

Ammonium nitrate

$\text{CH}_2\text{NH}_2\text{COOH}$ (D) ~~5240~~ 1933
5240 ~~g~~ in H_2O ; HCl ; NaOH

Auslow G.A., Foster M.L., Klingler C.
J. Biol. Chem. 1933, 103, 81-92

"The absorption spectra of glycine
solutions and their interpretation."

B. J. ~~2~~ "2" (8) | C.A., 1934, 709⁸

1825

1950

 $\text{CH}_3\text{NO}_2, \text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2 (\nu_1)$

Smith D.C., Pan Ch-Yuan, Nielsen J.R.

J.Chem.Phys., 1950, 18, 706-712

Vibrational spectra of the

...

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

HNO_2 , CH_3NO_2 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$ ($\hat{N}_i$) 8553
1951

d'Or L., Tarte P.

J.Chem.Phys., 1951, 19, 1064-5

Rotational isomerism in
nitrous acid and alkyl nitrites

C.A., 1951, 10055c

 $\text{C}_2\text{NH}_5\text{O}_2$ 1

1983

8552

CH_3O , $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ (I)

NO (A.P.)

CH_3ONO , $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONO}$ (De)

d.Or.L., Collin J.

Bull.Soc.roy sci Liège 1953, 22,

N 6-7, 285-304

Comportement des ...

J

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

846

1956

 $\text{CH}_3\text{COONH}_2$ (J)

Baba H., Omura J., Higasi K. →

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

Ионизационные потенциалы некоторых...

РХ., 1957, № 6, 18131

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

Ю, М

ВР- 5248 - IV

1958

$C_2H_5O_2N$; C_2H_4ClNO (ji)

Parsons A.E.,

J. Molecul. Spectrosc., 1958, 2, II 6,
566-574, 1959, II 1, 73-77

Инфракрасные спектры и структура
некоторых производных гидроксикислот.
Часть I. О-метилловый эфир
формилгидроксикислоты. Часть II.
Метилловый эфир хлорформилгидроксикислоты

РХ., 1960, № 4,
12298

Ю

$C_2H_5O_2$
ЕСТЬ Ф.К.

CH₃ONO, C₂H₅ONO (V₀) 1823

1959

Kette L.H., Anderson V.A.,

J.Chem.Phys., 1959, 30, 14,
399-408

Определение барьеров потенциальной
энергии ...

C₂H₅NO₂

1439

1350



Menglein A., Mussini C.A.,

J.Chem.Phys., 1959, N 5, 1426-1427

Реакции молекул с отрицательными
ионами.

PXX., 1960, N 13, 50624

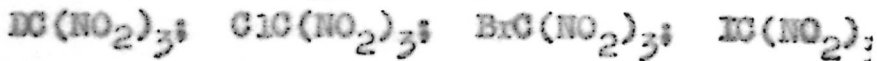


Эсб фсб

б

M-634

1963



(forc. const., ν)

Попов В.М., Шляпников В.А.

Оптика и Спектроскопия, 1963, 15/3/.

325-31

Analysis of the vibrational spectra...

J

Q

CA, 1964, 60, N2, 1234f

$C_2H_5NO_2$

[БФ-10181-IV]

1963

Тюлов Е. М., и др.

(сл.л.)

Дитера и спектры.

Т. 2. АН. СССР, 1963, 115-119

1967

$C_2H_5NO_2$

Klaeboe P., Jones R.,
Lippincott R. R.

u.k.-cnekp

Spectrochim. Acta, Part A
23 (12), 2957.

The infrared spectra and
the rotational isomerism
of me-thyl and ethyl
nitrite.

$(CH_3NO_2)_{III}$

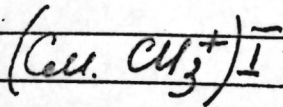
G. H. D-NO

mercur
chem

1968
Williamson J. M., et al.

J. Chem. Phys., 1968,

49, ~ 10, 4467.



1969

Tsuda S., et al.

Bull. Chem. Soc. Japan,
1969, 42, 6, 1515

~~Потенци~~

~~номера~~

использованы
пл. ударом



XIV -1041

1970

$\text{CH}_3\text{COONH}_2$ (Vi)

Arenas J., Parzellada R.,
Ann. Quím., 1970, 66, N 3,
283-292



10

C₂H₅NO₂

B91-XIV-1731

1970

(1039729) Microwave spectrum and dipole moment of nitroethane. Krishnaji; Pandey, Gopal K. (Dep. Phys., Univ. Allahabad, Allahabad, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1970, 8(5), 261-5 (Eng). The microwave spectrum of EtNO₂ mol. was obsd. at 18.0-27.5 and 32.0-37.0 GHz. About nineteen Q branch and fourteen R branch lines were assigned and the following rotational consts. were obtained: $A = 10806.6 \pm 0.1$ MHz, $B = 4464.81 \pm 0.05$ MHz, $C = 3291.60 \pm 0.05$ MHz, and $K = -0.687768$. These consts. along with other spectral features such as absence of c type transitions and vanishingly small c dipole moment were used to discuss the coplanarity problem of the NO₂ group. From the best fit method a plausible mol. model was presented and the values of the rotational consts. calcd. from this model were compared with those obtained exptl. From the Stark splitting measurements of some of the preferred lines the following dipole moment components were obtained: $\mu_a = 2.33 \pm 0.02$, $\mu_b = 2.24 \pm 0.02$, $\mu_c = 0$, and $\mu_{\text{resultant}} = 3.23 \pm 0.03$ D. RCXZ

u. b.
чекір

C.A. 1970. 73.20

ВР-ХIV-1731

1970

$C_2H_5NO_2$

м.и.

