

CO_2 ... NH_3

1985

Amos R. D., Handy N.C.,
et al.

раствор. J. Phys. Chem., 1985, 89,
экспер. N 11; 5th Amer. Conf..
молекуляр. Theor. Chem., Grand Te-
tor Nat. Park, Wyo., June
15-20, ● 1984, 2186-2192.
(cur. CO_2 ; III)

CN⁻ · H₂O

1985

Д 11 Б1086. Квантово-химическое исследование взаимодействия цианид-иона с молекулой воды. Барановский В. И., Фомичева В. П., Иванова Н. В., Сизова О. В. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 6, 37—41

ам. пост., $\bar{V}_i$

На основании неэмпирич. расчетов методом МО ССП в базисе 4—31 ГФ изучено взаимодействие иона CN⁻ с молекулой H₂O. Для наиболее стабильных геометрич. конфигураций рассчитаны силовые постоянные и частоты вал. кол. Н-связи и связи С—N и деф. кол. для угла Н...N—С (Н...С—N). Результаты сопоставлены с данными для незаряженной системы HCN · H₂O. Резюме

④ HCN



H₂O ($\bar{V}_i$)

X. 1986, 19, N 11

$\text{HCN} \cdot \text{H}_2\text{O}$

1985

Барановский В.И.,
Юлещева В.П. и др.

Vi;

Ж. структур. химии,
1985, 26, N 6, 37-41.

(сел. $\text{CN}^- \cdot \text{H}_2\text{O}$; III)



1985

Батюхова О.Р.,

Авторызераг диссертации
на соискание ученой степени
структур. параметров,
на основе
данных
электроно
графии

К.Х.Н., Москва, 1985

Строение молекул ряда
нитро соединений
на основе данных
электронографии

[Ом. 20 863]

1985

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NO}_3$

Береснева Г.А., Христен-
ко Л.В. и др.,

(Vi)

Вестн. МГУ. Химия,
1985, 26, N 1, 34-40.

CO₂ HCN

1985

Cooper D. L.,
Stutchbury N. J.

Рачен
емпыкм,
40;
Chem. Phys. Lett.,
1985, 120, N2, 167-
-172.

(Cell. HF; III)

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

DM. 22706 1985

8 B1091. Строение молекул этилизоцианата и этилизоотиоцианата по данным газовой электронографии. Electron diffraction investigation of the molecular structures of ethyl isocyanate and ethyl isothiocyanate. Craddock Stephen, Durig J. R., Sullivan J. F. «J. Mol. Struct.», 1985, 131, № 1—2, 121—130 (англ.)

Электронографические и лит. микроволновые данные использованы для уточнения конформаций $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NCO}$ (I) и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NCS}$ (II). В обоих случаях наиболее вероятен цис-конформер (метил затеняет NCX-группу), но для I согласие достигается также при отклонении на 45° от цис-ориентации. Это объяснено наличием ангармонич. двумерного Пт, связывающего деформации при атоме азота и внутр. вращение относительно связи C—N. В пренебрежении крут. кол. получена эффективная r_{av}^* -структура, параметры к-рой для I и II составляют: C—N 144,8(9) и 143,8(7) пм, C—H 108,4(7) и 110,5(8), C—C 152,4(11) и 152,0(8), C=N 121,8(5) и 118,7(5), C=X 117,4(4) и 158,0(4), валентные углы CCN 114,7(16) и 111,0(8)°, CNC 132,2(22) и 147,4(20), NCX 192,2(25) и 184,5 (30). В. С. Мاستрюков

геометрия,
структура

(7)

IX

X. 1986, 19, N 8

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

DM 21950

1985

6 B1391. Микроволновый спектр транс, гош, транс-пропилнитрита. Endo K., Hirayama S., Sugimura Z., Suzuki N., Kamura Y. «Нихон кагаку кайси, J. Chem. Soc. Jap., Chem. and Ind. Chem.», 1985, № 8, 1519—1522 (яп.; рез. англ.)

Измерены в области частот 8,5—32 ГГц вращат. спектры нормального изотопич. образца пропилнитрита, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{ONO}$ (I), и ^{15}N -изотопозамещенного, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}^{15}\text{NO}$ (II), в основном и одном возбужденном колебат. состояниях. Анализ спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона с двумя постоянными квартичными центробежного искажения. Для I и II соотв. вращат. постоянные в основном состоянии равны (МГц): $A=14266(65)$ и $14134(35)$, $B=1485,73(11)$ и $1474,74(1)$, $C=1446,52(1)$ и $1436,47(1)$. В предположении, что двухгранные углы $\angle(\text{CO} - \text{NO}) = 180^\circ$, $\angle(\text{CC} - \text{CO}) = 180^\circ$ соответствуют транс-конфигурации, и при фиксированных шести структурных параметрах определена r_0 -структура I $r(\text{C}-\text{O}) = 1,438(6) \text{ \AA}$, $r(\text{O}-\text{N}) = 1,420(6) \text{ \AA}$, $r(\text{N}=\text{O}) = 1,172(6) \text{ \AA}$, $\angle\text{CON} = 112,8(5)^\circ$, $\angle\text{ONO} = 111,2(5)^\circ$, $\angle(\text{CC}-\text{ON}) = 85,4(6)^\circ$.

С. Н. Мурзин

Di, M. N.,

геометр.
структура

Х. 1986, 19, № 6

OC ... HCN

1985

105:12505t Theoretical study on hydrogen bond formation between carbon monoxide and hydrogen cyanide. Fu, Xiaoyuan; Ma, Yong (Dep. Chem., Beijing Norm. Univ., Beijing, Peop. Rep. China). *Beijing Shifan Daxue Xuebao, Ziran Kexueban* 1985, (3), 65-7 (Ch). The mol. structure and energy of the OC...HCN H-bonded complex were studied with ab-initio, SCF-MO calcs. The C...H-C H-bond is collinear, with a stabilization energy of 2.6 kcal/mol (at the 4-31G-basis-set level). The various energy components of the heat of H-bonding were analyzed.

структура и
тепл. характ.,
тепл. параметр

с. А. 1986, 105, №2

CH₃CO₂NH₄

1985

calc. no cm⁻¹
Di, IR energy

103: 203002v Vibrational spectrum and normal coordinate analysis of CX₃CO₂NX₄ (X = H or D). Kanesaka, Isao; Tanbo, Hironori; Kawahara, Hisakazu; Kawai, Kiyoyasu (Fac. Sci., Toyama Univ., Gofuku, Toyama, Japan 930). *J. Raman Spectrosc.* 1985, 16(5), 297-302 (Eng). The vibrational spectrum of CH₃CO₂NH₄ at room temp. and 77 K is reported. The obsd. factor group splitting between 4 acetate ions is slight in each internal mode. The normal coordinate anal. was carried out under the assumption of neglect of H atoms. Good agreement between obsd. and calcd. frequencies was obtained for the lattice vibrations. The H bond has considerable strength and a very strong Raman band at 58 cm⁻¹ in CH₃CO₂NH₄ is a libration of the acetate ion about an axis perpendicular to the mol. plane. The strong IR band at 260 cm⁻¹ in CH₃CO₂NH₄ is discussed.

C.A. 1985, 103, N 24

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

1985

Koller J., Harb V., et al.

м.п.,
отпечатан. J. Mol. Struct., 1985,
122, N 3-4, Suppl.; Theo-
chem, 23, N 3-4, 343-350.

(см. $\text{NH}_3 \cdots \text{HOF}$; III)

$\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{N}$

1985

102: 175319n Microwave spectrum, conformational equilibria, intramolecular hydrogen bonding, dipole moment and centrifugal distortion of 3-hydroxypropanenitrile. Marstokk, K. M.; Moellendal, Harald (Dep. Chem., Univ. Oslo, N-0315 Oslo, 3 Norway). *Acta Chem. Scand., Ser. A* 1985, A39(1), 15-31 (Eng). The microwave spectra of 3-hydroxypropanenitrile, $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{N}$, and one deuterated species $\text{DOCH}_2\text{CH}_2\text{C}\equiv\text{N}$, were investigated in the 18.0-39.6 GHz spectral region at room temp. Three conformations of the mol. were assigned. The heavy-atom *gauche* conformation is stabilized by a weak, internal H bond formed between the hydroxyl group H atom and the π -electrons of the cyano group. The 2nd assigned conformation denoted anti I has a heavy-atom anti arrangement and C_s -symmetry, and the 3rd identified conformation called anti II has the hydroxyl group hydrogen atom rotated approx. 120° out of the plane formed by the heavy atoms. The internal energy difference was 2.7(4) kJ/mol by relative intensity measurements between anti I and *gauche*, with the latter as the more stable conformation. Anti II was likewise found to be 7.4(24) kJ/mol less stable than the *gauche*. The strength of the intramol. H bond is taken to be approx. equal to the energy difference between the *gauche* and anti II conformations, viz. 7.4(24) kJ/mol. 3-Hydroxypropanenitrile is the 1st example of a 2-substituted ethanol deriv. for which both a H-bonded *gauche* as well as 2 anti conformations were assigned by microwave spectroscopy.

(N8 chex)

C.A. 1985, 102, N20

$C_6H_5NO_2$

1985

№ 5 Л214. Фурье-спектроскопия электронных полос в ближней ИК-области. Крутильный барьер нитробензола в состоянии A^1A'' . Fourier-transform electronic spectroscopy in the near-infrared: torsional barrier of the A^1A'' state of nitrosobenzene. McCoustra M. R. S., Pfaff J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 4, 395—400 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения паров нитробензола при 53° — 120° С в слоях 15 см—10 м с разрешением 1 см^{-1} в области $11\,000$ — $12\,000\text{ см}^{-1}$, связанные с электронным переходом $A^1A'' \leftarrow X^1A'$. Приведены частоты наблюдаемых полос и их отнесение к переходам, связанным с возбуждением крутильных колебаний нитрогруппы. В некоторых случаях обнаружены компоненты горячих переходов с возбужденных крутильных уровней. Выполнены расчеты спектра с учетом барьера для внутреннего вращения, его величина для основного состояния принята равной 1290 см^{-1} . Библ. 22. М. В. Т.

(Л.П.)
ср. 1986, 18, N5

CH_2NO_2

(Om 22217)

1985

McKel M. L.,

geomorp.,

Di

ab initio

param

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N7, 1900-1904.

$(\text{CH}_3)_4\text{N}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$
 $(\text{CH}_3)_4\text{N}^+ \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

1985

18 Б1112. Необычные ионные водородные связи. 1. $\text{CH}_3^+ \dots \text{X}$. Комплексы четвертичных ионов с n - и π -донорами. Unconventional ionic hydrogen bonds. 1. $\text{CH}_3^+ \dots \text{X}$. Complexes of quaternary ions with n - and π -donors. Meot-Ner (Mautner) M., Deakyne C. A. «J. Amer. Chem. Soc.», 1985, 107, № 2, 469—474 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 3-21ГФ с частичной оптимизацией геометрич. параметров проведены расчеты некоторых возможных структур комплексов Me_4N^+ с одной и двумя молекулами H_2O , а также CH_3OH , CH_3NH_2 и CH_3Cl . Из результатов расчетов следует, что энергетически наиболее выгодной является такая структура комплекса, в к-рой гетероатом лиганда (O, N или Cl) взаимодействует с тремя атомами H 3 различных метильных групп. Полученный результат интерпретирован на основе анализа зарядового распределения в исследованных комплексах. Полученные результаты использованы для обсуждения эксперим. данных по энергетике H-связей с четв. аммониевыми ионами.

И. А. Абронин

структура

(+3)

Х. 1985, 19, N 18

CH_2NO_2

(DM-22254)

1985

Ritchie F. P.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N 7, 1829-
- 1837.

анализ
распредел.
электрон.
плотн.,
теор.
расчет.

$C_3H_4NO_2$

1985

Tupitsyn I. F., Shibaev A.
Yu.

теор.
расчет
свернутом.

Теор. Эксп. Хим. 1985,
21 (5), 590-4.

(сер. $C_3H_5^-$; III)

OCN⁻-H₂O

1986

15 Б1109. Квантово-химический расчет потенциальной поверхности взаимодействия OCN⁻-H₂O. Барановский В. И., Сизова О. В., Иванова Н. В., Ермаева Т. Т. «Ж. структур. химии», 1986, 27, № 1, 9-14.

Методом ССП МО в базисе 4-31 ГФ рассчитана потенциальная Пв взаимодействия OCN⁻-H₂O. Установлено, что наиболее устойчивы структуры с одной связью, образованной концевыми атомами OCN⁻. Для ряда структур вычислены энергии Н-связи, а также силовые постоянные и частоты колебаний, соотв. растяжению Н-связи. Потенциал взаимодействия OCN⁻-H₂O представлен в аналитич. виде.

Резюме

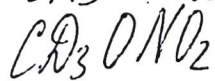
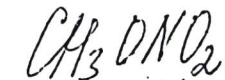
расчет
потенц.
поверхности

Х. 1986, 19, N 15.

$\text{H}(\text{OH})\text{CN}(\text{OH})_2^+$ (AM-23386) 1986
 $\text{HNC}(\text{OH})_2^+$ (2) Baer T., Hass J.R.

молекула.
спектр., J. Phys. Chem., 1986,
90, N 3, 457-455.

Δf H.



Om. 24146

1986

Bock Ch. W.,

Krasnozhchiokov S. V.,
Khristenko L. V., et al.,

Chem. Phys., 1986, 106,
N1, 69-73.

констан-
спектр,
спрежтура,
ab initio
расчет

[Om. 26567]

P986

$H_3N \cdots CCl_2$
 $NH_3 \cdots CCl_2 \cdots NH_3$
u gp.

Buckingham A.D.,
Handy N.C. et al.,

(mercury
Cb - Ba)

J. Comput. Chem.,
1986, 7, N3, 283-293

[Dm. 26567]

1986

$H_3N \cdots Cl_2$

$NH_3 \cdots Cl_2 \cdots NH_3$

$H_2NCOOH \cdots NH_3$

u gr.

crystallogr.,
pi, ab initio
pacem

Buckingham A.D.,
Handy N.C. et al.,

J. Comput. Chem.,
1986, 7, N3, 283-293.

$(\text{CH}_3\text{NO}_2)_2$

1986

24 Б1146. Расчет взаимодействия в димере нитрометана с учетом корреляции электронов. Correlated calculation of the interaction in the nitromethane dimer. Cole Samuel J., Szalewicz Krzysztof, Purvis George D., Bartlett Rodney J. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 12, 6833—6836 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в двухэкспонентном гауссовом базисе, дополненном поляризац. ф-циями, проведены расчеты димера $(\text{CH}_3\text{NO}_2)_2$ (I) с учетом корреляции электронов по многочастичной теории возмущений (учтены одно-, двух- и четырехкратные возбуждения), дисперсионной энергии и суперпозиционной ошибки базисного набора (СОБН), вычисляемого по методу уравнивающей ф-ции. Рассмотренная конфигурация I характеризуется образованием двух Н-связей $\text{C} \cdots \text{H} \cdots \text{O}$ между атомом О одной молекулы и атомом Н другой. В хартри-фоковском пределе и в расчете с учетом корреляции электронов энергия взаимодействия ΔE найдена равной 3,57 и 5,04 ккал/моль соотв. Учет СОБН и дисперсионной энергии повышает ΔE до 5,62 ккал/моль.

Э. Д. Герман

М.П.

X. 1986, 19, N 24

1986

~~Ammonia~~
(CH₃ NO₂)₂(frequency
calculations)
(cal)

105: 66803g Correlated calculation of the interaction in the nitromethane dimer. Cole, Samuel J.; Szalewicz, Krzysztof; Purvis, George D., III; Bartlett, Rodney J. (Quantum Theory Project, Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(12), 6833-6 (Eng). The interaction energy of the nitromethane dimer at several seps. between the monomers was calcd. by using fourth-order many-body perturbation theory (MBPT), with single, double, and quadruple (SDQ) excitations included. The SCF counterpoise (CP) correction, and second-order dispersion energy were also compared. A double-zeta plus polarization basis was used. The monomers were oriented so that a hydrogen atom on each monomer could form a hydrogen bond with an oxygen on the other monomer. An interaction energy of 3.57 and 5.04 kcal/mol was found at the SCF and SDQ-MBPT(4) levels of theory, resp. The CP-cor. SCF energy added to the second-order dispersion energy gave an interaction energy of 5.62 kcal/mol.

C.A. 1986, 105, N8

Н С О Н (СН₅)₂

1986

8 Б3018. Измерение теплоемкости диэтилформамида с помощью автоматизированного адиабатического калориметра. Heat capacity measurement of diethylformamide by an automatically-adiabatic calorimeter / Chen Guangming, Zhao Guanchun. // Thermophys. Prop.: Proc. 1st Asian Thermophys. Conf., Beijing, Apr. 21—24, 1986.— Beijing, 1986.— С. 169—174.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

(Ср)

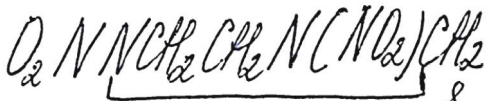
Сконструирован автоматич. адиабатич. калориметр (Кл) для определения термофиз. св-в газопоглощающих систем в интервале т-р 250—370 К. Полученные с помощью этого Кл данные для корунда и н-гептана согласуются с рекомендованными NBS в пределах $\pm 0,14$ и $\pm 0,31\%$ соотв. При т-рах 270—373 К измерена C_p диэтилформамида. Данные аппроксимированы ур-нием C_p (Дж/К · моль) = $8,695526 + 1,554063T - 4,315693 \cdot 10^{-3} T^2 + 4,497554 \cdot 10^{-6} T^3$. Р. Г. Сагитов

х. 1989, № 8

(CH_2NNO_2) Золотникова Т. Л., 1986

Строение ряда азотсодержащих соединений на основе метода газовой структура электрографии.

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
К. Х. Н., Москва, 1986, ИГЧ.



1986

Елоримова Т. Л.,

Строение ряда азотсодер-
жащих соединений на
структура основе метода газовой
электромиграции.

Автореферат диссертации на
соискание ученой степени К.Х.Н.,
Москва, 1986, ● МГУ.

(Om. 24728)

1986



Endo K., Tanuma R.,
et al.,

MF cncrmp,

Al. N. J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1986,

N 8, 1051-1054.

$(CH_2)_2O \cdots HCN$

1986

Goodwin Elizabeth J.,
Legon A.C., et al.

bp. cneqmp. J. Chem. Phys. 1986,
85(2), 676-82.

(see. $(CH_2)_2O$; III)

$[ON(CH_3)CONH_2]^-$

1986

16 Б1258. Анализ нормальных колебаний аниона N-метил-N-гидроксимочевина $[ON(CH_3)CONH_2]^-$. Харитонов Ю. Я., Саруханов М. А., Сливко С. А. «Ж. неорганич. химии», 1986, 31, № 4, 890—895

Проведен приближенный анализ нормальных колебаний аниона N-метил-N-гидроксимочевина $[ON(CH_3)CONH_2]^-$. Рассчитаны силовые константы, частоты, нормированные формы колебаний, распределение потенциальной энергии по внутр. колебат. координатам. Дано теорет. обоснование отнесения основных колебат. частот. Обсужден характер изменения силовых констант при переходе от нейтр. молекулы к иону. Резюме

анализ
норм. колеб.
(vi)

X. 1986, 19, N 16

$H_2O \cdots HCN$

1986

Hinchliffe Alan.

момент, γ -mol. Strict.

сверхтон.

Theochem, 1986, 136,
N 1-2, 193-199.

(ср. $NH_3 \cdots HCN$; III)

CH_3HNOH [Om. 25438]

1986

Kysel O., Mach P.,
Z. Mol. Struct. Theo-
Do; chem., 1986, 139, N3-4,
333-337.

$[\text{ON}(\text{CH}_3)\text{CONH}_2]^-$

1986

105: 199411z Normal vibrational analysis of N-methyl-N- α -hydroxyurea anion $[\text{ON}(\text{CH}_3)\text{CONH}_2]^-$. Kharitonov, Yu. Ya.; Sarukhanov, M. A.; Slivko, S. A. (Mosk. Khim.-Tekhnol. Inst., Moscow, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1986, 31(4), 890-5 (Russ). An approx. anal. of the normal vibrations of the anion of N-methyl- α -N-hydroxyurea $[\text{ON}(\text{CH}_3)\text{CONH}_2]^-$ was conducted. Force consts., frequencies, normal vibration shape and distribution of potential energy according to internal vibrational coordinates were calcd. The theor. basis for the assignment of basic vibrational frequencies is given. The character of the changes of the force consts. during the transition from the neutral mode to the ion is discussed.

