



Doctoral Thesis

## **Internal rotation of molecules with two inequivalent methyl groups the microwave spectrum of N-methyl-ethylidenimine**

**Author(s):**

Meier, Jürg

**Publication Date:**

1970

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000089336> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

**Diss. No. 4611**

**INTERNAL ROTATION OF MOLECULES WITH TWO  
INEQUIVALENT METHYL GROUPS:  
THE MICROWAVE SPECTRUM OF  
N-METHYL-ETHYLIDENIMINE**

DISSERTATION

submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY  
ZÜRICH  
for the degree of Doctor of Technical Sciences

presented by

**JÜRIG MEIER**

born April 18, 1941

dipl. Chem. ETH

M.S. Rensselaer Polytechnic Institute U.S.A.

Citizen of Winterthur (Ct. Zürich)

Accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Hs. H. Günthard

Prof. Dr. A. Bauder

Juris Druck + Verlag Zürich

1970

## 6. SUMMARY

The theory is presented for the calculation of the rotational energy of molecules with two internal three-fold symmetric tops capable of hindered rotation. N-Methyl-ethylidenimine is a good example of a molecule of this sort. The microwave spectra of two isotopic species of the trans isomer were recorded between 8 and 40 GHz. They showed the effects of the internal rotations of both methyl tops. Each rotational transition was split into five components according to the different irreducible representations of the symmetry group. The intensity ratios were consistent with the spin-statistical weights of the methyl protons. In addition to the internal rotors' splittings, the spectrum was further complicated by the nuclear quadrupole multiplets of the nitrogen. The internal axis method for two inequivalent tops was used in the high barrier approximation for the analysis of the appropriate splitting. The rotational constants, quadrupole coupling constants, and the torsional barriers for both methyl groups could be determined.

## 6. ZUSAMMENFASSUNG

Die theoretischen Grundlagen für die Berechnung der Rotationsenergie von Molekülen mit zwei dreizählig symmetrischen Gruppen als interne Rotatoren wurde zusammengestellt. Als gutes Beispiel einer solchen Art Molekül wurde das Mikrowellenspektrum von trans-N-Methyl-Aethylidenimin und einer isotopen Modifikation davon gemessen zwischen 8 und 40 GHz. Die Rotationsübergänge des Grundzustandes zeigten sehr schön den Einfluss der beiden Methylgruppen, indem sie je in fünf Komponenten aufgespalten waren gemäss den irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe. Die Intensität der Komponenten stimmte überein mit den statistischen Spingewichten der Methyl-Protonen. Zusätzlich zur internen Rotationsaufspaltung waren die Linien weiter aufgespalten durch den Quadrupolkern des Stickstoffes. Für die Auswertung der Messdaten wurde die IAM-Methode für zwei nicht äquivalente Methylgruppen in der Approximation bei hoher Barriere verwendet. Die Rotationskonstanten, die Quadrupolkopplungskonstanten, die interne Rotationsbarriere für beide Methylgruppen und das Dipolmoment von N-Methyl-Aethylidenimin wurden aus den Messungen berechnet.