

1980



ув. мех.
расчет.

(41) P

7 Б63. Анализ по теории возмущении транс-эффекта неподеленной пары в метиламине и метаноле. Bachler Vinzenz, Olbrich Gottfried. SCF-perturbational analysis of the trans lone pair effect in methylamine and methanol. «Theor. chim. acta», 1980, 57, № 4, 329—336 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении ППДП/2 с варьированием всех независимых степеней свободы рассчитаны метиламин (I) и метанол (II). Сопоставление с эксперим. и оптимизированными неэмпирич. методом ССП структурами I и II показывает, что метод ППДП/2 правильно передает наклон метильной группы и небольшое различие в длинах связей С—Н, находящихся в транс- и гош- и, соотв., в цис- и гош-положениях к неподеленным парам атомов N и O. Вычислены энергии E_p , необходимые для удлинения связей С—Н на 0,1 Å от равновесного значения, при различных зна-

X. 1981 № 7

чениях диэдрич. угла между связью С—Н и осью симметрии неподеленной пары гетероатома. Найдено, что транс-ориентации связи С—Н соответствует миним. значение E_p . Это согласуется с наблюдаемым экспериментально различием частот дейтерированных I и II. Анализ компонент E_p и локализованных МО I и II показали, что ослабление связи С—Н транс-положении связано с частичной делокализацией неподеленной пары на разрыхляющую МО транс-связи С—Н. Этот вывод подтверждается доп. расчетами диметиламина, триметиламина и диметилового эфира.

В. Фаустов

CH_3NO_2 [common 9707] 1980

Barnes A. J.; et al.

U.K. patent, J. Mol. Struct., 1980,
I
59, 39-53.



1.980

11 Б55. Теоретическое исследование неэмпирическим методом ССП фотохимического поведения трехчленных циклов. 6. Азиридин. Bigot B., Devaquet A., Sevin A. Theoretical Ab initio SCF investigation on the photochemical behavior of the three-membered rings. 6. Aziridine. «J. Org. Chem.», 1980, 45, № 1, 97—105 (англ.)

кв. мех.
расчет

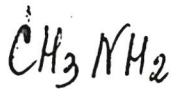
Выполнены неэмпирич. расчеты в базисе ОСТ—3ГФ молекулы азиридина $(\text{CH}_2)_2\text{NH}$ (I) с учетом взаимодействия однократно и двукратно возбужденных конфигураций, возникающих при промотировании электронов с 6 высших занятых на 4 низшие свободные МО. Рассмотрены несколько путей фотохим. превращений возбужденных молекул I и построены соотв. диаграммы корреляции натуральных МО и поверхности потенциальной энергии. Найдено, что в газовой фазе наиболее вероятным процессом является раскрытие цикла по связи C—N с образованием дирадикала $\cdot\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}\cdot$ (II). Разрыв кольца по связи C—C менее вероятен, однако в протонном р-рителе он может конкурировать с раскрытием по связи C—N. Фрагментация I на метилен

2.1980.111

и формальдимин в газовой фазе маловероятна, тогда как распад I на этилен и нитрен возможен и притом легче осуществляется двустадийно через интермедиат II, чем одностадийно. Мономолек. разрыв связи N—N в I не является перв. фотопроцессом, ведущим к образованию молек. водорода. Обсуждается роль ридберговских состояний в исследуемых фотохим. превращениях.

В. Я. Беспалов





Lomnicka 9238

1980

Binkley J.S., et al.

J. Amer. Chem. Soc.,
1980, 102 (3), 939-47

равновесн.
геометрия

μ

CH_3NH_2

1980

Donady J., et al

молек. Int. J. Quantum Chem.,
вол. 1980, 17, N 2, 211-233.



см CH_4 ; III

CH_3NH_2

силовые
постоянн

2. 1980. 111

Оттиски 9140

1980

11 Б65 Угловая зависимость силовой константы связи CH в метиламине в различных квантовохимических приближениях. Габдранипов В. З., Шлыгина И. А., Агашкин О. В. «Ж. физ. химии», 1980, 54, № 2, 491—493

Тремя полуэмпирич. квантовомех. методами проанализированы угловые зависимости ряда электронных характеристик в метиламине: полная, электронная и ядерная энергии, силовая константа связи CH и ее электронная и основная составляющие, равновесная длина связи CH , пр-ная дипольного момента молекулы по растяжению связи CH . Все три использованных метода дают аналогичные результаты. Силовая константа имеет два минимума при 0° (дис-ориентация п-пары и связи CH) и при 180° («больцмановский» фрагмент). Понижение силовой константы в «больцмановском» фрагменте достаточно для интерпретации «больцмановского» сдвига колебания CH в ИК-спектрах. Расчеты показывают, что удельная интенсивность «больцмановских» полос в ИК-спектрах должна примерно в полтора раза превышать уд. интенсивность обычных CH колебаний.

Резюме

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

1980

Ginde et al. et al.

J. Comput. Chem., 1980, 1(2),
118-28

rev. corr.
fact.

rev. Li - $\text{NH}_2 - \text{H}$



1980

1 Б45. Эффекты нежесткости фрагментов мембранно-активных комплексонов. Kryachko Eugene S., Kruglyak Yuri A., Dalton Bryan J. Nonrigidity effects of fragments of membrane-active complexons. «Int. J. Quantum Chem.», 1980, 17, № 6, 1229—1235 (англ.)

Эффекты

нежесткости

Изучена группа симметрии нежесткой молекулы CH_3NH_2 , являющейся одним из фрагментов мембранно-активных комплексонов. Наряду с внутренним вращением метильной группы относительно группы NH_2 учтен также возможность обмена атомами водорода между фрагментами CH_3 и NH_2 . Найдены расщепления энергетич. уровней при переходе от жесткой модели молекулы к нежесткой, рассчитаны ядерные статистич. веса расщепленных уровней и получены правила отбора для дипольных переходов. Обсуждено влияние туннелирования атома водорода между фрагментами на характеристики масс-спектра метиламина. Б. И. Жилинский

X. 1981 N 1

CH_3NH_2

1980

10 Д136. Эффекты нежесткости в молекуле метиламина. Крячко Е. С., Кругляк Ю. А. «Ж. структур. химии», 1980, 21, № 3, 57—61.

Эффект
нежесткости

Определена группа нежесткой молекулы метиламина как совокупность элементов полной группы перестановок с инверсиями тождественных ядер, учитывающих как внутренние вращения метильной группы и группы NH_2 , так и перегруппировку водорода от метильной группы к группе NH_2 . В обоих случаях найдено расщепление энергетич. уровней жесткой модели метиламина, вычислены ядерные статистич. веса расщепленных уровней, а также получены правила отбора для разрешенных дипольных переходов. Резюме



ф 1980 №10

CH_3NH_2

1980

Михайлов В.К., учр.

колебаний.
спектр,
расчет.

Изв. АН СССР Сер. хим.
1980. №1, 186-89

см. CH_4 -III

CH_3NH_2

1980

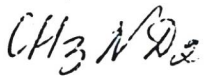
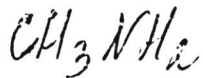
Pross Addy, et al

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

Кв. мех.
расчет,
структура



с см CH_3BH_2 ; III



number 10605 - 1980

Rolston J. H., et al.

(i; min.) J. Phys. Chem., 1980,
84, 2170-2179

Methylamine-Deuterium Isotope
Exchange Equilibria in Gaseous
and Liquid Phases.



молекул.
геометрии



5594

1980

ских методов, основанных на приближениях π и π ПДП, для расчета конформаций гетероатомных молекул. Щербина В. П., Данилова В. И. «Изв. вузов. Физ.», 1980, 23, № 9, 100—102

В рамках параметризаций ПДП/БУ (А) и МЧПДП/2 (Б) проведена оптимизация геометрии молекул H_2O_2 , CH_3OH , N_2H_4 и CH_3NH_2 . В ряде случаев, особенно с параметризацией Б, полученные авторами результаты весьма далеки от экспериментальных; для молекулы CH_3NH_2 в приближении Б расчеты приводили даже к отрыву H_2 от метильной группы. Оптимизация геометрии хлорпроизводных углеводородов $\text{CH}_2=\text{CHCl}$, CH_3CHCl_2 и транс-формы $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ методом А дает удовлетворительное согласие с экспериментом.

В. Я. Беспалов

х. 1981. N 5

CH_3NH_2

1980

Spangler Dale, et al.:

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, 17, n6, 1075-97.

lv. uex.
paorem
uol.

● (cor C_2H_6) III

CH₃NH₂

1980

вращат.
структура

17 Б287. Новые результаты в изучении внутреннего вращения и инверсии метиламина. Sztraka Lajos. Újabb eredmények a metil-amin belső rotációjának és inverziójának vizsgálatában. «Kém. közl.», 1980, 54, № 2—3, 371—377 (венг.; рез. англ.)