м.и. пр-ра

м.в. спектр

Х. 1971. 2

2 БЗ30. Микроволновый спектр и дипольный момент нитроэтана. Krishnaji, Pandey Gopal Krishna. Microwave spectrum and dipole moment of nitroethane. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1970, 8, № 5, 261—265 (англ.)

Исследован МВ-вращательный спектр молекулы нитроэтана (I) в области 18 000—27 500 и 32 000—37 000 Мгц. Отнесено 19 переходов «Q-ветви» ($2 \leq J \leq 11$) и 14 переходов «R-ветви» ($1 \leq J \leq 5$) в основном колебательном состоянии I. Определены вращательные постоянные $A = 10806,60 \pm 0,1$, $B = 4464,81 \pm 0,05$, $C = 3291,60 \pm 0,05$ Мгц, а также компоненты и полный дипольный момент молекулы $\mu_a = 2,33 \pm 0,02$, $\mu_b = 2,24 \pm 0,02$, $\mu_c = 0,00$, $\mu = 3,23 \pm 0,03$ D. Учет внутреннего вращения при анализе вращательного спектра I не проводился, поскольку высота

барьера внутреннего вращения в этом случае ожидается очень высокой $V_2 \approx 3$ ккал/моль. Из рассмотрения величины дефекта инерции и равенства $\mu_c = 0$ сделан вывод, что группа NO_2 в молекуле I должна быть копланарна со связями $\text{C}-\text{N}$ и $\text{C}-\text{C}$. С использованием принятых величин $r(\text{C}-\text{C}) = 1,540$ А и $\text{HCH} = 109^\circ 28'$, $\text{ONO} = 134^\circ 0'$, $\text{HCC} = 111^\circ 0'$ оценены следующие геометрич. параметры I: $r(\text{C}-\text{H}) = 1,093 \pm 0,008$, $r(\text{C}-\text{N}) = 1,505 \pm 0,003$, $r(\text{N}=\text{O}) = 1,213 \pm 0,003$ А.

А. П. Александров

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

39 XII 1731

1970

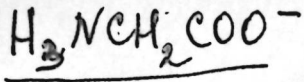
1 Д527. Микроволновый спектр и дипольный момент нитроэтана. Krishnaji, Pandey Gopal Krishna. Microwave spectrum and dipole moment of nitroethane. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1970, 8, № 5, 261—265 (англ.)

м.в. спектр

В областях частот $18,0 \div 27,5$ и $32,0 \div 37,0$ ГГц наблюден микроволн. спектр молекулы нитроэтана. Отождествлено 19 линий Q-ветви и 14 линий R-ветви. Определены вращательные постоянные: $A = 10806,6 \pm 0,1$; $B = 4464,81 \pm 0,05$ и $C = 3291,60 \pm 0,05$ МГц и $K = 0,687768$. Сделано заключение о копланарности NO_2 -группы. Из измерений эффекта Штарка рассчитаны величины дипольного момента и его компонентов: $\mu_a = 2,33 \pm 0,02$; постоянные колебательно-вращательного взаимодействия и удвоения l-типа.

Г. П.

09. 1971. 12

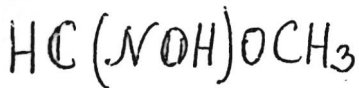


1971

(см. н.)

5 Д182. Определение валентного силового поля иона $\text{H}_3\text{NCH}_2\text{COO}^-$. Destrade Christian, Garrigou-Lagrange Chantal, Forel Marie-Thérèse. Détermination du champ de force de valence de l'ion $\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{COO}^-$. «J. Mol. Struct.», 1971, 10, № 2, 203—219 (франц.; рез. англ.)

Ф. 1972. 52



1972

1) 64788f Normal vibration of the O-methylformohydroxamic acid molecule. Sarukhanov, M. A.; Parpiev, N. A. (Inst. Khim.; Tashkent, USSR). *Uzb. Khim. Zh.* 1972, 16(4), 40-3 (Russ). The harmonic approxn. of the theory of low vibrations was used for analyzing the frequencies and normal vibrations of HC(NOH)OMe. The results showed a satisfactory agreement with expt. An interpretation of the vibrational spectrum is given. M. Hubik

vi;
(c.n.)

C.A. 1978. 78 N10

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

1973

17 Б250. Анализ нормальных колебаний метилкарбамата и N,N-дихлорметилкарбамата. Carter James C., Devia Jarge E. Vibrational analysis of methylcarbamate and N,N-dichloro-methylcarbamate. «Spectrochim. acta», 1973, A29, № 4, 623—632 (англ.)