Calc. NDCM,
Pi;

C. A. 1986, 105, N 22

$(\text{CH}_3)_3\text{CNO}$

1986

17 Б4367. Фотодиссоциация $(\text{CH}_3)_3\text{CNO}$ охлажденного в газовой струе. Разделение во времени безызлучательных переходов и мономолекулярных реакций. Photodissociation of jet-cooled $(\text{CH}_3)_3\text{CNO}$. Temporal separation of radiationless transitions and unimolecular reactions. Noble M., Qian C. X. W., Reisler H., Wittig C. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 6, 3573—3574 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

фотодиссоц.

С использованием перестраиваемого в области 670—710 нм импульсного лазера на красителе зарегистрированы спектры лазерно-индуцированной Фл 2-метил-2-нитропропана (I), охлажденного в сверхзвуковой струе He, истекающей в вакуум. Одновременно измеряли спектры фотодиссоциации (ФД) I с образованием NO через различные промежутки времени t (от 60 нс до 5 мкс) после фотолизующего импульса. Образование NO регистрировали методом однофотонной лазерно-индуцированной Фл с использованием лазерного излучения 226 нм. Показано, что для различных вибронных уровней времени жизни Фл I ≤ 45 нс. При энергиях фотолизующего света, превышающих энергию нулевого колебат. уровня S_1 -состояния I на величины $E <$

X. 1986, 19,
N 17

$< 600 \text{ см}^{-1}$, удается разделить во времени процессы
 затухания Фл и диссоциации I, поскольку при этих E
 образование NO протекает медленно (для некоторых
 уровней времени появления NO $> 1 \text{ мкс}$). Сделан вы-
 вод, что Дс должна протекать с низкоэнергетич. Пв,
 наиболее вероятно S_0 и, следовательно, получаемые
 скорости можно сравнивать с предсказаниями теории
 мономолек. распада Райса — Рамсперпера — Касселя —
 Маркуса при принятии энергии диссоциации $D_0(\text{CMS}_3\text{—}$
 $\text{—NO}) \approx 14\,200 \text{ см}^{-1}$. При $E \geq 600 \text{ см}^{-1}$ время появления
 NO сильно сокращается ($\leq 40 \text{ нс}$) из-за открытия но-
 вого канала Дс I, вероятно, с участием триплетного
 состояния.

В. Е. Скурат

учен.
 дукт

$(CH_3)_3 CNO$ [Om. 26206] 1986

Noble M., Gian C.X.W. et al.

exemp J. Chem. Phys., 1986, 85,
N10, 5763 - 5773.

$XCH=CHOH$ [Om. 23366]

1986

$X=CN, H_2F$ Plant C., Spencer K.,
et al.,

внутрен-
вращение,
структура,
ab initio
расчет

J. Mol. Struct., 1986,
140, N3-4, 317-326.

$(CH_3)_2 NOH$

1987

107: 14835r Analysis of the ground-state vibrations of N,N-dimethylhydroxylamine. Boehlig, Heinz; Franke, S.; Fruwert, J. (Sekt. Chem., Karl Marx Univ., Leipzig, Ger. Dem. Rep.). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1987, 268(2), 355-63 (Ger). On basis of the IR spectra at of 400-4000 cm^{-1} , an assignment of normal vibrations of various conformers of $Me_2NOH(D)$ was carried out using a normal coordinate anal. The Bohlmann bands in the region of CH stretching vibrations were characterized by means of the eigenvectors and the potential energy distribution. The weakening of trans CH and OH bonds in consequence of the trans lone pair effect appears in the corresponding stretching force consts. of the modified valence force field. A comparison of obsd. and calcd. vibrational frequencies indicates the existence of conformers, the OH bonds and Me groups of which are arranged in cis and trans position with respect to the lone pair on N.

(UK chemp)

C.A. 1987, 107, N2

^{Kollman et al.}
 $[CH_2O \cdot H \cdot NH_3]^+$ [Am. 26009]

1987

$[CH_2NH \cdot H \cdot OH_2]^+$

Bouchoux F., Hop-
pelliard Y.,

ab initio
pacem

Int. J. Mass Spectro-
metry and Ion Processes,
1987, 5● 75, 1-14.

$\text{CH}_3\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2$ (Im. 25888) 1987

106: 57992m 2-Methoxyethylamine: detection of a second conformer by microwave spectroscopy. Caminati, Walther (Ist. Chim. Fis. Spettroscop., Univ. Bologna, I-40136 Bologna, Italy), *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 121(1), 61-8 (Eng). In a previous microwave investigation of $\text{MeOC}_2\text{H}_4\text{NH}_2$ the spectrum of an internally H bonded conformer (G) was reported. (Wilson, E. B.) (1980). Now the rotational spectrum of a 2nd internally H bonded conformer (T) is assigned. In spite of its lower energy ($E_T - E_G = -85(30) \text{ cm}^{-1}$, the spectrum of T was not obsd. previously because of the unfavorable ratio of the μ_a dipole moment components: $\mu_a^2(G)/\mu_a^2(T) = 15.63$. The ^{14}N quadrupole coupling consts. and the V_3 Me barrier to internal rotation were detd.

Уб черны,
спрыкпыа

c.A. 1987, 106, 18

$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$ (M. 27109)

1987

$\text{C}_3\text{NH}_9\text{O}$

Caminati W.,

Siam K., Ewbank J.D.,

48 cncmp et al.,

u.n.

y. Mol.

Struct., 1987,
158, 237-247

$\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$ [Om. 26803]

1987

Dimitrov V.S., Ladd J.A;

cul. noCM,
M, uonerp,
ab initio
pacem

J. Mol. Spectr.; 1987, 159,
N1-2, 107-112.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{ONO}$ | Om. 28408 |

1987

Endo K., Furuehashi A.,

"Nippon Kagaku Kaishi,"

J. Chem. Soc. Jap.,

Chem. and Ind. Chem.,

1987, ● N12, 2227-2230

UV спектр,
структура

$H_2CO \dots HCN$
 $H_2C \dots HCN$

1987

7 Б1351. Влияние ослабления водородной связи на угловую геометрию $H_2CO \dots HX$. Данные из вращательного спектра $H_2CO \dots HCN$. Effect of weakening the hydrogen bond on the angular geometry of $H_2CO \dots HX$. Evidence from the rotation spectrum of $H_2CO \dots HCN$. Goodwin E. J., Legon A. C. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 5, 2426—2432 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в обл. частот 6—18 ГГц с разрешением около 16 кГц и точностью около 1 кГц измерены вращат. спектры трех изотопич. образцов слабо-связанного гетеродимера $H_2CO \dots HCN^{14}N$ (I), $H_2C \dots HCN^{15}N$ (II) и $H_2CO \dots DC^{14}N$ (III) в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квартичного центробежного искажения и ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия. Вращат. постоянные I, II и III, соотв., равны $A=91,2$ (7,5), 98,5

М.П.

(H) X

X. 1988, 19, 47

$H_2CO \dots DCN$

(3,8) и 88,2 ГГц, $B=1785,6217(10)$, $1736,8673(6)$ и $1787,955(19)$ МГц, $C=1749,7215(10)$, $1702,7860(6)$ и $1748,254(19)$ МГц. Димер обладает плоской структурой с Н-связью $C=O \cdots H-C$ и углом между связями $C=O$ и CH $\theta=138,1^\circ$ и расстоянием $O \cdots C$ 3,271 Å. Определена силовая постоянная Н-связи и обсуждены причины роста величины θ для $H_2CO \cdots HCN$ по сравнению с $H_2CO \cdots HF$ ($109,5^\circ$). С. Н. Мурзин

H_2 CO ... HCN

1987

Goodwin Elizabeth J.,
Legon A.C.

et al. J. Chem. Phys., 1987,
87, NS, 2426-2432.

(see H_2 CO ... HF; III)



От 27 757 1987

→ 6 Б1328. Анализ колебательного спектра свободного нитрометильного радикала. Analysis of the vibrational spectrum of the nitromethyl free radical. Jасох М. Е. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 19, 5038—5041 (англ.)

Рассмотрено отнесение частот колебаний свободного нитрометильного радикала, CH_2NO_2 (I) и 4-х его изотопозамещенных (по ^{13}C , D, ^{15}N) аналогов в ИК-спектрах поглощения матрично-изолированных комплексов вида I...HF («J. Phys. Chem.», 1983, 87, 3126). Для плоской модели I симметрии C_{2v} с использованием эксперим. частот колебаний всех изотопомеров рассчитано силовое поле I отдельно для плоскостных и внеплоскостных колебаний. Полученное удовлетворит. совпадение эксперим. и рассчитанных частот колебаний рассматривается как подтверждение правильности выбранной геометрии I. Наборы фундаментальных частот колебаний изотопомеров I проверены на выполнение правила произведений Теллера—Редлиха.

Г. М. Курамшина

анализ
колебат.
спектра

Х. 1988, 19, № 6

CH_2NO_2

от. 27757

1987

3 Л222. Анализ колебательного спектра нитрометильного свободного радикала. Analysis of the vibrational spectrum of the nitromethyl free radical. Jacob Marilyn E. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 19, 5038—5041 (англ.)

Проведен теоретич. анализ колебательных спектров нитрометильного свободного радикала, CH_2NO_2 (I) с использованием модельной плоской структуры I типа симметрии C_{2v} . Рассчитаны частоты нормальных колебаний, значения силовых постоянных связей и распределение потенц. энергии по набору колебательных состояний I. Обсуждена зависимость спектроскопич. постоянных с изотопич. состава I. Рассмотрено влияние резонанса Ферми на смещение полос в колебательных спектрах I. Установлено, что найденное значение силовой постоянной связи C—N согласуется с одиночным характером этой связи в I. Библ. 34. И. В. А.

М.П.

ф. 1988, 18, № 3.

CH_2NO_2

(Om 27757)

1987

/107:123516h Analysis of the vibrational spectrum of the nitromethyl free radical. Jacox, Marilyn E. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bureau Standards, Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Phys. Chem.* 1987, 91(19), 5038-41. (Eng). The vibrational spectra previously reported for the free radical CH_2NO_2 and its isotopically substituted counterparts were assigned. The agreement obtained in a least-squares force const. adjustment calcn. is sufficient to provide strong support both for this assignment and for the assumed C_{2v} symmetry of CH_2NO_2 . The magnitude of the CN-stretching force const. is appropriate for a C-N single bond.

(Vi)

c.A. 1987, 107, N14

$H_2NC_2H_4OH$

1987

конфам-
чекм

107: 30413g Vibrational spectrum of ethanolamine. Korolevich, M. V.; Sivchik, V. V.; Matveeva, N. A.; Zhbakov, R. G.; Lestechkina, V. A.; Frenkel, M. L.; Ladut'ko, A. I.; Pavlov, A. V.; Petryaev, E. P. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1987, 46(4), 620-4 (Russ). The work is devoted to the theor. and exptl. study of the vibrational spectrum of $H_2NC_2H_4OH$. The calcul. of spectra for 3 conformers has made it possible to reveal in the $H_2NC_2H_4OH$ spectrum frequencies sensitive to conformational states of the mol.

c. A. 1987, 107, NY

C-N-O-H [Dm. 28294]

1987

empyrm-
pa, s+H,
(D)

heroy G., Sana M.,
Wilante C., et al.,
J. Mol. Struct. Theo-
Chem., 1987, 153, N 3-4,
249-267.

Комплекс DM. 28 121 1987
 $C_6H_5OH - N(CH_3)_3$

мультиметр.
потенциометр
Mikami N., Suzuki I,
et al.,

$HN(CH_3)_3^+$ J. Phys. Chem., 1987,
91, N20, 5242-47.

$\text{CH}_4\text{-NO}$

(Om. 26428)

1987

Miller J.C.,

визрон.
спектр,
до

J. Chem. Phys., 1987, 86,
N6, 3166 - 3171.

[ДНН СОНН]

Дм. 25512 1

1987

Сливко С.А., Саруханов М.А.,
Харитонов Ю.Я.,

Ді, сел. лос.

М. Неотам. хемисс,
1987, ● 32, N 2,
303-306.

4 CON(CH₃)₂

cm 28594

1987

107: 105257v The vibrational spectra of amides - II. The force field and isotopic shifts of N,N-dimethyl formamide. Steele, D.; Quatremain, A. (Dep. Chem., Royal Holloway and Bedford New Coll., Egham/Surrey, UK TW20 0EX). *Spectrochim. Acta, Part A* 1987, 43A(6), 781-9 (Eng). The effects of ¹⁶O → ¹⁸O substitution on the vibrational frequencies of DMF were studied. To understand these and the effects of previously measured shift data due to ¹³C, ²H, and ¹⁵N, ab initio calcns. of frequencies and intensities were carried out at the 3-21G level. Accord between theory and expt. is generally good. There is a prediction of a weak band at ~2000 cm⁻¹ in DMF due to in-plane interaction between the Me umbrella modes and the anti-sym. CN stretch. This abnormally high frequency is explained as arising due to the planar trigonal C₂N entity. Previous problems in reproducing isotope shifts are due to this mode being previously assigned at ~1500 cm⁻¹. The effects of suppressing ref. to 1 of a set of internal valence angles involved in a redundancy are explored. The principal effect is to add the diagonal quadratic const. for that coordinate to all other quadratic terms involving pairs of the angles involved in the redundancy. This results in large, almost equal, interaction consts. amongst this set. The ab initio field is compatible with ab initio fields of mono N-Me amides extant in the literature.

Calc. 10cm.

C. A. 1987, 107, N12

C₂H₅NCO

DM 26396 1987

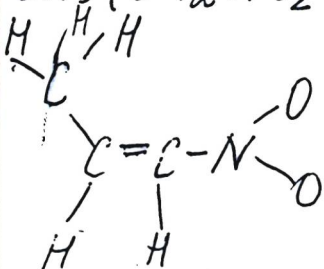
106: 128142x Vibrational spectrum, normal coordinate analysis, ab initio calculations, and conformational stability of ethyl isocyanate. Sullivan, J. F.; Durig, D. T.; Durig, J. R.; Craddock, Stephen (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *J. Phys. Chem.* 1987, 91(7), 1770-8 (Eng). The IR (3500 to 40 cm⁻¹) and Raman (3500 to 20 cm⁻¹) spectra of gaseous and solid EtNCO, were recorded. The IR spectrum of the sample isolated in a N₂ matrix was also recorded from 3500 to 200 cm⁻¹. Addnl., the Raman spectrum of the liq. was recorded and qual. depolarization values were obtained. An assignment of the fundamental vibrations based on the IR band contours, depolarization values, and group frequencies is given and discussed. This assignment is supported by a normal coordinate anal. utilizing a modified valence force field to calc. the normal modes and the potential energy distribution. The Me torsional mode was obsd. at 265 cm⁻¹ in the vapor state from which the 3-fold barrier to internal rotation is calcd. to be 1414 cm⁻¹ (4.04 kcal/mol). A complete equil. geometry was detd. by an ab initio Hartree-Fock gradient calcn. employing STO-3G, 3-21G, and 6-31G* basis sets. These parameters are compared to those obtained from an electron diffraction study as well as those suggested from the microwave investigation. The calcns. give only one stable min. which is the one with the Me group trans to the NCO moiety which is inconsistent with both the rotational and electron diffraction data where the stable conformer is the one with the Me group eclipsing the NCO moiety. These results are compared with the corresponding quantities for some similar mols.

UK chemist,

V₀, V_i, etc. mod.

C.A. 1987,
106, N 16.

$\text{CH}_3(\text{CH})_2\text{NO}_2$ [Om. 28584 | 28584) 1987



UK, *ad initio*
pacem

Turner A.G., Casper W.R.,

Spectrochim. Acta,
1987, 43A, N 8,

● 975-980.

C-N-H-O

1988

22 Б3091. Стандартные энтальпии образования некоторых полинитроалкильных производных нитрамино, амидов и карбоматов. Авдонин В. В., Кирпичев Е. П., Рубцов Ю. И., Коропин А. Г., Федоров Б. С., Еременко Л. Т. «12 Всес. конф. по хим. термодинам. и калориметрии. Тез. станд. докл., Горький, 13—15 сент., 1988. Ч. 1.» Горький, 1988, 61.

Термохимические исследования 7-ми крист. нитро-соединений дали след. значения $-\Delta_c H^\circ$ и $-\Delta_f H^\circ$ (кДж/моль): $C(NO_2)_3CH_2CH_2NH(NO_2)$ 1771,1 и $124,3 \pm 2,1$; $FC(NO_2)_2CH_2CH_2NH(NO_2)$ 1730,9 и $343,5 \pm 1,3$; $C(NO_2)_3CH_2NHC(O)NHCH_2C(NO_2)_3$ 2482,8 и $342,3 \pm 2,1$; $C(NO_2)_3CH_2NFC(O)NHCH_2C(NO_2)_3$ 2560,2 и $297,9 \pm 2,1$; $C(NO_2)_3CH_2N(NO_2)C(O)NHCH_2C(NO_2)_3$ 2438,9 и $243,5 \pm 2,9$; $C(NO_2)_3CH_2CH_2NFC(O)OCH_2C(NO_2)_3$ 2920,9 и $477,4 \pm 2,9$; $C(NO_2)_3CH_2CH_2N(NO_2)C(O)OCH_2C(NO_2)_3$ 2794,9 и $423,4 \pm 1,3$. Оценены вклады групп $(C)-NHC(O)NH-(C)$, $(C)-NFC(O)NH-(C)$, $(C)-NFC(O)O-(C)$ и $(C)-N(NO_2)C(O)O-(C)$ в $\Delta_f H$ для конденсированного состояния, равные соотв. $-200,0$, $-155,6$, $-136,0$, $-322,2$ и $-262,8$ кДж/моль. А. С. Гузей

 (ΔH_f)

X. 1988, N 22

$(CN^{\cdot-} \cdot H_2O)^-$ [сер. 29182] 1988
 $(NC^{\cdot-} \cdot H_2O)^-$

неоп.
растрем

Briznyuk A.A.,
Voityuk A.A.,
Zh. Biol. Struct. Theo-
chem., 1988, 164, N3-4,
343-349.

$KCNH^+ \cdot H_2O$ (OM-29182) 1988

Briznyuk A.A.,

Voityuk A.A.

неоп.
растрем

J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 167, N3-4,



343-349.

$(CH_3)_2NH^+ \cdot H_2O$ [OM 29182]

1988

Briznyuk A.A.,
Voityuk A.A.

теор.
раб.

J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 164, N3-4,
343 - 349.

$\text{NH}_2\text{CHOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ [over. 29/82] 1988

meop.
pacrim

Briznyuk A.A.,
Voityuk A.A.
7. Ilov. Street. Theo-
chem. 1988, 164, N3-4,
343-349.

C-N-H-O соединения

1988

22 Б3102. Структура и реакционная способность азоефиров. Теплоты сгорания и образования некоторых азоефиров. Structura și reactivitatea azoeterilor. Căldura de combustie și de formare a unor azoeteri. Ciocăzanu Ion, Dogaru Viorica, Moga-Gheorghe Spiridon, Zăvoianu Dinu. «Rev. chim.» (RSR), 1988, 39, № 3, 227—230 (рум.; рез. англ., рус.)

Определены теплоты сгорания некоторых азоефиров. Вычисл. из эксперим. данных значения $\Delta_f H^0$ (ккал/моль) составили: 2,5-диметил-4'- 130,20, 2-метил-4-хлор-4'-метоксиазобензол 123,5, 2,5-диметил-4- 81,20, 2-метил-4-хлор-4'- 115,25, 2,5-диметил-3'-хлор-4'- 74,56, 2-метил-3',4-дихлор-4'- 105,60, 4-этоксн-3',5'-диметил-4'- 99,03, 4-этоксн-3'-втор-бутил-4'- 34,25, 2-метил-4-хлор-3'-формил-4'-1 24,33, 4-этоксн-3'-формил-4'- 83,45, 4-метил-3'-формил-4'-бензилоксназобензол 94,20. Обсуждена взаимосвязь между структурой и реакц. способностью. Подчеркнуто влияние структуры на термодинамич. параметры.

Р. Г. Сагитов

(ΔH_f)

X. 1988, n 22

c- C_3H_5NCO OM. 29458 |

1988

nb cncmp

Durig J.R., Berry R.F.,
et al.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1988, 110, N 3,
718-726.



