

CL CN

CCCN

Badger R.M., Woo S.

1931

J. Amer. Chem. Soc., 1931, 53, 2572-7

УФ-спектр.

(90)

CNCL, CNBR,

130-8454-14 | 1931

CNY

Mooney R. B.,
Reid H. G.

(2)

Nature 1931, 128,
271-2

CCCN

West W., Farnsworth M.

(1933)

Raman-
spectrum
микро
CCCN

J. Chem. Phys., 1933, 1, 402-

397, 729 и 2201 cm^{-1} на волне отклонения
к осн. растронам

CCN
BrCN
ICN

Beach J. K., Turkevich A., 1939

J. Amer. Chem. Soc.,

1939, 61, 299-303

$$r_{C-C} = 1.67 \pm 0.02 \text{ \AA}$$

$$r_{C-N} = 1.13 \pm 0.03 \text{ \AA}$$

Исследования
исполнены

CCN

Wagner J.

1941

Z. phys. Chem., 1941, 48B, 339

Raman-
spectrum

radurae officinalis

CCN

Wagner J.

1943

Z. phys. Chem., 1943, 193A, 55.

Raman
spectrum

активное вещество

1947

5117

D(C₂N₂, HCN, ClCN, BrCN, JCN)

Goldfinger P.

Bull. soc. chim. Belges 1947, 56, 282-90

The dissociation energies of ...

H, J

CNCl

1958

BrCN, ClCN, OCS

(ω , ν_{C-N} , ν_{Br-C} , ν_{Cl-C}) 1947

Townes C.H., Holden A.N., Merrit F.R.

Phys.Rev. 1947, 71, 64

"Rotational spectra of some ...

CNCl

1547
OCS, ClCN, BrCN (*кларификация*) 1948

Rogers J.D., Williams D.
Phys.Rev., 1948, 74, 1889
Microwave spectra of the ...

CClN

CA., 1950, 44, 6269i

1948

2c

Smith, A.G., Ring, K., Smith, W.V., Gordy, W.

CCN

Phys. Rev. 1948, 74, 370

B₂CN

Мезоэлектронное расщепление

JCN

CCN, B₂CN, JCN

$$r_{C-O} = 1,630 \text{ \AA}$$

$$r_{C \equiv N} = 1,163 \text{ \AA}$$

CCN

Townes C.M., Redden A.N.,

1948

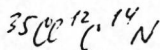
Merritt F.R.

Physical Review, 1948, 74, 1113

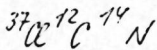
микроволновая спектроскопия

$$r(\text{C}-\text{O}) = 1,629 \text{ \AA}$$

$$r(\text{C}=\text{N}) = 1,163 \text{ \AA}$$



$$B_{\text{CO}} = 5970,82 \pm 0,02 \text{ мк/сек}$$



$$B_{\text{CO}} = 5847,258 \pm 0,014 \text{ мк/сек}$$

CCCN

Nixon E. R., Cross P. C.

1950

J. Chem. Phys., 1950, 18, n10, 1316-19

ли-свип
раса

Смеси $\nu_1, \nu_3, 2\nu_2, \nu_3 + \nu_2, \nu_3 + \nu_1, \nu_3 + 2\nu_2$ колеб.

$\nu_1 = 714 \text{ см}^{-1}$, $\nu_3 = 2214 \text{ см}^{-1}$, ν_2 выведено из
колеб. порою в пикет 390 см^{-1} .

CCN
 mass
 u curve
 mass spectrometry

W.S. Richardson, E.B. Wilson

1950

J. Chem. Phys. 18, 155-156

u.v. spectra $CC^{13}N$ & $CC^{13}N$.

2-16 μ .

Observed	$CC^{12}N$	calculated	$CC^{13}N$	calculated
ν_1 C-O	2114	2114	208	208
ν_2^+	—	—	—	—
ν_3 C-N	2213	2212	2157	2156
$2\nu_3$	2225	—	2165	—

$\nu_2 = 397$ cm⁻¹ He:  Farnsworth 113.

$$\Delta l = \sqrt{l_1^2 + l_2^2} + 2l_1 l_2 \cos \alpha$$

Скорость вол. $3 \cdot 10^5 \text{ г/см} \cdot \text{с}^{-1}$

	$\omega_1 \text{ с/с} \cdot \text{с}^{-1}$	$\omega_2 \text{ с/с} \cdot \text{с}^{-1}$	Средн.
$f_1(\text{с} - \text{с}^{-1})$	4,924	4,926	4,928
$f_2(\text{с} \equiv \text{с}^{-1})$	17,03	17,00	17,01

$f_{12} = 1 \cdot 10^5 \text{ г/см} \cdot \text{с}^{-1}$ - скорость волны



IV-1649-BSP

1950

C1CN (D)

Stevenson D.P.

J. Chem. Phys., 1950, 18, 1347-51

Ionization and dissociation by
electron impact: cyanogen, hydrogen
cyanide, and cyanogen chloride and
the dissociation energy of cyanogen

CNCl

C.A., 1951, 944b

chem group

M; 10

M; 10

CCCN

Thomas W. Y.