Измерены ИК-спектры в области $250-4000 \text{ см}^{-1}$ и спектры КР (возбуждение — He—Ne-лазер, 6328А) MeOCONH_2 (I) и MeOCONCl_2 (II) в тв., жидком состоянии и р-рах. Проведено отнесение нормальных колебаний I и II в приближении симметрии C_s . С использованием поля Юри — Бредли проведен расчет нормальных колебаний I и II.

спектр

х. 1973 № 17

(+1)



$C_2H_5NO_2$

оттиск 1558 1973

9 Б259. Микроволновой спектр и внутреннее вращение нитроэтана. Ekkers J., Bauder A., Günt-hard Hs. H. Microwave spectrum and internal rotation of nitroethane. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 22, № 2, 249—252 (англ.)

м. в-спектр

На штарковском спектрометре в области спектра от 7,5 до 40 Ггц при t -ре -30° получен крайне плотный и сложный спектр нитроэтана с линиями поглощения, расположенными друг от друга на расстоянии 2—3 Мгц, что сделало невозможным непосредственную идентификацию переходов. Привлечение метода двойного микроволнового резонанса и проведение расчетов вращательного спектра нитроэтана с учетом внутреннего вращения нитрогруппы по полужесткой модели Баудера и др. (РЖХим, 1969, 15Б383) позволило идентифицировать нек-рую часть переходов с $|K|=0, 1, 2$ для малых значений J R-ветви. Для $K=0$ серии переходов и для наименьших членов $K \neq 0$ серии переходов эффект Штарка был квадратичным, в то время как для других переходов эффект был линейным или смешанным.

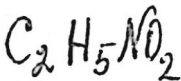
С. Н. Мурзин

Х. 1974

№ 9

оттиск 1558

1973



4 Д440. Микроволновый спектр и внутреннее вращение нитроэтана. Ekkers J., Bauder A., Günthard Hs. H. Microwave spectrum and internal rotation of nitroethane. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 22, № 2, 249—252 (англ.)

В диапазоне 7,5—40 ГГц измерен микроволн. спектр молекулы нитроэтана. С использованием результатов расчета по модели «вращение—внутреннее вращение», в которой нитрогруппа рассматривается как внутренний волчок с симметрией C_{2v} , а остальной (жесткой) части молекулы приписывается симметрия C_s , идентифицированы линии некоторых вращательных переходов с $J \leq 4$, относящихся к компонентам туннельного расщепления основного колебательного состояния.

М. Р. Алиев

М. в.
спектр

Ф. 1974 N 4

NH_4OOCN

ХЗ-5546

1973

20 Б807. Исследования фазовых переходов в ацетате и формате аммония, триоксане и тритиане при высоком давлении методами инфракрасной спектроскопии и волюметрии. Hamann S. D., Linton M., Pistorius C. W. F. T. Infrared and volumetric studies of the high-pressure phase transitions of ammonium acetate and formate, trioxane, and trithiane. «High Temp.-High Pressur.», 1973, 5, № 5, 575—580 (англ.)

Фазов.
превращ.

Методами ИК-спектроскопии с применением алмазной ячейки и волюметрии на приборе типа поршень—цилиндр изучены фазовые превращения в NH_4OOCN , $\text{NH}_4\text{OOCCH}_3$, 1,3,5-триоксане и 1,3,5-тритиане, происходящие при высоких давлениях. NH_4OOCN претерпевает фазовый переход I→II при 25° и ~11,8 кбар, а на P—T-фазовой диаграмме тройная точка имеет координаты 75° и 12,75 кбар, выше к-рой существует фаза III. Переход I→II сопровождается появлением в ИК-спектре полосы поглощения при 1475 см^{-1} , а переход II→III можно

Х. 1974. N20

(+)

фиксировать по появлению плеча при 1415 см^{-1} на склоне основной полосы с максимумом 1425 см^{-1} . Изменения объема и энтропии при переходе $\text{I} \rightarrow \text{II}$ составляют $-10,9\%$ и $-9\text{ дж/моль} \cdot \text{град}$ соотв. Аналогичные фазовые переходы $\text{I} \rightarrow \text{II} \rightarrow \text{III}$ наблюдаются у $\text{NH}_4\text{OOCCH}_3$ при $4,5\text{ кбар}$ и 20° и $\sim 15\text{ кбар}$ при 0° соотв. Изменения объема энтропии при переходе $\text{I} \rightarrow \text{II}$ составляют $-9,0\%$ и $+4,7\text{ дж/моль} \cdot \text{град}$ соотв. 1,3,5-триоксан претерпевает фазовый переход $\text{I} \rightarrow \text{II}$ при $22,3^\circ$ и $22,4\text{ кбар}$, а обратный переход $\text{II} \rightarrow \text{I}$ наблюдается при снижении давл. до $12,8\text{ кбар}$. Изменения объема при переходах $\text{I} \rightarrow \text{II}$ и $\text{II} \rightarrow \text{I}$ составляет $1,6$ и $2,4\%$ соотв. При переходе $\text{I} \rightarrow \text{II}$ в ИК-спектре исчезают 4 фундаментальные полосы поглощения, что указывает на изменение симметрии кольца до D_{3h} . В 1,3,5-триметиле не наблюдается фазовых переходов до давл. 50 кбар , но изменение положения и интенсивности полос в ИК-спектре свидетельствуют о нарушении исходной симметрии кольца.

