

C2N

A.P. (C_2N^+)

Tate J.T., Smith P.T., Vaughan A.L.
Phys.Rev. 1935, 48, 525-31
"A mass-spectrum-analysis of
the products of ionization by
electron impact in nitrogen,
acetylene, nitric oxide, cyanogen
and carbon monoxide".

C.A., 1935, 7174

NC₂

Jennings K.R., Linnett J.W. 1960

Trans. Faraday Soc. 56, 1737, 1960.

Смещение в активном
азоте.

Полупроводниковый диод
с напряжением 3280А!

Кристалл
Южно

1962

25394

THE REACTION OF GRAPHITE WITH NITROGEN AT ELEVATED TEMPERATURES. J. Berkowitz (Argonne National Lab., Ill.). Preprint SM-26/40. 18p. (In English)

To be published in the Proceedings of the IAEA Symposium on the Thermodynamics of Nuclear Materials held in Vienna, 21-25 May 1962.

The composition of the vapor at equilibrium when nitrogen reacts with graphite at a temperature of 2500°K was studied by a variation of the Knudsen effusion method. Nitrogen gas is introduced into a Knudsen cell lined with graphite, and the cell is heated by electron bombardment to a temperature in the range 2200 to 2500°K. The vapor effusing from the cell is collimated into a molecular beam and ionized by a transverse electron beam. The positive ions formed are accelerated and analyzed in a mass spectrometer. Several methods are used to distinguish the significant ion peaks from those due to residual background gas. At a nitrogen pressure of ca. 10^{-4} atm and a temperature in the range 2200 to 2500°K, the most abundant ions

C₂N⁺~~25394~~

C.M.

C₂N⁻I

NSA. 1962.

16. 19

are N_2^+ , CN^+ and those due to the vapor species above graphite, i.e., C^+ , C_2^+ , and C_3^+ . Much smaller intensities of ions were observed that could conceivably be C_2N^+ , C_3N^+ , $C_2N_3^+$, $C_3N_3^+$, $C_3N_4^+$, $C_6N_4^+$, $C_4N_6^+$, and $C_6N_5^+$. The intensity of CN^+ was more than ten times greater than any of the latter ion peaks, and hence attention was focused on the reaction product which was the precursor of CN^+ , namely the CN radical. A careful study of the concentrations of the various species in the equilibrium $C(g) + \frac{1}{2} N_2(g) \rightleftharpoons CN(g)$ was undertaken, in order to evaluate the equilibrium constant. This datum, when combined with well-established thermodynamic and molecular properties, was used to compute the enthalpy change of this reaction, and hence the heat of formation of the CN radical. This value, $\Delta H_f(CN) = 109.5$ kcal/mole, was compared with the results of a variety of previous experiments, including electron impact appearance potential measurements, spectroscopic observations, and detonation wave studies. The electron impact experiments, which favored ca. 90 kcal/mole for $\Delta H_f(CN)$, were re-interpreted to bring these results into reasonable agreement with those from the detonation wave experiments and from the present study. (auth)

1962

3Б65. Набл.ение четырех неидентифицированных
полос в ультрафиолетовом спектре электрического
разряда высокого напряжения в атмосфере ацето-
нитрила. Pannetier Guy, Marsigny Louis.
Observation de quatre bandes, non identifiées, dans le
spectre ultraviolet de la décharge électrique haute ten-
sion à travers l'acétonitrile. «C. r. Acad. sci.», 1962, 254,
№ 22, 3863—3864 (франц.)

Изучен УФ-спектр испускания электрич. разряда
высокого напряжения в атмосфере ацетонитрила (I).
Наблюдали четыре полосы испускания, расположен-
ные при 2868,8, 2971,4, 2973,0 и 2974,6 Å, природа ко-
торых в настоящее время не выяснена. Эти полосы,
которые также наблюдаются в спектре электрич. раз-
ряда в среде $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, отсутствуют в случае разряда
в чистом азоте, N_2H_4 , NH_3 и $(\text{CH}_3)_2\text{N} - \text{NH}_2$, что указы-
вает на то, что ни N_2 , ни NH не являются ответствен-
ными за их появление. Избыточное содержание азота
в I введет к исчезновению полос. Условия наблюде-
ния полос позволяют предположить, что причиной их
появления является соединение, содержащее углерод
и азот, возможно, трехатомного типа: C_2N , CN_2 или
 CNH .