011 30792

1988

11 Б1255. Микроволновые спектры цис,транс-пропаргилнитрита. Microwave spectra of cis,trans-propargyl nitrite / Endo K., Fukushima A. // Ниппон кагаку кайси—J. Chem. Soc. Jap., Chem. and ind. Chem.— 1988.— № 12.— С. 1925—1928.— Яп.; рез. англ.

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 16—32 ГГц с точностью около 10 кГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов цис,транс-пропаргилнитрита, $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{O}^{14}\text{NO}$ (I) и $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{O}^{15}\text{NO}$ (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели жесткого асимм. волчка. Вращат. постоянные I и II, соотв., равны в МГц $M=19631,05(25)$ и $19419,78(20)$, $B=1794,50(1)$ и $1774,87(1)$, $C=1661,97(1)$ и $1643,61(1)$. При фиксированных параметрах для пяти длин связей и пяти углов связей в предположении линейности $\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{N}$ определены четыре структурных параметра $r(\text{C}-\text{C})=1,472(8)$ А, $r(\text{C}-\text{O})=1,437(4)$ А, $\angle\text{CCO}=107,9(5)^\circ$, $\angle\text{CON}=113,6(5)^\circ$. Расчетные значения вращат. постоянных хорошо согласуются с эксперим. величинами.

С. Н. Мурзин

М.А.

X.1989, N 11

$\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$

От 30 564

1988

2 Л164. Микроволновый спектр $\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$. Microwave spectrum of the $\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$ complex / Fraser G. T., Suenram R. D., Lovas F. J., Stevens W. J. // Chem. Phys.— 1988.— 125, № 1.— С. 31—43.— Англ.

С использованием микроволн. фурье-спектрометра с импульсным соплом получены вращательные спектры комплексов $\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$ и $^{13}\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$. Наблюдавшиеся линии отнесены к 5 состояниям, 4 из которых метастабильны. Для 2 состояний комплекса, соответствующих основному вращательному состоянию волчка NH_3 , наблюдались прогрессии $\Delta J=1$, $K=0$. В результате проведенного вращательного анализа определены эффективные спектроскопич. постоянные, структурные параметры и дипольные моменты комплексов. Сделан вывод, что комплексы образованы водородной связью $\text{OH}\dots\text{N}$, длина которой равна 2,02 Å. Выполнены также неэмпирич. ССП расчеты для оценки энергии стабилизации комплексов и объяснения происхождения их дипольных моментов.

В. А. Морозов

л.л.

ф. 1989, № 2

$\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$

(от 30564)

1988

3 Б1400.. Микроволновый спектр комплекса $\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$. Microwave spectrum of the $\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$ complex / Fraser G. T., Suenram R. D., Lovas F. J., Stevens W. J. // Chem. Phys.— 1988.— 125, № 1.— С. 31—43.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в обл. частот 7—23 ГГц с точностью около 10 кГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов комплекса с Н-связью, $^{12}\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$ (I) и $^{13}\text{CH}_3\text{OH}-\text{NH}_3$ (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели вытянутого волчка с учетом кватерционного центробежного искажения, ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия и внутреннего вращения CH_3 и NH_3 групп. Для I и II, соотв., определены вращат. постоянные в двух состояниях внутреннего вращения, в состоянии $\alpha(B+C)/2 = 3690,119$ (2) и $3622,773$ (3) МГц и в:

М.А.

Х. 1989, № 3

состоянии $\beta(B+C)/2=3686,114(2)$ и $3618,950(5)$ МГц. Дипольные моменты I в состояниях α и β , соотв., равны $\mu=2,854(9)$ и $2,956(14) D$. При ряде допущений определена линейная структура комплекса с Н-связью почти коллинеарной с осью симметрии NH_3 . Структурные данные согласуются с результатами расчетов в приближении ССП.

С. Н. Мурзин



CH₃OH-NH₃

Im. 30564

1988

109: 179451s Microwave spectrum of the methanol-ammonia complex. Fraser, G. T.; Suenram, R. D.; Lovas, F. J.; Stevens, J. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899, USA). *Chem. Phys.* 1988, 125(1), 31-43 (Eng). Microwave spectra of MeOH-NH₃ and ¹⁸CH₃OH-NH₃ were obtained using a pulsed-noise Fourier-transform microwave spectrometer. The spectra, which are complicated by the internal rotation of the Me and NH₃ group, exhibit $K = 0$ states at the ~ 1 K rotational temp. of the expansion. Four of these are metastable, excited internal rotor states which correlate to E states of free MeOH or NH₃. For the 2 states in which the NH₃ top is in its ground internal rotor state, $\Delta J = 1$, $K = 0$ progressions are obsd. and fit to linear-mol.-type frequency expressions to obtain effective spectroscopic consts. For MeOH-NH₃ these consts. are: $(B + C)/2 = 3690.119(2)$ and $3686.114(2)$ MHz; $c(Q_{\text{NH}_3}) = -3.184(10)$ and $-3.182(9)$ MHz; and $\mu_a = 2.854(9)$ and $2.956(14)$ D. The complexes are H bonded with an OH—N bond length of 2.97 Å. This bond length is similar to that found by P. Herbine and T. Dyke (1981) in the related H₂O—NH₃ complex, 1.97 Å. Ab initio SCF calcs. were carried out for the MeOH-NH₃ and H₂O—NH₃ complexes in order to compare interaction-energy components and origins of the dipole moment enhancements.

(M6 cncmp)

C.A. 1988, 109, N 20

CO...HCN

от 31249

1988

6 Д47. Координаты типа r_s в слабосвязанных димерах. Применение к линейным димерам $B...HCN$, где $B=CO$, N_2 и HCN . r_s -Type coordinates in weakly-bound dimers: application to linear dimers $B...HCN$, where $B=CO$, N_2 , and HCN / Haynes A., Legon A. C. // J. Mol. Struct.— 1988.— 189, № 1/2.— С. 153—164.— Англ.

Проанализирована взаимосвязь между геометрич. конфигурацией димера с относительно слабым взаимодействием фрагментов и измеряемыми моментами инерции для разных изотопомеров этого димера. В рамках модели, учитывающей вращательные нулевые осцилляции фрагментов, получены выражения для расстояний z_i центров круговых движений ядер от центра масс димера. На основании эксперим. данных найдены величины z_i для тяжелых атомов димеров $B...HCN$, $B=CO$, N_2 , HCN и соответствующие им межъядерные расстояния в пределах одного фрагмента. Результаты сопоставлены со значениями, полученными без использования изотопного замещения. А. В. Зайцевский

(2)
X

ф. 1989, № 6

$N_2...HCN$, $HCN...HCN$

C-V-H-0

1988

Исаев П. П., Исаева Г. А.

Энтальпии образования метилнитрозамещенных бензола

// Журн. физ. химии. — 1988. — Т. 62, вып. 2. — С. 538—541.

Библиогр. : 10 назв.

— — 1. Нитробензол, замещенные — Энтальпия образования.

№ 76894

18 № 4042

НПО ВКП 21.07.88

УДК 541.11+541.66

ЕКЛ 17.8

ΔH_f

CH_2NO_2

com. 30490

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N2, 485.

C₆H₅NO

1988

23 Б1281. ¹⁴N-квадрупольное взаимодействие во вращательном спектре нитрозобензола. ¹⁴N quadrupole coupling in the rotational spectrum of nitrosobenzene. Keussen Ch., Andressen U., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1988, A43, № 4, 385—387 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с волноводной ячейкой в обл. частот 5—18 ГГц с точностью выше 5 кГц измерен вращат. спектр нитрозобензола, C₆H₅NO, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектра выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в S-редукции с учетом квартичного центробежного искажения и ¹⁴N-ядерного квадрупольного взаимодействия. Определены вращат. постоянные (в МГц) $A=5249,143(74)$, $B=1643,273(4)$, $C=1251,976(3)$ и постоянные квадрупольного взаимодействия (в МГц) $\chi_{aa}=0,042(8)$, $\chi_{bb}=-5,028(9)$, $\chi_{cc}=4,986(9)$. Полученные МВ-данные уточнили ранее выполненные измерения методом МВ-фурье-спектроскопии в области частот 8—12 ГГц (Fliege E. et al., «Z. Naturforsch.», 1981, 36a, 1122). С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1988, N 23

C-N-H-O соединения

1988

22 БЗ099. Стандартные теплоты сгорания и энтальпии образования этилендиаминдиантарной и β -оксиэтилиминодиуксусной кислот. Копнышев С. Б., Бородин В. А. «12 Всес. конф. по хим. термодинам. и калориметрии. Тез. станд. докл., Горький, 13—15 сент., 1988. Ч. 1». Горький, 1988, 86

В калориметре с изотермич. оболочкой измерены теплоты сгорания этилендиаминдиантарной (I) и β -оксиэтилиминодиуксусной (II) к-т. Получены $-\Delta_c H(s, 298,15 \text{ K}) = 4273,5 \pm 3,8$ и $2799,1 \pm 2,3$ кДж/моль; $-\Delta_f H^0(s, 298,15 \text{ K}) = 1948,3 \pm 3,8$ и $1134,0 \pm 2,3$ кДж/моль соотв. для I и II. А. С. Гузей

ΔH_f°

X.1988, N 22



1988

23 Б3027. Термодинамические свойства биурета в различных агрегатных состояниях. Козыро А. А., Френкель М. Л., Красулин А. П., Симирский В. В., Кабо Г. Я. «Ж. физ. химии», 1988, 62, № 7, 1752—1756

Методом бомбовой калориметрии определены энтальпии сгорания и образования крист. биурета (I). Теплоемкость C_p I измерена в интервале т-р 240—450 К. На основании полученных и лит. низкот-рных данных рассчитаны термодинамич. ф-ции I (сг) в интервале 0—450 К, станд. значения к-рых при 298,15 К составили C_p 131,3 Дж/моль·К, $H_T^\circ - H_0^\circ$ 21677 Дж/моль, $S_T^\circ - S_0^\circ$ 146,1 Дж/моль·К, $(H_T^\circ - H_0^\circ)/T$ 72,71 и $G_T^\circ - H_0^\circ/T$ 73,35 Дж/моль·К. Обнаружена аномалия C_p при т-рах вблизи 372 К и оценены термодинамич. х-ки соотв-щего фазового превращения $\Delta_{\text{trs}}H = 0,97 \pm \pm 0,05$ кдж/моль и $\Delta_{\text{trs}}S = 2,54 \pm 13$ Дж/моль·К. Инте-

$C_p, \Delta H_f, \Delta H_{f2},$

$P, \Delta H_f;$

⊗ (H)

Х. 1988, № 23

$\text{H}_2\text{NCONHCONH}_2(2)$
($C_p, H_T - H_0^\circ/T, S_T^\circ$) т.ф.

гральным эффузионным методом Кнудсена измерено
 давл. насыщ. пара I при т-рах 400—430 К и рассчиты-
 таны $\Delta_{\text{sub}}H$ $128,6 \pm 6,4$ и $126,7 \pm 1,9$ кДж/моль (для
 двух серий измерений), $\Delta_{\text{sub}}S$ $316,70 \pm 4,84$ Дж/моль·К.
 В результате проведенных спектральных исследований
 выполнено отнесение фундаментальных частот транс- и
 цис-изомеров I и методами статистич. термодинамики
 рассчитаны C_p , $H_T - H_0^\circ/T$ и S_T° для состояния ид. га-
 за, равные при 298,15 К для цис-I 118,58; 73,85 и
 345,81 Дж/моль·К, транс-I 118,56) 73,44 и 350,43;
 при 400 К для цис-I 141,95; 88,44 и 384,18; для транс-I
 143,39; 88,19 и 388,86.

А. Л. М.



$\text{NH}_4\text{HCO}_3 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$

1988

24 Б3108. Индуцированная давлением несоразмерная фаза в полугидрате кислого оксалата аммония. A pressure-induced incommensurate phase in ammonium hydrogen oxalate hemihydrate. Krauzman M., Godet J. L., Pick R. M., Poulet H., Toupny N., Bosio L., Debeau M., Launois P., Moussa F. «Europhys. Lett.», 1988, 6, № 1, 37—42 (англ.)

Установлено существование в кристаллах полугидрата кислого оксалата аммония (I) новой несоразмерной фазы, существующей только выше крит. давл. и имеющей некомпенсированной волновой вектор, параллельный вектору c^* обр. решетки. Новая фаза существует в широких пределах, изменяясь от 0,147 c^* при 4,3 кбар до $\approx 0,25$ c^* при макс. исследованном

Л. Е.;

X. 1988, N. 24

давл. — 8 кбар. Крист. I, т. обр., существует в виде трех фаз: I — при норм. условиях, II — при повышенных давл. и III — новая фаза при давл. выше 3 кбар и т-рах ниже 130 К. Фазовый переход II—III строго 1-го рода, в то время как переход I—III — 2-го рода в пределах точности измерений. Переход I—III промежут. типа.

В. Г. Юркин

$C_6(CH_3)_3(NO_2)_3$

21 Б1175 Деп. Исследование строения молекулы тринитромезитилена, $C_6(CH_3)_3(NO_2)_3$, в газовой фазе электронографическим методом. Куликова Е. И., Садова Н. И., Попик М. В., Иванов А. А., Беляков А. В., Бобылева М. В., Куликов Н. С., Вилков Л. В., Пятаков Н. Ф., Панкрушев Ю. А.; Ред. ж. «Вестн. МГУ. Химия» М., 1988. 16 с. ил. Библиогр. 15 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ 23.06.88, № 4941—В88)

Методом газовой электронографии определены структурные параметры молекулы $C_6(CH_3)_3(NO_2)_3$: $r_g(C \cdots C) = 1,397(2)$, $r_g(C-N) = 1,487(8)$, $r_g(N=O) = 1,221(2)$, $r_g(C_{Ph}-C_{Me}) = 1,482(11)$, $r_g(C-H) = 1,102$ А (принято), $\angle CNO_2 = 123,5(0,8)^\circ$, $\angle CNO = 116,6(0,3)^\circ$, $\angle CCH = 109,5^\circ$ (принято). Отмечено укорочение связи $C_{Ph}-C_{Me}$ по сравнению с молекулой $C_6H_3(CH_3)_3$. Конформация молекулы неплоская: угол поворота нитрогрупп вокруг связей $C-N$ составляет $71,8(0,6)^\circ$; принято, что в метильных группах одна из связей $C-H$ перпендикулярна плоскости бензольного кольца. Автореферат

М.П.

Х. 1988, 19, № 21



1988

Lien M. H., Hopkinson
A. C.

M. n. J. Org. Chem., 1988, 53,
N 10, 2150-2154.

(see $\bullet$ HCH_2CO^+ ; III)

$\text{NH}_2\text{OCCH}_2^+$ (om. 29867) 1988

Lien M.H., Hopkinson A.C.,

meopem-
paem
empyem.

J. Amer. Chem. Soc., 1988,
110, N 12, 3788-3722.

$H_2NCHO \cdots H_2O$ M. 29352 1988

108:103216c The microwave spectrum of formamide-water and formamide-methanol complexes. Lovas, F. J.; Suenram, R. D.; Fraser, G. T.; Gillies, C. W.; Zozom, J. (Mol. Spectrosc. Div. Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(2), 722-9 (Eng). The microwave spectra of the $H_2NCHO-H_2O$ and $H_2NCHO-MeOH$ complexes were investigated with a pulsed beam Fabry-Perot cavity Fourier transform microwave spectrometer. The hyperfine structure due to the ^{14}N nuclear quadrupole interaction was used to assign the rotational transitions for both species. For $H_2NCHO-H_2O$, the rotational anal. of 10 transitions provided the consts. (in MHz): $A = 11,227.931(1)$, $B = 4586.9628(10)$, $C = 3258.8278(7)$, $eQq_{aa} = 1.332(3)$, and $eQq_{bb} = 2.037(3)$. The $H_2NCHO-MeOH$ spectrum exhibits an addnl. splitting from internal rotation of the Me group. Eighteen obsd. transitions from the A and E symmetry states were assigned and fitted with the rotational consts. (in MHz): $A = 10186.594(6)$, $B = 2090.36(59)$, and $C = 1762.90(6)$ with hyperfine consts. close to those of $H_2NCHO-H_2O$. By assuming a Me top moment of inertia $I_a = 3.206 \mu A^2$, the barrier to internal rotation $V_3 = 231.01(17) \text{ cm}^{-1}$ is obtained. This barrier height is ~36% smaller than that of MeOH. The structures detd. for these complexes agree with prior ab initio calcs. which indicate essentially planar, double H bonded structures for both species.

(148 cm⁻¹ mp,)
(A, B, C)

C.A. 1988, 108, N12.

$C_3H_7NO_2$

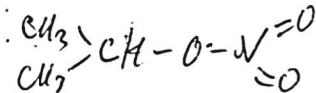
1988

Теплоемкость и стандартная энтропия изопропилнитрата
/Лушников В.Н., Рубцов Ю.И., Еременко Л.Т., Королев А.М.

// Журн. физ. химии. – 1988. – Т. 62, вып. 5. – С. 1209–1214.

Библиогр.: 17 назв.

— 1. Изопропилнитрат — Теплоемкость. 2. Изопропил-
нитрат — Энтропия.



№ 85136

УДК 541.113+547.260.2

18 № 4976

НПО ВКП 11.08.88

ЕКЛ 17.5

$C_6H_5OH-NH_3$

1988

20 Б4476. Фотодиссоциация связанного водородной связью гетеродимерного иона $[C_6H_5OH-NH_3]^+$. Photodissociation of the hydrogen-bonded heterodimer ion $[C_6H_5OH-NH_3]^+$. Mikami N., Okabe A., Suzuki I. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 7, 1858—1862 (англ.)

Изучена диссоциативная фотоионизация (ДФИ) связанного Н-связью комплекса $[C_6H_5OH-NH_3]$, полученного в сверхзвуковом молек. пучке смеси паров фенола с NH_3 в большом избытке He. ДФИ комплекса производили методом двухцветной многофотонной лазерной ионизации, что позволило исключить ионизацию др. компонентов молек. пучка. Первым лазером на красителе с удвоением частоты осуществляли возбуж-

(7)

Х. 1988, 19, N 20

дение перехода $S_1 \leftarrow S_0$ в комплексе, а вторым, пере-
страиваемым, лазером производили ионизацию с реги-
страцией получаемых ионов методом квадрупольной
МС. Найдено, что адиабатич. Пт ионизации комплек-
са равен $62\,200 \pm 100 \text{ см}^{-1}$ ($\sim 7,71 \text{ эВ}$). Показано, что
осколочный ион ~~$C_6H_5OH^+$~~ генерируется при превыше-
нии пороговой энергии $70\,400 \text{ см}^{-1}$. Энергия диссоциа-
ции ~~$[C_6H_5OH-NH_3]^+ \rightarrow C_6H_5OH^+ + NH_3$~~ найдена равной
 $8\,200 \pm 500 \text{ см}^{-1}$. Не обнаружено процесса ДФИ комп-
лекса с образованием $C_6H_5O^+ + NH_4^+$ даже при превы-
шении расчетной пороговой энергии этого процесса.

В. Е. Скурат

$N_3 CDNH_2$ (Om. 32234) 1988

Murthy E.K., Rao G.R.,

ind. no cm. Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1988,
26, 546-555.


$$\Pi_{t2}$$

1988

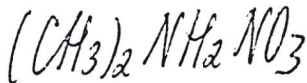
2 E746. Изучение структурного фазового перехода в $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ методами комбинационного рассеяния света и инфракрасной спектроскопии. Raman and infrared studies of structural phase transition in $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ / Mylrajan M., Srinivasan T. K. K. // J. Phys. and Chem. Solids.— 1988.— 49, № 8.— 929—937.— Англ.

