C6

●

C_6

Bauer S.H. и др. 1968

Struct. Chem. Mol. Biol., 1968,
653-70

Структуры C_6-, B_3N_3-, C_3N_3-кольцеобразных соединений.

(См. B_3N_3) I

C_6

Di,

Смл. п.

Weltner

Thompson K. R.,
Dekock R. L.

1971

J. Amer. Chem. Soc,

1971, 93, n 19, 4688.

(См. C_1) III

C_6

C_6^-

1982

Ewing D. W., et al.

Chem. Phys. Lett., 1982, 86, N4, 365-368.

геометр., структ., D_0.

(см. C_2; III)

C_6^-

1982

Goldring G., Eisen Y., et al.

Расчет
геометр.,
структ.

Phys. Rev. A: Gen. Phys., 1982, A26, N1, 186-198.

(см. $NCO^{+,0,-}$; $\underline{III}$)

C_6

1986

11 Д48. Строение небольших углеродных кластеров: циклическое основное состояние кластера C_6. Structures of small carbon clusters. Cyclic ground state of C_6. Raghavachari Krishnan, Whiteside R. A., Pople J. A. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 11, 6623—6628 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Проведены неэмпирич. расчеты равновесных конфигураций и энергий всех шести изомерных модификаций кластера C_6. Расчеты выполнены в приближении Хартри—Фока с расширенным базисом, включающим набор поляризационных ф-ций *d*-типа для каждого атома углерода. Корреляционные эффекты учитывались в рамках теории возмущений Меллера—Плессета четвертого порядка. Результаты расчетов показывают, что основным электронным состоянием кластера C_6 является циклическая синглетная структура с шестью π-электронами (плоская конфигурация с симметрией D_{3h}, $^1A'$). Считавшаяся ранее основной линейная $^3\Sigma_g^-$ структура имеет энергию на ~ 10 ккал/моль больше. Оценена теплота образования кластера C_6 $\Delta H \simeq 281$ ккал/моль, что согласуется с эксперим. данными. В. М. Стрельченя

М.П.

ф. 1987, 18, N 11

C_6

1986

106: 126193r Structures of small carbon clusters: cyclic ground state of C_6. Raghavachari, Krishnan; Whiteside, R. A.; Pople, J. A. (AT and T Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(11), 6623-8 (Eng). Accurate ab-initio calcns. were done to investigate the nature of the structures and energies of different C_6 isomers. The effects of polarization functions and electron correlation were included in these calcns. A cyclic singlet structure with six π-electrons (planar D_{3h}, $^1A'$) is the ground state. The linear $^3\Sigma_g^-$ structure lies about 10 kcal/mol higher in energy. The heat of formation of C_6 estd. to be $\Delta H_0° \simeq 281$ kcal/mol.

цикл., $\Delta_f H$,

Ⓗ C_6 ($\Delta_f H$)

C. A. 1987, 106, N 16.

C_6

1987

+ 9 Б1065. **Сравнение теоретических и экспериментальных данных для системы C_6(г).** Comparing theoretical and observed data in the C_6(g) system. Slanina Z. «Chem. Phys. Lett.», 1987, **142**, № 6, 512—514 (англ.)

На основании лит. результатов неэмпирич. расчетов стационарных точек на потенциальной Пв C_6 («J. Chem. Phys.», 1986, 85, 6623) интерпретированы эксперим. данные по равновесию пара C_6 над графитом. Неэмпирич. расчеты указывают, что наименьшей энергии отвечает циклич. изомер C_6 (D_{3h}), а линейная форма ($D_{\infty h}$) имеет энергию выше на 42 кДж/моль. Расчет статистич. сумм с вычисл. молек. постоянными при т-ре эксперимента 2500 К показал, что наибольший вес в паре тем не менее должен иметь линейный изомер (до 95%). Суммарная для всех изомеров константа равновесия $1{,}36 \cdot 10^{-12}$ атм оказалась лишь на 8% меньше эксперим. величины, что является примером очень хорошего согласия эксперим. и теорет. величин.

А. В. Немухин

М.П.