А. В. Салов

$C_2H_5NO_2$

1973

Harris I.E.

"J. Chem. Phys."

(To)

1973, 58 (12),

5615-26.

(equiv. NO_2^- ; III)

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

1974

12 Д377. Длинноволновый ИК-спектр нитроэтана. Groner P., Meyer R., Günter A., Kühne H., Güntliard H. S. H. The far infrared spectrum of nitroethane. «Chem. Phys.», 1974, 5, № 1, 136—141 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получен ИК-спектр поглощения газообразного нитроэтана с разрешением $\sim 0,15 \text{ см}^{-1}$ в области $8\text{—}60 \text{ см}^{-1}$, связанный с наложением полос вращательного спектра молекулы и спектра, обусловленного внутренним вращением нитрогруппы. Проведен расчет спектра внутреннего вращения в приближении жесткого ротатора симметрии C_{2v} , связанного с жесткой группой CH_3CH_2 , и нулевым потенциалом для внутреннего вращения. Определены гамильтониан системы, вычислены уровни энергии, матричные элементы переходов и интенсивности. Из сравнения рассчитанного и эксперим. спектров определен дипольный момент нитроэтана $3,4 \text{ D}$, близкий по величине дипольному моменту нитроэтана, определенному из микроволн. измерений. Библи. 8.

М. В. Тонков

Д. И. М. И.

ф. 1974
N 12

1974

 $C_2H_5NO_2$

(D; E)

3 Б264. Спектры нитроэтана в длинноволновой инфракрасной области. Gröner P., Meyer R., Günter A., Kühne H., Günthard Hs. H. The far infrared spectrum of nitroethane. «Chem. Phys.», 1974, 5, № 1, 136—141 (англ.)

Спектры нитроэтана в длинноволновой ИК-области получены на Фурье-спектрометре с разрешением $0,122 \text{ см}^{-1}$ в области $8—25 \text{ см}^{-1}$ и $0,153 \text{ см}^{-1}$ в области $20—60 \text{ см}^{-1}$. Вычислены уровни энергии внутреннего вращения нитрогруппы и вращения жесткого остова с учетом их взаимодействия. Вычисления проведены исходя из приближенного выражения гамильтониана:

$$H = 1/2 (\tilde{P}' p) \tilde{G}' \begin{pmatrix} P' \\ p \end{pmatrix} \text{ где } \tilde{P}' \text{ — компоненты оператора}$$

X. 1975. N3

углового момента, p — оператор, связанный с внутренним вращением, $\{G\}$ — симм. (4×4) кинетич. матрица. Точность вычислений энергетич. уровней повышалась за счет приведения $\{G\}$ к квазидиагональному виду путем ортогонального преобразования. Рассчитана абс. интенсивность полосы поглощения. Для случая дипольного момента, равного $3,4D$, направленного вдоль связи $N-C$, полученные значения согласуются с данными по микроволновому поглощению.

Б. Г. Антипов

1974

 $C_2H_5NO_2$

17 Б290. Микроволновый спектр и поворотная изомерия этилнитрата. Scroggin Don G., Riveros Jose M., Wilson E. Bright. Microwave spectrum and rotational isomerism of ethyl nitrate. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 4, 1376—1385 (англ.)

м. в. спектр

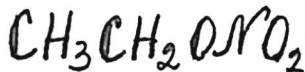
Получен и идентифицирован вращательный спектр транс- и гош-изомеров этилнитрата (I) в области частот от 8 до 40 ГГц, состоящий из переходов *a*- и *b*-типа. Для идентификации переходов с низкими использованы микроволновый-микроволновый и радиочастотный-микроволновый двойные резонансы. Определены вращательные постоянные в МГц с точностью не хуже $\pm 0,02$ МГц для транс-изомера: $A=9974,95$, $B=2208,08$, $C=1850,94$ и для гош-изомера: $A=7945,62$, $B=2557,14$, $C=2256,88$. Идентифицировано несколько переходов, относящихся к первым двум возбужденным состояниям двух типов крутильных колебаний, и определены вращательные постоянные для этих состояний. По эффекту Штарка определены компоненты дипольного момента для транс-изомера: $\mu_a=3,32$, $\mu_b=0,739$, $\mu_c=0$, $\mu_t=3,39$ и для гош-изомера: $\mu_a=3,17$, $\mu_b=0,45$,

X. 1974
N 17

$\mu_c = 0,34$, $\mu_t = 3,23$ (все величины в дебаях). Приводятся предполагаемые структурные параметры I. В случае транс-изомера атомы N, O и C лежат в одной плоскости, гош-изомер отличается поворотом метильной группы относительно оси C—O связи на $95 \pm 3^\circ$. Средняя величина разности энергий гош- и транс-изомеров 143 ± 70 см⁻¹. Определен вид потенциальной функции I для внутреннего вращения около C—O связи.

С. Н. Мурзин

ДУ
В ТО
члер



1974

9 Д487. Микроволновый спектр и вращательная изомерия этилнитрата. Scroggin Don G., Riveros Jose M., Wilson E. Bright. Microwave spectrum and rotational isomerism of ethyl nitrate. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 4, 1376—1385 (англ.)