Б. Рассадин

X. 1963.3

C₂N

XIV-982

1971

Tsuda, Satoru;
et al.

($\bar{A}_e$)

"Bull. Chem. Soc. Jap."

1971, 44 n 6, 1486-91.

(cm. HCN; III);

NC_2

Filby, E.E.; Ames L.L. 1972

"Inorg. Nucl. Chem. Lett"
1972, 8 (10), 855-60.

W.

(ex. MnCl_2 ; $\bar{\text{I}}$)

Ca N^+

1977

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. N1, p 1-221

T. G. CB-6a



+

C_2N
 C_2N^+
 C_3H

[omni 10434]

1980

Green S.

Astrophys. J. 240, 962.
(1980)

M. B. Neftci



Fyrbur

C_2N^+

1982

Wilson S. and Green S.

Astrophys. J. 253, 989 (1982)

Erratum: theoretical microwave spectral constants for C_3H^+

CN

[Om. 18076]

1983

99: 218938c Cross sections for formation of parent and fragment ions by electron impact from cyanogen (C_2N_2). Smith, O. I. (Dep. Chem. Eng., Univ. California, Los Angeles, CA 90024 USA). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1983, 54(1-2), 55-9 (Eng). Cross sections for the formation of parent and fragment ions by electron impact on $(CN)_2$ are reported between the ionization energy and 35 eV. Appearance energies show reasonably good agreement with those obtained in previous studies. The appearance energy for the process $C_2N_2 + e^- \rightarrow (C_2N)^+ + N + 2e^-$ leads to a value for the heat of formation of C_2N of $154 \text{ kcal mol}^{-1}$, somewhat higher than that currently accepted.

(ΔH)

C.A. 1983, 99, N 26

+

C₂N

1983

8 Б1093. Сечения образования материнских и осколочных ионов из C₂N₂ при электронном ударе. Cross-sections for formation of parent and fragment ions by electron impact from C₂N₂. Smith O. I. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1983, 54, № 1—2, 55—59 (англ.)

ΔH_f

На квадрупольном масс-спектрометре измерены кривые эффективности ионизации (КЭИ) электронным ударом C₂N₂ с образованием C₂N₂⁺, CN⁺, C₂⁺, C₂N⁺. Измерение ионных токов проводилось в режиме счета отдельных ионов. Из КЭИ определены Пт появления: $13,5 \pm 0,3$ для C₂N₂⁺; $19,5 \pm 0,3$ для C₂N⁺; $20,9 \pm 0,3$ для CN⁺ и $18,0 \pm 0,3$ для C₂⁺. Из относит. измерений КЭИ для Ne⁺ и продуктов ионизации C₂N₂ определены также абс. сечения ионизации C₂N₂ с образованием различных ионов. Из Пт появления C₂N⁺ получено значение теплоты образования C₂N — 154 ккал/моль.

Е. Николаев

x. 1984, 19, 18

CCN

ОМ- 23932 1985

9 Б1284. Определение констант сверхтонкого взаимодействия радикала CCN в состоянии $A^2\Delta(000)$ по спектрам двойного микроволново-оптического резонанса. Hyperfine coupling constants of the CCN radical in the $A^2\Delta(000)$ state by microwave-optical double resonance spectroscopy. Suzuki Tetsuo, Saito Shuji, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 12, 6154—6157 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом двойного СВЧ-оптич. резонанса наблюдались переходы между компонентами СТВ и между вращат. уровнями радикала CCN (I) в возбужденном электронном состоянии $A^2\Delta$ с конфигурацией ... $4\sigma^2\Pi^2$. Двойной резонанс детектировали в виде изменения флуоресценции I при 470 нм (переход $A^2\Delta-X^2\Pi$), возбуждаемой лазером, при сканировании СВЧ-развертки. Из наблюдаемых частот СВЧ-переходов определены константы СТВ на ядре ^{14}N (—5,9 и 7,8 МГц), константа спин-орбитального взаимодействия (COV) ядерного спина с

М.П.