Обсуждена теория и основанные на ней выражения, описывающие вращение, внутреннее вращение и инверсию метиламина. Применимость теории проверена путем анализа спектра высокого разрешения ($0,04 \text{ см}^{-1}$) метиламина в области вращательной структуры инверсионного перехода $0 \rightarrow 1$.

Резюме

X. 1981. № 17

H_3SiNH_2

1980

Витковская Н.М. и др.

кв. ест. р.
цол.

Успехи квант. химии
и квант. биол. Тр.
международ. конф., Киев,
1980, 47-54

● (см H_3SiH) III

H_3C-NH_2

ammua 9378

1980

нб. мек.
факт.

Vitro & Stanga N. M.
et al.

Int. J. Quant. Chem.
1980, 17, 299-305.

● ам. $H_3SiH-III$

M_3C-Ni_2

1980

Wiberg K. B.

рацем

J. Amer. Chem. Soc.

з. л. мотн.

1980, 102, N4, 1229-34

и



Cu M_3C-H i III

CH_3NH_2

1981
Bernardi F., et al.

расчёт
геометр.,
структ.,
св. н. с. н.

Theochem, 1981, 3,
N 1-2, 123-129.

● (св. H_2O_2 ; III)

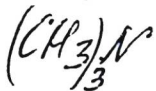
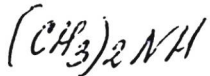
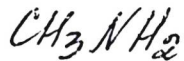
1981

CH_3NH_2
 $(\text{CH}_3\text{NH}_2)_2$
 $(\text{CH}_3\text{NH}_2)_3$
геометр.,
структура

5 Б101. Исследования водородной связи: изучение ассоциации метиламина на основе эмпирического потенциала. Brink George, Glasser Leslie. Studies in hydrogen-bonding: association in methylamine, using an empirical potential. «J. Mol. Struct.», 1981, 85, № 3—4, 317—324 (англ.)

Метод эмпирич. электростатич. потенциала использован для исследования структуры димеров, тримеров и тетрамеров метиламина. Наиболее стабильными структурами найдены линейная для димера и циклич. для тримера и тетрамера. И. Абронин

Х. 1982, 19, N5.



factor
($U_0; \mu; \gamma$)

Commen 128371 1981.

Eades R.A., et al.

J. Phys. Chem., 1981,

85, 976-981



NH_2CH_3

1981

Eades R. A., et al.

Справка
к протоколу
(17с)

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

●
(см. NH_3 ; I)

CH_3NH_2

1981

Suryán P. R., et al.

Theor. chim. acta, 1981,
59, N6, 603-604.

40

(see. CH_4 ; III)



1981

Электронное
строение

11 Д45. Неэмпирические исследования структурных характеристик, которые затруднительно изучать экспериментально. Ч. 6. Количественная оценка влияния де-
локализации связи на строение и сверхсопряжение амидной группы. Ab initio studies of structural features not easily amenable to experiment. Part 6. Quantitative estimate of the effect of bond delocalization on structure and hyperconjugative interaction of the amide group. Williams J. O., Van Alsenoy C., Schäfer Lothar. «J. Mol. Struct.», 1981, 76, № 2 («Teochem», 1981, 1, № 2), 171—177 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых ф-ций ОСТ-4-21ГФ с полной оптимизацией геометрии исследовано электронное строение формамида (I) и ацетамида (II) с расположением аминогруппы в плоскости молекулы и в перпендикулярной плос-

ф. 1981, 18, № 11.

кости путем поворота вокруг связи C—N. Обнаружено, что плоская форма выгоднее на 18 ккал/моль для I и на 17 ккал/моль для II, что согласуется с эксперим. оценками барьеров вращения для амидов (16—22 ккал/моль). Показано, что в перпендикулярной конформации, когда невозможно сопряжение, связь N—C удлиняется на 0,08—0,09 Å, связь C=O укорачивается на 0,01 Å, связь N—H удлиняется на 0,01 Å, угол H—N—C уменьшается на 5°—10° и угол C—N—O остается неизменным. Расчет правильно воспроизводит обусловленное резонансными взаимодействиями удлинение связи C=O сравнительно с карбонильными соединениями и укорочение связи C—N сравнительно с аминами. Сделан вывод, что при исследовании природных белков, когда отклонения амидной группы от планарности невелики, их влияние на геометрию белка можно не учитывать, хотя для полипептидов такие эффекты могут накапливаться и влиять на гибкость цепей и их способность к образованию водородных связей. Показано, что сверхсопряжение группы CH_3 с группой NH_2 инвариантно по отношению к вращению последней.

В. Л. Лебедев

CH_3NH_2

1982

18 Б239. Длинноволновой инфракрасный спектр внутреннего вращения в метиламине. Belorgeot C., Stern V., Goff N., Kachmarsky J., Möller K. D. Far-infrared spectrum of the internal rotation in methylamine. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 92, № 1, 91—100 (англ.)

М. Л., Д.

На фурье-спектрометре в области частот $80\text{--}280\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,12\text{ см}^{-1}$ измерен ДИК-спектр заторможенного внутреннего вращения группы CH_3 метиламина, CH_3NH_2 . Анализ спектра выполнен в приближении модели симм. волчка с учетом внутреннего вращения. На основе полученных данных вычислены 11 параметров b -типа. Вычисленный спектр хорошо согласуется с экспериментальным. С. Н. Мурзин

Х. 1982, 19, 418.

Метиламин

1982

CH_3NH_2

10 Д337. Длинноволновой ИК-спектр внутреннего вращения молекул метиламина. Far-infrared spectrum of the internal rotation in methylamine. Belorgeot C., Stern V., Goff N., Kachwarsky J., Möller K. D. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 92, № 1, 91—100 (англ.)

При комнатной т-ре исследованы вращательные спектры ИК-поглощения молекул метиламина в газовой фазе. Измерения проведены в области $80-280\text{ см}^{-1}$, с разрешением $0,12\text{ см}^{-1}$ в кювете, с длиной оптического пути 15 м. Полученные спектры содержат компоненты вращательной структура Q-ветви колебаний метильных групп. Проведен анализ спектров с использованием модели, содержащей 12 параметров. Вычислены значения параметров, обеспечивающие удовлетворительное описание наблюдаемых спектров. Обнаружен также ряд линий, отнесенных к P- и R-вращательным ветвям. Библ. 20.

М.П.

ор. 1982, 18, N 10

CH_3NH_2

1982

96: 151700m Far infrared spectrum of the internal rotation in methylamine. Belorgeot, C.; Stern, V.; Goff, N.; Kachmarsky, J.; Moeller, K. D. (Dep. Phys., Fairleigh Dickinson Univ., Teaneck, NJ 07666 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 92(1), 91-100 (Eng). The far-IR spectra of the Q branches of hindered rotation of MeNH_2 were studied at 80-280 cm^{-1} with resols. up to 0.12 cm^{-1} . Through the theor. anal. 11 of the 12 b-type parameters were detd. using a nonlinear least-squares fit. The agreement between the obsd. and the final theor. spectrum is satisfactory considering that only Q-branch lines were studied. Exptl. more lines, esp. at low frequencies, were obsd. which probably belong to P- and R-branch lines of clusters thereof.

V.

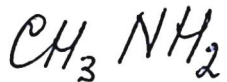
C. A. 1982, 96, N18

Omnium 15782

1982

NH_2CH_3^+
 CH_2NH_3^+
ab initio
расчет
геометрии

Bonazzola L.,
Leray N., et al.,
Chem. Phys., 1982,
73, N 1-2, 145-
153



1982

Brink G., et al.

равновес-
ная

J. Comput. Chem.
1982, 3 (1), 47-52.

коэффициент.

● (см. H_2O ; III)

CH_3NH_2

1982

Fleischhauer Jörg-,
et al.

AH^+ ; Z. Naturforsch., 1982,
A37, N1, 46-50.

(ver. MNH_2 ; III)

Меморандум [Оммуек 14394]

1982

CH_3NH_2

Goddard J. D.,

У. Кв. мех-
расчет

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

CH_3NH_2

1982

Picorem

Mont Robert F., Levi
Beverly A., et al.

Vi

J. Comput. Chem., 1982,
3, N2, 234-250.

● (Cor. H₂; III)

CH_3NH_2

[13515]

1982

8 Д485. Лазерный штарковский спектр метиламина в области 337 мкм. Laser-Stark spectrum of methylamine at 337 μm . Johnston L. H., Raju S. R., Sudhakaran G. R., Lees R. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2, 503—505 (англ.)

Получены штарковские спектры поглощения газообразного метиламина с лазером HCN на линии 337 мкм в электрич. полях до 60 кВ/см при параллельной и перпендикулярной полю поляризации излучения. Приведены спектры и значения штарковских сдвигов для переходов $\Delta M = \pm 1$, $\Delta J = 0$ между вращательно-инверсионными уровнями молекулы в основном состоянии крутильных колебаний. Определены нулевые частоты линий ветви Q для $J = 6 \div 9$. М. В. Т.

