

Mittlere Schwingungsamplituden eines X_2Y_2 -Molekülmodells mit C_{2h} -Symmetrie:

Anwendung auf das *trans*-Difluordiazin

Von

G. Nagarajan, J. R. Durig und A. Perumal*

Department of Chemistry, University of South Carolina,
Columbia, South Carolina, USA

Mit 2 Abbildungen

(Eingegangen am 8. Januar 1968)

Es wurde eine Methode zur Berechnung der mittleren Schwingungsamplitudenquadrate für das Modell eines X_2Y_2 -Moleküls mit C_{2h} -Symmetrie unter Verwendung von Symmetriekoordinaten entwickelt und analytische Ausdrücke für die verschiedenen mittleren Amplitudenquadrat-Größen in Termen der symmetrisierten Matrizen der mittleren Amplitudenquadrate abgeleitet. Diese Methode wurde zur Bestimmung der mittleren Schwingungsamplituden sowohl der gebundenen wie auch der nicht gebundenen Atompaaire des *trans*-Difluordiazins bei 298° K aus beobachteten Raman- und Infrarotgrundschwingungsfrequenzen und Angaben zur Molekülstruktur angewendet. Darüber hinaus wurden die molaren Größen der thermodynamischen Funktionen unter Annahme eines starren Rotator—harmonischen Oszillator-Modells für den Temperaturbereich 200 bis 2000° K berechnet. Die Ergebnisse der Berechnungen werden kurz diskutiert.

*Mean Amplitudes of Vibration of an X_2Y_2 Molecular Model of C_{2h} -Symmetry: Application to *trans*-Difluorodiazine*

A method for the determination of the mean-square amplitudes of vibration for an X_2Y_2 molecular model with C_{2h} symmetry has been developed using the symmetry coordinates. Analytical expressions for the various mean-square amplitude

* Department of Physics, Allen University, Columbia, South Carolina, USA.

quantities in terms of the symmetrized mean-square amplitude matrices have been derived. The method has been applied to *trans*-difluordiazine for the determination of mean amplitudes of vibration for both bonded and nonbonded atom pairs at 298° K from the observed Raman and infrared fundamental frequencies and molecular structural data. In addition to these, molar thermodynamic functions have also been computed on the assumption of a rigid rotator, harmonic oscillator model for the temperature range 200—2000° K. A brief discussion of the results has been given.

Einleitung

X_2Y_2 -Moleküle können allgemein in sechs Arten eingeteilt werden, und zwar: eine lineare, symmetrische Konfiguration $Y-X-X-Y$ der Punktgruppe $D_{\infty h}$, eine von quadratischem, ebenen Bau $X \begin{array}{c} \swarrow Y \\ \longleftarrow \\ \searrow Y \end{array} X$ der Punktgruppe V_h , eine zentrosymmetrische *trans*-Konfiguration $Y \begin{array}{c} \diagdown \\ X-X \\ \diagup \end{array} Y$ der Punktgruppe C_{2h} , eine *cis*-konfigurierte Wannensstruktur $Y \begin{array}{c} \diagdown \\ X-X \\ \diagup \end{array} Y$ der Punktgruppe C_{2v} , eine eben gebaute Konfiguration $X-X \begin{array}{c} \swarrow Y \\ \longleftarrow \\ \searrow Y \end{array}$ der Punktgruppe C_{2v} sowie schließlich eine nicht-ebene Konfiguration $Y \begin{array}{c} \diagdown \\ X-X \\ \diagup \end{array} Y$ der Punktgruppe C_2 . Eine Theorie zur

Berechnung der mittleren Schwingungsamplituden aus spektroskopischen Ergebnissen ist bereits abgeleitet, bisher aber ausschließlich auf Moleküle und Ionen der ersten Kategorie¹⁻⁴ angewendet worden. In der vorliegenden Arbeit wird versucht, eine Methode zur Berechnung der mittleren Schwingungsamplituden unter Zugrundelegung von Symmetriebetrachtungen nach der *Cyvin*schen Methode⁵ für ein X_2Y_2 -Molekül der Punktgruppe C_{2h} zu entwickeln, sie auf das *trans*-Difluordiazin anzuwenden und dann mit Hilfe eines starren Rotator—harmonischen Oscillator-Modells die molaren thermodynamischen Funktionen zu berechnen.