Х. 1988, 19, N 9

C_6

(Оп. 27488)

1987

107: 88243t **ESR of the carbon hexaatomic molecule.** Van Zee, R. J.; Ferrante, R. F.; Zeringue, K. J.; Weltner, W., Jr. (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(9), 5212–13 (Eng). The ESR signals attributed to the C_6 mol. in its lowest $^3\Sigma$ state, probably the ground state, are described. The C_6 mol. was obtained by vaporization of graphite powder or microwave dissocn. of triacetylene. The X band ESR spectra of the C_6 mol. was obtained by using Ar or Ne matrixes. The C_6 mol. trapped in solid Ar or Ne at 4K has a $^3\Sigma_g^-$ state and probably a cumulene–type bonding.

($X^3\Sigma_g^-$)

ЭПР в матрице

C.A. 1987, 107, N10

C_6

1988

109: 99140z **Isomerism of carbon C_6(g) cluster and its manifestations in the system thermodynamics.** Slanina, Zdenek (J. Heyrovsky Inst. Phys. Chem. Electrochem., Czech. Acad. Sci., CS-121 38 Prague, Czech.). *Thermochim. Acta* 1988, 127, 237-4 (Eng). In contrast to earlier conclusions based on simple models, the newest calcns. showed that the C_6(g) cluster isomer of the lowest potential energy is a cyclic structure of D_{3h} symmetry. The evaluation given in the present study, however, shows that increasing temp. increases the importance of the energetically higher linear structure which becomes the dominant component of the equil. gaseous mixt. of isomers in the end. Therefore, the D_{3h} structure alone cannot be used in simulating the C_6(g) system thermodn., and it is necessary to apply the overall terms including the contributions of all the isomers. The effects of isomerism are esp. noticeable with the heat capacity term whose temp. dependence shows a markedly extremal course. This study fundamentally changes both the values of the quantities used so far and the approaches to the thermodn. of this system.

(изомеризм)

C. A. 1988, 109, N 12.

C_6

От. 29617

1988

Van Zee R. J., Ferrante R

et al.,

электрон-
спин-
резонанс.

J. Chem. Phys., 1988,
<u>88</u>, N 6, 3465-3474.

C_6

1989

111: 181137d The electronic and molecular structure of the carbon hexaatomic molecule: complete active space self-consistent-field and multireference configuration interaction. Parasuk, V.; Almlof, J. (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(2), 1137–41 (Eng). Energies and equil. geometries were calcd. for different structures of the C_6 mol., using MC-SCF and MR-CI methods with large basis sets of ANO type. The ground state is linear with a cumulene-like electronic structure of $^3\Sigma_g^-$ symmetry. This result is consistent with recent exptl. findings, but disagrees with other recent ab initio calcns. using perturbation methods.

Ei, кв. мех. расчет

C.A. 1989, <u>111</u>, N20

C_6, C_8, C_{10} 1990

Liang Congxin,
Schaefer Henry F, III.
Chem. Phys. Lett.
1990, 169 (1-2), 150-160.

расчёт
Ti

(см. C_4; III)

C_6

1990

Martin J. M. L., François J. P. et al.

м-п.

J. Chem. Phys. 1990. 93, N 12. C. 8850-8861.

(см. C_4; III)

C_6 1990

Slanina Zdenek.

расчёт THEOCHEM 1990,
потенц. 65 (1–2), 143–51.
энергии

(см. Si_6H_6; III)

C_6^-

1991

12 Д186. Стабильные и метастабильные фотовозбуждения для линейного C_6^-. Теоретическое исследование. Stable and metastable photoexcitations of linear C_6^-. Theoretical study / Adamowicz L. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— **182**, № 1.— С. 45—50.— Англ.

М·Л·

В рамках предложенного ранее (// J. Chem. Phys.— 1991.— **94**.— С. 1241) метода корреляционных орбиталей первого порядка по схеме неограниченного хартри-фоковского подхода в базисах 5*s*3*p*2*d* и 6*s*4*p*1*d* с учетом корреляции электронов во втором порядке многочастичной теории возмущений исследовано электронное строение C_6^- в основном и возбужденных состояниях. Приведены энергии вертикальных возбуждений. Также предсказано наличие ряда метастабильных состояний. Обсужден механизм фотофрагментации.

ф. 1991, N 12

C_6

1991

Adamowicz Ludwik.

J. Chem. Phys. 1991, 94(2), 1241–6.

Ae

(см. C_3; III)

C_6

1991

Kurtz J., Adamowicz L.,

Колебат.
частоты,
интенсивн.,
теорет.
расчет

Astrophys. J. 1991, 370,
N2, Pt 1, 784–790.