м.п., V_0

ср. 1982, 18, № 8.

CH_3NH_2

Оттиск 13515

1982

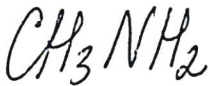
14 Б234. Лазерно-штарковский спектр метиламина
вблизи 337 мкм. Johnston L. H., Raju S. R., Sud-
hakaran G. R., Lees R. M. Laser-Stark spectrum of
methylanine at 337 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91,
№ 2, 503—505 (англ.)

Методом лазерной штарковской спектроскопии с ис-
пользованием линии 337 мкм HCN-лазера измерен
спектр поглощения паров метиламина, CH_3NH_2 . Для че-
тырех отнесенных линий Q-ветви $k=\overline{6-5}$, E_1-S , $v_1=0$
частоты в нулевом поле равны, соотв., для $J=6, 7, 8$ и
9 $\nu=890\,729, 890\,691, 890\,646$ и $890\,592$ МГц.

С. Н. Мурзин

лазерно-
штарковский
спектр

х. 1982, 19, №14.



1982

20 Б58. Теоретическое исследование влияния сверхсопряжения на барьеры инверсии азота в азиридинах. Kost D., Raban M. Theoretical investigation of the hyperconjugation effect on nitrogen inversion barriers in aziridines. «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 11, 2960—2967 (англ.)

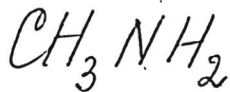
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ и 4-31ГФ с полной оптимизацией геометрич. параметров проведены расчеты различных конформаций CH_3NH_2 , FCH_2NH_2 и $\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{NH}_2$ с целью исследования влияния сверхсопряжения на барьеры инверсии (БИ) азота в аминогруппе. Обсуждено влияние сверхсопряжения на геометрию (длины C—N и C—F связей), БИ и величину переноса заряда с неподеленной пары атома азота NH_2 -группы к F или NH_3^+ . Полученные результаты интерпретированы в рамках анализа орбитальных взаимодействий с использованием концепции возмущенных МО. Показано, что во всех трех исследованных соединениях сверхсопряжение проявляется в граничных орбиталях, однако только в первых двух оно приводит к изменениям молек. свойств (геометрии и БИ).

расчет
геометрии,
структур

(42)

X. 1982, 19, № 20

И. Абронин



1983

Davis D.W., Singh U.C.,
et al.

J, AH^+ ; J. Mol. Struct., 1983,
105, N1-2, Suppl.: Theo-
chem, 14, N1-2, 99-104.

(see H_2O ; III)

CH_3NH_2

1983

Dick Bernhard, Freund
Hans-Joachim.

расчёт
момента,
структ.

Int. J. Quantum Chem,
1983, 24, N6, 747-765.

(сер. C_2H_2 ; III)

CH_3NH_2

1983

Frenking Gernot.

волеетр,
сирукт,
у;
J. Mol. Struct., 1983,
104, N 1-2, 233-239.

(сир. CH_4 ; III)

CH_3NH_2

1983

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

Ponec Robert.

4 gp

Chem. scr., 1983, 22,
NS, 245-247.

Ap;

( NH_3 ; III)



1983

Строение,
стабиль-
ность
изомера

Pople John A., Raghava-
chari Krishnan, et al.

J. Amer. Chem. Soc., 1983,
105, N21, 6389-6398.

(см. HNC; III)

CH_3NH_2

1983

Williams Ian H.

Расчет
геометр.,
структ.,
св. пост.,
Vi, Kp.

J. Mol. Struct., 1983, 105,
N1-2, Suppl.: Theorchem,
14, N1-2, 105-117.

(св. CH_3O^- ; III)

CH_3NH_2

[Om. 19320.]

1984

Имя
приемн.
состав.

Abuain T., Walker I. C.,
et al.,

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt. 2,
80, N5, 641-645.

CH_3NH_2
 $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$
 $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$

от 19782 · 1984

12 Л201. Спектры поглощения газообразных аминов в оберточной области: CH_3NH_2 , $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}$ и N_2H_4 . Конформационно-неэквивалентные изолированные осцилляторы C—H и N—H. Overtone absorption spectra of gaseous amines: CH_3NH_2 , $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, Et_2NH , and N_2H_4 . Conformationally non-equivalent C—H and N—H local mode oscillators. Fang Howard L., Swofford Robert L., Compton David A. C. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 6, 539—546 (англ.)

ν_i , см.посб.

Методами внутрирезонаторной фотоакустической и ИК-спектроскопии получены спектры поглощения ($19\,000\text{--}10\,200\text{ см}^{-1}$) молекул метиламина, диметиламина, диэтиламина и гидразина в газовой фазе при давл. ~ 50 мм рт. ст. Идентифицированы полосы оберточных колебаний связей N—H и C—H. Проведен теоретич. анализ интенсивности и полуширины полос обертонов этих молекул в рамках модели изолированных ангармонич. осцилляторов. Отмечено, что полосы обертонов вал. кол. связи C—H молекул диэтиламина опре-

ф. 1984, 18, N 12. N_2H_4

деляются вкладами различных конформеров. Найдены частоты обертонов вал. кол. связей С—Н диметиламина, расположенных в трансконформации, по отношению к другой метильной группе, к атому водорода и неподеленной паре электронов атома азота. Мультиплетная структура обертоновых полос вал. кол. связей N—H в спектрах гидразина приписана сложному конформационному составу этих молекул в газовой фазе. Сделан вывод, что величины силовых постоянных связей С—H и N—H изученных молекул зависят от степени взаимодействия протонов этих связей с неподеленными электронами атомов N. И. В. А.



1984

Frenking Gernot, Koch
Wolfram.

ссылка J. Mol. Struct., 1984, 110,
N 1-2, Suppl. Theochim.,
19, N 1-2, 49-59.

(ср. CH_2FH^+ ; III)

CH_3NH_2

1984

Cremer Dieter, Kraka
Elfi.

Angew. Chem., 1984,
96, N 8, 612-614.

($\bullet$ C₂H₆; III)

CH_3NH_2

(M. 20 665) 1984

Maak H.K., Stuhl F.,

J. Phys. Chem., 1984,

88, N16, 3627-3633.

Литер.
примеч.

CH_3NH_2

1984

Meyne E., Raabe G., et al
Z. Naturforsch., A: Phys.
Phys. Chem., Kosmophys.
1984, 39A(6), 593-5.

теор.
расчет

(ср. $\text{H}\overset{\bullet}{\text{N}}\text{H}_2$; III)



1984

Maquieir Francis,
Stahl Daniel, et al.

J. Chem. Soc. Chem.
Commun., 1984, N8,
504-506.

( CH_3F^+ ;

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

1984

racem^y,
 ΔH , 2e;

Mukhopadhyay A.K.
Mukherjee N.G.

Z. phys. Chem., 1984,
265, N2, 344-350.

( cu. CH_4 ; III)

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

1984

Musso Gian Franco,
Magnasco Valerio.

meop.

pacrem

Mol. Phys. 1984, 53 (3),

615-30.

(cur. ● $\text{CH}_3 \text{CH}_3$; III)

CH_3NH_2

1984

Raghavachari Krishnan.

Pacrem
Vi;

J. Chem. Phys., 1984,
81, N6, 2717-2722.

($\bullet$ C_{100}H_4 ; III)

СН₃ NH₂

1984

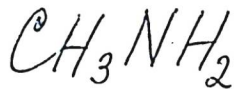
6 Д79. Свойства симметрии и вычисление энергии вращательно-торсионно-инверсионных уровней метиламина. Symmetry properties and the calculation of the rotation-internal rotation-inversion energy levels in methylamine. Sztraka L. «Acta phys. hung.», 1984, 55, № 1—4, 135—160 (англ.)

Рассмотрено вычисление энергии вращательных уровней молекул типа метиламина, имеющих 2 колебания с большой амплитудой (внутреннее вращение и инверсия). Построены классический и квантовомеханич. гамильтонианы для вращательно-торсионно-инверсионного движения, в котором минимизация кориолисова взаимодействия проведена методом внутренних осей. Дана классификация вращательно-инверсионно-торсионных уровней по типам симметрии перестановочно-инверсионной группы Лонге—Хиггинса. Методом контактных преобразований получено выражение для эффективного редуцированного вращательного гамильтониана в фор-

Вычисление
энергии
вращат. ур.

ср. 1985, 18, № 6

ме Уотсона, содержащего 15 независимых членов типа
квартичного центробежного искажения. Вычислены мат-
ричные элементы этого гамильтониана. М. Р. Алиев



1984

Tossell J. A., Moore J. H.,
et al.