¹ S. J. Cyvin und E. Meisingseth, Acta chem. scand. **15**, 1289 (1961).

² E. Meisingseth und S. J. Cyvin, Acta chem. scand. **15**, 2021 (1961).

³ J. Brunvoll und S. J. Cyvin, Acta chem. scand. **17**, 1405, 1412 (1963).

⁴ G. Nagarajan und E. R. Lippincott, Bull. Soc. chim. belges **75**, 555 (1966).

⁵ S. J. Cyvin, Spectrochim. Acta **15**, 828 (1959).

Mittlere Schwingungsamplituden

Ein X_2Y_2 -Molekül zentrosymmetrischer Struktur der Punktgruppe C_{2h} besitzt auf Grund einschlägiger Symmetriebetrachtungen und Auswahlregeln⁶ sechs Freiheitsgrade der Schwingung, die jedoch nur sechs Grundsicherungen entsprechen; diese sind wie folgt auf die verschie-

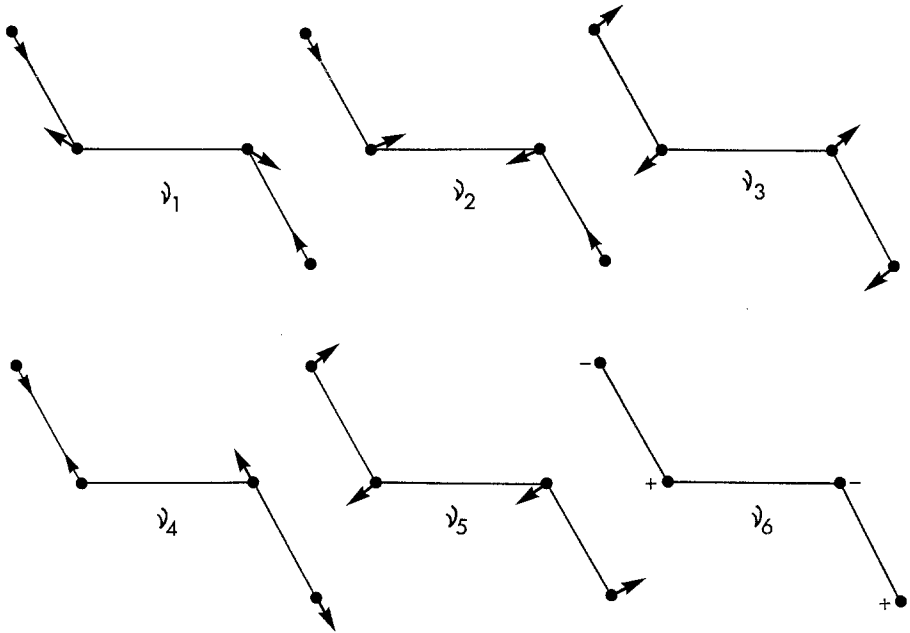


Abb. 1. Schematische Darstellung der Normalschwingungen des Modells eines X_2Y_2 -Moleküls mit C_{2h} -Symmetrie. Die Pluszeichen bedeuten eine Bewegung senkrecht zu und oberhalb der durch das Molekül beschriebenen Ebene, die Minuszeichen eine Bewegung senkrecht zu und unterhalb dieser Ebene

denen, irreduziblen Darstellungen verteilt: $3 A_g + 2 B_u + A_u$. Die mit g indizierten Schwingungsrasen sind ramanaktiv und symmetrisch in bezug auf das Symmetriezentrum, die mit u indizierten sind infrarotaktiv und in bezug auf das Symmetriezentrum asymmetrisch. Die Grundsicherungsfrequenzen ν_1 , ν_2 und ν_3 der Schwingungsrasse A_g entsprechen den völlig symmetrischen $X-Y$ -Valenz-, $X-X$ -Valenz- und den völlig symmetrischen $Y-\widehat{X}-X$ -Deformationsschwingungen; ν_4 und ν_5 der Schwingungsrasse B_u entsprechen asymmetrischen $X-Y$ -Valenz- und asymmetrischen $Y-\widehat{X}-X$ -Deformationsschwingungen; ν_6 der Schwin-

⁶ G. Herzberg, *Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, Van Nostrand 1960.