Х. 1987, 19, № 9

электронным орбитальным угловым моментом (50, 22 МГц) и константа ЯКР (0,75 МГц). Радикал I получен в реакции продуктов разряда в смеси CF_4 и $\text{CH}_3\text{-CN}$. Электронная плотность на азоте для 2p-орбитали составляет 0,36; спиновая плотность на азоте равна 0,047.

Б. Ф. Минаев



C₂N

1986

Bernath P. F.

лазервозб.

AIP Conf. Proc.

спектр
высокого

1986, 146, 443-6.

разрешения

(ссылка ● Ca OH; III)

CN⁺

(om. 24279)

1986

Harland P.W.,

A.P; Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process., 1986,
70, N2, 231-236.

С₂ N

1986

С₂ N⁻

Информационный отчет
МТУ, Химград, II квартал
1986.

Кв. мех.
расчет

"Компьютерное исследование
термодинамических
свойств и молекулярных
постоянных".

C₂N

1986

вертикальн.
спектры,
равновесн.
геометрии

Компьютерное исследование
теплотодинам. св-в
и молекулярных постоян-
ных (заключительный
отчет), ИТУ, Химград,
1986, стр. 45-49.

45-49

C_2N^-

1986

CN_2^-

Комплексное исследование
термодинамич. св-в
и молекулярных консто-
انتيني (заключений -
наиб отчет), ЛБТУ,
Химорак, 1986, стр.
45-49.

45-49

CNC⁺

1987

Kraemer W. P.

Struct. [React. and Thermo-
chem. Ions: Proc. NATO

Adv. Study Inst., Les Arcs, June

ser. n. 30-July 11, 1986. Dordrecht
etc., 1987. C. 247-260.

(car. HOC⁺; III)

G2N

1987

геометрия, Отчет ЛГУ, Химорак, 1987.
Кв. мех.
расчет

(сери в коробке отчетов)

С.Н.

Степанов Н.Ф. и др., 1987

"Комплексное исследование
термодинам. свойств и моле-
кулярных взаимодействий,"

Кв. мех.
раств.

Одесский ЛТУ, Одесса,

II квартал, 1987.

C₂N

1988

Богданова С.А., Мельников
А.В.

Ред. ж. Весен. МТУ. Химия.
м.п. М., 1988, 9с. 15 назв. Рус. (Ру-
копись деп. в ВНИИТ 11.08.
88, N 6470-В88).

(ссыл. C₂N₂; III)

CN⁺

Um 30 052

1988

1 B4046. Структурные изомеры C₂N⁺. Исследование техникой селективных ионных потоков. Structural isomers of C₂N⁺. A selected-ion flow tube study / Knight J. S., Petrie S. A., H., Freeman McEwan M. J., McLean A. D., DeFrees D. J. // J. Amer. Chem. Soc.— 1988.— 110, № 16.— С. 5286—5290.— Англ.

Исследована реакц. способность ионов C₂N⁺ в р-циях с H₂, CH₄, NH₃, H₂O, C₂H₂, HCN, N₂, O₂, N₂O и CO₂ при т-ре (300±5) К. Ионы получены либо электронным ударом C₂N₂, CH₃CN или HC₃N, либо в р-циях C⁺⁺+HCN и C⁺⁺+C₂N₂. Сопоставлены результаты, отнесенные к возможным изомерам CNC⁺ и CCN⁺, образующимися при электронном ударе с энергией 25 эВ. Отмечено, что соединение CCN⁺ является более реакционноспособным при взаимодействии с H₂, CH₄, H₂O, O₂ и CO₂. В др. р-циях различия между изомерами не

X. 1989, N 1

существенны. Методами ССП и теории возмущений Мёллера—Плессета с использованием широких базисных наборов рассчитан профиль Пв потенциальной энергии, связывающий оба изомера. Найдено, что минимуму энергии отвечает соединение CNC^+ , выше на 88 кДж/моль располагается CCN^+ , а разделяющий барьер имеет высоту 195 кДж/моль (со стороны CNC^+). Сделано заключение, ~~что более реакционно-~~ способный изомер CCN^+ вряд ли может присутствовать в значит. конц-ях в межзвездном пространстве.