Int. J. Quantum Chem.:

Quantum Chem. Symp., 1984,

Czechoslovakia N 18; Proc. Int. Symp. Atom.

Mol. and Solid-State Theory

and Computat. Quantum Chem.

Flagler Beach, Fla, March 1-15,

1984, 483-495. (see NH_3 ; III)

CH_3NH_2

DM-23005 1985

75 Л211. Дальнейшее разрешение ИК-полос веерного колебания аминогруппы в метиламине. Further resolution of the infrared amino wagging band of methylamine. Diallo A. O., van Thanh Nguyen, Rossi I. «Spectrochim. acta», 1985, A41, № 12, 1485—1489 (англ.)

Получен ИК-спектр ($4000\text{—}400\text{ см}^{-1}$) молекул CH_3NH_2 (I) в газовой фазе при давл. 20 мм рт. ст. и спектральном разрешении $0,25\text{ см}^{-1}$. Исследована структура ИК-полосы веерного колебания (K) аминогруппы I с частотой $\sim 780\text{ см}^{-1}$. Проведен теоретич. анализ параметров данной полосы в спектре I. Получен вид гамильтониана для крутильного K I. Найдены частоты компонент тонкой структуры Q-полосы веерного K I. Показано, что удовлетворительное согласие данных расчета и наблюдаемых параметров ИК-полос K I может быть достигнуто при условии эффективного взаимодействия инверсионного и крутильного K I.

И. В. А.

(Vi)

фр. 1986, 18, N5

CH_3NH_2

1985

Om. 23 005

104: 78027z Further resolution of the infrared amino wagging band of methylamine. Diallo, A. O.; Van Thanh, Nguyen; Rossi, I. (Lab. Infrarouge, Assoc., CNRS, 91405 Orsay, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1985, 41A(12), 1485-9 (Eng). The so-called A'-type amino wagging band of MeNH_2 was reexamd. by using 0.25 cm^{-1} resolu. IR spectroscopy. The central portion of the band, reported hitherto as a plateau, is resolved into multiplets. The obsd. fine structure of the Q-branch absorption lines are in agreement with calcns. based on theory for the coupling between the inversion and internal rotation of MeNH_2 .

(2i)

C.A. 1986, 104, N10

CH_3NH_2

1985

Gribov L.A., Rasovskiy M.R.

рацем J. Mol. Struct., 1985, 122,
запом N 1-2, Suppl.: Theochim,
пересогос 23, N 1-2, 15-34.

(сес. H_2O_2 ; III)

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

1985

Meaton M. M.,
Mills D.

paper in
M. N.,
J, Δ H;

Int. J. Quantum
Chem., 1985, 28, N2, 163-
-180.

● (c.w. $\text{CF}_3 \text{NH}_2$; III)

№. NCH3

1985

19 B1056. Валентный критерий для бирадикалов и цвиттер-ионов. A valence criterion for diradicals and zwitterions. Jug K. «Tetrahedron Lett.», 1985, 26, № 11, 1437—1440 (англ.)

Изучена возможность применения индекса реализованной валентности атома (V_A) для идентификации бирадикальных и цвиттер-ионных соединений. Такие соединения должны обладать субвалентными и гипервалентными атомами, для к-рых вычисл. индексы V_A существенно отличаются от станд. целочисленных значений $V_C=4$, $V_N=3$, $V_O=2$. На примерах этилена (состояние T_1 /симм. D_{2h} ; состояния S_0 , T_1 /симм. D_{2d} , C_s), триметиленметана (T_1/D_{3h}), циклобутadiена (T_1 и S_0/D_{4h}), бензола (T_1/D_{2h}) показано, что сумма вычисл. индексов V_A в углеводородных бирадикалах приблизи-

геометр.,
структура

(49) 

X. 1985, 19, N 19

тельно на 2 ед. меньше суммы станд. валентностей. Для цвиттер-ионных состояний этилена (S_1 и S_2/C_s) она немного меньше (1,4 и 1,6). Отмечено, что предлагаемый критерий бирадикального характера молекул допускает нарушение синглет-триплетного вырождения. Оно отсутствует, напр., для хиноидного триплетного состояния бензола $T_1(D_{2h})$, но пониженные до 3,27 индексы V_c двух атомов углерода указывают на его бирадикальный характер. На примерах изомеров $\underline{H_2NCH_3}$ и $\underline{H_3NCH_2}$, $\underline{H_2NNH_2}$ и $\underline{H_3NNH}$, $\underline{H_2NOH}$ и $\underline{H_2NO}$, $\underline{H_3CON}$ и $\underline{H_4CO}$, $\underline{H_2VCHO}$ и $\underline{H_3VCO}$ показано, что цвиттер-ионы характеризуются не только большими значениями дипольных моментов, но и существенным отклонением индексов V_A от станд. значений, в то время как для «нормальных» изомеров наибольшее их различие составляет 0,09 (V_c для H_2VCHO).

С. Г. Семенов



1985

Koch Wolfram,
Maquin F., et al.

открыт.,
реценз.
(обзор)

Chimia, 1985, 39,
N 12, 376-384.

(ссыл. CH_2H^{2+} ; III)

CH_3NH_2

1985

Magnasco Valerio,
Rui Marina, et al.

Uo;

Chem. Phys. Lett., 1985,
115, N 4-5, 395-400.

( CH_3CH_3 ; III)

CH_3NH_2

1985

Meot-Ner (Mautner) M.,
Deakyne C. A.

сверх-
масса

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N2, 469-474.

(cell. $(\text{CH}_3)_4\text{N}^+\text{H}_2\text{O}$; III)

$[CH_5N]^{\bullet+}$ [Om. 22510]

1985

Nguyen M. T., Hegarty A. E.,
Brint P.,

смыкы-
па, млеп.
рацим,
s Hf

J. Chem. Soc. Dalton.

Trans., 1985, N 9, 1915-

● 1921.

CH_3NH_2

1985

Reed Alan E.,
Weinstock Robert B., et al.

ab initio
pacem

J. Chem. Phys. 1985,
83(2), 735-46.

(corr. CH_3F ; III)

CH_3NH_2

1985

Smits G. F., Altona C.

Ho, E.

Theor. Chim. acta, 1985,
67, N 6, 461-475.

●
(civ. CH₄; III)

CH_3NH_2

1985

9 Л186. Силовое поле молекулы гидроксиламина, рассчитанное неэмпирическим методом МО. Force field in the hydroxylamine molecule from ab initio MO calculation. Tanaka Naoki, Hamada Yoshiaki, Tsuboi Masamichi. «Chem. Phys.», 1985, 94, № 1—2, 65—75 (англ.).

На основании расчета молекулы гидроксиламина неэмпирич. методом ХФ ССП МО в базисе 4-31G* получены 69 ангармонических силовых постоянных, достаточно полно характеризующих силовое поле молекулы. Вычисленные значения частот фундаментальных колебаний с учетом ангармоничности в среднем на 6% превышают эксперим. значения, что объясняется ошибками в квадратичных силовых постоянных. На основе модели орбитальных взаимодействий радикалов проведено сравнение геометр. параметров и силовых кон-

стат молекул метиламина, гидразина и гидроксиламина. Е. П. Смирнов

анг. пост., ν_i ,
геометр., стр.—
ф. 1985, 18, № 9

NH_2CH_3

1985

Yabushita Satoshi,
Gordon Mark S.

рецензир,
эксперт,
Δ U

Chem. Phys. Lett., 1985,
117, N 4, 321-325.

● (ср. NH_3 ; III)



1985

19 Б1062. Радикал-катион метиленаммиака ($\text{CH}_2\text{-NH}_3^+$). The methyleneammonium radical cation ($\text{CH}_2\text{-NH}_3^+$). Yates B. F., Nobes R. H., Radom L. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 116, № 6, 474—477 (англ.).

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием 5 базисных наборов от 6—31* ГФ до 6—311 ГФ, дополненных диффузными s- и p-ф-циями и поляризац. d- и f-ф-циями и учетом электронной корреляции во 2-(МП2), 3-(МП3) и 4-(МП4) порядках теории возмущений Меллера — Плессета выполнены расчеты относит. стабильности радикал-катионов метиламина CH_3NH_2^+ (I) и метиленаммиака CH_2NH_3^+ (II). Оптимизация геометрии выполнена в базисе 6—31* ГФ с учетом МП2. Все расчеты предсказывают, что структура II стабильнее, чем I. Показано, что расширение базиса увеличивает относит. стабильность II от 16 до 21 кДж/моль. Учет МП3 понижает эту величину на ~7 кДж/моль, а учет МП4 еще на ~3 кДж/моль. С учетом поправки на энергию нулевых колебаний

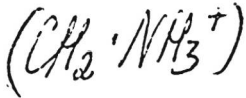
д.г. геометрии
структура

(4)

Х. 1985, 19, N 19

структура II стабильнее I на 8 кДж/моль. Выполнена
теор. оценка теплоты образования II. А. Е. Смоляр

тр
ных.