Theoretical vibrations of carbon chains C_3, C_4, C_5, C_6, C_7, C_8 and C_9.

C_6^-

1991

12 Д185. Ромбический C_4. Содержит ли он самое короткое расстояние C—C между несвязанными атомами? Rhombic C_4. Does it contain the shortest nonbonding C—C distance? / Lammertsma K., Güner O. F., Sudhakar P. V. // J. Chem. Phys.— 1991.— **94**, № 12, Pt 1. — С. 8105—8110.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-311ГФ (2*d*, *p*) с учетом корреляции электронов во втором порядке теории возмущений Меллера—Плессета (ТВМП) исследовано электронное строение ромбич. конформации C_4 (**I**), его протонированных форм C_4H^+ и $C_4H_2^{2+}$ и линейного изомера **I** (**II**). Обнаружено, что **I** и **II** близки по энергии. Приведены гармонические колебательные частоты и интенсивности, карты лапласиана. Показано, что поперечная связь CC в **I** топологически нестабильна. Проведено сопоставление данных с результатами для [1.1.1] пропеллана. В 4-м порядке ТВМП поперечное расстояние между несвязанными атомами C оценено в 1,546 Å.

М.Л.

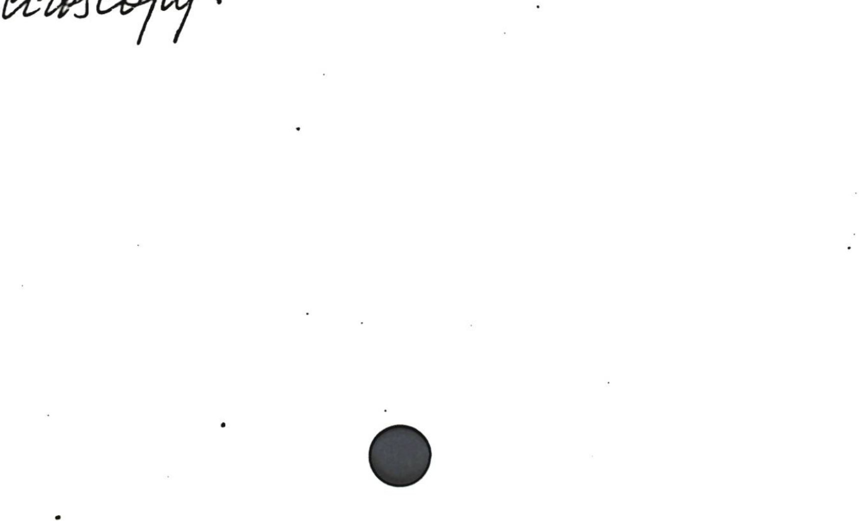
ф. 1991, N 12

C_6^- Om. 37403 1992

C_6 Arnold C.C., Zhao Y., et al.,

Di cuer. noon. J. Chem. Phys., 1992, <u>97</u>(9), 6121–6135

Study of C_6^- and C_6 with threshold photodetachment spectroscopy and autodetachment spectroscopy.



C_6^-, C_6

1993

119: 191164q **Reply to 'Comment on: Study of carbon hexaatomic mononegative ion and molecule (C_6^- and C_6) with threshold photodetachment spectroscopy and autodetachment spectroscopy'.** Arnold, Caroline C.; Neumark, Daniel M. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(2), 1442-3 (Eng). A polemic in reply to R. Liu and X. Zhou (ibid., 1440) concerning the vibrational frequencies and force consts. of C_6 and C_6^-.

(ν_i, сил. пост)

C.A. 1993, <u>119</u>, N 18

C_6 ОМ 37178 1993

7 Б1182. Инфракрасная лазерная спектроскопия охлажденных в струе кластеров углерода. Структура триплетного C_6.. Infrared laser spectroscopy of jet-cooled carbon clusters Structure of triplet C_6 /Hwang H. J., Van Orden A., Tanaka K., Kuo E. W., Heath J. R., Saykally R. J. //Mol. Phys. .—1993 .—**79** ,№ 4 .—С. 769—776 .—Англ.

Методом диодной лазерной спектроскопии с использованием многоходового оптич. устройства измерена вращат. и тонкая структура полосы антисимм. вал. кол.

М.П.