А. В. Немухин

2N⁺ OM 30023 1988
12 Д137. Сравнительное теоретическое исследование ионов C_2N^+ и $SiCN^+$ и процессов их образования. A comparative theoretical study of the C_2N^+ and $SiCN^+$ ions and their formation processes. Largo-Cabrero A., Barrientos C. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 148, № 1, 79—85 (англ.)

М.П.
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31 ГФ* исследовано электронное строение C_2N^+ (I) и $SiCN^+$ (II); для II также проведены расчеты в расширенном базисе. Учитывались корреляция электронов в четвертом порядке теории возмущений Меллера—Плессета. Обнаружено, что изомеры CNC^+ и $SiNC^+$ стабильнее изомеров CCN^+ и $SiCN^+$ (все линейны) на 23,6 и 9,1 ккал/моль соответственно с барьерами изомеризации 29,5 и 8,7 ккал/моль. Приведены равновесная геометрия, дипольные моменты (0 и 3,716 ед. Дебая для I и II соответственно), вращательные постоянные, колебательные частоты, распределения электронной плотности. Оценены энтальпии реакций C^+ и Si^+ с HCN и HNC и C^+ с HSiN и HNSi и обсуждена возможность протекания этих реакций в межзвездном пространстве.
В. Л. Лебедев.

ф. 1988, № 2

C_2N^+

М 30023

1988

24 Б1047. Сравнительное теоретическое исследование ионов C_2N^+ и $SiCN^+$ процессов их образования. A comparative theoretical study of the C_2N^+ and $SiCN^+$ ions and their formation processes. Largo-Cabrerizo A., Barrientos C. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 148, № 1, 79—85 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисного набора 6—31 ГФ* определены электронное и геометрич. строение изомеров C_2N^+ и $SiCN^+$. Энергии стационарных точек уточнены расчетами с учетом электронной корреляции по теории возмущения Мёллера—Плессета 4-го порядка в более расширенных базисах. В обоих случаях более стабильными найдены изомеры состава HCN^+ , однако в случае $X=Si$ разница в энергии между изомерами много меньше, чем для $X=C$. Барьеры р-ции изомеризации $HCN^+ \rightarrow HNC^+$ найдены равными 29,5 и 8,7 ккал/моль для $X=C$ и Si , соотв. В обоих случаях не найдено стабильных циклич. состояний. Оценены энтальпии р-ций X^+ с HCN и HNC и C^+ с $HSiN$ и $HNSi$ и обсуждена возможность существования таких ионов в межзвездном пространстве.

И. Н. Сенченя

И.Н.

⊠ (H)

Х. 1988, №24

C_2N^+

(Om 30 023)

1988

197599

... study of the ...
methylenimine and cyanosilylium, idene (C_2N^+ and $SiCN^+$)
ions and their formation processes. Largo-Cabrero, A;
Barrientos, C. (Dep. Quim. Fis., Fac. Cienc., Valladolid, Spain
47005). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 148(1), 79-85 (Eng). Ab initio
calcs. at the HF/6-31G* level have been carried out to det. the mol.
structure of the isomers of C_2N^+ and $SiCN^+$, followed by correlated
calcs. at the MP4 level, CNC^+ and $SiNC^+$ are found to be more
stable than CCN^+ and $SiCN^+$, resp. Isomerization barriers of 29.5
and 8.7 kcal/mol are found in each case. A theor. estn. of the
enthalpies for the reactions of C^+ with HCN and HNC, Si^+ with
HCN and HNC, and C^+ with $HSiN$ and $HNSi$ is provided, and on
the basis of our results the possibility of these reactions occurring in
interstellar space is discussed.

neopemueck-
pacem
cmprkngpr,
Vapomepy.