В интервале т-р $90 \leq T \leq 350$ К изучены спектры КРС и ИК-спектры ($10\text{--}5000\text{ см}^{-1}$) диметиламмоний нитрата $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ и его *N*-дейтерированных аналогов. КРС изучались с помощью Аг-лазера (5145 Å ; $200\text{--}300\text{ мВт}$). Образцы для исследования ИК-спектров получены сублимацией на пластинах KRS-5 и полиэтилена. Идентифицировано большинство наблюдаемых полос. На основании анализа существенных изменений спектра либрационных и трансляционных колебаний катионных и анионных комплексов показано существование фазового перехода при $T_c = 297\text{ К}$, являющегося переходом типа смещения со значительной компонентой порядок—беспорядок. Ниже 254 К обнаружена мягкая мода ($18,5\text{ см}^{-1}$ при 140 К), частота которой не обращается в ноль при $T \rightarrow T_c$ вследствие ее связи с акустич. модой. Дейтерирование приводит к слабому

X. 1989, № 3

понижению частот большинства линий в спектрах КРС
и ИКС. С. Л. Бравина





1988

109: 241181j Raman and infrared studies of structural phase transition in dimethylammonium nitrate. Mylrajan, M.; Srinivasan, T. K. K. (Reg. Sophisticated Instrum. Cent., Indian Inst. Technol., Madras, 600 036 India). *J. Phys. Chem. Solids* 1988, 49(8), 929-37 (Eng). $\text{Me}_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ belongs to the monoclinic space group $P2_1/m$ with $Z = 2$ at 295 K. Raman and IR spectra of $\text{Me}_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ and of its ND_2 deriv. were investigated at 90-350 K. A systematic temp. dependent study of the frequencies and band widths showed the existence of a phase transition at 297 K. Assignments of most of the bands obsd. are proposed. The high temp. phase I is disordered in which both cations and anions exhibit reorientational motion and the transition to phase II is brought about by freezing out the disorder of both the cations and anions. A soft mode was identified in the low temp. phase.

 (Γ_{t2}) C.A. 1988, 109, N26

$(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$
 $(\text{CH}_3)_2\text{ND}_2\text{NO}_3$

1988

3 БЗ139. Исследования методами инфракрасной спектроскопии и комбинационного рассеяния структурного фазового перехода в $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$. Raman and infrared studies of structural phase transition in $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ / Mylrajan M., Srinivasan T. K. // J. Phys. and Chem. Solids.— 1988.— 49, № 8.— С. 929—937.— Англ.

T_c

Методами КР- и ИК-спектроскопии при 10—5000 см^{-1} и т-рах 90—350 К, и РСТА исследованы $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{NO}_3$ и $(\text{CH}_3)_2\text{ND}_2\text{NO}_3$. При $T_c = 297$ К в обоих соединениях зафиксировано фазовый переход (ФП), проявляющийся в резком изменении частотных характеристик и ширины спектральных линий. Установлено, что ФП. в высокот-рную фазу I происходит в результате структурного разупорядочения при к-ром катионы и анионы совершают вращат. движение. Мягкой модой

х. 1989, № 3

при обратном, сопровождающимся упорядочением, переходе является мода $18,5 \text{ см}^{-1}$ (140 K) в спектре КР. В интервале $155\text{—}254 \text{ K}$ ее частота меняется по закону $\omega_2 = A(T_c - T)$, $A = 0,88 \text{ см}^{-2}\text{K}^{-1}$. Сделан вывод, что превращение частично относится к типу смещения, но с компонентами размерного разупорядочения.

В. Е. Смирнов

$(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$

1988

1 E752. Исследование фазовых переходов в $(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$ методами колебательной спектроскопии. Vibrational study of phase transitions in $(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$ / Mylrajan M., Srinivasan T. K. K. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 3.— С. 1634—1641.— Англ.

Изучены спектры КРС и ИК-поглощения монокристаллических и поликристаллич. образцов нитрата триметиламмония (3MANO) в интервале т-р 90—415 К, включающем два фазовых перехода. Проведено отношение измеренных частот линий КРС и полос ИК-поглощения к внутренним колебательным модам. Изучены температурные зависимости частот, полуширин и интенсивностей ряда линий, показывающие наличие двух фазовых переходов при $T=359$ и 407 К. Оба фазовых перехода характеризуются температурным гистерезисом, что свойственно переходам I рода. Делается вывод, что высокотемпературные фазы характеризуются активацией переориентационных движений и при $T>407$ К молекулы $(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$ испытывают переориентации вокруг всех трех осей инерции.

В. М. Б.

Π_{t2}

ф. 1989, № 1

$(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$

$(\text{CH}_3)_3\text{NDNO}_3$

П
12

Х. 1989, № 3

1988

3 Б3140. Спектральные исследования фазовых превращений в $(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$. Vibrational study of phase transitions in $(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$ / Mylrajan M., Srinivasan T. K. K. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 3.— С. 1634—1641.— Англ.

Методами КР- и ИК-спектроскопии при 10—5000 см^{-1} в интервале 90—415 К и РСТА исследованы монокрист. и поликрист. образцы $(\text{CH}_3)_3\text{NHNO}_3$ и $(\text{CH}_3)_3\text{NDNO}_3$. Обнаружены 2 фазовых превращения (ФП) 1-го рода при 359 и 407 К в процессе нагрева, характеризующихся т-рым гистерезисом, равным, соотв., 14 и 20 К, и сопровождающихся резким изменением структуры. Показано наличие вращат. смещения групп NO_3^- , CH_3 , $(\text{CH}_3)_3\text{NH}^+$ и NC_3 в фазах II (359—407 К) и I (≥ 407 К). В фазе III большинство вырожденных мод группы NC_3 расщепляются. Исчезновение вырождения завершается при 90 К. В II и I вырождение восстанавливается. Дейтерирование не влияет на особенности ФП.

В. Е. Смирнов

EN-O-H

[om. 31402] 1988

соединен. Remko M., Scheiner S.,

геометр.;
барьер
внутрен.
вращен.

J. Mol. Struct. (Theochem),
1988, 180, 175-188.

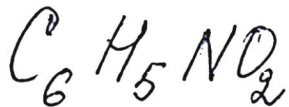
$(NCH)_2OH_2$ (om. 28873)

1988

Rhee S-K., Karpfen A.,

колебат.
спектр,
струк-
тура,
ab initio
расчет.

Chem. Phys., 1988,
120, N2, 199-213.



1988

Ritchie J.P.

Tetrahedron. 1988.

d.n.

44, N 24, C. 7465 -
- 7478.

( cell. CH_3NO_2 ; III)

$C_2H_2N_2O_2$

(DM 30791)

1988

(148)

109: 118489p Microwave spectra of furazan. I. The doubly determined substitution structure. Stiefvater, Otto L. (Adran Cemeg, Coleg Prifysgol Gogledd Cymru, Wales, UK LL57 2UW). *Z. Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1988, 43(6), 597-606 (Eng). Double Resonance Modulation (DRM) microwave spectroscopy was used to det. the rotation consts. of isotopic forms of normal $C_2H_2N_2O_2$ and perdeuterated furazan ($C_2D_2N_2O$). From these data, the complete substitution structures were derived by J. Kraitchman (1953) methods and by the computer program GEOM. The latter procedure fails to give correct results due to the decrease of the moment in inertia about the C_{2v} -axis and the simultaneous interchange of inertial axes in the ^{18}O -3,4- d_2 -form. The bond lengths (in Å) and angles are best compatible with the total body of isotopic information. The uncertainties cover small differences between normal and d -furazan as well as discrepancies resulting from different schemes of structure calcn.

C.A. 1988, 109, N 14

НСОДН₂

1988

6 Б3165. Об энтальпиях смешения в системе вода—формамид / Зайчиков А. М., Ноговицын Е. А., Железняк Н. И., Крестов Г. А. // Ж. физ. химии.— 1988.— 62, № 11.— С. 3118—3121.— Рус.

В калориметре с изотермич. оболочкой измерены $\Delta_{\text{mix}}H^E$ в системе вода—формамид при т-рах 288,15; 298,15; 308,15 и 318,15 К. Описана конструкция калориметра. Концентрац. зависимости $\Delta_{\text{mix}}H^E$ аппроксимированы ур-нием Редлиха—Кистера, коэф. к-рого приведены. Поскольку величины $\Delta_{\text{mix}}H^E$ при всех т-рах положительны и относительно невелики, предположено, что энергии н-связей в чист. компонентах близки по величине и при смешении заменяются более слабыми связями вода—формамид.

А. Л. М.

ΔK_{mix}

Х. 1989, № 6

[Dm. 33696]

1989



u.n. Croat. Chem. Acta, 1989,

62, N 4, 617-622

Unrestricted • Hartree-Fock-

Rootaan Calculations of
Geometrical Parameters of
(Z) - $\text{CH}_3\text{CH}=\text{NO}^\bullet$ and (E) - $\text{CH}_3\text{CH}=\text{NO}^\bullet$
Iminoxy Radicals.

$[CH_5NO]^+$ [Om. 32487]

1989

romerees.
nrepxre.
romer.

Burgers P.C.,
Lidshetz Ch., et al.,
Organic Mass Spectro
metry 1989, 24, N8,
579- 590

Азиды

P-N-H-O сеп. 1989

111: 219685w Ionization energies of azines from Green's function method in semiempirical AM1 approximation. Danovich, D. K.; Zakrzewski, V. G.; Dornina, E. S. (Irkutsk Inst. Org. Chem., 664033 Irkutsk, USSR). *THEOCHEM* 1989, 57(1-2), 159-66 (Eng). The ionization energies of a no. of azines have been calcd. using the OVGF method in the semiempirical AM1 approxn. The SCF AM1 and MNDO calens. fail to reproduce correctly the ordering of the ionization energies for the azines under consideration. The quant. agreement of the OVGF (AM1) values with the obsd. photoelectron spectra is at the same level as that of the OVGF ab initio calcn. with a polarized basis set. The computer time needed for the latter is 40-50 times that of the OVGF (AM1) calcn. For all the mols. under consideration the OVGF (AM1) method gives much better quant. agreement with expt. than does the semiempirical HAM/3 method. In the particular case of the pyridine mol., the OVGF (AM1) method reproduces correctly the degeneration of the two upper occupied σ - and π -type levels, which is in contrast with the HAM/3 method.

С.А. 1989, 111, N 24

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

(Am. 31769)

1989

Dwivedi A.M.,
Krimm S., et al.,

Vi, empty, empty,
am. nom.

Spectrochim. acta

A 1989, 45, N2, 271-279.

C-N-O-H
cyclic.

(Dm 32888)

1989

Fitzpatrick N. F.,
ab initio
naem. Mageswaran R.,

Polyhedron 1989, 8,
N18, 2255-2263.

Theoretical study of hydro-

amic acids

OCO-HCN

am 32416

1989

2 Б1300. Вращательный спектр и структура линейного димера $\text{CO}_2\text{—HCN}$: зависимость образования изомеров от газа-носителя. Rotational spectrum and structure of the linear $\text{CO}_2\text{—HCN}$ dimer: Dependence of isomer formation on carrier gas / Klots T. D., Ruoff R. S., Gutowsky H. S. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 8.— С. 4216—4221.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в обл. частот 4,0—8,5 ГГц с точностью ~ 1 кГц измерены вращат. спектры 7 изотопич. образцов линейного димера, OCO—HCN (I), $^{18}\text{OCO—HCN}$, $\text{O}^{13}\text{CO—HCN}$, $\text{OC}^{18}\text{O—HCN}$, OCO—DCN , $\text{OCO—H}^{13}\text{CN}$, $\text{OCO—HC}^{15}\text{N}$, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели линейной молекулы с учетом кватерного центробежного искажения и ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I определены вращат. постоянная $B_0 = 1057,9397(2)$ МГц, центробежная постоянная $D_j = 1,372(8)$ кГц и постоянная квадрупольного взаимодей-

М.П.

Х. 1990, №2.

ствия $\chi = -4,2466(5)$ МГц. Вычислены структурные параметры и P_t взаимодействия между двумя мономерами в димере. Относит. конц-ия линейного и T -образного изомеров обнаружила очень сильную зависимость от используемого в сверхзвуковой струе газа-носителя.

С. Н. Мурзин



OCO-HCN

от 324/6

1989

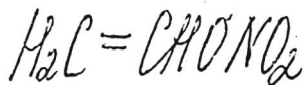
→ 12 Л156. Вращательный спектр и структура линейного $\text{CO}_2\text{—HCN}$ димера: зависимость конфигурации изомера от газа-носителя. Rotational spectrum and structure of the linear $\text{CO}_2\text{—HCN}$ dimer: dependence of isomer formation on carrier gas / Klotz T. D., Ruoff R. S., Gutowsky H. S. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 8.— С. 4216—4221.— Англ.

На импульсном микроволн. фурье-спектрометре изучены вращательные спектры линейного димера с водородной связью OCO—HCN и его шести моноизотопич. замещенных. Для норм. изотопа получены значения вращательных констант $B_0 = 1057,9397(2)$ МГц, $D_1 = 1,372(8)$ кГц и $\chi_{aa}(^{14}\text{N}) = -4,2466(5)$ МГц. Амплитуда торсионного движения мономеров OCO и HCN относительно их центров масс составляет $7,66^\circ$ и $12,40^\circ$ соответственно, расстояние между центрами масс $R = 5,035$ А. Наблюдалась сильная зависимость относит. конц-ий линейного и T -формы изомеров от используемого газа-носителя в сверхзвуковой струе. Линейная форма не зарегистрирована в аргоне, но давала сильный сигнал в неоне. T -форма присутствовала в обоих газах.

Б. С. Д.

М.П.

ср. 1989, N 12



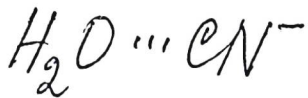
1989

Kraese H., et al.,

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

F8

Eleventh Colloquium on
High Resolution Molecular
Spectroscopy, Giesse,
September 18-22, 1989,
A1, F8.



1989

Lee Timothy J.

ab initio
parcēm
компек.

J. Am. Chem. Soc. 1989,
III (19), 7362-71.

(Cell. FH $\cdots$ CN^- ; III)

Дилер

1989

(CO₂, HCN)

19 Б1202. Применение метода пульсирующего сверхзвукового потока и диодного лазерной ИК-спектроскопии для изучения $v=1 \leftarrow 0$ перехода CO₂ асимметричного валентного колебания в димере (CO₂, HCN). Pulsed-jet, diode-laser ir spectroscopy of the $v=1 \leftarrow 0$ transition in the CO₂ asymmetric stretching mode of (CO₂, HCN) / Legon A. C., Suckley A. P. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 157, № 1—2.— С. 5—10.— Англ.

В области 2350 см⁻¹ на ИК-спектрометре с диодным лазерным источником излучения измерены спектры димера (CO₂, HCN) (I) в пульсирующем сверхзвуковом потоке. Наблюдался переход $v=1 \leftarrow 0$ видоизмененного ν_3 асимм. вал. кол. CO₂ в I. Сделано отнесение полос. Вращат. константы A_1 , B_1 , C_0 (МГц) для основного $v=0$ и возбужденного $v=1$ состояний, соотв., равны 11 824, 2226,549; 1861,564 и 11 727,35; 2226,38; 1858,67. Спектральные константы ΔI , ΔJ_K ,

(м.п.)

Х. 1989, № 19

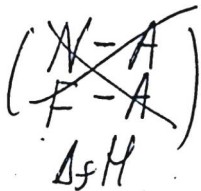
δ_I, δ_K (кГц), соотв., — 6,97; 292,2; 1,28; 243. Дефекты момента инерции для $v=0$ и $v=1$ положительны, что типично для слабо связанного димера с плоской равновесной конфигурацией. Сдвиг полосы ν_3 после образования димера небольшой 0,99034 см^{-1} . Возбуждение ν_3 асимм. вал. кол. CO_2 в I незначительно искажает геометрич. параметры I.

Н. Л. Ариюткина



HCN - AF⁺

A - nanop. 2ay



⊗ (+2)

C.A. 1989, 110,
N10

1989

110: 82770c Properties of atoms in molecules: krypton and xenon and their bonds to nitrogen and fluorine in hydrogen cyanide complexes with noble gas fluorides, HCN-NgF⁺, NgF⁺ and NgF₂ (Ng = noble gas). MacDougall, Preston J.; Schrobilgen, Gary J.; Bader, Richard F. W. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *Inorg. Chem.* 1989, 28(4), 763-9 (Eng). This exptl. study of the properties of the bonds formed by N and F and a noble-gas atom, Kr or Xe, is complemented by a theor. investigation at the SCF level of the properties of mols. contg. such bonds and by the detn. of the properties of the atoms and bonds in these mols. by using the theory of atoms in mols. The ability of the NgF⁺ ions to act as Lewis acids is related to the presence of holes in the valence shell charge concns. of the Kr and Xe atoms that expose their cores. The mechanism of formation of the Ng-N bonds in the adducts of NgF⁺ with HCN is similar to the formation of a hydrogen bond: the mutual penetration of the outer diffuse nonbonded densities of the Ng and N atoms is facilitated by their dipolar and quadrupolar polarizations, which remove d. from along their axis of approach, to yield a final d. in the interat. surface that is only slightly greater than the sum of the unperturbed densities. The Ng-N interactions lie closer to the closed-shell limit than do the Ng-F bonds formed in the reaction of NgF⁺ with F⁻. The energies of formation of these adducts are dominated by the large stabilizations of the Ng atoms that result from the increase in the concn. of charge in their inner quantum shells.

HO 25

1) AF^+

2) AF_2

A - флюор. 2ay.

B_gH



$\text{CH}_3\text{NH}_3^+(\text{H}_2\text{O})_n$ (DM · 32843) 1989
($n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 9, 10$) Masamura M.,

мыкыа, Chem. Phys. Lett.,
ab initio 1989, 162, N 4, 5,
pacem 329-335

The structure ● of CH_3NH_3^+ in

aqueous solution: an ab
initio study.



1989

111: 14568p Vibrational spectra and normal vibrations of N,N-dimethylurea and three deuterated analogs. Mido, Yoshiyuki; Tanase, Kozo; Kido, Kenji (Fac. Sci., Kobe Univ., Kobe, Japan 657). *Spectrochim. Acta, Part A* 1989, 45A(1), 397-402 (Eng). The IR and Raman spectra of N,N-dimethylurea $(\text{CH}_3)_2\text{NCONH}_2$ and its 3 deuterated analogs $(\text{CH}_3)_2\text{NCOND}_2$, $(\text{CD}_3)_2\text{NCONH}_2$ and $(\text{CD}_3)_2\text{NCOND}_2$ in the cryst. state were recorded in the 4000-100 cm^{-1} region. The obsd. spectra were analyzed on the basis of spectral comparison with structurally related compds. and of normal coordinate calcs., and vibrational assignments were made for the 4 species of dimethylurea. The mol. is suggested to be in a centrosym. dimer, different from a ribbon polymer of urea and some urea derivs.

(UK 4 CKP)

C.A. 1989, 111, N2

HCNO

1989

H^{13}CNO J. Preußner,

HC^{15}NO Mikrowellenspektroskopie

у спек- an den quasilinearen
ночные Knallsäure- Isotopomeren

HCNO , H^{13}CNO und

HC^{15}NO (на полке от земнов) (Diplomarbeit)

C-N-O-H соединения

1989

111:219683u Electronic structures of carboxylic acid amides. Rezen, A. M.; Khimenko, N. M.; Krupnov, B. V. (Mosk. Inst. Teor. Khim. Tekhnol., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1989, 63(5), 1239-48 (Russ). The geometry, proton affinity, and electronic structure are calcd. of $RR^1C(=O)$ mols. (R, R^1 are H, CH_3 , NH_2 , and $N(CH_3)_2$) by MNDO and AM1 methods. Several model structures are detd. by ab initio calens. The donor and coordinative capacity of O atoms are discussed. The extractive properties of the mols. studied are related to the proton affinity.

расчет
структур

С.А. 1989, 111, N 24

$(\text{HCN})_2 - \text{CO}_2$

(om. 32417) 1989

Ruoff R.S., Emilsson T.,
et al.,

Ерассим.
спектр,
структура

J. Chem. Phys., 1989,
90, №, 4069-4078.

$C_2H_5-OC^{14}N$

BM 33137

1989

14 B1245. Микроволновый спектр этилцианата.
The microwave spectrum of ethyl cyanate / Sakaizumi T., Mure H., Ohashi O., Yamaghi I. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 2.— С. 375—382.—
Англ.

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в области частот 8—40 ГГц измерены вращат. спектры двух изотопомеров этилцианата, $C_2H_5-OC^{14}N$ (I) и $C_2H_5-OC^{15}N$ (II), в основном колебат. состоянии и I. в трех возбужденных колебат. состояниях. Для I и II, соотв., определены вращат. постоянные в основном состоянии в МГц $A=30055(94)$ и $29794(110)$, $B=2543,53(1)$ и $2474,87(1)$, $C=2419,67(1)$ и $2357,03(1)$ и дипольный момент $\mu=4,72(23)$ D. Возбужденные колебат. состояния отнесены к C—O торсионным и CH_3 торсионному колебаниям с частотами 120(30), 250(40) и 300(50) cm^{-1} для состояний (1,0), (2,0) и (0,1), соотв. Из сравнения эксперим. данных с результатами модельных расчетов полученные МВ-данные отнесены к конформеру типа антипериплоского (транс)-этилцианата.
С. Н. Мурзин

И.И.