Х. 1994, N 7

$\nu_4(\sigma_u)$ охлажденных в импульсной плоской струе аргона кластеров C_6 в триплетном состоянии ($^3\Sigma_g^-$). Кластеры получались при лазерном испарении (эксимерный KrF-лазер) графита. Начало полосы находится при 1959,85852 см^{1}. Значения рассчитанных вращат. постоянных, параметров центробежного искажения и спин-спинового вз-вия равны (в см$^{-1}$): $B''=0{,}048479$, $D''=2{,}2\cdot10^{-8}$, $\lambda''=0{,}1875$, $B'=0{,}048410$, $D'=3{,}0\cdot10^{-8}$, $\lambda'=0{,}1854$ ($r'_{эфф}=1{,}2868$, линейная структура). При анализе использовались постоянные спин-вращат. вз-вия, полученные из спектров ЭПР, $\gamma''=\gamma'=-0{,}0001$ см$^{-1}$. Результаты сопоставлены с данными ряда неэмпирич. расчетов, выполненных различными методами и с использованием различных наборов базисных функций. Библ. 37.

В. М. Ковба

C_6 Om 37178 1993

119: 236814v Infrared laser spectroscopy of jet-cooled carbon clusters: structure of triplet carbon hexaatomic molecule. Hwang, H. J.; Van Orden, A.; Tanaka, K.; Kuo, E. W.; Heath, J. R.; Saykally, R. J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Mol. Phys.* **1993,** 79(4), 769-76 (Eng). **The authors report the first structural characterization of the triplet isomer of C_6.**

Forty-one rovibrational/fine structure transitions in the $\nu_3(\sigma_u)$ antisym. stretch fundamental of the C_6 cluster have been measured by diode laser absorption spectroscopy of a supersonic carbon cluster beam. The obsd. spectrum is characteristic of a centrosym. linear triplet state with cumulene-type bonding. The measured ground state rotational const. $B_0 = 0.048\ 479\ (10)\ cm^{-1}$ and the effective bond length $r_{eff} = 1.2868\ (1)$ Å are in good agreement with ab initio predictions for the linear triplet ($^3\Sigma_g^-$) state of C_6.

(D_2)

B_0

C.A. 1993, 119, N 22

C_6

1993

118: 89753y **Fourier-transform infrared isotopic study of the ν_4 and ν_5 stretching modes of linear carbon hexamer in argon at 10 K.** Kranze, Richard H.; Graham, W. R. M. (Dep. Phys., Texas Christ. Univ., Fort Worth, TX 76129 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(1), 71–7 (Eng). The vibrational spectrum of the linear C_6 cluster produced by trapping the products of the high temp. evapn. of graphite in Ar at ~10 K has yielded a complete set of measurements of the $\nu_4(\sigma_u)$ and $\nu_5(\sigma_u)$ stretching modes for all possible ^{13}C-substituted isotopomers. The obsd. isotopomer frequencies are in excellent agreement with the predictions of recent second-order, Moller–Plesset, ab initio calcns.

ИК в Ar
(матрице)
интен. ν_4, ν_5

C.A.1993, 118, N10

C_6^-

C_6

1993

(νi, сил. пост.)

119: 191163p Comment on: Study of carbon hexaatomic monopositive ion and molecule (C_6^- and C_6) with threshold photodetachment spectroscopy and autodetachment spectroscopy. Liu, Ruifeng; Zhou, Xuefeng (Dep. Chem. Biochem., Univ. Arkansas, Fayetteville, AR 72701 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(2), 1440–1 (Eng). A polemic to C. C. Arnold, et al (ibid, 97, 1992, 6121) concerning the vibrational frequencies and force consts. of the title compds.

C.A. 1993, 119, N18.

C_6

1993

Nakata M.,

Bunko Kenkyu 1993, <u>42</u>(2), 79–83

ИК в матрице, обзор

(см. C_3; <u>III</u>)

