Lett.,
CB826 1988, 145, N3, 193-199.

An ab initio study of
the N-Cl bond.

ClNH₂ (om. 29224) 1988

Ch-N Destro R., Merati F.,
et al.
Chszb Chem. Phys. Lett.,
1988, 145, N3, 193-199.
An ab initio ● study of
the N-Cl bond.

NH₂Cl

CM. 29583

1988

109: 63478b Infrared spectrum of monochloramine: amino wagging and inversion. Hamada, Yoshiaki; Fujiwara, Satoru; Buijs, Henry (Fac. Pharm. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 129(2), 354-63 (Eng). The high-resoln. IR spectrum of the NH₃ wagging band of NH₂Cl was obsd. The inversion splitting of the 1st excited state of the NH₂ wagging vibration is 0.162 cm⁻¹ for the ³⁵Cl isotopic species. The inversion barrier was estd. as 4400 cm⁻¹, which is of the same order of magnitude as the energy difference between the equil. and planar structure calcd. by an ab initio MO method. Ab initio force consts. were calcd. with a 4-31 G* basis set.

(cm. no cm.,
UK, Di)

C.A. 1988, 109, N 8

NH_2Cl

OM-29583

1988

1 J1236. ИК-спектр NH_2Cl : деформационные колебания аминогруппы и инверсия. Infrared spectrum of NH_2Cl : amino wagging and inversion / Hamada Yoshiaki, Fujiwara Satoru, Buijs Henry // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 129, № 2.— С. 354—363.— Англ.

Методом фурье-спектроскопии исследован ИК-спектр молекул NH_2Cl в газообразном состоянии в области полосы основного тона деформационных колебаний аминогруппы $900\text{—}1200\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,005\text{ см}^{-1}$ и в области первого обертона указанного колебания $1950\text{—}2100\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,02\text{ см}^{-1}$. Частоты зарегистрированных линий приведены в таблице. По величине инверсионного расщепления линий определена высота инверсионного барьера, равная 4400 см^{-1} . Произведен теоретич. расчет силовых постоянных и колеба-

М.А.

ф. 1989, № 1

тельных частот исследованной молекулы, результаты
расчета удовлетворительно согласуются с данными
эксперимента. Н. Н. Ф.

NH_2Cl

Om - 29583

1988

22 Б1223. ИК спектр NH_2Cl : веерное колебание и инверсия аминогруппы. Infrared spectrum of NH_2Cl : amino wagging and inversion. Hamada Y., Fujiwara S., Buijs H. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 2, 354—363 (англ.)

Методом Фурье-спектроскопии получены ИК-спектры NH_2Cl в диапазонах частот $900\text{—}1200\text{ см}^{-1}$ (веерн. кол. NH_2 -группы) и $1950\text{—}2100\text{ см}^{-1}$ (обертонная полоса) при разрешении $0,005$ и $0,02\text{ см}^{-1}$ соотв. Рассчитаны молек. постоянные основного состояния и возбужденных уровней 1^+ и 1^- молекул $\text{NH}_2^{35}\text{Cl}$ и $\text{NH}_2^{37}\text{Cl}$ и определена величина инверсионного расщепления возбужденного состояния ($0,162$ и $0,161\text{ см}^{-1}$ соотв.). По лит. данным оценена высота инверсионного барьера 4400 см^{-1} . Методом МО рассчитаны постоянные центробежного растяжения, силовые постоянные и разность

М.А.

Х. 1988, 19, №22

энергии между равновесной и плоской конфигурациями монохлорамина (4366 см^{-1}), значение к-рой согласуется с величиной инверсионного барьера, полученной из эксперим. данных. Наблюдаемые возмущения вращат. уровней с высоким квантовым числом K вызваны кориолисовым взаимодействием веерн. кол. с ненаблюдаемым крутильно-деф. кол. NH_2 -группы, спектр к-рого по расчетам должен располагаться в диапазоне частот $1160\text{—}1200\text{ см}^{-1}$.

А. В. Бучкин



ClH_2N^+ com. 30490 1988.
(NH_2Cl^+) Jacob M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 268.

H_2NCl

DM 32 232

1989

111: 30485q IR-matrix spectrum and normal coordinate analysis of monochloramine. Minkwitz, R.; Woelfel, V.; Nass, R.; Haertner, H.; Sawodny, W. (Fachbereich Chem., Univ. Dortmund, D-4600 Dortmund, 50 Fed. Rep. Ger.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1989, 570, 127-32 (Ger). H_2NCl was prepd. by halide exchange on H_2NF with $CaCl_2$ in a gas solid state reaction and isolated in a N_2 matrix at 15 K. The assignment of the 6 fundamentals is supported by a normal coordinate anal.

lek B
Mampuse

c.A. 1989, 111, N 4

NH₂Cl

Om 36919

1992

117: 220481g Vibrational analysis of monochloramine and its isotope. Natarajan, A.; Ilango, C. Delano Barnabas; Ebenezer, J. S. P. (Dep. Phys., Bharathidasan Univ., Tiruchirapalli, 620 024 India. *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1992, 30(4), 188-90. (Eng). Force field study was made for NH₂Cl mol. and its isotope NH₂³⁷Cl. The stretching, bending and many interaction force consts. were computed using general valence force field. Using these consts., other important mol. consts. such as mean square amplitudes of vibrations, generalized mean square amplitudes of vibrations, the shrinkage

the Coriolis coupling consts., and rotational distortion consts.

Calc. NOCM.
H.A.