X. 1990, № 14

CH₃NO₃

[om. 33706]

1989

Spieckermann Z., Lutter
D.H.,

u.n.

Z. Naturforsch. 1989,
44a, 1087-1096

C_2H_5OCN

1989

н/б спектр,
к. анал.
исслед. в
областной
химической

112: 44547u The microwave spectrum of ethyl cyanate. Sakaizumi, Takeshi; Mure, Hiroki; Ohashi, Osamu; Yamaguchi, Ichiro (Fac. Sci. Technol., Sophia Univ., Tokyo, Japan 102). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 138(2), 375-82 (Eng). The microwave spectra of EtOCN and its ^{15}N species generated by reacting EtOC(S)NH₂ with HgO were obsd. at 8-40 GHz. The rotational consts. for normal and ^{15}N species were detd. The dipole moments obtained for normal species are $\mu_a = 4.70 \pm 0.18$, $\mu_b = 0.38 \pm 0.15$, and $\mu_{total} = 4.72 \pm 0.33$ D. The obsd. reaction product was antiperiplanar (*trans*)-EtOCN.

с.А.1990, 112, N 6

(Om. 32 982)

1989

$(CH_3)_2CHONO$

Veken B.J. Van der
crympe and Maas R.,

J. Mol. Struct. (Theo-
chem), 1989, 200, 413-44)

Vibrational and ● Conformatio-

nal analysis of isopropyl-
pylinitrite.

$\text{CO}_2 \dots \text{HCN}$

1990

23 Б1150. Инфракрасная спектроскопия и неэмпирическая теория структурных изомеров $\text{CO}_2\text{—HCN}$. Infrared spectroscopy and ab initio theory of the structural isomers of $\text{CO}_2\text{—MCN}$ / Dayton D. C., Pedersen L. G., Miller R. E. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 7.— С. 4560—4570.— Англ.

Методом оптотермич. детектирования получены ИК-спектры, отвечающие внутримолек. валентным колебаниям (ВК) C—H линейного (I) и T -образного (II) изомеров комплекса CO_2 (III) с HCN (IV). Методом теории возмущений Мёллера—Плессета 2-го порядка в базисах 6-31ГФ**, 6-31+ГФ(2р, 2d) и D95** оптимизированы геометрии и рассчитаны гармонич. колебат. частоты и интенсивности ВК C—H I—IV. Помимо I и II, на потенциальной ПВ комплекса обнаружен еще один, менее стабильный изомер с параллельным расположением молекул мономеров. Общее согласие расчета с экспериментом весьма хорошее, хотя сдвиги частот при комплексообразовании и силовые постоянные межмолек. ВК чувствительны к выбору базисного набора.

В. Я. Беспалов

М.А-

Х. 1991, № 23

$\text{CO}_2\text{-HCN}$

1990

113: 200-429k Infrared spectroscopy and ab initio theory of the structural isomers of carbon dioxide-hydrogen cyanide. Dayton, D. C.; Pedersen, L. G.; Miller, R. E. (Dep. Chem., Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(7), 4560-70 (Eng). IR spectra were obtained for the linear and T-shaped isomers of $\text{CO}_2\text{-HCN}$ using the optothermal detection method. These spectra correspond to the intramol. C-H stretching vibration in each isomer. The IR results are consistent with the structures detd. previously from microwave spectroscopy and provide addnl. data that is helpful in making meaningful comparisons with theory. Ab initio calens. were also carried out for this system using 3 different basis sets. The agreement between the exptl. and calcd. structures is good for all 3 basis sets, while the vibrational frequency shifts (scaled to the monomer) and the intramol. stretching force consts. are much more basis set dependent. Nevertheless, the overall agreement between expt. and ab initio theory is very good.

спрыкнепа,
дд.н.

с. А. 1990, 113, N 22

CH₃CH₂ONO₂

1990

113: 122800h Far-infrared spectra and barriers to internal rotation of ethyl nitrate. Durig, J. R.; Lindsay, N. E. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *Spectrochim. Acta, Part A* 1990, 46A(7), 1125-35 (Eng). The far-IR spectra of gaseous and solid Et nitrate, CH₃CH₂ONO₂, was recorded from 500 to 50 cm⁻¹. The fundamental asym. torsion of the trans conformer which has a heavy atom plane has been obsd. at 112.50 cm⁻¹ with 2 excited states falling to lower frequencies, and the corresponding fundamental torsion of the gauche conformer was obsd. at 109.62 cm⁻¹ with 2 excited states also falling to lower frequencies. The results of a variable temp. Raman study indicate that the trans conformer is more stable than the gauche conformer by 328 ± 96 cm⁻¹ (938 ± 275 cal mol⁻¹). An asym. potential function governing the internal rotation about the CH₂O bond is reported which gives a trans to gauche barrier of 89.1 ± 15 cm⁻¹ (2.56 ± 0.04 kcal mol⁻¹) and a gauche to gauche barrier of 3063 ± 68 cm⁻¹ (8.76 ± 0.20 kcal mol⁻¹) with the trans conformer more stable by 22 ± 148 cm⁻¹ (0.63 ± 0.42 kcal mol⁻¹). transitions arising from the sym. CH₃ and NO₂ torsions are obsd. for both conformers, from which the threefold and twofold periodic barriers to internal rotation were calcd. For the trans

UK-chemp,

M.N.

C.A. 1990, 113, N14

conformer the values are 1002 cm^{-1} ($2.87\text{ kcal mol}^{-1}$) and $2355 \pm 145\text{ cm}^{-1}$ ($6.73 \pm 0.42\text{ kcal mol}^{-1}$) and for the gauche conformer they are 981 cm^{-1} ($2.81\text{ kcal mol}^{-1}$) and $2736 \pm 532\text{ cm}^{-1}$ ($7.82 \pm 1.81\text{ kcal mol}^{-1}$) for the CH_3 and NO_2 rotors, resp. These results are compared to the corresponding quantities for some similar mols.



HCN-(CO₂)₂

1990

113: 161399d Rotational spectrum and structure of the hydrogen cyanide-carbon dioxide (CO₂)₂ trimer. Gutowsky, H. S.; Chen, Jane; Hajduk, P. J.; Ruoff, R. S. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(20), 7774-80 (Eng). Rotational spectra were obsd. and rotational consts. detd. for HCN-(CO₂)₂, H¹³CN-(CO₂)₂, HC¹³N-(CO₂)₂, and HCN-¹³CO₂CO₂ by using the Fourier transform, Flygare/Balle Mark II microwave spectrometer with a pulsed nozzle. Less extensive observations were made of DCN-(CO₂)₂, HCN-(¹³CO₂)₂, and 2 ¹⁸O-substituted isotopic species. The rotational consts. found for the parent asym. top are 1852.844, 1446.159, and 981.48 MHz for A, B, and C and -0.1035, -0.0297, -0.0241, -0.0190, and -0.0066 MHz for τ_1 , τ_2 , τ_{12} , τ_{13} , and τ_{23} , resp. The isotopic substitution reveals a ground-state geometry with the C₂ symmetry of the slipped parallel (CO₂)₂ subunit and having the HCN along the C₂ axis, the N end closest to the (CO₂)₂. The C₂ symmetry was confirmed by the absence of ν_0 and ν_c states as predicted for 2-fold symmetry with only equiv. bosons off-axis. The 2 C's of the (CO₂)₂ lie in a plane $R = 3.093$ Å below the center of mass of the HCN. The C-C distance in this subunit is 3.522 Å, which is 0.077 Å shorter than reported for the free (CO₂)₂ dimer. An

frauzam-
Czekma,

M.A.

C.A. 1990, 113, N18

inertial anal. shows the individual CO₂'s to be counterrotated by $\gamma = 20.3^\circ$ out of the ac plane contg. the C's, the inner O's rotated away from the HCN. The OCC "clip" angle β is 60.8° in the (CO₂)₂. The torsional oscillations of the HCN are anisotropic, with an av. displacement of 12.4° , as detd. from isotopic substitution and the ¹⁴N hyperfine structure. Virtually all of the hyperfine components are doublets sepd. by 10-200 kHz. The doubling was attributed to an inversion of the clusters by a 140° counterrotation of the CO₂'s. The inversion does not affect the dipole moment of the cluster, so the obsd. doubling is the difference in tunneling splittings of the rotational states for each transition.



HCONH_2

1990

Hildenbrandt P.,
Buboi M., et al.,

Vi J. Phys. Chem. 1990, 94(6),
2274-9.

Ultraviolet resonance Raman
spectroscopy ~~of~~ formamide,
C.A. 1990, 112, N16, 148076f

C-N-H-O

1990

113: 179304d Enthalpies of combustion of phenazine N-oxide, phenazine, benzofuroxan, and benzofurazan: the dissociation enthalpies of the (N-O) bonds. Leitao, M. Luisa P.; Pilcher, G.; Acree, W. E., Jr.; Zvaigzne, Anita I.; Tucker, Sheryl A.; Ribeiro da Silva, Maria D. M. C. (Dep. Chem., Univ. Manchester, Manchester, UK M13 9PL). *J. Chem. Thermodyn.* 1990, 22(9), 923-8 (Eng). The std. ($p^\circ = 0.1$ MPa) molar enthalpies of combustion at 298.15 K were measured by static-bomb calorimetry and the std. molar enthalpies of sublimation at 298.15 K were measured by microcalorimetry for phenazine, benzofurazan, and their corresponding N-oxides. From the std. molar enthalpies of formation of the gaseous compds., the molar dissecn. enthalpies of the (N-O) bonds were derived.

(ΔH_f)

C.A. 1990, 113, N 20

CH_2NNO_2

1990

7 Д167. Неэмпирическое изучение CH_2NNO_2 методом конфигурационного взаимодействия с набором исходных конфигураций. Отщепление HONO в сравнении с разрывом связи NN. Ab initio multireference configuration interaction study of CH_2NNO_2 . HONO elimination vs NN bond fragmentation / Mowrey R. C., Page M., Adams G. F., Lengsfeld (III) H. H. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 3.— С. 1857—1864.— Англ.

С помощью метода МК ССП в варианте полного пространства активных орбиталей и метода КВ с набором исходных конфигураций, учитывавшим вклады конфигураций, одно- и двукратно возбужденных по отношению к исходным, изучена поверхность потенц. энергии (ППЭ) молекулы CH_2NNO_2 . Рассмотрены 2 возможных механизма процесса термич. распада CH_2NNO_2 : 1) молекулярной диссоциации ($\text{CH}_2\text{NNO}_2 \rightarrow \text{HONO} + \text{HCN}$) и 2) разрыва связи NN ($\text{CH}_2\text{NNO}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{N} + \text{NO}_2$). Найдено, что величина энергии активации (ЭА) для молекулярной диссоциации равна 31 ± 4 ккал/моль, что не-

М.П.

ф. 1991, № 7

сколько ниже рассчитанной величины ЭА для разрыва
связи NN, которая равна 35 ± 4 ккал/моль. Сделан вы-
вод о предпочтительности механизма молекулярной
диссоциации в процессе термич. распада CH_2NNO_2 . От-
мечено, что этот вывод противоположен теоретич. пред-
сказаниям, сделанным ранее другими исследователями,
однако, он согласуется с последними экспериментами с
молекулярными пучками.

А. И. К.

NNO-HCN

Om 34 424a"

1990

48 cmcm,
transam-
nscmodH.

/112: 207004f Rotational transition and quadrupole coupling measurements on the nitrous oxide-hydrogen cyanide (NNO-HCN) complex. Pauley, D. J.; Roehrig, M. A.; Kukolich, S. G. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 167(1-2), 57-61 (Eng). Seven a -dipole and 7 b -dipole transitions were measured for 1 isomer of the NNO-HCN complex using a pulsed-beam, Fourier transform microwave spectrometer. Rotational consts. (in MHz) $A + \Delta_K = 10326.3(4)$, $B = 2814.32(14)$, and $C = 2201.00(12)$ and distortion consts. $\Delta_J = 0.014(8)$ and $\Delta_{JK} = 0.14(6)$ were obtained by fitting the obsd. transition frequencies. A quadrupole coupling strength due to the N atom of HCN of $eQq_{aa} = 1.97 \pm 0.05$ MHz was obtained by fitting low- J transitions. Approx. structural parameters were obtained using moments of inertia and quadrupole coupling data.

C.A. 1990, 112, N22

NNO-HCN

1990

¹⁵NNO-HCN

113: 200379u Microwave spectra and structures of the nitrous oxide-hydrogen cyanide (NNO-HCN, ¹⁵NNO-HCN, and NNO-DCN) complexes. Pauley, D. J.; Kukolich, S. G. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(6), 3881-6 (Eng). A total of 60 *a*- and *b*-dipole rotational transitions were measured in the 4-13 GHz range for the NNO-HCN, ¹⁵NNO-HCN, and NNO-DCN bimol. complexes using a pulsed-beam, Fourier transform microwave spectrometer. Spectroscopic consts. (*A*-*D*_K), *B*, *C*, *D*_J, *D*_{JK}, *eQq*_{aa} (N of HCN), and *eQq*_{bb} (N of HCN) were obtained by fitting the obsd. transition frequencies with a 1st-order quadrupole coupling interaction Hamiltonian. The structure of the complex appears to be planar with NNO and NCH nearly parallel. It can be described with the distance *R*_{cm} between the center-of-masses of the monomer subunits, the angle *θ* between HCN and *R*_{cm}, and the angle *φ* between N₂O and *R*_{cm}. A least-squares fit to the 9 rotational consts. to obtain the structure parameters *R*_{cm}, *θ*, and *φ*, produced 3 local min. for bent structures with std. deviations of <25 MHz. A Kraitchman anal. was used to det. magnitudes of principal axes coordinates for the N of HCN, and the terminal N of NNO. The

Pauley et al.
J. Chem. Phys.

M.A. (7) 18

C.A. 1990, 113, N 22

NNO-DCN

best nonlinear least-squares fit result (structure I, lowest std. deviation of the fit = 7.2 MHz) produced the best match to the coordinates from the Kraitchman anal. The spectroscopic consts. B , C , and eQq_{aa} were used in a 2nd structural anal. to det. values for R_{cm} , θ , and ϕ . These results were compared with the above coordinates. The best least-squares fit structure parameters for the vibrationally averaged structure are $R_{cm} = 3.253(4)$ Å, $\theta = 89.1(5.4)^\circ$, and $\phi = 76.4(0.4)^\circ$. Comparisons were made with other similar weakly bound complexes.

NNO—HCN

¹⁵NNO—HCN

И.И.

Х. 1991, N 18

1990

№ 18 Б1338. Микроволновые спектры и структуры комплексов NNO—HCN, ¹⁵NNO—HCl и NNO—DCN. Microwave spectra and structures of the NNO—HCN, ¹⁵NNO—HCN, and NNO—DCN complexes / Pauley D. J., Kukolich S. G. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 6.— С. 3881—3886.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в области частот 4—18 ГГц с точностью около 3—10 кГц измерены вращат. спектры трех бимолек. комплексов NNO—HCN, ¹⁵NNO—HCN и NNO—DCN в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом квартичного центробежного искажения и ¹⁴N-ядерного квадрупольного вз-вия. При ряде допущений определена замещенная структура комплекса в виде плоской конфигурации с почти параллельной ориентацией осей NNO и HCN с небольшим наклоном. Изогнутая структура комплексов подобна структурам вандерваальсовых комплексов NNO—HF, NNO—HCl и NNO—HBr.

С. Н. Мурзин

OC-(HCN)₂

H₂O-(HCN)₂

М.П.

X. 1991, N 18

1990

18 Б1336. Вращательные спектры и структура малых кластеров, содержащих димер HCN: X-(HCN)₂ с X=CO, N₂, NH₃ и H₂O. Rotational spectra and structures of small clusters containing the HCN dimer: X-(HCN)₂ with X=CO, N₂, NH₃, and H₂O / Ruoff R. S., Emilsson T., Chuang C., Klotz T. D., Gutowsky H. S. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 9.— С. 6363—6378.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в области частот 3—15 ГГц измерены вращат. спектры тримеров OC-(HCN)₂, N₂-(HCN)₂, H₃N-(HCN)₂ и H₂O-(HCN)₂ в основном колебат. состоянии. При ряде допущений для всех тримеров определена замещенная структура. При этом по сравнению с соотв-щими димерами в тримерах X-(HCN)₂, где X=OC, N₂, H₃N и H₂O, наблюдается сокращение длин связей Δr_1 (X-HCN)=0,0684, 0,0563, 0,0838 и 0,0741 А и Δr_2 (HCN-HCN)=0,0131, 0,0133, 0,0441 и 0,0264 А, соответственно. С. Н. Мурзин

{ H₃N-N₂-(HCN)₂
(HCN)₂

CO-(HCN)₂

1990

Франк-
НОСМ-
Смукла

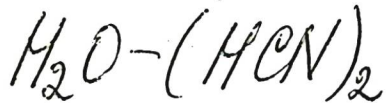
73

C.A. 1991, 114, 44

114: 32103z Rotational spectra and structures of small clusters containing the hydrogen cyanide dimer: X-(HCN)₂ with X = carbon monoxide, molecular nitrogen, ammonia, and water. Ruoff, R. S.; Emilsson, T.; Chuang, C.; Klots, T. D.; Gutowsky, H. S. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(9), 6363-70 (Eng). This work is the counterpart of a previous report on the (HCN)₂-Y trimers with Y = HF, HCl, HCF₃, and CO₂. Rotational spectra were obsd. for several isotopic species of the OC-, N₂-, H₂N-, and H₂O-(HCN)₂ trimers, using a pulsed nozzle, Fourier transform Balle/Flygare microwave spectrometer. The structures are basically composites of those reported for the (HCN)₂ and X-HCN dimers. The trimers are effectively axially sym., but have some shrinkage of dimensions. Rotational consts. found for the main isotopic species of each trimer are: For X = OC, a B₀ of 421.142 MHz and D_J of 110 Hz; for X = N₂, 435.573 MHz and 155 Hz; for X = H₂N, a sym. top, a B₀ of 675.777 MHz, D_J of 180 Hz, and D_{JK} of 41.1 kHz; and for X = H₂O, with C_{2v} symmetry, a (B₀ + C₀)/2 of 667.028 MHz, (B₀ - C₀)/2 of 0.617 MHz, D_J of 173 Hz, and a D_{JK} of 62.9 kHz. The rotational consts. for the isotopic species of each trimer were used to det. the distances r₁ and

r_2 between the centers of mass (c.m.) of adjacent monomers, r_1 being that for X-HCN and r_2 that for $(\text{HCN})_2$. For X = OC, N₂, H₃N, and H₂O the shrinkages found in r_1 are 0.023, 0.056, 0.084, and 0.074 Å, resp., and in r_2 0.013, 0.013, 0.044, and 0.026 Å. The ¹⁴N quadrupole coupling consts. were detd. by selective ¹⁵N substitution for most of the nitrogen sites in the trimers. The effects of charge redistribution in the trimers were sepd. from those of torsional oscillations in several instances including N₂ in N₂-(HCN)₂.





1990

Ruoff R.S.,
Emilsson T. et al.

вращающ.
посл.,
соединения.

J. Chem. Phys. 1990,
93 (9), 6363-70.



1991
 H_2NCHO Aihara Jun-Ichi.

M.N. g. Mol. Struct. Theorchem.
1991. 228. C, 277-283.

(Cell.  $C_3H_5^-$; III)

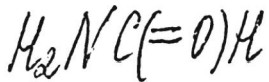
$H(OH)CN$

1991

Chipman D. M.,
Carmichael Ian et al.

et al. J. Phys. Chem. 1991. 95,
N. 12. C. 4702-4708.

( cell. H_2CN ; iii)



1991

/ 116: 159317u A theoretical study of structure and intramolecular dynamics of N-nitrosamine. Khaikin, L. S.; Perevozchikov, V. I.; Boggs, J. E.; Vilkov, L. V. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1991, 32(5), 441-7. (Russ). The structure, and rotational and inversion barriers are calcd. for $\text{H}_2\text{NN}=\text{O}$, H_2NNO_2 , and $\text{H}_2\text{NC}(=\text{O})\text{H}$ by using the GAUSSIAN-88 program and the MP2 method.

