

Cy Ny

1963

Bsp - 7942 - IV

 $C_4N_4^+$

The reactions of normal and excited ions of cyanogen and the persistent complex $C_4N_4^+$. A. Henglein, G. Jacobs, and G. A. Muccini (Hahn-Meitner Inst. Kernforsch., Berlin-Wannsee). *Z. Naturforsch.* 18a, 98-99(1963)(in English). The secondary ions were recognized by the linear dependence of the current ratio on the gas pressure and by the decrease of this ratio with increasing repeller field. The relative intensities and appearance potentials of primary and secondary ions in cyanogen and the postulated reactions are tabulated. The secondary ion $C_4H_4^+$ is a persistent complex from the collision of a $C_2H_2^+$ ion with a C_2N_2 mol. The secondary ion $C_3N_3^+$ appears at 16 ± 0.5 v. The secondary $C_4N_2^+$ shows a first appearance potential of 15 ± 1.0 v. F. Schossberger

C.A. 1963. 58.13

13239h

$(NCCN)_2$

1986

Spackman Mark A.

теорет.
расчет
водородн.
связи,
ссыл. посыл.,
 ν_i ;

J. Chem. Phys. 1986,
85 (11), 6587-6601.

(ссыл.  $(HF)_2$; III)

(NCCN)₂

1994

120: 331677g The molecular structure of the (NCCN)₂ and (PCCP)₂ van der Waals dimers. De Almeida, Wagner B.; Resende, Stella M.; Dos Santos, Helio F. (Inst. Cien. Exatas, Univ. Federal Minas Gerais, 30.161 Belo Horizonte, Brazil). *Mol. Phys.* 1994, 81(6), 1397-410 (Eng). The stationary points on the potential energy surfaces of the (NCCN)₂ and (PCCP)₂ van der Waals homodimers were examd. at the ab initio Hartree-Fock level of theory employing 4-31G basis set. Only a T-shaped C_{2v} stable min. energy structure was found for the (NCCN)₂ dimer, while 2 energetically very similar stable min., exhibiting near T-shaped C_s and slipped-parallel C_{2h} spatial arrangements, were predicted for the (PCCP)₂ dimer. The predictions for the (NCCN)₂ complex are in agreement with a recent gas phase spectroscopic study. No exptl. gas phase study seems to have been reported for the (PCCP)₂ dimer, and an equil. between a near T-shaped and a parallel form probably occurs. The implications of including electron correlation effects and higher polarized/diffuse functions are discussed.

импульсы
ab initio
расчет

⊕ ⊠

C. A. 1994, 120, N 26

● (PCCP)₂

$(NCCN)_2$

1994

22 Б1082. Молекулярная структура ван-дер-ваальсовых димеров $(NCCN)_2$ и $(PCCP)_2$. The molecular structure of the $(NCCN)_2$ and $(PCCP)_2$ van der Waals dimers /De Almeida Wagner B., Resende Stella M., Dos Santos Helio F. //Mol. Phys. .—1994 .—81 ,№ 6 .—С. 1397—1410 .—Англ.

Стационарные точки на поверхности потенциальной энергии ван-дер-ваальсовых гомодимеров $(NCCN)_2$ (I) и $(PCCP)_2$ (II) определены неэмпирич. методом ХФ в базисе 4-31 ГФ. Только одна устойчивая Т-образная структура симметрии C_{2v} предсказана для димера I, в то время как для димера II — две устойчивые энергетически близкие конформации. Одна из них низкой симметрии (C_s) близка к Т-форме, другая определяется смещенно-параллельным пространственным C_{2h} -расположением мономеров. Результаты расчета согласуются с газофазными спектроскопич. данными для I, для II такие данные отсутствуют. Обсуждено влияние учета электронной корреляции и кач-ва базисного набора на результаты расчета. Библ. 67. Н. С.

М.П.

ⓧ (H)

X.1994, №22.