C_6 1994

121: 213517c Ab initio study of the energy difference between the cyclic and linear forms of the C_6 molecule. Pless, V.; Suter, H. U.; Engles, B. (Inst. Physikalische und Theoretische Chem., Universitaet Bonn, 53115 Bonn, Germany). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(5), 4042–8 (Eng). The energy difference between the three lowest-lying isomers of C_6, the linear $^3\Sigma_g^-$ state, and the two ring forms, the benzene structure ($^1A_{1g}$) possessing D_{6h} symmetry and a distorted cyclic form ($^1A_1'$, D_{3h} symmetry) have been calcd. using various ab initio methods. Variational methods such as multireference CI (MR–CI) and complete active space second order perturbation treatment (CASPT2) have been applied, as well as perturbational treatments and coupled cluster calcns. (CCD). The correlation of all valence shell electrons is found to be important for a balanced description of the isomers of C_6. Methods which do not account for higher-order effects appropriately proved to be unsuitable for calcg. the energy difference correctly. The results from MR–CI methods show that the isomers are close in energy with the cyclic forms somewhat lower than the linear form. The ring form possessing D_{3h} symmetry ($^1A_1'$) is found to be the lowest-lying structure.

теорет. расчет структуры и стабильности

C. A. 1994, 121, N18

C_6^- 1995

Botschwina, P;
Seeger S., et al.,

структур
параметры,
Di

Int. Rev. Phys. Chem.,
1995, <u>14</u> (2), 169-204.

(см. NH_2^-, ● <u>III</u>)

C_6^- Ом. 38179 1995

C_6

Daniel Forney, Jan Fulara,

спектр et al.,

в

матриц J. Chem. Phys., 1995,

<u>103</u> (1), 48 – 53.

Electronic absorption spectra

of linear carbon chains in neon matrices. I C_6^-, C_6, and C_6H

C_6^-

1995

123: 126066c Electronic absorption spectra of linear carbon chains in neon matrixes. I. C_6^-, C_6, and C_6H. Forney, Daniel; Fulara, Jan; Freivogel, Patrick; Jakobi, Michael; Lessen, Daniel; Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Chem. Phys.* **1995**, 103(1), 48-53 (Eng). Electronic absorption spectra of linear C_6^-, C_6, and C_6H have been identified in neon matrixes at 5 K. The species were produced by codepositing mass selected cations and anions with neon. The ions were generated in a hot cathode discharge source using diacetylene. The spectra of C_6^- and C_6 could also be obsd. using a pure carbon anion source or laser vaporization of graphite. The assignment is based on the mass selection, exptl. and spectroscopic evidence, leading to the location of the 0_0^0 transitions of C_6^-: $^2\Pi_g \leftarrow X\ ^2\Pi_u$, C_6: $^3\Sigma_u^- \leftarrow X\ ^3\Sigma_g^-$, and C_6H: $^2\Pi \leftarrow X\ ^2\Pi$ at 16 458, 19 558, and 18 854 cm^{-1}, resp. The frequencies of the sym. carbon stretching vibrations have been obtained for these species in their excited electronic states.

Электрон-
спектр
поглощен.

(+2) ☒

C_6, C_6H

C.A. 1995, 123, N10

C_6 DM · 37971 1995

Martin J.M.L., Taylor P.R.,

J. Chem. Phys., 1995, 102,
N20, 8270 – 8273

Accurate ab initio total atomization energies of the C_n clusters (n=2-10)

C_6, C_6^-

1995

122: 197398c A theoretical investigation of four electronic states of C_6^- and the ground state of linear C_6. Schmatz, Stefan; Botschwina, Peter (Institut fuer Physikalische Chemie, Universitaet Goettingen, Tammannstrasse 6, D-37077 Gottingen, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 235(1,2), 5–12 (Eng). Large-scale open-shell coupled cluster calcns. have been carried out for the four lowest doublet states of C_6^- and the ground state of linear C_6. They strongly support the assignment of the peaks at 607.7 and 586.5 nm obsd. in neon matrix isolation expts. to the 0_0^0 and 3_0^1 transitions within the electronic band $\tilde{C}\ ^2\Pi_g \leftarrow \tilde{X}\ ^2\Pi_u$ of C_6^-. The vibrational structure of the photoelectron spectrum of C_6^- has been calcd.; the 1_0^1 transition is calcd. to have 42% intensity with respect to the adiabatic peak. Some misassignments of the exptl. threshold photodetachment and autodetachment spectra are cor. Excellent agreement with expt. is obtained for the electron affinity of linear C_6.