gungsrasse A_u schließlich entspricht einer Torsion. Eine schematische Darstellung der Normalschwingungen eines derartigen Moleküls gibt Abb. 1 wieder; die Plus- und Minuszeichen geben hierbei die Bewegungen in entgegengesetzten Richtungen senkrecht zur Molekülebene an. Im gegenständlichen Fall wurden sechs innere Koordinaten zur Beschreibung der sechs Schwingungsfreiheitsgrade (vgl. Abb. 2) gewählt und mit

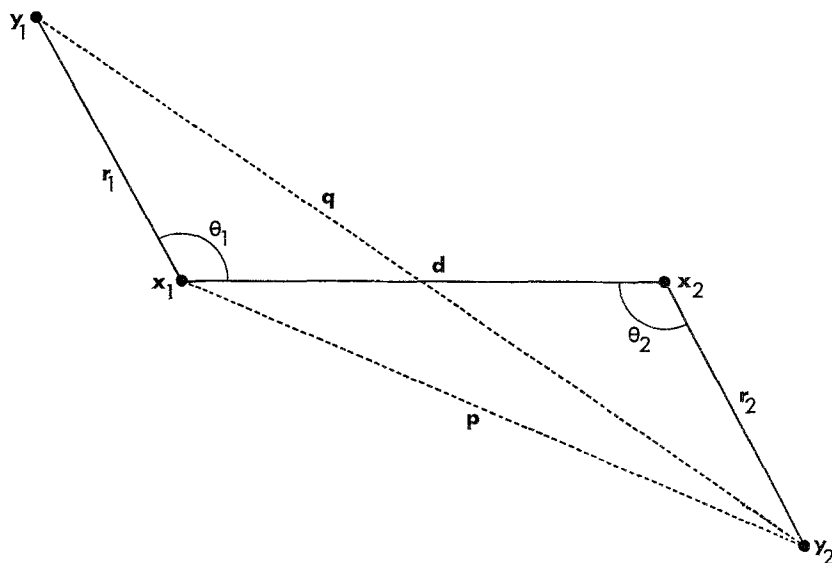


Abb. 2. Geometrische Darstellung der inneren Koordinaten des Modells eines X_2Y_2 -Moleküls mit C_{2h} -Symmetrie. Die Koordinate Φ der Torsion der X — Y -Bindungen um die X — X -Bindung herum ist nicht eingezeichnet. Die Symbole bedeuten die Abweichungen von den Werten der Gleichgewichtskonfiguration

ihrer Hilfe sodann das folgende, die Bedingungen der Normalität, Orthogonalität und Transformation der betreffenden Schwingungsrasen befriedigende System von Symmetriekoordinaten aufgestellt:

$$S_1(A_g) = (r_1 + r_2)/\sqrt{2}$$

$$S_2(A_g) = d$$

$$S_3(A_g) = \sqrt{RD} (\theta_1 + \theta_2)/\sqrt{2}$$

$$S_4(B_u) = (r_1 - r_2)/\sqrt{2}$$

$$S_5(B_u) = \sqrt{RD} (\theta_1 - \theta_2)/\sqrt{2}$$

$$S_6(A_u) = \sqrt{RD} \phi.$$

Darin bedeuten: r die Abweichung der Bindungslänge $X—Y$ von ihrem Gleichgewichtswert, d diejenige der $X—X$ -Bindung, θ die Änderung des Winkels zwischen den $X—Y$ - und $X—X$ -Bindungen und ϕ die Änderung der Torsion zwischen den $X—Y$ -Bindungen um die $X—X$ -Bindung herum. Mit R und D werden die Gleichgewichts-Kernabstände der $X—Y$ - und der $X—X$ -Bindung bezeichnet. Die Winkelverschiebungskoordinaten (angle displacement coordinates) werden im vorliegenden Fall mit den Gleichgewichtskernabständen R und D multipliziert, um die Dimensionen der sich auf die Winkelfeldformation beziehenden Größen der mittleren Amplitudenquadrate denjenigen der sich auf die gebundenen Atompaare beziehenden anzugleichen.