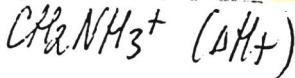
1985

9 Д135. Метиленаммониевый катион-радикал ($\text{CH}_2\text{-NH}_3^+$). The methyleneammonium radical cation ($\text{CH}_2\text{-NH}_3^+$). Yates Brian F., Nobes Ross H., Radom Leo. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 116, № 6, 474—477 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах гауссовых ф-ций от 6-31ГФ до 6-211ГФ с учетом поляризационных ф-ций p -типа для атомов Н и d - и f -типов для атомов С и N и корреляции электронов вплоть до четвертого порядка теории возмущений Меллера—Плессетта с полной оптимизацией геометрии исследовано электронное строение металамина (I) и метиленаммониевого катион-радикала, CH_2NH_3^+ (II). Подтвержден полученный ранее вывод, (см. Bouma W. J. et al. «Org. Mass. Spectrom.», 1983, 18, 12) о том, что II энергетически выгоднее, чем I, на 8 кДж/моль (в самом точном расчете) в связи с чем подвергнуты сомнению эксперим. данные (см. Holmes J. L. et al., «Can.

расчет геометр,
стр, ΔH°

ф. 1985, 18, № 9



J. Chem.», 1983, 61, 2305), свидетельствующие о том, что I энергетически выгоднее, чем II, на 115 кДж/моль. Теплота образования II найдена равной 835 кДж/моль (с учетом поправки на энергию нулевых колебаний). Приведены равновесные геометрич. параметры. Библ. 22.
В. Л. Лебедев



CH_3NH_2^+

[Om. 25289]

1986

Bonazkolia L., Leray N.,
Roncin J., et al.,

Смесь
ab initio
расчета

J. Phys. Chem., 1986,
90, N 22, 5573-5578.

CH₃NH₂

OM 23 685

1986

2) 18 Б1103. Колебательные поправки для метиламина и определение средней структуры для основного колебательного состояния. Vibrational correction for methylamine and determination of the zero-point average structure. Iijima Такао. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1986, 59, № 3, 853—858 (англ.)

Метод учета колебат. поправок для молекул с большими амплитудами колебаний применен к определению средней структуры метиламина в основном колебат. состоянии. Особое внимание при решении задачи обращено на координату, описывающую внутр. вращение. Для расчета средн. структуры использованы совместные электронографич. данные и микроволновые данные по эффективным моментам инерции. Получены след. значения параметров r_z -структуры для CH₃NH₂: $r(\text{C—N}) = 1,471$ (3), $r(\text{C—H}) = 1,101$ (3), $r(\text{N—H}) = 1,019$ (6) Å, $\angle \text{HCH} = 108,4$ (5), $\angle \text{HNN} = 106,0$ (6), $\angle \text{CNH} = 111,5$ (7)°. Найдены также параметры для дейтерированных молекул, значения к-рых хорошо согласуются с вычисл. для др. молекул.

(М.А.)

X. 1986, 19, n18

Б. И. Жилинский

CH_3NH_2

[Om. 24056]

1986

леонид
структура

Tijima T., Jimbo H.,
Taguchi M.,

J. Mol. Struct., 1986,
144, N 3-4, 381-383.

CH_3NH_2

[om. 25118]

1986

Ikuta S.,

Ap,
ab initio

Chem. Phys., 1986, 108,
N.3, 441-449.

CH_3NH_2

(Dm. 24194)

1986

Musso G. F., Rui M.,
Magrascio V.

Chem. Phys. Lett., 1986,

V_0 ,
meop.
pacrim. 126, N3-4, 335-341.

CH_3NH_2

[Om. 25207]

1986

Peel J.B.,

ab initio
pacem

Austral. J. Chem.,
1986, 39, N 8, 1281-5.

CH₃NH₂ (DM-24756)

1986

Turi Nagy Z., Tvaroška I.
et al.

молекула.
схемат.,
теор.
расчет.

Collect. Czechosl. Chem.
Commun., 1986, 51, N 9,
1803-1818.

$\text{NH}_3 \cdot \text{HCH}$

1987

ab initio
calculations.

Cammins P. L.,
Baeskae G. B., et al.

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

(see $\text{N}_2 - \text{HF}$; III)

CH_3NH_2

1987

/ 107: 144019p Far infrared spectrum of methylamine. Malghani, M. S.; Lees, R. M.; Johns, J. W. C. (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *Int. J. Infrared Millimeter Waves* 1987, 8(8), 803-25 (Eng). The far-IR (FIR) spectrum of MeNH_2 was studied in the 25-125 cm^{-1} region at a resoln. of 0.005 cm^{-1} with a BOMEM Fourier transform spectrometer. All of the R branches with K rotational quantum no. from 5 to 13 were identified for A -a and E -a torsion-inversion symmetries in the ground torsional state, as well as some branches of A -s and E -s symmetries and some in excited torsional states. The obsd. branches were fitted to series expansion to det. the branch origins.

see enckmjr

C.A. 1987, 107, N16

CH_3NH_2

От 28 832

1987

6 Л187. Далекий инфракрасный спектр и константы основного состояния метиламина. Far-infrared spectrum and ground state constants of methyl amine. Ohashi Nobukimi, Takagi Kojiro, Hougen Jon T., Olson W. Bruce, Lafferty Walter J. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 2, 443—459 (англ.).

На высокоразрешающем фурье-спектрометре получены вращательные и крутильные спектры метильной группы молекулы метиламина. Значения параметров вращательного гамильтониана для основного состояния молекулы использованы при отнесении линий в полосе крутильных колебаний метильной группы. Получены удовлетворительные значения частот линий вращательно-крутильно-инверсионных переходов для значений вращательных квантовых чисел $0 \leq K \leq 19$ и $K \leq J \leq 30$.
В. А. Морозов

М.П.

ф. 1988, 18, № 6

CH_3NH_2

(OM-28832)

1987

газекый
ИК спектр,
М.П.

108: 28751t Far-infrared spectrum and ground state constants of methylamine. Ohashi, Nobukimi; Takagi, Kojiro; Hougen, Jon T.; Olson, W. Bruce; Lafferty, Walter J. (Fac. Sci., Kanazawa Univ., Kanazawa, Japan 920). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 126(2), 443-59 (Eng). The far-IR spectrum of MeNH_2 was studied at 40-350 cm^{-1} by Fourier transform spectroscopy with an apodized resolu. of $\leq 0.005 \text{ cm}^{-1}$. Both the pure rotational spectrum and the spectrum of the fundamental torsional band were assigned. The ground state consts., obtained from a global fitting of a data set including ground state microwave transitions from the literature as reported, as well as far-IR pure rotational ground state transitions and ground state combination differences from the torsional band. Slightly over 1000 energy differences for the ground state with $0 \leq J \leq 19$ and $K \leq J \leq 30$ were fit to 30 mol. parameters from a group theor. formalism developed earlier, and a std. deviation of $\pm 0.0006 \text{ cm}^{-1}$ was obtained. An ambiguity (noted earlier in the microwave literature) in the detn. of the structural parameter ρ , which arises when 2 large amplitude motions are present in the mol., can be understood and resolved using the present formalism.

С.А. 1988, 108, N 4

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

1987

Д8 Д78. Туннельная проблема кручения-поворотов и проблема кручения-поворотов — вращения в метиламине. The torsional-wagging tunneling problem and the torsional-wagging-rotational problem in methylamine. Ohashi Nobukimi, Hougen Jon T. «J. Mol. Spectrosc.». 1987, 121, № 2, 474—501 (англ.)

Теоретический формализм, который ранее применялся для нахождения значений уровней энергии внутреннего вращения в молекуле метиламина, усовершенствован т. обр., что он может использоваться при рассмотрении поворотных (зонтичных) движений группы NH_2 и крутильного движения группы CH_3 вблизи пределов, определяемых высотой соответствующих энергетич. барьеров. Отдельно рассматриваются колебательная туннельная и вращательная задачи крутильных поворотов. При этом используются свойства перестановочно-инверсионной группы G_{12} и расширенной группы G_{12}^m . Приведено выражение для феноменологического вращательного га-

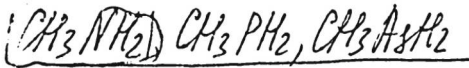
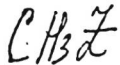
Vpr.

ф. 1987, 18, № 8

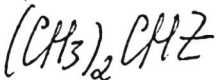
мильтонниана молекулы, содержащего линейные и квадратичные члены относительно компонент полного углового момента. Даны правила отбора для вращательных и крутильно-поворотных (колебательных) переходов, с использованием которых построена гамильтоновская крутильно-поворотно-вращательная матрица. Детальное применение метода к объяснению спектра метиламина предполагается опубликовать в следующей работе.