теор. расчет
основного
и возбужд.
состояний

C.A. 1995, 122, N16

C_6

1995

21 Б152. Теоретическое исследование четырех электронных состояний C_6^- и основного состояния линейной [структуры] C_6. A theoretical investigation of four electronic states of C_6^- and the ground state of linear C_6 / Schmatz Stefan, Botschwina Peter // Chem. Phys. Lett. .— 1995 .— **235** , № 1 - 2 .— С. 5—12 .— Англ. м. ч.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в трехэкспонентном для валентной оболочки гауссовом базисе с включением поляризац. ф-ций и учетом электронной корреляции методом связанного кластера с включением возбуждений вплоть до трехкратных изучены четыре нижних дублетных состояния C_6^- и основное состояние линейного кластера C_6. Проведено отнесение полос спектра поглощения C_6^- в неоновой матрице. Рассчитана колебательная структура фотоэлектронного спектра. Теор. величина сродства к электрону C_6 очень близка к эксперим. значению. Н. Л.

М.Л.

Н IXI C_6^-

Х. 1995, N21.

C_6 1996

Szczepanski, Jan;
Ekern, Scott; et al.,

Ик
в
мат-
рице

Chem. Phys. 1996,
211 (1,2,3), 359-366

(см C_8; III)

C_6^- 1997

Freivogel P., Grutter M., et al.

Эл. спектр поглощ. в Ne матр.

J. Chem. Phys. 1997, <u>107</u>(1), 22-27.

● (см. C_4^-; <u>III</u>)

C_6 (цикл.)

Ом 38957 1997

ИК в Ar матрице

127: 254556g Vibrational spectra of cyclic C_6 in solid argon. Presilla-Marquez, J. D.; Sheehy, J. A.; Mills, J. D.; Carrick, P. G.; Larson, C. W. (Propulsion Sciences Division, USAF Phillips Laboratory, 10 E. Saturn Blvd., Edwards AFB, USA). *Chem. Phys. Lett.* **1997**, 274(5,6), 439–444 (Eng), Elsevier. Vapors from solid and powd. C emitted from an oven cycled between 2000 and 3000 K were co-condensed with Ar onto a CsI substrate maintained at 10 K The cycling process produced a matrix sandwich with regions of high C d. alternating with layers of Ar. FTIR measurements including extensive ^{13}C isotopic data, supported by ab initio calcns., allow the assignment of a band at 1694.7 cm^{-1} to the $\nu_4(e')$ fundamental of cyclic C_6. This represents the 1st conclusive identification of a small cyclic neutral polycarbon. Addnl., a vibration previously obsd. at 1710.3 cm^{-1} was confirmed as the $\nu_9(\sigma_u)$ mode of linear C_8.

C.A. 1997, 127, N18

C_6^- 1997

Szczepanski, Jan;
Elkern, Scott; et al.,

Di,
ИК спектр

J. Phys. Chem. A 1997,
101 (10), 1841–47.

(См C_3^-; III)

C_6 Om: 38 982 1997

Wang S.L., Rittby C.M.L.
et al.,

J. Chem. Phys., 1997, 107
(16), 6032-6037

Detection of cyclic carbon
clusters. I Isotopic study

of the ν_4 (e') mode of
cyclic C_6 in solid Ar.

C_6

1997

127: 300665s **Photoelectron spectroscopy of C_4^-, C_6^-, and C_8^-.** Xu, Cangshan; Burton, Gordon R.; Taylor, Travis R.; Neumark, Daniel M. (Department of Chemistry, University of California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* **1997**, 107(9), 3428–3436 (Eng), American Institute of Physics. Photoelectron spectra of C_4^-, C_6^-, and C_8^- were obtained at photodetachment wavelengths 266 nm (4.657 eV) and 213 nm (5.822 eV). The spectra reveal considerably more electronic and vibrational structure than was seen in previous studies of these species. Term values for several low−lying excited electronic states of the neutral C clusters were obtained, as well as new vibrational frequencies for the ground and some of the excited electronic states of the neutral clusters. Assignments of excited electronic states were aided by measurements of the photoelectron angular distributions. A new assignment of the vibrational frequencies for C_6 is in considerably better agreement with ab initio results than our original assignment.

(Vi)

C-A. 1997, 127, N21

1999

F: C6
P: 3
132:42205 Electronic absorption spectra of linear C6, C8 and cyclic C10, in neon matrices.

Grutter, Michel; Wyss, Muriel; Riaplov, Evgueni; Maier, P.; Peyerimhoff, Sigrid D.; Hanrath, Michael Institut fur Physikalische Chemie, Universitat Basel Basel CH-4056, Switz.