открыта

С.А. 1992, 116, N 16

CH_2NO_2^-
 CH_2NO_2

1991

— 20 B1222. Исследование 2B_1 и 2A_2 состояний молекул CH_2NO_2 с помощью ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии анионов CH_2NO_2^- . Study of the 2B_1 and 2A_2 states of CH_2NO_2 via ultraviolet photoelectron spectroscopy of the CH_2NO_2^- anion / Metz R. B., Cyr D. R., Neumark D. M. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 7.— С. 2900—2907.— Англ.

С использованием лазерного излучения с длинами волн 355 (I) и 266 (II) нм в кач-ве источников возбуждения исследованы фотоэлектронные спектры (ФЭС) анионов CH_2NO_2^- и CD_2NO_2^- . Проведен детальный анализ полученных спектров на основе данных неэмпирич. расчетов электронной и геометрич. структур CH_2NO_2^- и CH_2NO_2 . В ФЭС I идентифицированы компоненты колебат. структур полностью симм. ν_3 и ν_4 колебаний группы NO_2 (1292 ± 25 и $954 \pm 25 \text{ см}^{-1}$), а также крут. кол. Сродство к электрону

(H) (X)

Х. 1991, № 20

CD_2NO_2 , CD_2NO_2^-

для CH_2NO_2 и CD_2NO_2 оценено в $2,475 \pm 0,010$ и $2,480 \pm 0,010$ эВ, соотв. Найдено, что при переходе от CH_2NO_2 к CH_2NO_2^- величина торсионного барьера увеличивается от 1250 до 25 000 см^{-1} . Сделан вывод, что С—N связь является однократной в основном состоянии CH_2NO_2 и двойной — в анионе CH_2NO_2^- . В ФЭС II обнаружена особенность, к-рая отнесена к ранее не наблюдавшемуся возбужденному $^2\text{A}_2$ состоянию CH_2NO_2 , лежащему на 1,591 эВ выше основного состояния. Библ. 34.

О. А. Басченко

CH_2NO_2^-
 CD_2NO_2^-

1991

114: 153341j Study of the $^2\text{B}_1$ and $^2\text{A}_2$ states of nitromethyl free radical via ultraviolet photoelectron spectroscopy of the nitromethyl(1-) anion. Metz, R. B.; Cyr, D. R.; Neumark, D. M. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Phys. Chem.* 1991, 95(7), 2360-7 (Eng). The photoelectron spectra of CH_2NO_2^- and CD_2NO_2^- at 355 and 265 nm were obtained. The 355-nm spectra show extended progressions in the NO_2 sym. stretch mode and the previously unobserved torsion mode. The exptl. results were analyzed with the aid of ab initio calcs. to det. the change in geometry upon detachment of CH_2NO_2^- . Anal. of the spectra yields an electron affinity of 2.475 ± 0.010 eV for CH_2NO_2^- and torsion barriers of 1250 cm^{-1} in CH_2NO_2 and $25,000\text{ cm}^{-1}$ in CH_2NO_2^- . This supports M. E. Jacox's conclusion that the ground state of CH_2NO_2 has a C-N single bond and indicates a C-N double bond in the anion. The 265-nm photoelectron spectrum of CH_2NO_2^- was obtained and reveals the previously unobserved $^2\text{A}_2$ electronic state of CH_2NO_2 . This state lies 1.591 eV above the ground state and has a geometry similar to that for the anion.

CH₂NO₂⁻,
Ac, u.n.

C.A. 1991, 114, N16

HC(O)NCO Nguyen Minh Tho, 1991
Majnal M. R., et al.,

структура,
реакция.

THEOCHEM 1991, 77,
185-93.

(см. ● ccc(O)NCO; III)

CH_3ONHCHO

1991

уф спектры,
структура,
м.н.

115: 145269x. Microwave spectrum and molecular structure of N-methoxyformamide. Styger, C.; Caminati, W.; Ha, T. K.; Bauder, A. (Lab. Phys. Chem., Edg. Tech. Hochsch., CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 148(2), 491-505 (Eng). The microwave spectra of N-methoxyformamide (CH_3ONHCHO) and 3 of its deuterated species were investigated in the 12-55 GHz range. Rotational transitions of an extended conformer were assigned in which all the heavy nuclei except for the carbon of the Me group lie in or near a plane. The normal isotopic species is accidentally an almost prolate sym. top with an asymmetry parameter of -0.998. The deuterated species are less sym. The permanent elec. dipole moment was detd. from quant. Stark measurements. No hyperfine structure of the rotational transitions due to the ^{14}N nuclear quadrupole moment were resolved. Several vibrational satellites belonging to low-frequency torsional motions were measured but no splittings due to the internal rotation of the Me group were obsd. suggesting a high V_3 barrier. A plausible structure of N-methoxyformamide was deduced from the combined data of moments of inertia and of *ab initio* calcns.

C.A. 1991, 115, N14

NNO-HCN

1992

198967w The nitrous oxide-hydrogen cyanide (NNO-HCN) complex. Ab initio calculations with the coupled-cluster method and first-order correlation orbitals. Adamowicz, Ludwik. *J. Chem. Phys.* 100(1), 165(2-3), 281-6 (Eng). Four equil. conformers are identified for the NNO-HCN complex. Coupled cluster calcs. with the first order correlation orbitals indicate that the oxygen-hydrogen-bonded linear structure has the lowest energy, by 0.26 kcal/mol lower, than the exptl. characterized "slipped parallel" structure. The result lends support to suggestions that there should be at least two stable isomers of NNO-HCN in the gas phase.

ab initio
(parum)

©.A.1992, 117, N 20

Меморизування

1992

120: 147432x High resolution infrared spectroscopy of the ν_1 , ν_2 , and ν_4 fundamental bands of methylisocyanide. Bernheim, R. A.; He, Chun; Faust, C. M.; Elshakre, M.; Gold, L. P. (Dep. Chem., Penn State Univ., University Park, PA 16802 USA). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1992. 1711(High-Performance Optical Spectrometry), 27-8* (Eng). The high-resoln. IR band spectra of the ν_1 , ν_2 , and ν_4 fundamentals of methylisocyanide have been measured with an interferometric spectrometer at an unapodized resoln. of 0.004 cm^{-1} . The spectra, yielding fully J and K-resolved transitions, are analyzed and fit to spectroscopic consts. In each case some of the major perturbations were identified.

(Di, UK)

C.A. 1994, 120, N12

№0 - МСН.

1992

96 Д81. Структурные исследования двух изомерных форм N_2O-HCN . Structural determinations for two isomeric forms of N_2O-HCN / Dayton D. C., Pedersen L. B., Miller R. E. // J. Phys. Chem.— 1992.— 96, № 3.— С. 1087—1095.— Англ.

Для идентификации двух изомерных форм бинарного комплекса N_2O-HCN проведены исследования методом ИК-спектроскопии высокого разрешения на молекулярных пучках. Показано, что более распространенный изомер имеет две мономерные группы, паралл. друг другу. Менее распространенный изомер, предположительно имеющий более высокую энергию, является линейным, причем мономерная группа HCN действует в нем как кислота. Проведены неэмпирич. расчеты комплекса с использованием программы Гауссиан-88 в различных базисах. Найдено количеств. согласие неэмпирических и эксперим. данных для вращательных постоянных, колебательных частот и относит. стабильностей двух исследованных изомеров.

М.П.

ф. 1992, №6

$H_2O \cdot HCN$

1992

(146 enclmp)

116: 244165n Structure and dynamics of the water-hydrogen cyanide (H_2O -HCN) dimer. Gutowsky, H. S.; Germann, T. C.; Augspurger, J. D.; Dykstra, C. E. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(8), 5808-16 (Eng). This report extends an earlier microwave study of the H_2O -HCN weakly bonded dimer by A. C. Legon (1984). The H-H(H_2O) hyperfine structure (hfs) in rotational transitions of H_2O -HC ^{15}N and the ^{17}O hfs in $H_2^{17}O$ -HC ^{15}N was resolved using a modified Balle/Flygare Fourier transform microwave spectrometer with a pulsed supersonic nozzle as the sample source. Also, the rotational const. of H_2O -H ^{13}C N were detd. The hfs, particularly that of ^{17}O , and a substitution anal., are used to clarify the dynamics of the dimer. The analyses support a pseudoplanar, H_2O -HCN, C_{2v} structure in which the H_2O and HCN experience in-plane and out-of-plane bending vibrations of modest on av. amplitude. The out-of-plane H_2O bend is 20° and the in-plane is perhaps half that. The bending of the HCN is isotropic, with an amplitude of 9.4° in both directions. The mol. mechanics for clusters (MMC) model was used to explore the potential energy surfaces (PES) for the

C.A. 1992, 116, N 24

weak-bonding coordinates. The calcd. equil. structure differs greatly from the exptl., with the H_2O rotated out of plane by 60° in one direction and the HCN by 20° in the other (cis). The difference is shown by the ^{17}O hfs and its dependence upon the H_2O bending to be caused by the zero-point vibrational averaging of the structure, which extends over the shallow sym. double min. in the PES. The interaction energy is large ($\sim 1590 \text{ cm}^{-1}$), but the PES is relatively flat in the bending coordinates over large regions between the equil. min., making the vibrational avs. differ substantially from the equil. values.



$H_2O \cdot NCCN$

1992

/ 116: 264631q The rotational spectrum, internal rotation, and structure of water-ethanedinitrile and water- d_2 -ethanedinitrile (H_2O -NCCN and D_2O -NCCN). See, Seonmoon; Suni, Ian I.; Klemperer, William (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(8), 5577-84 (Eng). The radio frequency and microwave spectra of H_2O -NCCN and D_2O -NCCN were measured using mol. beam elec. resonance spectroscopy. The spectrum is characteristics of a planar T-shaped asym. top in which the H_2O subunit exhibits hindered twofold internal rotation. The spectroscopic parameters for H_2O -NCCN are $A = 4692.11(2)$ MHz, $A' = 4689.45(25)$ MHz, $B = 4258.06(1)$ MHz, $C = 2219.34(1)$ MHz, and $\mu_a = 2.06(3)$ D and for D_2O -NCCN are $A = 4644.31(27)$ MHz, $B = 3822.76(10)$ MHz, $C = 2084.86(10)$ MHz, and $\mu_a = 2.1617(10)$ D. The H_2O subunit is bound to NCCN through the oxygen atom with a twofold barrier of $285(6)$ cm^{-1} hindering the internal rotation of H_2O about the a axis of the complex.

Trans. crankp.
A, B, C, μ_a in D.
 V_0

C. A. 1992, 116, N26

HC:CNCO

1992

мв спектр,
структурные
параметры.

(116: 161402m The microwave spectrum and semirigid bender analysis of isocyanatoethyne, HC:CNCO. Ross, Stephen C.; Cooper, Terry A.; Firth, Steven; Kroto, Harold W.; Walton, David R. M. (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E5B 5A3). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 152(1), 152-67 (Eng). HC:CNCO was prepd. and its microwave spectrum recorded. The mol. behaves as a slightly asym. prolate rotor, the spectrum indicating deviations from linearity in the equil. structure. Vibrationally excited states with ≤ 3 quanta of the CNC bending mode were obsd., allowing anal. of the spectrum to be carried out using a semirigid bender model. The results of this anal. give the following structural parameters: $r(\text{C:C}) = 1.2237(20)$ Å, $r(\text{C-N}) = 1.3025(54)$ Å, $r(\text{N=C}) = 1.2139(60)$ Å, $r(\text{C=O}) = 1.1741(48)$ Å, $\angle(\text{CNC}) = 140.67(48)^\circ$ and, $\angle(\text{NCO}) = 170.02(93)^\circ$, with all other bond angles assumed to be 180° . The barrier to linearity was calcd. to be $537.2(5.4)$ cm^{-1} .

C.A. 1992, 116, 116

N_2O-HCN

1992

118: 220122m Nitrogen oxide (N_2O)-hydrogen cyanide and carbon monoxide-acetylene: two associating systems with remarkable low-temperature relative-stability interchanges. Slanina, Zdenek; Adamowicz, Ludwik (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *THEOCHEM* 1992, 95, 133-40 (Eng). Relative stabilities of four and three min.-energy structures in the N_2O-HCN and $CO-C_2H_2$ systems, resp., were evaluated in terms of partition functions. Structural and vibrational parameters originated from the 2nd-order Moeller-Plesset perturbation treatment with the 6-31 + + G^{**} basis set. Relative energies were further refined within the coupled cluster method and 1st-order correlation orbitals. Three relative stability interchanges were revealed in each system. The lowest interchange points appear at temps. of 114 K and 13 K in the N_2O-HCN and $CO-C_2H_2$ systems, resp.

(meop. pacem)

41 Δ

$CO-C_2H_2$

C.A. 1993, 118, 1422

C₂H₅NO

М.П.

X. 1992, N 13

1992
13 Б1034. Структура ацетамида: плоская или неплюская? Structure of acetamide: planar or Nonplanar? / Wong Ming Wah, Wiberg Kenneth B. // J. Phys. Chem.— 1992.— 96, № 2.— С. 668—671.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП исследовано влияние размера базиса на результаты расчета геометрии ацетамида (I). Расчет в базисе 6—31 ГФ предсказывает для I плоскую геометрию. Включение поляризац. sp-ф-ций на тяжелых атомах приводит к сильному искажению конформации метильной и аминовой групп. Проанализировано изменение электронной заселенности на атомах при переходе от плоской к неплюской конформации I. Относит. стабильность конформаций оценена с учетом электронной корреляции по теории возмущений МП2 КВОД для базиса 6—311++ГФ**. Минимуму полной энергии I отвечает неплюская структура с частично пирамидальной NH₂-группой, в к-рой одна С—Н связь перпендикулярна плоскости тяжелых атомов. Энергетич. предпочтительность неплюской конформации объяснена взаимодействием неподеленной электронной пары атома N и одного из протонов группы CH₃.
А. Н. Исаев

$\text{CH}_2(\text{NO}_2)_2$

1992

18 Б1022. Неэмпирический расчет потенциалов вращения и устойчивости молекулярных структур $\text{CX}_2(\text{NO}_2)_2$ ($\text{X}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}$) /Wu Nianci, Dong Nan, Cai Guoqiang, Yu Qingsen, Zong Hanxing //Ханчжоу дасюэ сюэбао. Цзыжань кэсюэбань =J. Hangzhou Univ. Natur. Sci. Ed .—1992 .—19, № 2 .—С. 172—178 .—Кит. ;рез. англ.

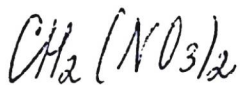
В базисе СТО-3ГФ проведен неэпирич. квантово-мех. расчет молекул $\text{CH}_2(\text{NO}_2)_2$ (I), $\text{CF}_2(\text{NO}_2)_2$ (II), $\text{CCl}_2(\text{NO}_2)_2$ (III). Рассчитаны хартри-фоковские энергии I—III как ф-ции двух углов вращения вокруг двух одинарных связей в молекулах I—III, оценены потенциалы заторможенного внутр. вращения, оптимизированы геометрич. параметры для 5 наиболее стабильных конформаций I—III.

Г. М. Курамшина

М.П.

(+2) 12

Х. 1993, N 18



1992

118: 198665s Ab initio study of the rotational potential and stabilities of molecular structures of halonitromethanes $\text{CX}_2(\text{NO}_2)_2$ ($\text{X} = \text{H}, \text{F}, \text{Cl}$). Wu, Nianci; Dong, Nan; Cai, Guoqiang; Yu, Qingsen; Zhong, Hanxing (Dep. Chem., Hangzhou Univ., Hangzhou, Peop. Rep. China). *Hangzhou Daxue Xuebao, Ziran Kexueban* 1992, 19(2), 172-8 (Ch). The potential energy for internal mol. rotation and the stabilities and structures of $\text{CH}_2(\text{NO}_2)_2$, $\text{CF}_2(\text{NO}_2)_2$, and $\text{CCl}_2(\text{NO}_2)_2$ were studied by the ab initio method at the STO-3G level. The factors affecting on mol. structures were also analyzed.

no metus.

op - use;

neop. pa chem

(42) ☒C. A. 1993, 118, N 20

$\text{CO}_2 \cdot \text{HCN}$

1992

КОМУНКА

117: 97639k Ab initio studies on the molecular complexes between carbon dioxide and hydrogen cyanide, ammonia or water. Xu, Sen; Fang, Decai; Fu, Xiaoyuan (Dep. Chem., Beijing Norm. Univ., Beijing, Peop. Rep. China 100875). *Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao* 1992, 13(1), 78-80 (Ch). All of the geometries of the title complexes are optimized by the energy gradient technique based on ab initio SCF MO by using 3-21G basis. The results show that the mol. complexes $\text{CO}_2\text{-HCN}$, $\text{CO}_2\text{-NH}_3$, $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ all have T-shaped equil. structures. The van der Waals' bond lengths of the three complexes are 0.2865, 0.2775 and 0.2543 nm, resp. The binding energies are 14.8, 27.0 and 31.2 kJ/mol, resp. The results of energy decompn. show that the interaction energy INT is mainly contributed by the electrostatic interaction ES and is slightly by the charge transfer energy CT.

моп. рачет
структ.
стабильно стб

(+2) $\otimes$

С.А. 1992, 117, N 10

CNCH₂OCH₃ (K, 2)

1993

120: 203161x Raman and infrared spectra, conformational stability, barriers to internal rotation, ab initio calculations and vibrational assignment of cyanomethyl methyl ether. Durig, J. R.; Tang, Qun; Phan, H. V. (Dep. Chem., Univ. Missouri, Kansas City, MO 64110 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1993, 24(12), 851-65 (Eng). The Raman spectra (3400-10 cm⁻¹) of gaseous, liq. and solid and the IR spectra (3500-35 cm⁻¹) of gaseous and solid cyanomethyl Me ether (methoxyacetonitrile), (CN)CH₂OCH₃, were recorded. The far-IR spectrum of the gas was recorded at a resolu. of 0.10 cm⁻¹ in the region from 370 to 30 cm⁻¹. The fundamental asym. torsions of the gauche and trans conformations were obsd. at 112.5 and 104.6 cm⁻¹, resp., the the gauche form having two excited-state transitions falling to lower wavenumber. From these data, along with the enthalpy difference and gauche dihedral angle, the asym. torsional potential function was calcd. with the following coeffs.: $V_1 = 153 \pm 9$, $V_2 = -619 \pm 8$, $V_3 = 1000 \pm 2$ and $V_4 = -100 \pm 2$ cm⁻¹. From this potential function, the trans to gauche, gauche to

CKP, Pi, along

V₀, Δ₆H

C.A. 1994, 120, N16

gauche and gauche to trans barriers were detd. as 512, 1592 and 951 cm^{-1} , resp., with an enthalpy difference of $439 \pm 19 \text{ cm}^{-1}$ ($1255 \pm 54 \text{ cal mol}^{-1}$) and the gauche conformer the more stable form in the gas phase. The enthalpy difference was also detd. exptl. from variable-temp. studies of the Raman spectrum and a value of $337 \pm 44 \text{ cm}^{-1}$ ($964 \pm 126 \text{ cal mol}^{-1}$) was obtained for the liq. with the gauche form more stable. Addnl., the sym. Me torsions of both gauche and trans forms were obsd. at 170.4 and 217.6 cm^{-1} , resp. On the basis of a one-dimensional model, the barrier to internal rotation of the Me moiety was detd. as 839 cm^{-1} ($2.40 \text{ kcal mol}^{-1}$) for the gauche conformer and 947 cm^{-1} ($2.71 \text{ kcal mol}^{-1}$) for the trans form. A complete vibrational assignment is proposed for a gauche-trans equil. in the gas and liq. phases from the Raman ($3200\text{--}10 \text{ cm}^{-1}$) and IR ($3200\text{--}35 \text{ cm}^{-1}$) spectra, but in the solid state only the gauche conformer remains. The structural parameters, conformational stability, barriers to internal rotation and fundamental vibrational frequencies which were detd. exptl. were compared with those obtained from ab initio calcs. employing the RHF/4-31G*, RHF/6-31G* and MP2/6-31++G** basis sets. These results were compared with the corresponding quantities obtained for some similar mole.