В. А. Морозов





1987

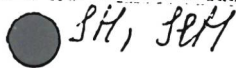


□

теорет. расчёт
эксперим.,
сравнение.



C. A. 1987, 107, N 22



16

с. 107

107: 205-193n Substituent stabilization energies in α -substituted carbocations CH_2Z^+ , $CH_3CH_2Z^+$ and $(CH_3)_2CHZ^+$ where Z is NH_2 , PH_2 , AsH_2 , OH , SH and SeH . Rodriguez, C. F.; Hopkinson, A. C. (Dep. Chem., York Univ., North York, ON Can. M3J 1P3). THEOCHEM 1987, 37(1-2), 55-68 (Eng). Ab initio MO calcs. at the MINI 1 and 3-21 G levels of theory were used to optimize structures for α -substituted carbocations CH_2Z^+ , $CH_3CH_2Z^+$, and $(CH_3)_2CHZ^+$, and for the hydrocarbons CH_3Z , CH_3CH_2Z and $(CH_3)_2CHZ$ where Z is NH_2 , PH_2 , AsH_2 , OH , SH and SeH . Energy differences between conformers as calcd. by theory are compared with exptl. results. Substituent stabilization energies, calcd. by using isodesmic reactions, are largest in primary ions and smallest in tertiary ions. For elements from Group V the stabilizing effect of an α -substituent is $NH_2 > PH_2 > AsH_2$ and for Group VI $OH > SH > SeH$. There is a good correlation between exptl. and calcd. values for the effect of Me substitution on the hydride affinities of substituted Me cations.

CH_3NH_2

от 28512

1987

→ 13 Б1310. Определение потенциальной функции инверсии и геометрии метиламина по данным микроволновых и инфракрасных спектров. Determination of the inversion potential function and the geometry of methylamine from microwave and infrared data. Sztraka L. «Acta chim. hung.», 1987, 124, № 6, 865—876 (англ.)

Рассчитаны константы потенциальной ф-ции инверсии и внутр. вращения, а также геометрия молекулы метиламина (I) в основном состоянии и в состоянии с возбуждением инверсии. Для определения барьеров вращения и инверсионных расщеплений использованы 108 линий в микроволновых спектрах и 150 линий с разрешением $0,045 \text{ см}^{-1}$ в ИК-спектрах газ. I. Барьер инверсии I оказался значительно выше (2081 см^{-1}), чем было рассчитано ранее (1823 см^{-1}) и выше барьера инверсии молекулы аммиака ($2027,1 \text{ см}^{-1}$). Барьеры внутр. вращения V_3 и V_6 и геометрия молекулы изме-

М.П.

Х. 1988, 19, N 13

няются при возбуждении инверсии, так $V_3 = 682,9 \text{ см}^{-1}$, а $V_6 = -2,653 \text{ см}^{-1}$ в основном состоянии, $V_3 = 711,3 \text{ см}^{-1}$, $V_6 = -2,7 \text{ см}^{-1}$ в возбужденном состоянии. Вращат. постоянные при этом почти не меняются. При подборе геометрии I по экспериментальным вращат. постоянным принят в расчет усредненный эффект инверсии, к-рый раньше не учитывали. И. А. Гарбузова

H_3NCH_2 (DM. 31326) 1988

Catalan J., De Paz J. L. G.,

et al.,
J. Mol. Struct. Theorchem,
meopem. 1988, 181, N1-2, 61-70.
paerem.

A Theoretical Study of N-oxides
(H_3NO), N-  Imines (H_3NNH)

and N-Y Lides (H_3NCH_2).

CH_3NH_2 (OM-30736a) 1988

Duncan J.L., Mc Kean D.C. et al.,

сперми-
резонанс.
постоян.
ангармон.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. Pt II 1988, 84, N 9,
1423-42.

CH_3NH_2

(Om. 29378)

1988

спектр
потери
электронов
применяет
высшая
состояния
с энергией
4, 75 эВ.

Hebin-Franzkin M. J.,
Delwiche J., et al.,
J. Phys. B: Atom., Mol.
and Opt. Phys." (formerly
"J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys"], 1988, 21, N1, 189-202

CH_3NH_2

1988

/ 110: 124242q Far infrared laser assignments for methylamine. Lees, R. M.; Lewis-Bevan, W. (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 5A3). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1988, 1039(Int. Conf. Infrared Millimeter Waves, 13th, 1988), 358-9 (Eng). High-resoln. FTIR spectroscopy of the C-N stretching band of MeNH_2 permitted location of several coincidences with CO_2 laser lines and identification of far-IR (FIR) laser transitions optically pumped by these lines. With the use of previous FIR spectroscopic results, it was possible to form closed frequency combination loops to support the assignment of 1 of the IR-pump/FIR laser transition systems and improve the accuracy of 1 of the FIR laser frequencies.

UK Pyro
CNEKMP

C.A. 1989, 110, N 14

HCNH⁺

1988

108: 121238r The ν_3 fundamental band of protonated hydrogen cyanide (HCNH⁺) and the $2\nu_3 \leftarrow \nu_3$ and $\nu_2 + \nu_3 \leftarrow \nu_2$ hot bands of formyl cation (HCO⁺). Liu, Di Jia; Lee, Sze Tsen; Oka, Takeshi (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(1), 236-49 (Eng). The ν_3 (CN stretch) fundamental band of HCNH⁺ and $2\nu_3 \leftarrow \nu_3$, $\nu_2 + \nu_3 \leftarrow \nu_2$ hot bands of HCO⁺ were obsd. at $\sim 5 \mu\text{m}$ using a tunable IR diode laser and an a.c. glow discharge. These transitions were combined with previously obsd. transitions, and the following mol. consts. were detd.: HCNH⁺, $B_0 = 37275.4(7)$ MHz and $\alpha_3 = 192.4(3)$ MHz; HCO⁺, $\chi_{23} = 0.134(2)$ cm⁻¹ and $\chi_{33} = -10.054(2)$ cm⁻¹. B_e 's were calcd. of HCNH⁺ isotopic species by scaling α_i from the theor. prediction and the equil. bond length of HCNH⁺ was estd.

(23)

C.A. 1988, 108, N 14

CH_3NH_2

(OM. 30798)

1988

гашки
и к спектр

110: 15312s Far-infrared spectrum of methyl amine. Ohashi, Nobukimi; Takagi, Kojiro; Hougen, Jon T.; Olson, W. Bruce; Lafferty, Walter J. (Fac. Sci., Kanazawa Univ., Kanazawa, Japan 920). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 132(1), 242-60 (Eng). The far-IR spectrum of MeNH_2 was studied at 40-350 cm^{-1} with a resolu. of 0.005 cm^{-1} or better. The pure rotational spectrum in the 1st excited torsional state, and the fundamental torsional band were assigned. The obtained data were combined with microwave data from the literature, and a global fit was carried out, based on a group theor. formalism developed previously. The >650 transitions with $0 \leq K \leq 14$ and $K \leq J \leq 25$ were fit to 41 mol. parameters, with a std. deviation of $\pm 0.00094 \text{ cm}^{-1}$. This std. deviation was achieved by including J- and K-dependent (centrifugal distortion) corrections to the structural parameter ρ . Problems remaining in the fit presumably arise from the neglect of 5 tunneling and nontunneling terms with selection rules $\Delta K = \pm 1$. Some aspects of the torsional potential function and inversion potential function in this mol. are discussed.

C.A. 1989, 110, N2

CH₃NH₂

От 30798

1988

! 5 Л152. Длинноволновый ИК-спектр метиламина. Отнесение и анализ первого торсионного состояния. Far-Infrared spectrum of methyl amine. Assignment and analysis of the first torsional state / Ohashi Nobukimi, Takagi Kojiro, Hougen Jon T., Olson W. Bruce, Lafferty Walter J. // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 132, № 1.— С. 242—260.— Англ.

Получены спектры длинноволн. ИК-поглощения паров метиламина в области 40—350 см⁻¹ с разрешением не хуже $5 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹. Проведено отнесение вращательной структуры спектров первого возбужденного торсионного состояния и фундаментальных частот торсионных переходов. С использованием литер. данных по микроволн. поглощению и теоретико-группового формализма создана модель, содержащая 41 параметр и позволяющая описать частоты 650 переходов с отклонением не более 10^{-4} см⁻¹. Кратко обсуждаются некоторые особенности потенциальной ф-ции торсионных колебаний. К. Э. М.

М.П.

ф. 1989, № 5

CH_2NH_3

1988

Peeters D., Leroy G.,
et al.

Vibrations,
u. n.