Unter Benutzung des von *Wilson*⁷ postulierten Prinzips und der oben angeführten Symmetriekordinaten wurden die Matrixelemente G der kinetischen Energie erhalten. Sie lauten für die verschiedenen irreduziblen Darstellungen:

$$\begin{aligned} G_{11}(A_g) &= \mu_X + \mu_Y \\ G_{22}(A_g) &= 2\mu_X \\ G_{33}(A_g) &= \{(4/D^2) + (1/R^2) - (4 \cos \theta'/RD)\} \mu_X + (1/R^2) \mu_Y \\ G_{12}(A_g) &= G_{21}(A_g) = \sqrt{2} \cos \theta' \mu_X \\ G_{13}(A_g) &= G_{31}(A_g) = -(2/D) \sin \theta' \mu_X \\ G_{23}(A_g) &= G_{32}(A_g) = -(\sqrt{2}/R) \sin \theta' \mu_X \\ G_{44}(B_u) &= \mu_X + \mu_Y \\ G_{55}(B_u) &= (1/R^2) (\mu_X + \mu_Y) \\ G_{45}(B_u) &= G_{54}(B_u) = 0 \\ G_{66}(A_u) &= (2/R^2 \sin^2 \theta') (\mu_X + \mu_Y) \end{aligned}$$

μ_X und μ_Y sind hierbei die reziproken Massen der Atome X bzw. Y .

Die symmetrisierten Matrizen Σ der mittleren Amplitudenquadrate wurden durch Einführung der oben angeschriebenen Größen σ der mittleren Amplitudenquadrate nach dem von *Cyvin*⁵ angegebenen Verfahren erhalten und lauten:

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}(A_g) &= \langle S_1^2 \rangle = \sigma_r + \sigma_{rr} \\ \Sigma_{22}(A_g) &= \langle S_2^2 \rangle = \sigma_d \\ \Sigma_{33}(A_g) &= \langle S_3^2 \rangle = \sigma_\theta + \sigma_{\theta\theta} \\ \Sigma_{12}(A_g) &= \Sigma_{21}(A_g) = \langle S_1 S_2 \rangle = \sqrt{2} \sigma_{rd} \\ \Sigma_{13}(A_g) &= \Sigma_{31}(A_g) = \langle S_1 S_3 \rangle = \sigma_{r\theta} + \sigma_{r\theta'} \\ \Sigma_{23}(A_g) &= \Sigma_{32}(A_g) = \langle S_2 S_3 \rangle = \sqrt{2} \sigma_{d\theta} \end{aligned}$$

⁷ *E. B. Wilson, Jr., J. Chem. Physics 7, 1047 (1939); 9, 76 (1941).*

$$\begin{aligned}\Sigma_{44}(\text{B}_u) &= \langle S_4^2 \rangle = \sigma_r - \sigma_{rr} \\ \Sigma_{55}(\text{B}_u) &= \langle S_5^2 \rangle = \sigma_\theta - \sigma_{\theta\theta} \\ \Sigma_{45}(\text{B}_u) &= \Sigma_{54}(\text{B}_u) = \langle S_4 S_5 \rangle \sigma_{r\theta} - \sigma_{r\theta'} \\ \Sigma_{66}(\text{A}_u) &= \langle S_6^2 \rangle = \sigma_\Phi\end{aligned}$$

Die Größen der inneren Amplitudenquadrate können durch die inneren Koordinaten in folgender Weise ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}\sigma_r &= \langle r_1^2 \rangle = \langle r_2^2 \rangle \\ \sigma_{rr} &= \langle r_1 r_2 \rangle \\ \sigma_d &= \langle d^2 \rangle \\ \sigma_\theta &= RD \langle \theta_1^2 \rangle = RD \langle \theta_2^2 \rangle \\ \sigma_{\theta\theta} &= RD \langle \theta_1 \theta_2 \rangle \\ \sigma_{rd} &= \langle r_1 d_1 \rangle = \langle r_2 d_2 \rangle \\ \sigma_{r\theta} &= \sqrt{RD} \langle r_1 \theta_1 \rangle = \sqrt{RD} \langle r_2 \theta_2 \rangle \\ \sigma_{r\theta'} &= \sqrt{RD} \langle r_1 \theta_2 \rangle = \sqrt{RD} \langle r_2 \theta_1 \rangle \\ \sigma_{d\theta} &= \sqrt{RD} \langle d \theta_1 \rangle = \sqrt{RD} \langle d \theta_2 \rangle \\ \sigma_\Phi &= RD \langle \phi^2 \rangle\end{aligned}$$

Hierin sind: σ_r die mittlere Amplitudenquadratgröße für das gebundene Atompaar $X-Y$, σ_d die für das gebundene Atompaar $X-X$, σ_θ die der Deformation des Winkels $Y-X-X$ entsprechende Größe, σ_Φ die der Torsion der $X-Y$ -Bindungen um die $X-X$ -Bindung und σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$, $\sigma_{r\theta}$, $\sigma_{r\theta'}$ und $\sigma_{d\theta}$ die entsprechenden Größen der Wechselwirkung zwischen gebundenen Atompaaren und Winkeldeformationen.