CH₃C(O)NCO (24, K)

1993

119: 55617y Raman and infrared spectra, conformational stability, barriers to internal rotation and ab initio calculations of acetyl isocyanate. Durig, J. R.; Guirgis, G. A.; Krumler, K. A.; Sullivan, J. F. (Dep. Chem. Biochem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1993, 24(5), 259-73 (Eng). The Raman (3100-10 cm⁻¹) and IR (3100-30 cm⁻¹) spectra of acetyl isocyanate, CH₃C(O)NCO, and the d₂-isotopomer were recorded for the gases and solids. Addnl., the Raman spectra of the liqs. were recorded and qual. depolarization values were obtained. The obsd. bands are assigned on the basis of the more stable cis (syn) conformer (isocyanate group cis to the carbonyl bond) and less stable trans (anti) conformer in the vapor state. ΔH of the gas is estd. to be 433 cm⁻¹ [1.24 kcal mol⁻¹ (1 kcal = 4.184 kJ)] from the relative intensity of the conformer pair at 800 and 763 cm⁻¹. From the temp. dependence of the Raman spectrum of the liq., two conformer pairs were used to det. exptl. a ΔH value of 370 $\pm$ 60 cm⁻¹ (1.06 $\pm$ 0.17 kcal mol⁻¹) but now with the trans conformers the more stable form. In the annealed cryst. solid, only the trans conformer

(C.K.P., U.K., V.O.,
V.C.)

C. A. 1993, 119, N 6

remains. The fundamental asym. torsion of the cis conformer was obsd. at 79 cm^{-1} with two excited states falling to lower frequency. Utilizing these data and ΔH for the gas the potential function governing the conformer interchange was estd. A complete vibrational assignment is proposed for both conformers based on IR band contours, Raman depolarization data, group frequencies and normal coordinate calcns. The exptl. conformational stability, barriers to internal rotation and fundamental vibrational frequencies are compared with those obtained from ab initio Hartree-Fock gradient calcns. employing the RHF/6-31G* basis set and to the corresponding quantities obtained for some similar mols.

NH₄HC₄H₄O₆

1993

119: 236792m FT-IR and Raman spectra of ammonium hydrogen tartrate and potassium hydrogen tartrate crystals. Kolandaivel, P.; Selvasekarapandian, S. (Dep. Phys., Bharathiar Univ., Coimbatore, India). *Cryst. Res. Technol.* 1993, 28(5), 665-70 (Eng). FT-IR and Raman spectra of ammonium hydrogen tartrate [NH₄HC₄H₄O₆] and potassium hydrogen tartrate [KHC₄H₄O₆] have been measured. Vibrational assignments have been made for both the internal and external vibrations. Because of the free rotation of the NH₄⁺ ion, it forms only weak hydrogen bonds with the oxygen atom.

FT-IR u
CKA, Di

□ KH₄HC₄H₄O₆
(ti)

C. A. 1993, 119, N 22

$H_2C:CHCH_2NCO$

1993

118: 112098z Microwave spectrum of allyl isocyanate: gauche conformer. Maiti, S.; Jaman, A. I.; Nandi, R. N. (Saha Inst. Nucl. Phys., Calcutta, 700 064 India). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 158(1), 8-13 (Eng). The ground state microwave rotational spectrum of allyl isocyanate ($H_2C:CHCH_2NCO$) in the frequency range 12.4-26.0 GHz is reported. Anal. of a-type R-branch transitions gives the rotational consts. $A = 8019.78$ MHz, $B = 2088.85$ MHz, and $C = 1757.40$ MHz. The assigned transitions are consistent with the C-gauche conformer of the mol. having the NCO group cis with respect to the C-C bond.

(yb cncmp)

C.A. 1993, 118, N12

Сим. - $C_6(OH)_3(NO_2)_3$

1993

120: 144666r Electron diffraction study of the gas-phase molecular structure of sym- $C_6(OH)_3(NO_2)_3$. Shishkov, I. F.; Sadova, N. I.; Vilkov, L. V. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, Russia). *Kristallografiya* 1993, 38(6), 283-6 (Russ). The mol. structure of trinitrofluoroglycine in gas phase was studied by electron diffraction. Only the N=O bond length and the CC₂C and ONO bond angles could be detd. with high accuracy. Comparison of the results with those for nitrophenol indicate the possibility of the existence of H bonds in trinitrofluoroglycine. The H bond is instrumental in detg. the planar structure of the mol.

А. группировка
исследования

С.А. 1994, 120, N12

N,N-dimethylformamide

1993



118: 220158c Molecular structure of *N,N*-dimethylformamide from gas-phase electron diffraction. Scholtz, Gyorgy; Hargittai, Istvan (Struct. Chem. Res. Group, Hung. Acad. Sci., H-1431 Budapest, Hung.). *J. Phys. Chem.* 1993, 97(19), 4966-9 (Eng). The mol. structure of gaseous *N,N*-dimethylformamide has been detd. by electron diffraction, yielding the following bond lengths (r_e) and bond angles (r_a) with estd. total errors: $\text{C}-\text{H}_{\text{mean}}$, 1.112 ± 0.003 Å; $\text{C}=\text{O}$, 1.224 ± 0.003 Å; $\text{C}(\text{H}_3)-\text{N}_{\text{mean}}$, 1.101 ± 0.003 Å; $\text{C}(\text{H}_3)-\text{N}-\text{C}(\text{H}_3)$, $113.9 \pm 0.5^\circ$; $\text{C}(\text{O})-\text{N}-\text{C}(\text{H}_3)_{\text{mean}}$, $121.6 \pm 0.3^\circ$. The exptl results indicate a slight nonpolarity of the nitrogen bond configuration. The angle $\text{C}(\text{O})-\text{N}-\text{C}$ syn. to $\text{C}=\text{O}$ is somewhat smaller than the other

структура,
данные эксперимента

$\text{C}(\text{O})-\text{N}-\text{C}$ angle. This and the $\text{O}-\text{H}$ distance in $\text{C}=\text{O}-\text{H}-\text{C}$, 2.40 ± 0.03 Å, suggest some attractive intramol. interaction which may influence the Me torsion in *N*-methylformamide and *N*-methylacetamide, studied by previous expts.⁶⁻⁹. Similar or shorter $\text{O}-\text{H}$ distances characterize *N,N*-dimethylacetamide and *N*-methylacetamide according to recent high-level ab initio calcns.

C. A. 1993, 18, N 22

1993

$\text{CH}_3\text{OH}-\text{NO}_2$

$\text{CH}_3\text{OH}-\text{NO}_2^+$

(Ap, ~~неправильно~~
слова)

Sunderlin L. S., et al.,

Chem. Phys. Lett., 1993,

212(3-4), ...

(calc. $\text{H}_2\text{O}-\text{NO}_2$; III)

NCCCH-CO

1993

119: 148704d High-resolution IR study of the NCCCH-CO complex. Yang, X.; Pearson, R. Z.; Scoles, G. (Dep. Chem., Princeton Univ., Princeton, NJ 08544-1009 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 204(1-2), 145-51 (Eng). The high-resoln. IR spectrum of the NCCCH-CO van der Waals mol. was investigated. The ν_1 band of the complex was recorded, analyzed and accurate mol. consta. were obtained. The H-C hydrogen bond length was detd. to be 2.615 Å, assuming that the structures of the 2 monomers remain unchanged upon complexation. An anal. of the rotational state dependence of the spectral lineshape allows the authors to obtain the predissocn. lifetime of the complex and to establish the presence of intramol. coupling enhanced predissocn. at the $J = 8$ level and around $J = 22$ of the $\nu_1 = 1$ state. Finally, the results obtained here for OC-HCCCN are compared with similar results obtained for OC-HCN in other labs.

(UK, P1)

C.A. 1993, 119, N14

CH_2NO_2

1994

№ 17 Б1041. Неэмпирическое изучение низколежащих электронных состояний радикала CH_2NO_2 . Ab initio study of the low-lying electronic states of the CH_2NO_2 radical /Cai Z.-L. //Int. J. Quantum. Chem. .—1994 .—49 ,№ 6 .—С. 781—788 .—Англ.

Неэмпирически исследованы низколежащие электронные состояния X^2B_1 , 2B_2 , 2A_2 и 2A_1 радикала CH_2NO_2 . Равновесные геометрич. параметры радикала в основном состоянии X^2B_1 определены методом КВ с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям в двухэкспонентном базисе с поляризац. ф-циями. Энергии вертикальных возбуждений, силы осцилляторов и излучат. времена жизни, рассчитанные для этих состояний также в рамках указанного приближения, находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Н. С.

Низколежащие
электронные
состояния,
 X^2B_1 , 2B_2 ,
 2A_2 , 2A_1

Х. 1994, № 17.

CH₂NO₂

1994

120: 227403d Ab initio study of the low-lying electronic states of the CH₂NO₂ radical. Cai, Z. L. (Dep. Chem., East China Inst. Technol., Nanjing, Peop. Rep. China 210014). *Int. J. Quantum Chem.* 1994, 49(6), 781-8 (Eng). Ab initio electronic structure calcns. are reported for the low-lying electronic states X²B₁, ²B₂, ²A₂, and ²A₁ of the nitromethyl radical. The geometric parameters for the ground-state X²B₁ are predicted by MRSDCI calcns. with a double zeta plus polarization basis set. The vertical excitation energies for these electronic states are detd. using MRSDCI/DZ+P calcns. at the ground-state equil. geometry and in agreement with the recent exptl. data obtained via PES of the CH₂NO₂⁻ anion. The oscillator strengths and the radiative lifetimes for these electronic states and the spin properties for the ground state are calcd. based on the MRSDCI wave functions, predicting results in good agreement with available exptl. data.

руководитель

М.А.О.С.М.

X²B₁, ²B₂,

²A₂, ²A₁

список названий, Di,
T₂, меоп. аб инициации

С.А. 1994, 120, N 18

$C_6H_5NO_2$

[DM-37413]

1994

Chen E.C.M., Wiley J.R., et al.,

J. Phys. Chem., 1994, 98, 88-94

(Ae)

C_2H_5NCO [Am. 37505]

1994

Heineking N., Grabow J.-U.,
Stahl W.,

M.N. Mol. Phys., 1994, 81, N5,
1177-1185.

The microwave  spectrum and

molecular structure of
ethylisocyanate.

C-N-D-H [Am. 37565]

1994

~~Chemical~~
~~Abstracts~~
~~Condition~~
~~Index~~
95-111 Khadikar P., Pol B., et al.,
Chimica Acta Turcica,
1994, 22, 85-95

Molecular
amplitudes of
thermodynamic
Symmetry, mean
vibration and
functions of

salicyl hydroxamic acid
(SHA).

$(\text{HNCO})_2$

1994

ab initio
расчет
структур
и стабильн.

121: 286868c A theoretical study on the hydrogen-bonded dimers of HNCO molecules. Wang, Yan; Feng, Wen-Lin; Zhang, Shao-Wen; Zhu, Wei-Xin (Chem. Dep., Beijing Normal Univ., Beijing, Peop. Rep. China 100875). *Jiegou Huaxue* 1994, 13(4), 312-15 (Eng). Ab initio method has been employed to investigate the hydrogen-bond between two HNCO mols. Two types of hydrogen-bondings in HNCO dimers have been found, one type is N-H...O, the other is N-H...N. The latter is a little stabler than that of the former. The stabilization energies of the two types of dimers are estd. to be 13KJ/mol-21KJ/mol.

C. A. 1994, 121, N24

N₃C₂H₄OH

1995

F: N3C2H4OH

P: 3

06.Д.0201. Молекулярные свойства 2-азидэтанола и 2-хлорэтилазида. Теоретическое исследование. Molecular properties of 2-azidoethanol and 2-chloroethyl azide. A theoretical study / Costa Cabral B. J., Costa M. L. // J. Mol. Struct. Theochem. - 1995. - 339. - С. 143-151. - Англ. эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах до 6-31 ГФ** с учетом электронной корреляции по МП2 исследовано электронное строение 2-азидэтанола (N[3]CH[2]CH[2]OH) и 2-хлорэтилазида (N[3]CH[2]CH[2]Cl) и их анионов. Оценены равновесная геометрия, потенциалы ионизации. Проведен конформационный анализ. Отмечена большая чувствительность результатов, в особенности относит. стабильности конформеров, к величине базиса и учету корреляции.

X. 1996, № 6

$(\text{CO}_2)_3 \cdots \text{HCN}$

1995

123: 66363k Molecular structure and internal motion in the $(\text{CO}_2)_3 \cdots \text{HCN}$ tetramer. De Almeida, Wagner B. (Dep. Quimica, U.F.M.G., 31270-901 Belo Horizonte, Brazil). *Spectrochim. Acta, Part A* 1995, 51A(4), 653-60 (Eng). The mol. structure and energetics of the $(\text{CO}_2)_3 \cdots \text{HCN}$ tetramer are detd. at the ab-initio RHF level of theory employing the split-valence 4-31G and double zeta plus polarization function (DZP) basis sets. Electron correlation effects are accounted for by second-order Moeller-Plesset perturbation theory (MP2) in a single point calcn. at the optimized HF/DZP geometry. The HCN mol. is predicted to interact with a nonplanar $(\text{CO}_2)_3$ trimer via the nitrogen end, in agreement with a recent Fourier-transform microwave study. The internal motion in the $(\text{CO}_2)_3$ nonplanar subunit has also been examd. The energy barrier for rotation of the CO_2 monomers around one of their symmetry axes is found to be 844 cm^{-1} (RHF/4-31G value), which may inhibit tunneling motion through a planar $(\text{CO}_2)_3$ arrangement.

non-planar,
freq. study,
ab initio
param

C.A. 1995, 123, N 6



1995

ab initio
pacem
сверхъядъ,
Vi

Khaikin L.S.,
Grikina O.E. et al.
Izv. Acad. Nauk,
Ser. Khim., 1995,
(11), 2135-47.

(сер. $\text{HN}(\text{NO}_2)_2$; III)

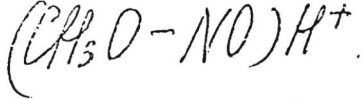
CO(NH₂)₂

1995

123: 182088y Infrared spectra and force constants of urea in the gaseous phase. Langer, Jutta; Schrader, Bernhard; Bastian, Volker; Jacob, Eberhard (Inst. Physikalische Theoretische Chemie, Univ. Essen, D-45117 Essen, Germany). *Fresenius' J. Anal. Chem.* 1995, 352(5), 489-95 (Eng). IR spectra in the gaseous phase were recorded for urea and the isotopomers urea-d₄, urea-¹⁵N₂, and urea-¹³C. On the base of these data a normal coordinate calcn. was performed, resulting in an optimized force field of urea, showing that, due to the very small intermol. forces, the internal force const. increase by evapn. This is esp. true for the C:O bond with a force const. increased by 10%.

(UK, succ. not,
Pi)

C. A. 1995, 123, N 14



1996

125: 204981e Protonated methyl nitrite. A theoretical investigation on the structure and stability of $(\text{MeO}-\text{NO})\text{H}^+$ and the proton affinity of $\text{RO}-\text{NO}$ ($\text{R} = \text{H}, \text{Me}$). Aschi, Massimiliano; Grandinetti, Felice (Dipartimento di Studi di Chimica e Tecnologia delle Sostanze Biologicamente Attive, Universita di Roma La Sapienza, P.le A. Moro, 5, 00185 Rome, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 258(1,2), 123-128 (Eng). Ab initio calcns. have been performed on the structure and stability of $(\text{MeO}-\text{NO})\text{H}^+$ and the proton affinity (PA) of $\text{RO}-\text{NO}$ ($\text{R} = \text{H}, \text{Me}$). At the MP4/6-311G**//MP2(FULL)/6-31G* level of theory, the ion-dipole adduct $\text{MeOH}-\text{NO}^+$ 1 is by far the most stable protomer. At the G2 level, the dissocn. enthalpy into MeOH and NO^+ is computed as 25.3 kcal mol⁻¹ and the PAs of $\text{MeO}-\text{NO}$ and $\text{HO}-\text{NO}$ amt. to 187 and 188 kcal mol⁻¹, resp. This finding marks a departure from the expected order and parallels the anomalous trend recently ascertained in the PAs of the strictly related $\text{RO}-\text{NO}_2$ ($\text{R} = \text{H}, \text{Me}$).



+2

структура
и свойства
молекулы

C.A. 1996, 125, N16

1) $\text{HO}-\text{NO}$ (AP)
2) $\text{CH}_3\text{O}-\text{NO}$ (AP)

[H, C, N, O]

cycles.

geom. param.

1996

J. Chem. Phys., 1996, 105, 515
p.6439

1996

F: CH₂(NH₂)(OH)

P: 3

17B162. Глобальный конформационный анализ и аномерные взаимодействия метандиола, метандиамина и аминметанола. [Исследование методами МП2 и МП4]. Global conformational analysis and the anomeric interactions of methanediol, methanediamine and aminonethanol / Chang Y.-P., Su T.-M. // J. Mol. Struct. Theochem. - 1996. - 365, 2-3. - С. 183-200. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП в трехэкспонентном корреляционно-согласованном базисе с учетом электронной корреляции в рамках МП2-МП4 и КВ рассчитаны поверхности потенциальной энергии метилизотиоцианата и силилизотиоцианата при движениях с большой амплитудой (изменение угла Х-Н-С и внутреннее вращение метильной и силильной групп). Полученные результаты согласуются с эксперим. данными и формой квазисимметричного волчка для этих молекул.

РМХ 1997

$(C_2H_5ONO_2)H^+$ [Om. 38877]

1996

Massimiliano Aschi; et al.,

Ap,
ab initio
pavet

J. Phys. Chem., 1996, 100,
18522-29.

tr. - cis-упом
HONOc N₂
CO

HONO-CO

1996

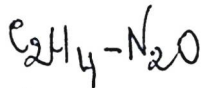
125: 21328c Matrix Infrared Spectra and ab Initio Calculations of the Nitrous Acid Complexes with N₂ and CO. Mielke, Zofia; Latajka, Zdzislaw; Kolodziej, Joanna; Tokhadze, Konstantin G. (Faculty of Chemistry, Wroclaw University, 50-383 Wroclaw, Pol.). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(28), 11610-11615 (Eng). The complexes formed by trans- and cis-HONO isomers with N and CO were obsd. and characterized in Ar matrixes. Six perturbed trans-HONO vibrations and 4 perturbed cis-HONO vibrations were identified for both the N₂ and CO complexes. The perturbation of the OH group vibrations proves that all 4 complexes are H bonded; the blue shifts of the CO vibrations in trans- and cis-HONO complexes as compared to CO monomer indicate the OC-HONO structures in which C atoms are the acceptor sites. The strength of interaction, as evidenced by the perturbation of the OH vibrational modes of the nitrous acid, increases from cis- to trans-isomer and from N to CO. Theor. studies of the structure and spectral characteristics of the complexes formed between the 2 isomers of nitrous acid and N or CO were carried out on the electron correlation level with the 6-31G(d,p) basis set. The binding energy and the calcd. spectral parameters are in very good agreement with exptl. data.

uk exptl &
manipulase

(H) 

HONO-N₂

C.A. 1996, 125, N2



~~A 4834~~

$\nu_0 = 3103.9852 \text{ cm}^{-1}$

$A'' = 0,282805$

$B'' = 0,083298$

$C'' = 0,066427$

Rhee W.,

J. Korean Phys. Soc.

Infrared laser spectroscopy
of a $C_2H_4-N_2O$ Van der Waalse
molecule.

1996

CA 1996, 125, 122, 1796

NO·CH₄

1998

Barr, Jonathan D;
et al.,

отв
свекрощ. J. Electron. Spectrosc.
Relat. Phenom. 1998, 97(1-2),
159-170

(Cell. NO; ● III)

C-N-O-H conj.

1998

cmp-na, Bobadora - Parvanova,
vi, smazheni, Petia; et al.,
mop. p. a. v. J. Phys. Chem. A1998,
102 (10), 1815 - 1819.