J. Mol. Struct. Theo-
chem, 1988, 166, 267-
277.

(comp. CH_2CH_3 ; iii)

CH₃NH₂

(Om-30057)

1988

/ 109: 116415n Theoretical investigations of the nature of intramolecular interactions. II. Application of the energy decomposition scheme to methanamine, methanol, hydrazine, hydroxylamine, and hydrogen peroxide. Smits, Guido F.; Krol, Maarten C.; Altona, Cornelis (Gorlaeus Lab., Leiden Univ., NL-2300 RA Leiden, Neth.). *Mol. Phys.* 1988, 63(5), 921-38 (Eng). A previously developed energy decompn. scheme in terms of quasi-classical, interference and charge transfer interactions between non-orthogonal, strictly local MOs (NOLMOs) is applied to the study of the barriers to internal rotation in some simple mols., i.e. CH₃NH₂, CH₃OH, NH₂NH₂, NH₂OH and HOOH. The barriers in these mols. essentially arise from a combination of a no. of predominant quasi-classical and interference effects. It is shown that the functional behavior of vicinal interference interactions can be classified into three different types. Each type displays a characteristic functional behavior, which can be predicted simply on the basis of the difference in abs. values between the overlap at the synperiplanar and antiperiplanar conformations.

V₀, mwp. param

(44) 

c. A. 1988, 109, N 14

CH_3NH_2

(от 30057)

1988

3) 12 Д144. Теоретическое исследование природы внутримолекулярных взаимодействий. Ч. II. Применение схемы разбиения энергии к молекулам CH_3NH_2 , CH_3OH , NH_2NH_2 , NH_2OH и HOON . Theoretical investigations of the nature of intramolecular interactions. II. Application of the energy decomposition scheme to CH_3NH_2 , CH_3OH , NH_2NH_2 and HOON . Smits Guido F., Krol Maarten C., Altona Cornelis. «Mol. Phys.», 1988, 63, № 5, 921—938 (англ.)

Электронные волн. ф-ции и энергии различных ротамеров молекул CH_3NH_2 , CH_3OH , NH_2NH_2 , NH_2OH и HOON рассчитаны методом строго локализованных неортогональных МО в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций 4—31 ГФ. Получено разбиение электронной энергии на квазиклассическую и интерференционную компоненты и вклад эффектов переноса заряда («Theor. Chim. Acta», 1985, 67, 461). Показано, что существование барьеров вращения обусловлено спецификой пове-

М.А.

2140

ф. 1988, N 12

дения квазиклассической и интерференционной компоненты и в большинстве случаев — вкладами взаимодействия неподеленных пар. Отмечено, что ограничения при оптимизации МО, обеспечивающие корректность разбиения энергии, не вносят существенных искажений в характер зависимости от торсионных углов ч. I. «Mol. Phys.», 1986, 59, 209. Библ. 24. А. В. Зайцевский



CH_3NH_2

(om. 32778)

1989

Guo H., Karplus M.,

geom.
momen-
tium

J. Chem. Phys., 1989, 91,
N 3, 1719-1733.

Basis set and polarization
function effects on optimi-
zed geometries and harmo-

0001

nic frequencies at the second-order Møller-Plesset perturbation level.

СМЗ НМ₂

от 31 444

1989

6 Д54. Геометрия и потенциальная функция инверсии — внутреннего вращения метиламина. The geometry and inversion—internal rotation potential function of methylamine / Kreglewski Marek // J. Mol. Spectrosc.—1989.— 133, № 1.— С. 10—21.— Англ.

Для молекулы CH_3NH_2 рассчитаны геометрия и потенц. ф-ция инверсии — внутреннего вращения из вращательного спектра в основном колебательном состоянии и из ветвей PQ и RQ в первых возбужденных состояниях инверсии и внутреннего вращения. Вращательно-колебательные энергетич. уровни рассчитывались непосредственно из структуры и из потенц. ф-ции с использованием гамильтониана полужесткой инверсии — внутреннего вращения — вращения. Полученные результаты могут быть применены к отнесению вращательной структуры ИК-спектра внутреннего вращения и инверсионных полос.

Н. В. В.

М.П., $V_{\text{ф}}$

ср. 1989, № 6

CH_3NH_2

(DM 31444)

1989

110: 84452z The geometry and inversion-internal rotation potential function of methylamine. Kreglewski, Marek (Inst. Phys. Chem., Univ. Kiel, D-2300 Kiel, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 133(1), 10-21 (Eng). The geometry and the inversion-internal rotation potential function of MeNH_2 were detd. from the rotational spectrum in the ground vibrational state and from the ^PQ and ^BQ branches in the 1st excited states of inversion and of internal rotation. The rotation-vibration energy levels were calcd. directly from the structure and from the potential function using a semirigid inversion-internal rotation-rotation Hamiltonian. This approach will make it possible to assign the rotational structure of the IR internal rotation and inversion bands.

структура,
потенс.
ф-ция, ν_i

C.A. 1989, 110, N 10

CH_3NH_2

1989

McKear D.C.

D(C-H)

Int. J. Chem. Kinet.

1989. 21, N6. C. 445-464.

( C₂H₄; III)

CH_3NH_2

1989

9 Б1340. Далекий инфракрасный спектр метиламина: Отнесение второго торсионного состояния. Far-infrared spectrum of methyl amine: Assignment of the second torsional state / Oda M., Ohashi N. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 1.— С. 246—250.— Англ.

Выполнена идентификация ранее полученного ИК-фурье-спектра в обл. частот $40\text{--}350\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,005\text{ см}^{-1}$ метиламина, CH_3NH_2 (/ Ohashi N. et al. // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 132.— С. 242) учетом второго возбужденного торсионного состояния. Идентифицировано 35 чисто вращательных переходов во втором торсионном состоянии и 87 переходов $v=2\leftarrow 1$ торсионной полосы. Анализ ИК-спектра осуществлен с использованием теоретико-группового фор-

М.П.

X.1990, N 9

мализма, развитого ранее, с включением 22 молек. параметров. Определены разности энергий для торсионных состояний $W(A, v=2) - W(A, v=0) = 452,776(2) \text{ см}^{-1}$, $W(E, v=2) - W(A, v=0) = 489,532(1) \text{ см}^{-1}$, к-рые довольно хорошо согласуются с результатами модельного расчета 452,405 и 490,367 см^{-1} , соответственно. С. Н. Мурзин

CH_3NH_2

1989

6 Б1511. Микроволновый спектр метиламина: отнесение и анализ первого торсионного состояния. Micro-wave spectrum of methyl amine: assignment and analysis of the first torsional state / Ohashi N., Tsunekawa S., Takagi K., Hougen J. T. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 137, № 1.— С. 33—46.— Англ.

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в области частот 2,7—60 ГГц и МВ-спектрометре с модуляцией источника в области 60—90 ГГц с точностью 0,1 МГц заново измерен спектр метиламина, CH_3NH_2 , в первом торсионном состоянии. Анализ МВ-данных вместе с ранее полученными МВ- и ИК-данными выполнен с использованием эффективного туннельно-вращат. гамильтониана для инверсионного туннельного движения NH_2 и внутреннего вращения CH_3 с учетом матричных элементов $\Delta K = \pm 1$ взаимодействий в первом торсионном состоянии. Для расчета частот 714 линий использовано 38 молекулярных параметров. Уточненные значения вращат. постоянных в основном состоянии равны в МГц $A-B=81099,8620(2300)$, $B=22103,36036(4900)$, $B-C=763,5707(2500)$.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1990, № 6

CH₃NH₂

1989

(111: 122936r Microwave spectrum of methyl amine: assignment and analysis of the first torsional state. Ohashi, Nobukimi; Tsunekawa, Shozo; Takagi, Kojiro; Hougen, Jon T. (Fac. Sci., Kanazawa Univ., Kanazawa, Japan 920). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 137(1), 33-46 (Eng). The microwave absorption spectrum of MeNH₂ were reinvestigated at 7-90 GHz, with the aim of analyzing the 1st torsional state. By combining the newly obtained microwave data with the far-IR and microwave data already available, it was possible to make an anal. of the tunnelling-rotational levels of the 1st torsional state in which 3 types of $\Delta K = \pm 1$ elements were introduced into the Hamiltonian matrix described in the group-theor. formalism developed previously. The present global fit uses 38 mol. parameters (3 fewer than previously) to describe 714 transitions involving tunneling-rotational levels of the 1st excited torsional state (57 more than previously). It resulted in a satisfactorily small std. deviation of 0.00095 cm⁻¹ (almost the same as previously) for $J \leq 30$ (5 J values higher than included previously). On the basis of this fit, avoided crossing between $K = 0$ and 1 levels belonging to A and B species in the mol. symmetry group G_{12} are discussed. Stark effect data, remeasured during the present study, was examd. in connection with the $\Delta K = \pm 1$ interaction.

(yb cnekmp)

C.A. 1989, 111, N 14

CNH_5^+

[om. 31515]

1989

Pius K., Chandrasekhar Z.,

ab initio
расчет
стабильн.
и структ.