Neben den oben angegebenen Größen der mittleren Amplitudenquadrate konnten analytische, die symmetrisierten Matrizen der mittleren Amplitudenquadrate enthaltende Ausdrücke für die den nichtgebundenen Atompaaren $Y\dots X$ und $Y\dots Y$ entsprechenden mittleren Amplitudenquadrate aufgestellt werden:

$$\begin{aligned}\sigma_p &= \left\{ \left(\frac{1}{2} \right) \Sigma_{11} + \Sigma_{22} + \sqrt{2} \Sigma_{12} + \left(\frac{1}{2} \right) \Sigma_{44} \right\} \sin^2(\theta'/2) + \left(\frac{1}{2} \right) (\Sigma_{33} + \Sigma_{55}) \cos^2(\theta'/2) - \\ &\quad + (\Sigma_{13} + \sqrt{2} \Sigma_{23} + \Sigma_{45}) \sin(\theta'/2) \cos(\theta'/2) \\ \sigma_q &= (2 \Sigma_{11} + \Sigma_{22} + 2 \sqrt{2} \Sigma_{12} + 2 \Sigma_{44}) \sin^2(\theta'/2) + \left(\frac{1}{2} \right) (\Sigma_{33} + \Sigma_{55}) \cos^2(\theta'/2) + \\ &\quad + (\Sigma_{13} + (1/\sqrt{2}) \Sigma_{23} + \Sigma_{45}) \sin(\theta'/2) \cos(\theta'/2)\end{aligned}$$

θ bedeutet darin den Winkel $Y-\hat{X}-X$ der Gleichgewichtskonfiguration.

Anwendung auf *trans*-Difluordiazin

Das erstmalig von *Haller*⁸ dargestellte Difluordiazin ist eben gebaut und existiert in einer *cis*- und in einer *trans*-Form, wie Elektronenbeugungs-, Mikrowellen- und andere Untersuchungen von *Bauer*⁹, *Armstrong* und Mitarbeitern^{10, 11} sowie *Kaczkowski* und *Wilson*¹² ergeben haben. Infrarotspektroskopische Untersuchungen im Gaszustand wurden von *Colburn* und Mitarbeitern¹³ und *Sanborn*¹⁴ ausgeführt, die die Grundschwingungen der *trans*- und *cis*-Konfigurationen zuordneten und die Kraftkonstanten berechneten. *Ettinger* und Mitarbeiter¹⁵ und *Sanborn*¹⁶ haben diese Arbeiten fortgesetzt und die Struktur des Moleküls diskutiert. *King* und *Overend*¹⁷ haben kürzlich sowohl die Raman- wie die Infrarotspektren untersucht und die Zuordnung der Grundschwingungsfrequenzen für das *trans*-Isomere verfeinert; diese Werte sind in Tab. 1 angeführt. Die von ihnen entwickelte Methode wurde hier auf die Ermittlung der mittleren Schwingungsamplituden gebundener und nichtgebundener Atompaaire bei Raumtemperatur angewendet.

Die von *Cyvin*⁵ abgeleitete grundlegende Gleichung $|\sum G^{-1} - \Delta E| = 0$ diene zur Lösung der Säkulargleichungen und zur Berechnung der symmetrisierten Matrizen der mittleren Amplitudenquadrate, in denen Δ mit der Normalschwingungsfrequenz ν durch die Gleichung

$$\Delta_i = (h/8 \pi^2 \nu_i) \cot h (h \nu_i/2 k T)$$

verbunden ist. Darin bedeutet E die Einheitsmatrix, h die Plancksche Konstante, k die Boltzmannsche Konstante und T die absolute Temperatur. Die die Normalschwingungsfrequenzen in Termen der Größen der mittleren Amplitudenquadrate wiedergebenden Säkulargleichungen für *trans*-Difluordiazin wurden unter Zuhilfenahme der Schwingungsfrequenzen der Tab. 1, der Angaben zur Molekülstruktur von *Bauer*⁹, nämlich N—F 1,44 Å, N=N 1,25 Å und F— \widehat{N} =N 115° und der Ma-

⁸ *J. F. Haller*, Dissertation Cornell University, 1942.