(+2) 

$SiCN^+$, $SiNC^+$,
 CNC^+

C.A. 1988, 109, N22

1994

F: CCN

P: 3

4Б1294. Колебательно-вращательные уровни радикала CCN ($X_2^2\Pi$)
Rovibronic levels of the CCN ($X_2^2\Pi$) radical / Gabriel W., Reinsch E.-A.
Rosmus P. // Chem. Phys. Lett. - 1994. - 231, N 1. - С. 13-17. Англ.

С использованием вариационной процедуры Реннера-Теллера при учете спинов электронов по трехмерным функциям потенциальной энергии (определенным методом CASSCF для 63 геометрич. структур вблизи положения равновесия) и набора эксперим. частот рассчитаны колебательно-вращат. уровни радикала CCN в основном электронном состоянии ($X_2^2\Pi$), удовлетворительно воспроизводящие около 20 разностей колебательно-вращательной энергии с точностью $10\text{-}20\text{ см}^{-1}$ и известные эксперим. уровни для $J=P$ ($P' \leq 7/2$) до 2500 см^{-1} .

Р.Ж.Х. №4, 1996.

C₂N

1994

121: 216089a Ab initio study of the spectroscopy and thermochemistry of the C₂N and CN₂ molecules. Martin, Jan M. L.; Taylor, Peter R.; Francois, J. P.; Gijbels, R. (Departement SBG, Limburgs Universitair Centrum, Universitaire Campus, 3590 Diepenbeek, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 226(5-6), 475-83 (Eng). Several structures and electronic states of the C₂N and CN₂ mols. were studied using complete active space SCF (CASSCF), multireference CI (MRCI), and coupled cluster (CCSD(T)) methods. Both mols. are very stable. The best computed total atomization energies $\sum D_0$ are 288.6 ± 2 kcal/mol for CN₂, and 294.1 ± 2 kcal/mol for C₂N. The CNC and CCN structures for C₂N are nearly isoenergetic. CNN(³Π) lies ~30 kcal/mol above NCN(³Π_g), but has a high barrier towards interconversion and is therefore obsd. exptl. Computed harmonic frequencies for CNN are sensitive to the correlation treatment: they are reproduced well using multireference methods as well as the CCSD(T) method. High spin contamination has a detrimental effect on computed harmonic frequencies at the CCSD(T) level.

meop. panel,
Hepmud atom.
Pi

~~121~~ CN₂

C.A. 1994, 121, N18

CNC

1995

Lee T. J., Racine S.

Mol. Phys. 1995, 84(4),
717 - 25.

пер.
расчёт
стабильн.
и структуры.

( сш. FCN, III)

CCN

1995

123: 68913p Fourier-transform microwave spectroscopy of CCN ($X^2\Pi_{1/2}$). Ohshima, Yasuhiro; Endo, Yasuki (Dep. Pure Appl. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(1), 225-32 (Eng). The lowest $J = 3/2-1/2$ rotational transition of the CCN radical in its $X^2\Pi_{1/2}$ state has been obsd. by using a Fabry-Perot-type Fourier-transform microwave spectrometer combined with a pulsed discharge nozzle. The radical has been generated by a pulsed elec. discharge of CH_3CN or CCl_3CN dild. in Ar, and subsequently cooled to a few degrees in a supersonic free jet. The spectrum with completely resolved fine and hyperfine structures has been analyzed to provide an accurate set of spectroscopic consts. The spin d. and other electronic properties of the unpaired electron in the radical have been estd. from the detd. hyperfine coupling consts. assocd. with the nitrogen nucleus.

$X^2\Pi_{1/2}$,
48 cm⁻¹ m⁻¹

C.A. 1995, 123, N6

CN⁻

1996

125:339496w Ab initio studies on the structures, vertical electron detachment energies and fragmentation energies of C_nN⁻ clusters. [Erratum to document cited in CA125:42254]. Zhan, Chang-Guo; Iwata, Suehiro (Institute for Molecular Science, Myodaiji, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(15), 6578 (Eng). The calcd. results for the ground state of C₂N⁻ were given incorrectly in the original paper. The results for C₂N⁻ listed in Fig. 1 and Tables II and III are not for this state and should be removed. Table IV is reprinted to show the cor. values. The errors were not reflected in the abstr. or the index entries.

meop. pamy
Erratum

C.A. 1996, 125, N 26

CN

[Om. 38756]

1997

Miroshi Konguchi,
Yasuhiko Ohshima et al.,

M.N. J. Chem. Phys., 1997, 106
(13), 5429



GN

1997

Kirotu, Eizi, et al.,

високо-
качеств.
спектры

Adv. Ser. Phys. Chem.
1997, 9, 1-55.