C.A. 1992, 117, N22

H₂NCl

1997

констан-
ты
сил. полей

128: 54741x Interpretation of the vibrational spectra of chloramide, H₂NCl, on the basis of post-Hartree-Fock force field. Khaikin, Leonid S.; Grikina, Olga E.; Alcolea Palafox, Mauricio (Department of Chemistry, Moscow State University, 119899, Moscow, Russia). *THEOCHEM* 1997, 417(1-2), 187-193 (Eng), Elsevier. The ab initio RHF and MP2 force fields were calcd. for H₂NCl using the 6-31G*, 6-31G** and 6-311G** basis sets. The ab initio force fields obtained were scaled by fitting to the available exptl. vibrational frequencies for the H₂NCl, H₂N³⁷Cl and HDNCl species. This makes it possible to extend the set of transferable scale factors recommended earlier. Minimal differences were obsd. between the scaled MP2 and RHF force fields,

although the inclusion of electron correlation improved the ab initio data and showed better agreement with the obsd. frequencies obtained by scaling. The effect produced by empirical anharmonicity corrections to the obsd. NH(ND) stretching frequencies on the results of the fitting was tested. The exptl. obsd. satellite band at 1032 cm⁻¹ in the IR spectrum of the parent substance was identified, and it was attributed to the presence of HNCl₂ in the sample, in contrast to previous assignments to vibrations of H₂NCl or any of its isotopomers.

CA 1998, 128 N5

H₂NCl

1997

agreement with expt.

128: 140315t Ab initio calculations of the structure and inversion barriers of chloramide, H₂NCl, and N-chloro-N-methyl-

methanamine, (CH₃)₂NCl. Kahaikin, L. S.; Grikina, O. E.; Palafox, M. Alcolea; Vilkov, L. V. (Dep. Chem., Moscow State Univ., Moscow, Russia 119899). *THEOCHEM* 1997, 417(3), 215-221 (Eng), Elsevier Science B.V.. The ab initio geometries of the equil. forms and transition states of the amino nitrogen inversion for H₂NCl and (CH₃)₂NCl were calcd. by the RHF and MP2 methods with the use of the 6-31G*, 6-31G**, and 6-311G** basis sets. The inclusion electron correlation at the MP2 level increases the barrier height ests. and yields a somewhat better agreement between the calcd. and exptl. geometric parameters. The obtained data do not agree with the idea that a larger inversion barrier is assocd. with a more pyramidal configuration of the nitrogen atom. Me substituents flatten the nitrogen configuration in (CH₃)₂NCl. The barrier heights calcd. by the MP2 method are 10.2 kcal mol⁻¹ for H₂NCl and 12.6 kcal mol⁻¹ for (CH₃)₂NCl, or 9.3(1.0) and 12.0(1.0) kcal mol⁻¹, resp. when zero-point corrections are made.

... and hydrogen bond acceptor feature.

(+1) Δ

CA. 1998, 128, N12

ab initio
param
cmp th

$\text{Na} \cdot \text{HCl}$

RUTKOWSKI L.S., et al., 1998

$\Delta_f H, \text{Vi}$
(like chromium)

J. Mol. Struct. 1998,
448 (2-3), 231-237

(am. HCl. HCl, III)

2000

F: NH₂Cl

P: 3

132:85342 Rotational analyses of several
infrared bands of NH₂Cl. Masuko, Ei-Ichi;
Hamada, Yoshiaki The University of the Air
Chiba 261-8586, Japan J. Mol. Spectrosc.,
199(1), 128-137 (English) 2000 The high-
resoln. absorption spectra of several IR bands of
NH₂Cl mol. we obsd. and analyzed. Rotational lines
of amino wagging and scissoring fundamental bands
are split by ~0.2 cm⁻¹ through the amino inversion
moti The shape of the inversion potential and the
barrier height are considere comparing the results
of the exptl. observations and an ab initio MO calc
amino twisting band of amine mol. was obsd. for the

C.A. 2000, 132

1st time in the gas p The intensity of the transition seems to be induced through a Coriolis interaction with the intense amino wagging band.

F: NH₂Cl

P: 3

2000

132:85342 Rotational analyses of several
infrared bands of NH₂Cl. Masuko, Ei-Ichi;
Hamada, Yoshiaki The University of the Air
Chiba 261-8586, Japan J. Mol. Spectrosc.,
199(1), 128-137 (English) 2000 The high-resoln.
absorption spectra of several IR bands of NH₂Cl mol.
were obsd. and analyzed. Rotational lines of amino
wagging and scissoring fundamental bands are split by
~0.2 cm⁻¹ through the amino inversion motion. The
shape of the inversion potential and the barrier
height are considered by comparing the results of the
exptl. observations and an ab initio MO calcn. The
amino twisting band of amine mol. was obsd. for the
1st time in the gas phase. The intensity of the
transition seems to be induced through a Coriolis
interaction with the intense amino wagging band.

C.A. 2000, 132

NH₂Cl

2001

(FTIR-
CHIRP)

135: 159419w High Resolution FTIR Study on NH₂Cl Molecule: Inversion and Anharmonicity. Masuko, Ei-ichi; Shin, Saeko; Hamada, Yoshiaki (The University of the Air, Wakaba, Mihama-ku, Chiba, Japan 261-8586). *J. Mol. Spectrosc.* 2001, 207(1), 39-53 (Eng), Academic Press. The high-resoln. FTIR absorption spectra of the NH₂Cl mol. have been measured in the region 500-3600 cm⁻¹. The rotational structures of all the fundamental bands and a no. of overtone and combination bands have been analyzed. Every rotational line of the obsd. bands except the NH₂ twisting and stretching fundamental bands splits into two components due to the amino inversion motion. The vibrational anharmonicity and the direction of the transition moments have been studied with the help of B3LYP/6-31++G** calcns. The amt. of inversion splitting depends on the mol. rotation, and the J,K-dependence of the inversion splitting has been detd. (c) 2001 Academic Press.