1951

J. Chem. Phys. 19, 1162

Гармоническое колебание
линейных трехатомных
молекул.

приводится к сумме, сивов.
постоян и моментальные
расстояния.

Вейц. II 147

CCN.

1955
Hornig D.F. Mexican D.C.
J. Phys Chem. 59, 1133

Bond Moment and Molecular
Structure.

	μ	K
CCN	1.163	16.9 · 18.2.

cm CH₄

сесн

1955

White R. L.

Rev. Mod. Phys., 27,
246-88.

Сверхтонкая магнитная
опер-ра, связанная с кван-
тацией орбитального углового
момента. мал-е в
 $^1\Sigma$ -состоянии.



СССН

1955

Мадотинский А. Е.

Успехи химии 1955, 24, 730

Радиоспектроскопия и
строение молекул (обзор,
около 130 ссылок) имеются
данные для улов связи
и метаном. расстояние

сч 80

CCN

Burrus C.A., Gordy W.

1956

Phys. Rev., 1956, 101, n2, 599 - C02

$$^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N} \left\{ \begin{array}{l} B_{000} = 5970,831 \text{ mc/sec} \\ D_{000} = 1,663 \cdot 10^{-3} \text{ mc/sec} \end{array} \right.$$

$$^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N} \left\{ \begin{array}{l} B_{000} = 5847,245 \text{ mc/sec} \\ D_{000} = 1,608 \cdot 10^{-3} \text{ mc/sec} \end{array} \right.$$

СЕН
БРЕН

W.O. Freitag., E.R. Nixon.

1956

У.К. Селлерс

J. Chem. Phys. 24, Vol, 103-14.

У.К. Селлерс заговор. и
критика СЕН и БРЕН.

CCNT

L. Yarmus

1957

Phys. Rev. 105, w, 928.

Direct β -type doubling trans-
itions in ^{13}C .

$$g_1 = 7,467767 - 1,327 \cdot 10^{-5} \gamma(\gamma+1).$$

Авс. зкар. нападзла акумуляру

$$h = 0,0101 \pm 0,0004.$$

1959

CCN

Jones W. J., Oreville-Thomas W. J.
Opik U.

J. Chem. Soc. 1959, 1625-7

Суровое исследование и
географическое распределение
в OCS, CCN и BrCN

(Lit. OCS) III



1544
OCS, ClCN, BrCN (сил.пост.) 1959

Orville-Thomas W.J., Opik U.,
J.Chem.Soc., 1959, Apr., 1625-1627

Силовые: постоянные и центробежное

...

PX., 1960, N 23, 91279

CNCC

CNcl

[BQP-1910-IV | 1960

Herron J.T., Dibelar V.M.

(J.A.P)

" J. Amer. Chem. Soc., 1960,
82, №7, 1555-59.

изуч. методом др. автора...

CCCN

Nagarajan G.

1963

Indian J. Pure

координат

and Appl. Phys, 1963,

1, n 9, 324-27

В. 8. 4. 9. 9. - 1. 1. 5. 6. 4. 8. - 4. 8. 2. 1.

(CCCN) II

1963

СССН

Tyler J. K., Sheridan J.

Врач.
Смер.

Trans. Faraday Soc., 1963, 59,
№12, 2661.-2676

Исследование структуры
линейных молекул мето-
дом микроволновой спект-
роскопии.

Ф. 1964-87156

СССН

Magarajan G.

1964

Средние
амплитуды

У. chim. phys. et phys. -
chim. vid., 61, n 3, 338-42

И-1-8876-0991

Средние амплитуды и
периоды ф-ции уча-
стков гомонов.

(см. FCN, Термод. ф-ции)

CCCN

BP-M950-IV | 1965

(cur. no. 5.)

Fadini A.

"Z. angew. Math. und
Mech.", 1965, 45, Sonderh.,
T29-T31

Сл СВ

1965

№ 5 Д299. Инфракрасный и микроволновой спектр CICN. Lafferty Walter J., Lide David R., Toth Robert A. Infrared and microwave spectra of CICN. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 6, 2063—2070 (англ.)

ИК- и микроволн. спектр

Исследованы низшие J -переходы микроволн. спектров $^{35}\text{CICN}$ и $^{37}\text{CICN}$ в состояниях $\nu_2^1, 2\nu_2^0, \nu_1, 2\nu_2^2$. Найдено, что между уровнями ν_1 и $2\nu_2^0$ существует острый ферми-резонанс. Δ - и Σ -уровни состояния $2\nu_2$ расщеплены за счет l -резонанса. Полученные значения вращательных постоянных и постоянных квадрупольного расщепления совпадают с литературными данными. Получен ИК-спектр CICN ($1710-3300 \text{ см}^{-1}$) на приборе высокой разрешающей способности. Исследованы парал. полосы $\nu_3, \nu_1 + \nu_3, \nu_3 + 2\nu_2^0$ и перпендикулярная полоса $\nu_3 + \nu_2^1$ у обеих изотопич. молекул. Получены значения колебательных и вращательных постоянных, констант ан-