(см. CCH;



III)

C₂N₂

1998

isomers.
reflexions
give some
information,
more in-
formation

128: 221851s Theoretical study on potential-energy surface of C₂N₂. Ding, Y. H.; Huang, X. R.; Li, Z. S.; Sun, C. C. (Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun, Peop. Rep. China 130023). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(5), 2024-2027 (Eng), American Institute of Physics. B3LYP and CCSD(T) (single-point) calcns. are performed on structures and interconversion transition states for five C₂N₂ isomers, i.e., the linear structures NCCN 1, CNCN 2, CNNC 3, and CCNN 4, and the NNC three-membered ring structure with exocyclic C-C bonding 5. A schematic potential-energy surface of the five C₂N₂ isomers is established. It is shown that the elusive and long searched for isomer 3 lies in a deep potential well against isomerization to the well-studied isomers 1 and 2, while the two transition states, which have been predicted to connect the isomers 1 and 3, are actually assocd. with the inter-exchange of the two cyano groups in isomer 2. It is also shown that the exptl. unknown but expectedly important isomer 4 may take an isomerization pathway to the isomer 1 via the intermediate 5, and the isomer 4 also lies in a deep potential well. Both the isomers 3 and 4 may be thermally as stable as the isomer 2. The results presented in this paper may provide useful information for the identification of the two isomers 3 and 4.

C.A. 1998, 128, N18

CCN

2000

132: 315129x Far-Infrared Laser Magnetic Resonance Spectroscopic Study of the ν_2 Bending Fundamental of the CCN Radical in Its $\tilde{X}^2\Pi_r$ State. Allen, Michael D.; Evenson, Kenneth M.; Gillett, David A.; Brown, John M. (Time and Frequency Div., National Institute of Standards and Technology, Boulder, CO 80303 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 2000, 201(1), 18-29 (Eng), Academic Press. Bending vibration-rotation transitions between the (010) $\mu^2\Sigma^-$ and (000) $^2\Pi_r$ vibronic states of the CCN radical in its ground electronic state were obsd. using far-IR laser magnetic resonance (FIR LMR) spectroscopy. Thirteen FIR laser lines were used to record 769 resonances. The LMR data, combined with previous data, were used to det. vibrational, Renner-Teller, fine-structure, rotational, hyperfine, and mol. g-factor parameters using a least-squares fitting routine. The model used was an N^2 effective Hamiltonian modified to include the Renner-Teller effect explicitly in a $^2\Pi$ electronic state. The band origin for the (010) $\mu^2\Sigma^- \leftarrow$ (000) $^2\Pi_r$ transition is $179.598176 \pm 0.000067 \text{ cm}^{-1}$. The spin-orbit splitting in the ground state was refined and the complete set of ^{14}N -hyperfine parameters detd. for the 1st time. (c) 2000 Academic Press.

$X^2\Pi_r$ (ν_2)
 g ane k u i i
 l e k c a l e k o p

C.A. 2000, 132, 123

F: CCN

P: 3

2000

133:43069 Ab-initio MRD-CI studies of electric field gradient (efg) and dipole moment of CCN radical at CASSCF optimized geometries for X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- and C2.SIGMA.+ electronic states.