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process 1989,
87, 21, 15-18.

CH_3NH_2

1989

24 Б1251. Квантовохимическая оценка факторов, определяющих силовые взаимодействия в монозамещенных метана / Тупицын И. Ф., Пузанов Ю. В., Шibaев А. Ю. // Теор. и эксперим. химия.— 1989.— 25, № 4.— С. 406—412.— Рус.

На основании данных неэмпирич. расчета методом ССП в базисе 3—21 ГФ и полуэмпирич. расчета методом МЧПДП/3 рассмотрены факторы, ответственные за изменения силовых постоянных связей CH (K_{CH}) в молекулах типа CH_3X ($\text{X}=\text{NH}_2, \text{OH}, \text{F}, \text{Cl}, \text{CN}, \text{NC}$). Анализ «орбитальных сил», определяющих величину K_{CH} , показал, что наиболее важный вклад в эту величину для молекул симметрии C_{3v} вносят электроны с МО π -типа. Метильная группа в таких молекулах проявляет эффект сверхсопряжения через свои групповые квази- π -орбитали. Качеств. картина электронных влияний на K_{CH} .

М.А.

(73)

х. 1989, № 24

CH_3OH

$\text{CH}_3\text{F}, \text{CH}_3\text{Cl}, \text{CH}_3\text{CN}$
 CH_3NC

лученная с помощью разложения на компоненты полной силы валентной деформации по Фишеру и Кольмару, в целом согласуется с результатами орбитального рассмотрения. Найдено, что наряду с эффектом сверхсопряжения влияние на величину K_{CH} в ряду pr -ных метана, включающих молекулы с симметрией C_s , оказывают невалентные взаимодействия.

Резюме



CH_3NH_2

(OM. 33938)

1990

Rauk A., Dutler R. et al.
Can. J. Chem. 1990, 68, N2,
258-266.

Infrared and vibrational circular dichroism intensities of model systems ● CH_3OH , CH_3NH_2 , NH_2NH_2 , NH_2OH and HOOH and

the deuterated species, ND_2ND_2 ,
 D_2OOH , and D_2OOD : A theoretical
study using the vibronic coupling
formalism.

CH_3NH_2

1991

114: 32142m Microwave spectrum of methylamine- d_1 : analysis of the ground state. Ohashi, Nobukimi; Oda, Motoki; Takagi, Kojiro (Fac. Sci., Kanazawa Univ., Kanazawa, Japan 920). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 145(1), 180-91 (Eng). The microwave absorption spectrum of methylamine- d_1 was investigated in the range from 20 to 110 GHz. One hundred twenty-two transitions in the ground vibrational state are least-squares-analyzed with 21 mol. parameters according to a group-theor. formalism modified from the method developed previously for CH_3NH_2 . Pure torsional and wagging energy differences are derived from the parameters obtained, and a classical tunneling path during the inversion motion of the unsym. -NHD amino group is deduced by combining an assumed parametrization for the tunneling path with traditional methods for treating the internal rotation problem.

M.A.

C.A. 1991, 114, NY

CH_3NH_2

1992

117:260715t The rotational spectrum of methylamine in a submillimeter-wave range. Kreglewski, Marek; Włodarczyk, Georges (Fac. Chem., Adam Mickiewicz Univ., PL-60-780 Poznan, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 156(2), 383-9 (Eng). The title spectra was measured from 120 to 250 and from 350 to 470 GHz in the ground and first excited torsional states. The line frequencies were cor. for hyperfine quadrupole splitting using a specialized program which accounts for quadrupole-inversion-internal rotation coupling, and used with other available data to improve the accuracy of parameters in the Hougen-Ohashi's group-theor. effective Hamiltonian. The $\Delta K = 1$ parameters in the excited torsional states were significantly changed.

H. Czekmp

C.A. 1992, 117, N 26

CH₃ NH₂

1994

122: 301664z Calculation of force field and vibrational spectra of methylamine using semiempirical quantum mechanical method AM1. Muldagaliev, Kh. Kh.; Khavryuchenko, V. D.; Zaets, V. A. (Inst. Khim. Nauk, Almaty, Kazakhstan). *Izv. Nats. Akad. Nauk Resp. Kaz., Ser. Khim.* 1994, (4), 19-22 (Russ). The force field was calcd. for methylamine using the semiempirical quantum mech. method AM1. For methylamine and its deuterated derivs. the vibrational frequencies were calcd. and the vibrational bands assigned.

(Di, uen. room)

C.A. 1995, 122, N24

$H_3 CNH_2$

1995

Ijaali F., Mo O., et al;

THEOCHEM 1995, 338, 225-33

Ap,
mop-
pact

(cell. HCN,  III)

CH₃NH₂

1996

125:96601v Classification of ground states for methylamine molecule. Burenin, A. V. (Inst. Prikl. Fiz., Nizhniy Novgorod, Russia 603600). *Opt. Spektrosk.* 1996, 80(1), 65-9 (Russ). An expanded geometrical group of symmetry for nonrigid CH₃NH₂ mol. is constructed. The expanded symmetry group contained a point group as a subgroup and incorporated symmetry of intramol. dynamics both for internal rotation of Me group and for the more complex torsional-inversional motion of NH₂ and CH₃ groups. The most complete classification of ground states for methylamine mol. was obtained using the expanded symmetry group in the framework of the concept of chain of symmetry groups for mol. models inserted one into another. Effect of alteration of mol. models on elec. dipole selection rules was discussed as an example of the expanded group application.

неоп. paper

C.A. 1996, 125, N8

CH_3-NH_2

[OM-38522]

1996

$\text{CH}_3-\text{NH}_2^+$

Harold Basch, Pinchas Ared
et al.,

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

Mol. Phys., 1996, 89, No. 2,
331-354.

De,

Re

ab initio
pacem

F: CH₃NH₂

P: 3

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

Описан метод расчета ИК-спектров нежестких молекул с колебаниями большой амплитуды и применен к молекулам метил- и диметиламинов. Результаты расчета находятся в хорошем согласии с эксперим. данными и позволяют уточнить отнесение некоторых полос спектров.

1996

CH_3NH_2

1997

128: 81551s Coupling between the first inversion and the third torsional levels in the IR spectrum of methylamine. Sztraka, L.; Alanko, S.; Koivusaari, M. (Budapesti Muszaki Egyetem, Fizikai Kémia Transzek, Hung.). *Magy. Kem. Foly.* 1997, 103(9), 420-426 (Hung), Magyar Kemikusok Egyesulete. A no. of transitions (8813) have been assigned in the $n = 1 \leftarrow 0$ wagging band range $680\text{--}900\text{ cm}^{-1}$ of the high resolu. (0.0026 cm^{-1}) spectrum of MeNH_2 . The assigned transitions have been arranged into 44 complete branch sets (A type $^{\text{P}}\text{Q}$, $^{\text{Q}}\text{Q}$, $^{\text{R}}\text{Q}$ and B type $^{\text{P}}\text{P}$, $^{\text{Q}}\text{P}$, $^{\text{R}}\text{P}$, $^{\text{P}}\text{R}$, $^{\text{Q}}\text{R}$, $^{\text{R}}\text{R}$) and 190 non-complete sets. Irregularities can be obsd. among the upper wagging levels relative to the periodic properties required by the Ohashi-Hougen formalism worked out for the description of the ground state and the first torsional state levels. 54 Torsional overtone transitions ($\nu = 3 \leftarrow 0$) to $k = 0$ ($\nu = 0$, $s = 1$) levels have also been found and assigned.



C.A. 1998, 128, N7

CH_3NH_2

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

неопем.
парем
смп-м.
смазлннн-

Chem. (NH₃, III)

F: CH₃NH₂

2000

P: 3

132:214274 The (2 + 2) REMPI study of methylamine
in the 430-485-nm regio Wei, Jie; Zhang, Bing;
Fang, Li; Zhang, Liandi; Cai, Jiye Laser
Spectroscopy Laboratory, Anhui Institute of Optics
and Fine Mechanics, Academia Sinica Hefei 230031,
Peop. Rep. China Spectrochim. Acta, Part A,
56A(1), 47-51 (English) 2000 The mass resolved (2 +
2) resonance enhanced multiphoton ionization (REMPI)
spectra of MeNH₂ via the (nN, 3s) Rydberg state were
obtained at 4 485 nm using a time-of-flight (TOF)
mass spectrometer. They have the sam vibrational
structure mainly due to NH₂-wagging mode excitation.
The par ion relative intensity increases at longer
wavelengths. The multiphoton ionization mechanism is
discussed.

C.A. 2000, 132

(CH₃NH₂)

DM. 41506

2002

ab initio
pacem

Imre Bakó et al.,

J. Mol. Struct. (Theochem)

2002, 594, 179-184.