(м.п.)

В диапазоне 8—40 ГГц измерен микроволн. спектр молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}_2$ (I). По эффекту Штарка и методом двойного микроволн. резонанса идентифицированы линии вращательных переходов *a*- и *b*-типов основного и низлежащих возбужденных колебательных состояний двух изомеров I и определены значения вращательных постоянных. Показано, что наблюдаемые спектры относятся к изомерам с транс- и гаус-расположением

ф. 1974. № 9.

группы NO_2 относительно группы CH_3 , причем все тяжелые атомы *транс*-изомера расположены на одной плоскости, а *гош*-изомер отличается от *транс*-изомера вращением NO_2 -группы вокруг связи $\text{C}=\text{O}$ на угол 95° .
Найдены дипольные моменты: для *транс*-изомера $\mu_a = 3,32$, $\mu_b = 0,739$, $\mu_c = 0$, $\mu_t = 3,39$, а для *гош*-изомера $\mu_a = 3,17$, $\mu_b = 0,45$, $\mu_c = 0,34$, $\mu_t = 3,23$ ед. Дебая. По относит. интенсивности линий изомеров I оценена разность энергии изомеров (*транс*-изомер на $143 \pm 70 \text{ см}^{-1}$ стабильнее *гош*-изомера), а по относительной интенсивности линий основного и возбужденных состояний построена приближенная форма потенц. ф-ции внутреннего вращения вокруг связи $\text{C}=\text{O}$.

М. Р. Алнев

$C_2H_5NO_2$

XIV-6673

1975

84: 23987a Matrix and gas infrared spectra of nitroethane isotopic species. Groner, P.; Meyer, R.; Guenthard, Hs. H. (Lab. Phys. Chem., Swiss Fed. Inst. Technol., Zurich, Switz.). *Chem. Phys.* 1975, 11(1), 63-85 (Eng). The ir and far-ir gas phase and Ar matrix isolation spectra of the isotopic species of nitroethane, $EtNO_2$, $MeCD_2NO_2$ and $CD_3CD_2NO_2$ are reported. An assignment is proposed, based mainly on matrix spectra and normal coordinate anal. An approx. 25 parameter valence force field is given. The anal. of the gas phase spectra was complicated by the fact that only very few band contours comparable to quasirigid model envelopes occur. This phenomenon and unusual band widths and splittings in the matrix spectra are related to the nearly free internal rotation of the nitro group. The Q branch sequence assocd. with the Me torsion shows a remarkable splitting into doublets probably also related to the NO_2 rotation. A value of $1080 \pm 20 \text{ cm}^{-1}$ for the Me torsional barrier was derived.

и.к.
манушья

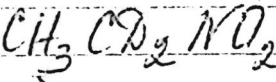
C.A. 1976. 84. r4





XIV-6673

1975



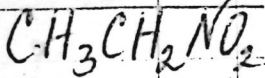
(10, 11)

9 Б237. Спектры инфракрасного поглощения газообразных и изолированных в матрицах изотопозамещенных нитроэтана. Groner P., Meyer R., Günthard Hs. H. Matrix and gas infrared spectra of nitroethane isotopic species. «Chem. Phys.», 1975, 11, № 1, 63—85 (англ.)

Исследованы спектры ИК-поглощения $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$ (I), $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{NO}_2$ (II) и $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{NO}_2$ (III) в газовой фазе и в Ar-матрице ($T=4,2\text{K}$) в диапазоне частот $3100-200\text{ см}^{-1}$. Проведено отнесение колебаний. В матричных спектрах нек-рые полосы расщеплены на значительное число компонент. Для объяснения этих эффектов спектры в матрице получены при нескольких значениях A/M. Найдено почти свободное вращение нитрогруппы. Вычисленный барьер равен $1080 \pm 20\text{ см}^{-1}$. Предположение подтверждается сравнением наблюдаемых контуров в газовой фазе с рассчитанными. В спектрах наблюдается ряд полос, обусловленных взаимодействием различных колебаний с внутренним вращением.

Б. Г. Антипов

X 1976 N 9



Сред. м.ст;
в; Но

(+1) ⊗

Ф-1976 N4

4 Д417. ИК-спектры изотопических производных нитроэтана в матрице и газовой фазе. Groner P., Meyer R., Günthard Hs. H. Matrix and gas infrared spectra of nitroethane isotopic species. «Chem. Phys.», 1975, 11, № 1, 63—85 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения нитроэтана $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NO}_2$, $\text{CH}_3\text{CD}_2\text{NO}_2$, $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{NO}_2$ в газовой фазе и в матрице Ar в области $20\text{--}3500\text{ см}^{-1}$. Приведены спектры, частоты наблюдаемых полос и их отнесение, выполненное сравнением частот спектров матриц с рассчитанными при решении колебательной задачи. Внутренние координаты молекул введены для конформации, в которой все тяжелые ядра лежат в одной плоскости. Приведены определенные в расчете 25 силовых постоянных нитроэтана и формы его колебаний. Сложная структура полос в матрице связана с переходами с различных уровней крутильных колебаний. Интерпретация спектров газовой фазы выполнена с использованием рассчитанных синтетич. контуров и частот спектра матрицы. В ДВ-спектре газообразного нитроэтана обнаружена серия линий, связанная с переходами между уровнями крутильных колебаний группы CH_3 . Вычисленный барьер для ее вращения составляет 1080 см^{-1} . Библ. 32.