Prasad, Rajendra; Chandra, P. Department of Chemistry, Banaras Hindu University Varanasi 221 005, India Indian J. Chem., Sect. A: Inorg., Bio-inorg., Phys., Theor. Anal. Chem., 39A(1-3), 148-162 (English) 2000 X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- and C2.SIGMA.+ states of CCN radical have been studied using complete active space SCF (CASSCF), multi ref. singles and doubles CI (MRD-CI) methods. The optimized geometry for electronic states under consideration seems to be sensitive towards the choice of active orbitals in CASSCF calcns. The equil. excitation energi obtained from extrapolated energies in MRD-CI calcn. are in

C.A. 2000, 133

excellent agreement with exptl. results for X2.PI..fwdarw.A2.DELTA. and X2.PI..fwdarw.C2.SIGMA.+ systems. The equil. excitation energy (Tc), ele field gradient (efg), and dipole moment are sensitive towards the selecti of ref. configurations, no. of roots treated simultaneously, threshold va (T) for configuration selection and quality of starting one-particle basi MOS in MRD-CI calcns. Natural orbitals (NO's) obtained from iterative natural orbital procedure (INO) are very good starting one-particle MOS f reliable prediction of one-electron properties in MRD-CI calcns. ab initii cyanomethylidyne radical elec field gradient dipole moment CI (configurat interaction), Quantum chemistry, MRD-CI; ab-initio MRD-CI studies of elec field gradient (efg) and dipole moment of CCN radical at CASSCF optimized geometries for X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- and C2.SIGMA.+ electronic states; CASSCF (molecular orbital), Dipole moment, Electric fi gradient, Electronic state, Energy level excitation, ab-initio MRD-CI stu of elec. field gradient (efg) and dipole moment of CCN radical at CASSCF optimized geometries for X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- and C2.SIGMA.+ electronic states; Molecular orbital, natural; ab-initio MRD-C studies of elec. field gradient (efg) and dipole moment of CCN radical at CASSCF optimized geometries for X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- C2.SIGMA.+ electronic states; Molecular structure, optimized; ab-initio M CI studies of elec. field gradient (efg) and dipole moment of CCN radical CASSCF optimized geometries for X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- C2.SIGMA.+ electronic states; 4120-02-9, ab-initio MRD-CI studies of elec field gradient (efg) and dipole moment of CCN radical at CASSCF optimized geometries for X2.PI., a4.SIGMA.-, A2.DELTA., B2.SIGMA.- and C2.SIGMA.+ electronic states

F: C2N

P: 3

2001

134:242952 Ground and valence excited states of C2N and CN2 transients: Ab initio geometries, electronic structures, and molecular properties. Prasad, Rajendra; Chandra, P. Department of Chemistry, Banaras Hindu University, Varanasi, India. J. Chem. Phys. (2001), 114(4), 1589-1600. in English.

Geometric and vibrational characterization of CCN($X\sim 2\Pi$, $a\sim 4\Sigma^-$, $A\sim 2\Delta$, $B\sim 2\Sigma^-$, $C\sim 2\Sigma^+$), CNC($X\sim 2\Pi_g$, $A\sim 2\Delta_u$, $B\sim 2\Sigma_u^-$), CNN($X\sim 3\Sigma^-$, $a\sim 1\Delta$, $b\sim 1\Sigma^+$, $A\sim 3\Pi$, 11Π) and NCN($X\sim 3\Sigma_g^-$, $a\sim 1\Delta_g$, $b\sim 1\Sigma_g^+$, $A\sim 3\Pi_u$) systems was done using full-valence complete active space SCF (CASSCF) method. The Renner-Teller interaction parameter, ϵ , was calcd. for Π electronic states with CASSCF potentials. Excitation energies with zero-point corrections, T_0 , elec. field gradient (efg), and dipole moment, μ , were calcd. using CASSCF, complete active space second order perturbation theory (CASPT2) and multireference singles and doubles CI (MRD-CI) levels

of theory. The fact that CASSCF values of the principal components V_{XX} , V_{YY} , and V_{ZZ} of the efg tensor listed through two quantities $eq1(=V_{ZZ})$ and $eq2(=V_{XX}-V_{YY})$ are not very different from their CASPT2 counterparts, suggests that second-order perturbation involving all singles and doubles over the one-dimensional space spanned by the CASSCF wave function are not important for the efg and μ . However, the important contributions come from the higher excitations (triple, quadruples, etc.), which are included in MRD-CI wave function, by taking multireference zeroth-order wave function. The use of iterative natural orbital seems to be necessary to obtain stable values of the efg and μ in the MRD-CI method.