⁹ *S. H. Bauer*, *J. Amer. Chem. Soc.* **69**, 3104 (1947).

¹⁰ *G. T. Armstrong*, *S. Marantz* und *C. F. Coule*, *J. Amer. Chem. Soc.* **81**, 3798 (1959).

¹¹ *G. T. Armstrong* und *S. Marantz*, Natl. Bureau of Standards, Rept. No. 7303, June 1961.

¹² *R. L. Kaczkowski* und *E. B. Wilson, Jr.*, *J. Chem. Physics* **39**, 1030 (1963)

¹³ *C. B. Colburn*, *F. A. Johnson*, *A. Kennedy*, *K. McCullum*, *L. C. Metzger* und *C. O. Parker*, *J. Amer. Chem. Soc.* **81**, 6397 (1959).

¹⁴ *R. H. Sanborn*, *J. Chem. Physics* **33**, 1855 (1960).

¹⁵ *R. Ettinger*, *F. A. Johnson* und *C. B. Colburn*, *J. Chem. Physics* **34**, 2187 (1961).

¹⁶ *R. H. Sanborn*, *J. Chem. Physics* **34**, 2188 (1961).

¹⁷ *S. T. King* und *J. Overend*, *Spectrochim. Acta* **22**, 689 (1966).

trizen Σ und G bei Raumtemperatur aufgestellt. Die Anzahl der symmetrisierten Matrizen der mittleren Amplitudenquadrate ist größer als die Anzahl der Grundschnwingungsfrequenzen und eine eindeutige Lösung daher nicht möglich. Aus Einfachheitsgründen wurden deshalb die nicht-diagonalen Elemente vernachlässigt und dann die Gleichungen gelöst. Die abgeschätzten Werte der symmetrisierten Matrizen der mittleren Amplitudenquadrate dienten sodann zur Berechnung der Werte der Größen der mittleren Amplitudenquadrate. Sie betragen bei Raumtemperatur in Å^2 : $\sigma_r = 0,0195364$, $\sigma_d = 0,0164836$, $\sigma_\theta = 0,0080195$, $\sigma_\phi = 0,0144289$, $\sigma_p = 0,0039942$ und $\sigma_q = 0,0063362$. Das mittlere Amplitudenquadrat der Torsion ist demnach sehr viel größer als das der Deformation und das für nichtgebundene und gebundene Atumpaare. Der Wert für die Deformation ist seinerseits wieder größer als der für nichtgebundene und gebundene Atumpaare, und schließlich der für nichtgebundene Atumpaare größer als der für gebundene. Dies zeigt, daß der Wert der mittleren Schwingungsamplitude mit der Größe der Bindungslänge zunimmt, gleichgültig, ob es sich dabei um gebundene oder nichtgebundene Atumpaare handelt. Die entsprechenden Werte für die mittleren Schwingungsamplituden der gebundenen Atumpaare $N-F$ und $N=N$ und der nichtgebundenen Atumpaare $N---F$ und $F---F$ sind bei Raumtemperatur (in Å) 0,0442, 0,0406, 0,0632 und 0,0796. *Bauer*⁹ hat in seiner Arbeit über die Elektronenbeugungsuntersuchungen an diesem Molekül keine Angaben über die mittleren Schwingungsamplituden gebundener oder nichtgebundener Atumpaare bei irgendeiner Temperatur gemacht. Ein Vergleich seiner experimentellen Ergebnisse mit denen der vorliegenden Arbeit wäre nun somit möglich; desgleichen sollten die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit für die Interpretation zukünftiger Elektronenbeugungsversuche von größtem Wert sein.