М. В. Тонков

1975 9761
С799
6673
XIV-6673

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

1979

9 Б222. Миллиметровый спектр глицина. S. Kim, Richard D., Lovas F. J. Millimeter Spectrum of Glycine. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 3, 372—382 (англ.)

Измерен в области частот от 75 до 120 ГГц МВ-спектр глицина, $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$, в основном и возбужденном колебательных состояниях. Ввиду слабой летучести и нестабильности молекулы измерения выполнены на специально изготовленном миллиметровом спектрометре с подогреваемой волноводной ячейкой при температурах от 150 до 200°. Анализ спектра выполнен с использованием гамильтониана в представлении Уотсона с учетом эффекта центробежного искажения. В основном и возбужденном колебательных состояниях, соотв., определены вращательные постоянные (в МГц) $A=10130,47(62)$ и $10079,79(62)$, $B=4071,473(36)$ и $4077,206(74)$, $C=3007,538(44)$ и $3008,844(94)$ и центробежного искажения (в кгц) $\tau_1=-28,52(64)$ и $-21,4(11)$, $\tau_2=-6,89(44)$ и $-5,54,63$, $\tau_3=33(36)$ и $41(43)$, $\tau_{aaaa}=-94(100)$, $\tau_{bbbb}=-2,98(52)$ и $-17,(12)$,

М.И.

2/1979, NO

$\tau_{\text{свс}} = \dots - 3,7(11)$. Возбужденное колебательное состояние отнесено к торсионному движению вокруг С—С-связи с частотой менее 100 см^{-1} . Из эффекта Штарка 2-го порядка для ряда переходов и по уширению линий в электрич. поле установлено, что дипольный момент μ_a имеет минимальное значение $\sim 3 D$. Полученные данные отнесены к компактному конформеру глицина с Н-связью между аминогруппой и атомом водорода гидроксильной группы. С. Н. Мушин

$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2\text{H}$
(2 мкг/мл)

Brown R.D.

1948

Pure and Appl. Chem., 1948,
50, no. 771-779.

микроволн.
спектрск.

(см. CH_3OD III)

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

1979

17 Б271. Конформационное исследование этилнитрита методом микроволновой спектроскопии. Turner Paul H. Conformational study of ethyl nitrite by microwave spectroscopy. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 2, 317—336 (англ.)

Измерены в области частот от 8 до 40 ГГц МВ-спектры трех ротамеров этилнитрита, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}$, цис-транс (I), цис-гош (II) и транс-гош (III) в основном и ряде возбужденных C—O торсионных колебательных состояниях. Анализ спектров I и II выполнен в приближении жесткого волчка, анализ спектра III проведен с учетом квартичных постоянных центробежного искажения. Для I, II и III соотв. вращательные постоянные в основном колебательном состоянии равны (Мгц) $A = 18021,0$ (1), 10185 (4), $17639,3$ (2), $B = 3019,936$ (5), $3979,09$ (7), $2746,44$ (2), $C = 2674,593$ (5), $3325,06$ (7), $2619,46$ (2). Для всех ротамеров определены компоненты дипольных моментов. Полные дипольные моменты I,

I; геометр.
м. в. спектр



Х. 1079, N14

II и III соотв. равны $\mu=2,306$ (3) D, 2,221 (6) D и 2,50 (2) D. Из измерений относит. интенсивностей МВ-линий установлено, что II менее стабилен, чем I, на 238 (50) см^{-1} , а III менее стабилен, чем I, на 81 (20) см^{-1} . Для всех ротамеров определены возможные значения структурных параметров. Ротамер I характеризуется углами связей τ_1 (ON—OC) = 0° , τ_2 (CC—ON) = 180° , ротамер II — углами $\tau_1=0^\circ$, $\tau_2=80^\circ$ и ротамер III — углами $\tau_1=180^\circ$, $\tau_2=90^\circ$.

С. Н. Мурзин

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

Оттисек 10596

1980

7 Б218. Микроволновый спектр и структура этилнитрита. Endo K., Koshiba T., Saito H., Kamura Y. «Нихон кагаку кайси», Nippon kagaku kaishi, J. Chem. Soc. Jap., Chem. and Ind. Chem., 1980, № 11, 1661—1665 (япон.)

Измерены в области частот 8,5—32,0 ГГц МВ-спектры трех вращательных изомеров, цис-транс (ЦТ), цис-гош (ЦГ) и транс-гош (ТГ), этилнитритов, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}^{15}\text{NO}$ (I) и $\text{CD}_3\text{CD}_2\text{ONO}$ (II), в основном колебательном состоянии. В приближении жесткого волчка для ЦТ—I, ЦТ—II, ЦГ—I, ЦГ—II, ТГ—I и ТГ—II, соотв., определены вращательные постоянные (в Мгц) $A=17\,893$ (52); $14\,470$ (26); $10\,157$ (5); $8592,5$ (3); $17469,8$ (5) и $13359,5$ (5), $B=2987,17$ (5); $2646,35$ (4); $3924,98$ (5); $3451,67$ (5); $2727,91$ (6) и $2444,84$ (5), $C=2645,35$ (5); $2370,70$ (4); $3287,94$ (5); $2953,47$ (5); $2604,98$ (6) и

М.И.