(cell: H_2CO ,  III)

NO. CH₄

(OM. 39606)

1998

Jonathan D. Barr, John M. Dyke
et al.,

спектр.
и
фотон. y. Electron Spectrosc.
спектр., and Related Phenomena
Журн. 1998, 97, 159-170

и
ab initio
кален

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

1598

129: 281270g Ab initio study of hydrogen bonding cluster $\text{NH}_3\text{-CH}_3\text{OH}$. Li, Yue; Liu, Xianghong; Zhang, Xiaoguang; Wang, Xiuyan; Lou, Nanquan (State Key Lab. Molecular Reaction Dynamics, Dalian Inst. Chem. Physics, Chinese Academy Sci., Dalian, Peop. Rep. China 116023). *Huaxue Wuli Xuebao* 1998, 11(4), 327-333 (Ch), Zhongguo Kexue Jishu Daxue Chubanshe. The $\text{NH}_3\text{-CH}_3\text{OH}$ binary cluster system was studied by ab initio calcns. at the HF/6-31G* and MP2/6-31G** levels. The results show that the neutral $\text{NH}_3\text{-CH}_3\text{OH}$ cluster forms a linear N-H-O hydrogen bonded structure in which CH_3OH acts as a proton donor. For the ionic $\text{NH}_3\text{-CH}_3\text{OH}^+$ cluster, three kinds of equil. conformations are suggested, in which the bridging H atom of types I and II corresponds to H of the hydroxyl group of methanol and ammonia, resp. Type III is the result of an intracuster reaction that H in the Me group of CH_3OH rearranges onto the O atom. The dissocn. channels and dissocn. energies of both neutral and ionic $\text{NH}_3\text{-CH}_3\text{OH}$ clusters are also presented. The calcns. show that when $\text{NH}_3\text{-CH}_3\text{OH}$

ab initio
расчет
структур
и
стабильности

C. A. 1998, 129, N 21

is vertically ionized, a fast intracuster proton transfer reaction should occur and protonated NH_4 (and CH_3O) should be the predominant products. For another channel corresponding to the prodn. of NH_4 (and CH_2OH), it needs a proton rearrangement process (type I $\rightarrow$ III) taking place in advance. Although the channel has the lowest dissocn. energy,

a high barrier of 213.61 kJ/mol makes it less favorable than the former channel.

Кумроанин

C-N-O-T

1998

(ук, скр)

130: 229305d Far IR and Raman vibrational spectra of nitramines. Shlyapochnikov, V. A.; Khaikin, L. S.; Grikina, E.; Cherskaya, N. O.; Maksimova, L. E.; Pyatakov, N. F. (N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia 117913). *Russ. Chem. Bull.* 1998, 47(11), 2173-2176 (Eng), Consultants Bureau. Vibrational spectra of several nitramines in the long-wave region ($50-450\text{ cm}^{-1}$) were studied. The frequencies of intra- and intermol. vibrations were sep'd. and a tentative assignment of the frequencies of self-associative complexes was performed.

C. A., 1999, 130, N17

F: H₂NCO₂Et

P: 3 131:65135 Microwave spectrum, conformational equilibrium and quantum chemical calculations of urethane (ethyl carbamate). Marstokk, K. -M.; Mollendal, Harald (Department of Chemistry, University of Oslo, Oslo N- 0315, Norway). Acta Chem. Scand., 53(5), 329-334 (English) 1999 The microwave spectrum of urethane (H₂NCO₂Et) was studied at 16.5- 56.0 GHz at room temp. Two rotamers denoted conformer I and conformer II were assigned. The C-O and O CH₂ bonds are oriented in the syn conformation in both

these rotamers. The H2NCO2CC atoms are coplanar in conformer I with the Me group anti to the Ccarbonyl-O bond. The Et group is rotated 98.degree. in conformer II from the position it has in I. Conformer I is 0.5(5) kJ mol⁻¹ more stable than II by relative intensity measurements. The ground vibrational state was assigned for I, whereas the ground and 1 vibrationally excited state were assigned for II. The microwave work was assisted by ab initio computations at the MP2/cc-pVTZ level of theory, as well as density functional theory calculations at the B3LYP/6-31G* level. Both these methods predict similar geometrical structures for the 2 conformers and rotational constants that are close to the experimental ones. Both theoretical procedures predict a shallow pyramid around the N nucleus.

1999

F: carbamate

P: 3

130:252036 Microwave spectrum, conformation, barrier to internal rotation, ^{14}N quadrupole coupling constants, dipole moment and quantum chemical calculations for methyl carbamate. Marstokk, K. -M.; Mollendal, Harald (Department of Chemistry, The University of Oslo, Oslo N-0315, Norway). Acta Chem. Scand., 53(2), 79-84 (English) 1999 Munksgaard International Publishers Ltd. CODEN: ACHSE7. ISSN: 0904-213X. DOCUMENT TYPE: Journal CA Section: 22 (Physical Organic Chemistry) Section cross-reference(s): 73 The microwave spectrum of Me carbamate ($\text{H}_2\text{NCO}_2\text{CH}_3$) has been investigated in the 13.5-40.0 GHz spectral region at room temp. One conformer was assigned. This rotamer has a symmetry plane (C_s symmetry) and two out-of-plane hydrogen atoms. The Me and the carbonyl groups are in the syn conformation. The barrier to internal rotation of the Me group is

C.A., 1999, 150, 1413

4235.9(66) J mol⁻¹. The dipole moment is (in units of 10⁻³⁰ C m) $\mu_a=0.544(7)$, $\mu_b=7.653(31)$, $\mu_c=0$ (for symmetry reasons) and $\mu_{tot}=7.672(31)$. The ¹⁴N quadrupole coupling consts. were found to be $\chi_{aa}=1.52(27)$ and $\chi_{bb}=3.51(15)$ MHz. The microwave work has been assisted by ab initio computations at the HF/6-311++G**, MP2/6-311 ++G** (frozen core) levels of theory, as well as d. theory calcns. at the B3LYP/6-31G* level. microwave spectrum conformation barrier internal rotation methyl carbamate; quadrupole coupling nitrogen 14 methyl carbamate; dipole quantum chem. calcns. for Me carbamate; 598-55-0, microwave spectrum, conformation, barrier to internal rotation, ¹⁴N quadrupole coupling consts., dipole moment and quantum chem. calcns. for Me carbamate

F: H₂NCO₂CH₃

P: 3

130:252036 Microwave spectrum,
conformation, barrier to internal rotation
quadrupole coupling constants, dipole moment
and quantum chemical calcula for methyl
carbamate. Marstokk, K. -M., Mollendal,
Harald (Department of Chemistry, The
University of Oslo, Oslo N-0315, Norway).
Acta Chem. Scand., 53(2), 79-84 (English) 1999
The microwave spectrum of Me carbamate

(H₂NCO₂CH₃) has been investigated in the 13.5-40.0 GHz spectral region at room temp. One conformer was ass This rotamer has a symmetry plane (C_s symmetry) and two out-of-plane hydr atoms. The Me and the carbonyl groups are in the syn conformation. The to internal rotation of the Me group is 4235.9(66) J mol⁻¹. The dipole m is (in units of 10⁻³⁰ C m) .mu.a=0.544(7), .mu.b=7.653(31), .mu.c=0 (for symmetry reasons) and .mu.tot=7.672(31). The

1999

 $\text{CH}_3\text{CH}:\text{CH}-\text{NO}$ (syn form)

(48 cmkmp)

130: 273426t Generation, Microwave Spectrum, and Ab Initio MO Calculation of trans-1-Nitrosopropene, $\text{CH}_3\text{CH}:\text{CH}-\text{NO}$ (syn form). Sakaizumi, Takeshi; Tanaka, Hideki; Hirano, Kouji; Kuze, Nobuhiko; Ohashi, Osamu (Department of Chemistry, Sophia University, Tokyo, Japan 102-8554). *J. Mol. Spectrosc.* 1999, 194(1), 79-86 (Eng), Academic Press. Trans-1-Nitrosopropene (syn form) was generated in the gas phase by pyrolysis of 1-chloro-1-methyl-2-(hydroxyimino)ethane and identified by microwave spectroscopy. The microwave spectrum of the pyrolyzate was obsd. at $\nu = 8.0-40.0$ GHz. The rotational consts. (MHz) were detd. as $A = 34,025(390)$, $B = 2315.62(2)$, and $C = 2198.54(2)$ for $\text{CH}_3\text{CH}:\text{CH}-\text{NO}$ (normal species) and $A = 34,012(530)$, $B = 2300.04(3)$, and $C = 2182.70(2)$ for $\text{CH}_3\text{CH}:\text{CH}-^{15}\text{NO}$ (^{15}N isotopic



C.A., 1999, 130, N20.

species) in the ground vibrational state. The values of planar moment ($P_{cc} = (I_a + I_b - I_c)/2$) obtained for the normal and ^{15}N isotopic species are 1.62(10) and 1.52(13) $\text{u}\text{\AA}^2$, resp. These values are almost the same within the limit of errors. Probably the N atom lies in or is close to the ab inertial plane of the mol. and shows also that only 2 H atoms are located sym. out of the symmetry plane. The pyrolyzate is trans-1-nitrosopropene by comparing the obsd. and calcd. rotational consts., κ (Ray's asym. parameter), and r_s coordinates of the N atom. One vibrationally excited state was obsd. and assigned to the C-N torsional mode ($158(50) \text{ cm}^{-1}$). Interesting pyrolyzates such as HCN and acetaldehyde were detected during the pyrolysis of the precursor. The lifetime of trans-1-nitrosopropene is $\sim 5 \text{ s}$ in the waveguide cell. (c) 1999 Academic Press.

F: CH(NO2)3

P: 3

1999

132:78173 Structure and vibrational spectra of dinitromethane and trinitromethane. Tafipolsky, M. A.; Tokmakov, I. V.; Shlyapochnikov, V. A. N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences Moscow 117913, Russia J. Mol. Struct., 510(1-3), 149-156 (English) 1999 The mol. geometries of dinitromethane and trinitromethane were optimized and their harmonic force fields were calcd. by the DFT/B3LYP method. The force fields obtained made it possible to interpret reliably the vibrational spectra of dinitromethane, trinitromethane and a no. of isotopomers of trinitromethane. Some general conclusions on geometry and vibrational spectra of the mols. under study are made. The hybrid d. functional method used is shown to predict the reliable structural parameters and vibrational frequencies for polynitromethanes.

C.A. 2000, 132

F: CH2(NO2)2

P: 3

1999

132:78173 Structure and vibrational spectra of dinitromethane and trinitromethane. Tafipolsky, M. A.; Tokmakov, I. V.; Shlyapochnikov, V. A. N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences Moscow 117913, Russia J. Mol. Struct., 510(1-3), 149-156 (English) 1999 The mol. geometries of dinitromethane and trinitromethane were optimized and their harmonic force fields were calcd. by the DFT/B3LYP method. The force fields obtained made it possible to interpret reliably the vibrational spectra of dinitromethane, trinitromethane and a no. of isotopomers of trinitromethane. Some general conclusions on geometry and vibrational spectra of the mols. under study are made. The hybrid d. functional method used is shown to predict the reliable structural parameters and vibrational frequencies for polynitromethanes.

C.A. 2000, 132

F: MeCOCN

1799

P: 3

131:4990 Fluorescence excitation spectroscopic study of the jet-cooled acetyl cyanide. Yoon, Min-Chul; Choi, Young S.; Kim, Sang Kyu (Department of Chemistry, Inha University, Incheon (402) 751, S. Korea). J. Chem. Phys., 110(15), 7185-7191 (English) 1999 American Institute of Physics. CODEN: JCPSA6. ISSN: 0021-9606. DOCUMENT TYPE: Journal CA Section: 22 (Physical Organic Chemistry) Section cross-reference(s): 73 Fluorescence excitation spectrum of MeCOCN in a supersonic jet was obtained for the $1(n,p^*)$ transition (S_1-S_0). A spectral-origin band is located at 27 511 cm^{-1} , and its fluorescence lifetime is measured as 3.5 ± 0.3 ms. The

C. A. 2000

S1-state vibrational modes assocd. with Me torsion, C-C-O and C-C-N bending, and C-O wagging are optically active. The fluorescence intensity decreases with increasing energy from the origin up to ~ 2000 cm^{-1} , while the fluorescence lifetime changes little over the same energy region. Instead, a broad background signal appears in the high-energy region, indicating that ntramol. vibrational redistributi becomes important in the S1 state as the d. of states increases.

F: monoethanolamine

P: 3

132:2

C-N-H-O 2000

C13316 Force Field of Monoethanolamine. Alejandro,
Jose; Rivera, Jose Luis; Mora, Marco Antonio; De la
Garza, Virginia Departamento de Quimica,
Universidad Autonoma Metropolitana-Iztapalapa
Mexico City 09340, Mex. J. Phys. Chem. B,
104(6),

1332-

1337 (English) 2000 We have performed ab initio
calcns. and canonical mol. dynamics simulations to
obtain a force field of monoethanolamine (MEA). The
mol. modeled by seven charged sites, and the force field
includes intramol. degrees of freedom and intermol.
interactions. The charges obtained in t energy
minimization procedure reproduce the exptl. geometry,

C.A. 2000, 132

dipole moment and the most stable conformation. Molecular dynamics simulations were carried in the liquid phase and in the liquid-vapor equilibrium state. Simulations in the liquid region give us information about hydrogen bond formation, while simulations in the two-phase region allow us to obtain the coexisting densities and surface tension as functions of temperature. The hydrogen bond is favored when the hydrogen of the hydroxyl group is close to a nitrogen or an oxygen of another molecule, and the strength in both cases is the same. Radial distribution functions involving hydrogens and oxygen in the hydroxyl group of MEA are compared with those of water at 298 K, and a similar structure is found for the first neighbor of atoms. The proposed force field gives a good description of the liquid-vapor coexistence of MEA. The liquid obtained in our simulations of the liquid-vapor equilibrium at 298 K is 1.003 g/cm³ vs. the experimental value of 1.012 g/cm³. Our estimated critical point is located at 583.9 K and 0.32 g/cm³ in comparison with the experimental result of 614 K and 0.3116 g/cm³, respectively. At 323 K the calculated surface tension is 43.2 $\pm$ 2.5 mN/m while the experimental value is 44.81 mN/m.

NO. Calki (A-X) (Do)

2000

134: 10966u The $\tilde{A} - \tilde{X}$ (1 + 1) Resonance-Enhanced Multiphoton Ionization Spectrum of the $\text{NO-C}_2\text{H}_6$ and $\text{NO-(C}_2\text{H}_6)_2$ Complexes. Daire, Sophia E.; Lozeille, Jerome; Gamblin, Stuart D.; Wright, Timothy G. (School of Chemistry Physics and Environmental Science, University of Sussex Falmer, Brighton, UK BN1 9QJ). *J. Phys. Chem. A* 2000, 104(40), 9180-9183 (Eng), American Chemical Society. The $\tilde{A} - \tilde{X}$ transitions of $\text{NO-C}_2\text{H}_6$ and $\text{NO-(C}_2\text{H}_6)_2$ were recorded using (1 + 1) resonance-enhanced multiphoton ionization spectroscopy. The $\text{NO-C}_2\text{H}_6$ origin is $44050 \pm 15 \text{ cm}^{-1}$, and the dissocn. energy, D_0' , of the $\tilde{A}$ state is $340 \pm 20 \text{ cm}^{-1}$. The latter values allow the dissocn. energy of the $\tilde{X}$ state, D_0'' , to be detd. as $190 \pm 20 \text{ cm}^{-1}$. In addn., ests. of the dissocn. energies for the processes $\text{NO-(C}_2\text{H}_6)_2 \rightarrow \text{NO-C}_2\text{H}_6 + \text{C}_2\text{H}_6$ and $\text{NO-(C}_2\text{H}_6)_2 \rightarrow \text{NO} + 2\text{C}_2\text{H}_6$ in the $\tilde{X}$ and $\tilde{A}$ states are obtained; the $\tilde{A}$ state is dissociative along the $\text{NO-C}_2\text{H}_6\text{-C}_2\text{H}_6$ coordinate. Comparison of the $\text{NO-C}_2\text{H}_6 \tilde{A} - \tilde{X}$ spectrum with that of NO-CH_4 is made.

F: $\text{NH}_2\text{COCH}_2\text{CONH}_2$

P: 3

133:111616 Tautomers and conformers of malonamide,
 $\text{NH}_2\text{-C(O)-CH}_2\text{-C(O)-NH}_2$: vibrational analysis, NMR
spectra and ab initio calculations. Schiavoni, M. M.;
Mack, H.-G.; Ulic, S. E.; Della Vedova, C. O.

Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de
Química, LADECOR, Universidad Nacional de La Plata La
Plata, Argent. Spectrochim. Acta, Part A, 56A(8), 1533-

1541 (English) 2000. The conformational and tautomeric compns. of malonamide, $\text{NH}_2\text{-C(O)-CH}_2\text{-C(O)-NH}_2$ were detd. by vibrational spectroscopy and theor. calcns. (HF/6-31G*, B3PW91/6-31G*). Solid state FTIR and Raman spectra were analyzed. They reveal the existence of a diketo tautomer. Theor. calcns. predict a diketo structure belonging to the C_1 symmetry group. No enol form is present in the mol. in the solid. ^{13}C -NMR studies show only signals of a diketo tautomer.

2000

F: C₅₉HNO

P: 3

134:272918 Electronic absorption and vibrational spectroscopy of azafullerene C₅₉HN and its oxide C₅₉HNO. Tagmatarchis, Nikos; Shinohara, Hisanori; Pichler, Thomas; Krause, Matthias; Kuzmany, Hans. Department of Chemistry, Nagoya University, Nagoya, Japan. Perkin 2 (2000), (12), 2361-2362. in English.

Monomeric hydroazafullerene C₅₉HN was synthesized and isolated by HPLC in its pure form, which was efficiently oxidized to give C₅₉HNO in the presence of O under irradiation with a UV lamp; mid-IR, UV-visible-NIR and FT-Raman spectra were measured. Analyses of the electronic absorption and vibrational spectra of C₅₉HN and C₅₉HNO are also reported.

2000

F: C59HNO

P: 3

134:272918 Electronic absorption and vibrational spectroscopy of azafullerene C59HN and its oxide C59HNO. Tagmatarchis, Nikos; Shinohara, Hisanori; Pichler, Thomas; Krause, Matthias; Kuzmany, Hans. Department of Chemistry, Nagoya University, Nagoya, Japan. Perkin 2 (2000), (12), 2361-2362. in English.

Monomeric hydroazafullerene C59HN was synthesized and isolated by HPLC in its pure form, which was efficiently oxidized to give C59HNO in the presence of O under irradiation with a UV lamp; mid-IR, UV-visible-NIR and FT-Raman spectra were measured. Analyses of the electronic absorption and vibrational spectra of C59HN and C59HNO are also reported.

NO · CH₄
NO · CD₄

2001

135: 83744a The $\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi$ transition of the NO · CH₄ and NO-CD₄ complexes. Daire, Sophia E.; Lozeille, Jerome; Gamblin, Stuart D.; Wright, Timothy G.; Lee, Edmond P. F. (Spectroscopy of Complexes and Radicals (SOCAR) Group, School of Chemistry, Physics and Environmental Science, University of Sussex, Falmer, Brighton, UK BN1 9QJ). *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2001, 3(6), 917-924 (Eng), Royal Society of Chemistry. NO-CH₄ and NO-CD₄ were studied in a mol. beam, using (1+1) resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI) spectroscopy. A detailed spectrum results in each case, with bands obsd., assigned to intermol. vibrations onto which is superimposed further

($\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi$)

C. A. 2001, 135, N6

structure. The origin of this further structure is discussed in the light of previous studies. From the spectrum, a no. of intermol. vibrational frequencies in the $\tilde{A}$ state were obtained. D_0' for NO-CH₄ (NO-CD₄) was measured as 211(238) cm⁻¹; with D_0'' for NO-CH₄ (NO-CD₄) being derived as 117(122) cm⁻¹. 'Ab initio calcns. were performed on the $\tilde{X}$ state, and the $\tilde{X}$ state has a C_s global min., with the NO pointing towards a Me face, with the N tilted towards the methane. This indicates, from the energetic proximity of a no. of stationary points, the complex is expected to be performing wide amplitude motion, sampling a wide range of energies even with the zero-point energy.

$H_2O-N(CH_3)_3$

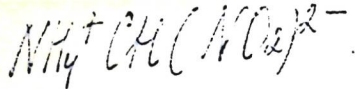
2071

. Coebel, James R; et al;

J. Phys. Chem. A 2011,
105(26), 6430-6435

UK в
матрице

(all. H_2O - NH_3 ; III)



2021

опыты,
спектр
Shlyapochnikov V. A.
Tadipolsky M. A. et al.,
J. Mol. Struct., 2021,
559 (1-3), 147-166.

On the structure and
spectra of dinitramide

salt s.