Tabelle 1. Grundschnwingungen in cm^{-1} für Difluordiazine

Schnwingungs- rasse	Funda- mental		Frequenz
A_g	1	$N-F$ symmetrical stretching	1010
A_g	2	$N=N$ stretching	1522
A_g	3	$N=\widehat{N}-F$ symmetrical bending	600
B_u	4	$N-F$ asymmetrical stretching	990
B_u	5	$N=\widehat{N}-F$ asymmetrical bending	423
A_u	6	torsion	363,5

Die thermodynamischen Funktionen

Mit Hilfe der in Tab. 1 in cm^{-1} angeführten Schwingungsfrequenzen und der Angaben zur Molekülstruktur⁹ wurden die molaren thermodynamischen Funktionen, wie Enthalpie, freie Enthalpie, Entropie und spezifische Wärme des *trans*-Difluordiazins, für den Temperaturbereich 200—2000° K berechnet. Der Berechnung lag die Annahme eines starren

Tabelle 2. Enthalpie, freie Enthalpie, Entropie und Wärmekapazität des *trans*-Difluordiazins im idealen Gaszustand bei 1 Atmosphäre (in Cal · Grad⁻¹ Mol⁻¹)

$T(^{\circ}\text{K})$	$(H_0 - H_0^{\circ})/T$	$-(F_0 - H_0^{\circ})/T$	S°	C_p°
200	8,797	50,917	59,714	10,742
273,16	9,533	53,770	63,303	12,300
298,16	9,786	54,616	64,402	12,777
300	9,801	54,674	64,475	12,801
400	10,763	57,626	68,389	14,430
500	11,615	60,114	71,729	15,637
600	12,379	62,318	74,697	16,557
700	13,021	64,264	77,285	17,222
800	13,580	66,050	79,630	17,720
900	14,063	67,668	81,731	18,103
1000	14,488	69,189	83,677	18,395
1100	14,846	70,562	85,408	18,619
1200	15,163	71,853	87,016	18,798
1300	15,375	73,110	88,485	18,944
1400	15,711	74,280	89,991	19,062
1500	15,925	75,313	91,238	19,157
1600	16,134	76,366	92,500	19,238
1700	16,318	77,341	93,659	19,307
1800	16,486	78,255	94,741	19,364
1900	16,640	79,183	95,823	19,415
2000	16,783	80,006	96,789	19,459

Rotator—harmonischen Oscillator-Modells und eines Gases im thermodynamischen gasförmigen Standardzustand der Fugazität 1 (1 Atmosphäre) zugrunde. Zur Ausführung wurden die Standardformeln und Funktionstabellen für die Beiträge des harmonischen Oscillators von *Pitzer*¹⁸ benutzt. Da der tatsächliche Wert der Torsionsenergie weder experimentell noch theoretisch je bestimmt worden ist, wurde ihr Beitrag ($363,5 \text{ cm}^{-1}$) zu den thermodynamischen Gesamteigenschaften hier in ähnlicher Weise berücksichtigt wie der der harmonischen Schwingungen. Die Hauptträgheitsmomente, aus den Elektronenbeugungsergebnissen berechnet, haben folgende Werte:

$$\begin{aligned}I_{xx} &= 64,725 \text{ AME } \text{Å}^2 (107,517 \cdot 10^{-40} \text{ g cm}^2) \\I_{yy} &= 63,297 \text{ AME } \text{Å}^2 (105,145 \cdot 10^{-40} \text{ g cm}^2) \\I_{zz} &= 128,022 \text{ AME } \text{Å}^2 (212,661 \cdot 10^{-40} \text{ g cm}^2)\end{aligned}$$

In der Berechnung wurde eine Symmetrie von 2 und ein elektronischer Singulett-Grundzustand angenommen und chemische Atomgewichte verwendet, die Anteile der Zentrifugaldistorsion, Isotopenbeimengung, des Kernspins und der Wechselwirkung zwischen Schwingung und Rotation jedoch vernachlässigt, da ihre Beiträge zu den thermodynamischen Gesamteigenschaften vernachlässigbar klein sind. Die berechneten Werte aller vier thermodynamischen Größen des *trans*-Difluordiazins sind in $\text{cal} \cdot \text{grad}^{-1}$ in Tab. 2 angeführt. Kalorimetrische Angaben, die einen Vergleich zwischen experimentellen und theoretischen Ergebnissen gestatten würden, sind aus der Literatur nicht bekannt.

* AME = Atommasseneinheit.