х. 1981 N 7

2315,97 (4). Полученные результаты вместе с данными для основного изотопич. образца (Р. Н. Turner, «J. Chem. Soc., Faraday Trans», 1979, 2, 75, 317) использованы для определения r_0 -структуры вращательных изомеров этилнитрита. При ряде допущений вычислены структурные параметры ротамеров ЦТ, ЦГ и ТГ, соотв., $r(\text{C—O}) = 1,436$ (5); $1,436$ (5) и $1,437$ (5) Å, $r(\text{O—N}) = 1,394$ (8); $1,386$ (6) и $1,420$ (4) Å, $r(\text{N=O}) = 1,182$ (4); $1,180$ (6) и $1,172$ (6) Å, $\angle \text{CON} = 114,7$ (7); $115,2$ (5) и $112,4$ (5)°, $\angle \text{ONO} = 114,9$ (7); $122,0$ (1,0) и $111,0$ (6)° и двугранный угол 0, $96,5$ (3) и $86,0$ (5)°. Полученные значения структурных параметров сопоставлены с аналогичными данными для ротамеров родственных молекул.



1980

8 Б266. Миллиметровый спектр глицина. Новый конформер. Suenram R. D., Lovas F. J. Millimeter wave spectrum of glycine. A new conformer. «J. Amer. Chem. Soc.», 1980, 102, № 24, 7180—7184 (англ.) —

Измерен в области частот 80—115 ГГц вращательный спектр нового конформера глицина в основном и первых трех возбужденных колебательных состояниях. Определены вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и дефекты инерции в основном и первом возбужденном колебательных состояниях. Вращательные постоянные нового конформера в основном состоянии равны (в МГц) $A=10341,76(17)$, $B=3876,195(9)$, $C=2912,361(10)$. Из анализа данных по эффекту Штарка оценена величина компоненты дипольного момента $\mu_a \approx 1,00(15)$ D и установлено, что компонента $\mu_b \neq 0$, но в любом случае $\mu_a > \mu_b$. Структура

молекула
конформер

и.п.

Х. 1981 N 8

конформера характеризуется плоским расположением тяжелых атомов, цис-конфигурацией гидроксильной группы по отношению к карбонильной группе и симм. расположением по отношению к a , b -плоскости молекулы двух атомов водорода метиленовой и двух атомов водорода аминной групп. Конформер является на 490 (150) см^{-1} более стабильным, чем ранее исследованный. (Suenram R. D., Lovas F. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, 372) С. Н. Мурзин

Глицин

1980

$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2\text{H}$

ДЗ97. Спектр глицина в диапазоне миллиметровых волн. Новый конформер. Millimeter wave spectrum of glycine. A new conformer. Suenram R. D., Lovas F. J. «J. Amer. Chem. Soc.», 1980, 102, № 24, 7180—7184 (англ.)

М.П.

В диапазоне 81—112 ГГц исследован микроволновый спектр паров простейшей аминокислоты глицина. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 17$ основного колебательного состояния и первых трех возбужденных состояний крутильного колебания вокруг связи C—C конформера глицина, в котором атом O группы C=O связан с группой NH_2 водородной связью, а группа OH занимает цис-положение относительно группы C=O. Определены значения вращательных постоянных, постоянных кватертичного центробежного искажения и α -компоненты дипольного момента ($\approx 1,0$ ед. Дебая). На основании результатов измерения относительной интенсивности линий показано, что исследуемый конформер глицина на 500 см^{-1} стабильнее другого конформера, в котором атом H группы OH связан с группой NH_2 водородной связью. М. Р. Алиев

Ф. 1981 N 5

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

1988

5 Б1343. ^{14}N -квадрупольное взаимодействие во вращательном спектре этилнитрита. ^{14}N quadrupole coupling in the rotational spectrum of ethyl nitrite / Keussen Ch., Andresen U., Dreizler H. // Z. Naturforsch. A.— 1988.— 43, № 5.— С. 469—475.— Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с волноводной ячейкой в обл. частот 5—36 ГГц измерены вращат. спектры трех вращат. изомеров, цис-транс (ЦТ), цис-гош (ЦГ) и транс-гош (ТГ), этилнитрита, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}$ (I), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в S-редукции с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения и ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия. Диагональные элементы тензора квадрупольного взаимодействия для ЦТ-I, ЦГ-I и ТГ-I, соотв., равны в МГц $\chi_{aa}=1,243(10)$, $-0,418(9)$ и $0,595(12)$, $\chi_{bb}=-4,681(11)$, $-0,471(13)$ и $2,985(14)$, $\chi_{cc}=3,438(11)$, $0,888(13)$ и $-3,580(14)$. Дополнит. расщепление вращат. переходов с-типа ТГ-I объяснено туннельным эффектом двух эквивалентных гош-форм.

М.А.