J. Chem. Phys., 111(16), 7397-7401 (English) 1999 The electronic absorption spectra of the even-numbered C mols. C6-C14 we measured in Ne matrixes. Bare C anions were produced in a Cs sputter sou mass selected, codeposited with Ne at 6

C. A. 2000, 132

K, and neutralized. The spectra apart from the known (1) 3.SIGMA.u- X 3.SIGMA.g- transition of linear C6, and C10 in the visible, absorption bands in the UV region. The spectral when considered in conjunction with ab initio calcns. show that the linea of C6 and C8 have the next strong (2) 3.SIGMA.u- X 3.SIGMA.g- transition band max. near 238 and 277 nm, resp., whereas the band systems of C10, C1 C14 at 316, 332, and 347 nm are due to the monocyclic species.

C_6 Om. 40005 1999

Michael Hanrath, et al.

Chem. Phys., 1999, 249, 121-128.

Theoretical studies on the electronic spectrum of linear $L_{\overset{\frown}{6}}$.

F: C6
P: 3 (dm. 39930) 1999

132:42205 Electronic absorption spectra of linear C6, C8 and cyclic C10, C12 in neon matrices.

Grutter, Michel; Wyss, Muriel; Riaplov, Evgueni; Maier, John P.; Peyerimhoff, Sigrid D.; Hanrath, Michael Institut fur Physikalische Chemie, Universitat Basel Basel CH-4056, Switz.

J. Chem. Phys., 111(16), 7397-7401 (English) 1999 The electronic absorption spectra of the even-numbered C mols. C6-C14 were measured in Ne matrixes. Bare C anions were produced in a Cs sputte source, mass selected, codeposited with Ne at 6 K, and neutralized. The spectra show, apart from the

C.A. 2000, 132

known (1) 3.SIGMA.u- X 3.SIGMA.g- transition linear C6, C8, and C10 in the visible, absorption bands in the UV region. The spectral data when considered in conjunction with ab initio calcns. s that the linear forms of C6 and C8 have the next strong (2) 3.SIGMA.u- X 3.SIGMA.g- transition with band max. near 238 and 277 nm, resp., whereas band systems of C10, C12, and C14 at 316, 332, and 347 nm are due to the monocyclic species.

C_6^- Ом. 40 359 2000

Naaman A., Bhushan K.G.

м.п. J. Chem. Phys., 2000, 113, N11, 4662–4667

C_6^-

2001

134: 185370x MRD−CI Characterization of Electronic Spectra of Isoelectronic Species C_6^-, NC_4N^+, and CNC_3N^+. Cao, Zexing; Peyerimhoff, Sigrid D. (Institut fuer Physikalische und Theoretische Chemie, Universitaet Bonn, D-53115 Bonn, Germany). *J. Phys. Chem. A* 2001, 105(3), 627−631 (Eng), American Chemical Society. The structure and stabilities of linear and cyclic isomers of C_6^- and $N_2C_4^+$ were studied by DFT, MP2, CISD, and CCSD methods. The linear isomers of C_6^- and NC_4N^+ are predicted to be the most stable forms. Multireference CI methodol. was used for the calcn. of the doublet and quartet excited states. Assignments to obsd. transitions in matrix spectroscopy of these species are made. The 1st X $^2\Pi$ − $^2\Pi$ transitions for C_6^-, NC_4N^+, and CNC_3N^+ occur at 1.98, 2.14, and 2.65 eV, resp., showing similar features with large oscillator strengths. A significant difference exists in the X $^2\Pi_u$ − 1 $^2\Sigma_g^+$ band system between the C_6^- and NC_4N^+. Correlation between the relative MO energy and spectroscopic properties is discussed. The predicted electronic spectra agree well with available exptl. data.

структура
и
стабильн.
теор. расчет
спектр в
матрице
$X^2\Pi \rightarrow {}^2\Pi$
$X^2\Pi_u \rightarrow 1\ {}^2\Sigma_g^+$ Ⓗ ● $N_2C_4^+$

C.A. 2001, 134, N13

C_6^- (От. 40828) 2001

Zexing Cao et al.,

электр. спектр

J. Phys. Chem. 2001, A105, 627-31.

MRD-CI Characterization of Electronic Spectra of Isoelectronic Species

C_6^-, NC_4N^+, and CNC_3N^+.