Х. 1989, № 5

С. Н. Мурзин

$\text{NH}_2\text{COOCH}_3$ | OM. 31402 | 1988

Remko M., Scheiner S.,

гелиметр,
барьер
внутрен.
вращем.

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

CH₃ CH₂NO₂

1990

113: 220455u Raman spectra, vibrational assignment, structural parameters and ab initio calculations for ethyl nitrate. Durig, J. R.; Sheehan, T. G. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1990, 21(10), 635-44 (Eng). Raman spectra (4000-10 cm⁻¹) of gas, liq. and solid Et nitrate were recorded. The qual. depolarization values were obtained from the spectrum of the liq. A vibrational assignment for the normal modes is proposed based on depolarization values, group frequencies and normal coordinate calcs. The structures for the trans and gauche conformers were detd. from ab initio Hartree-Fock gradient calcs. using the Gaussian-82 program with both the 3-21G and 6-31G* basis sets. From this calcn. at the 6-31G* level, the energy difference between the more stable trans conformer and the higher energy gauche conformers was found to be 474 cm⁻¹ (1.36 kcal mol⁻¹) with a gauche dihedral angle (CCON) of 79°. The trans to gauche and gauche to gauche barriers are 990 cm⁻¹ (2.83 kcal mol⁻¹) and 3152 cm⁻¹ (9.01 kcal mol⁻¹), resp. Barriers to internal rotation for the CH₃ and NO₂ groups were also obtained from ab initio calcs. For the

crekmp
konw. pac-
clclclclcl
Di, de. n.

C. A. 1990, 113, N24

$^{13}\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}$ [Dm 34084] 1990

$\text{CH}_3^{13}\text{CH}_2\text{ONO}$ Endo K., Furuehashi A,

of chem., Nippon Kagaku Kaishi
Lp. num. 1990, No. 81-84
Ochoban. Microwave spectra
of ^{13}C -species of

cis, trans - Ethyl Nitrite,
 $^{13}\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}$ and $\text{CH}_3^{13}\text{CH}_2\text{ONO}$.

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

1991

115: 122726e Rotation-torsion interaction in the ground state microwave spectrum of trans-gauche ethylnitrite. Keussen, C.; Dreizler, H. (Inst. Phys. Chem., Univ. Kiel, W-2300 Kiel, 1 Fed. Rep. Ger.). *Z. Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1991, 46(7), 590-4 (Eng). A small rotation-torsion interaction was studied in the microwave spectrum of trans-gauche ethylnitrite, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{ONO}$. The difference between the 2 lowest energy levels of the torsion around the C-O bond axis was 24.8(8) kHz. The high resolu. of microwave Fourier transform (MWFT) spectroscopy was necessary to measure the resulting small splittings.

M.A.-

c.A. 1991, 115; N 12

1992

F: C₂H₅NO₂

P: 3

17B170. Молекулярная структура этилнитрата, определенная методом электронографии и с помощью неэмпирических расчетов методом MO. Molecular structure of ethyl nitrate from gas-phase electron diffraction and ab initio MO calculations / Shishkov Igor F., Vilkov Lev V., Bock Charles W., Hargittai Istvan // Chem. Phys. Lett. - 1992. - 197, 4-5. - С. 489-494. - Англ.

Phx 1997

1996

F: NO₂CH₂CH₂OH

P: 3

1B1312. Микроволновый спектр, конформация, внутримолекулярная водородная связь и неэмпирические расчеты для 2-нитроэтанола. Microwave spectrum, conformation, intramolecular hydrogen bonding and ab initio calculations for 2-nitroethanol / Marstokk K.-M., Mollendal Harald // Acta chem. scand. - 1996. - 50, N 6. - С. 505-511. - Англ.

На микроволновом спектрометре в области частот 26,5-39,0 ГГц с точностью 0,10 МГц измерен вращательный спектр 2-нитроэтанола в основном и шести возбужденных торсионных колебательных состояниях. Выполнен конформационный анализ с учетом внутримолекулярной водородной связи.

РМХ 1997

HONO-C₂H₄

1997

127: 25153f Matrix infrared spectra of HONO-C₂H₄ complexes in solid argon. Krajewska, Magdalena; Mielke, Zofia; Tokhadze, Konstantin G. (Faculty of Chemistry, Wroclaw University, Joliot-Curie 14, 50-383, Wroclaw, Pol.). *J. Mol. Struct.* 1997, 404(1-2), 47-53 (Eng), Elsevier. The complexes formed by trans- and cis-HONO isomers with ethene were obsd. and characterized in Ar matrixes. Five perturbed trans-HONO vibrations and 4 perturbed cis-HONO vibrations were identified for the complexes formed by the trans and cis isomers, resp. The strong perturbation of the OH group vibrations of both isomers and the blue shift of the out-of-plane bending vibration of ethene in the trans complex indicate the formation of H-bonded π complexes. The strength of interaction increases from the cis to the trans isomer.

UK &

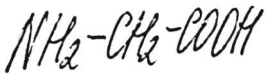
manuscript

C. A. 1997, 127, 42

WUWUWUWU

[Dm. 39785]

1999



Wuisker F., et al.,

J. Chem. Phys., 1999, 111,
N7, 2978-2984.

The O-H stretching vibrations
of glycine trapped in
rare gas matrices and helium

clusters.