См. № 1186

ВАНТИ

ф. 1966. 58

гармоничности и моментов инерции для изотопич. молекул. Приведены диаграммы энергетич. уровней для $\nu_3 + \nu_1$, $\nu_3 + 2\nu_2^0$ и $\nu_3 + 2\nu_2^2$. Рассчитаны равновесные r_e и средние $\langle r \rangle$ межатомные расстояния для 8 изотопич. молекул. Наиболее надежные значения $\langle r_{\text{CIS}} \rangle = 1,631 \text{ \AA}$ и $\langle r_{\text{CN}} \rangle = 1,162 \text{ \AA}$. Значения r_e для обеих связей несколько меньше средних; с учетом ошибок определения $\langle r \rangle - r_e < 0,010 \text{ \AA}$. Библ. 21 назв. Э. Броун

539.293

properties

инения

1965

CCN

W.K. & B.
Chemistry

Infrared and microwave spectra of ClCN. Walter J. Lafferty, David R. Lide, Jr., and Robert A. Toth (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 43(6), 2063-70 (1965)(Eng). The microwave spectra of $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ and $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ have been obtained for mols. in the vibrational states ν_1 , $2\nu_2^0$, and $2\nu_2^2$. In addn., high-resolution infrared spectra have been obtained for the bands ν_1 , $\nu_2^1 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_3$, and $2\nu_2^0 + \nu_3$. Estimates for the frequencies of ν_1 and ν_2^1 have been made, and equil. and av. bond distances have been calcd. RCJQ

1186
Emmaced

C.A-1965.63.8

9253 et

ce CN

Venkateswarlu K., Mar-1965.

viam S., Rajalakshmi K.

и.и.

Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg.,

51, n° 3, 359-370.

Средние амплитуды колеба-
ний, эрркий сокращения и
периоды динамического св-ва:
линейные моменты и поин
кчз.

139-A.589

CLCN

BD - M946 - II | 1966

BrCN

Fadini A.

(Chim. mod.)

Z. Naturforsch., 1966,

921 (4), 484-5

св.с.н

Freed R. F.,
Lombardi J. R.

1966

J. Chem. Phys., 45, no. 2, 591.

Изучение вращений и ко-
лебаний 3-х атомных
молекул.

(см. Растрей
и.и.)

ce CN

17 Б154. Ультрафиолетовый спектр поглощения галогенидов циана. I. Отождествление и корреляция. King G. W., Richardson A. W. The ultraviolet absorption of cyanogen halides. Part I. Identification and correlation. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 4, 339—352 (англ.)

Изучен спектр поглощения молекул ClCN , BrCN и JCN в области выше 1250 Å. Структура спектров всех этих молекул одинакова. Отмечено смещение полос в сторону длинных волн в порядке $\text{J} > \text{Br} > \text{Cl}$. Слабое сплошное поглощение в области 2600—1800 Å (А-система) приписано переходу $\text{A}'\pi \leftarrow \text{X}'\Sigma^+$, второе слабое сплошное поглощение (α -система) при более коротких длинах волн отнесено к переходу на верхнее состояние молекулы π ($\pi \rightarrow \sigma^*$) или состояние ${}^1\text{A}$ или ${}^1\text{A}''$ ($\pi \rightarrow \pi^*$). Интенсивное дискретное поглощение в области 1700—1300 Å состоит из систем В и С, относящихся к переходу $\pi \rightarrow (n+1)\sigma$. Кроме того, наблюдаются полосы, представляющие собой переходы на более высокие орбиты $\rho\sigma$ и $\rho\pi$.

А. Беляева

1966
④

X. 1967. 17

42003w The ultraviolet absorption of cyanogen halides. I. Identification and correlation. G. W. King and A. W. Richardson (McMaster Univ., Hamilton, Can.). *J. Mol. Spectrosc.* 21, 339-52(1966)(Eng). The absorption spectra of the 3 cyanogen halides ClCN, BrCN, and ICN, have been examd. under high resolution down to 1250 Å. Apart from shifts to longer wavelengths in the order $I > Br > Cl$, the spectra of the 3 mols. have basically similar structure, and can be analyzed as follows: (1) weak continuous absorption in the 2600-1800 Å. region (the *A* system) resulting from an $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ transition, the upper state being formed by a $\pi \rightarrow \sigma^*$ electron promotion localized on the halogen atom; (2) a 2nd weak continuous absorption at shorter wavelengths (the α system), resulting from transition to either a 2nd $^1\Pi$ state ($\pi \rightarrow \sigma^*$) or a bent state of $^1A'$ or $^1A''$ symmetry ($\pi \rightarrow \pi^*$); (3) intense discrete absorption in the 1700-1300 Å. region, contg. the *B* and *C* systems which are the 1st members of Rydberg series obtained by $\pi \rightarrow (n+1)s\sigma$ promotion of a halogen-localized electron; and (4) Rydberg bands involving transitions to higher $p\sigma$ and $p\pi$ orbitals. 33 references.

RCKP

CCN

1966

+2

C.A. 1967. 66. 10

CCN

1966

42004x The ultraviolet absorption of cyanogen halides. II. Analysis of the B and C systems. G. W. King and A. W. Richardson (McMaster Univ., Hamilton, Can.). *J. Mol. Spectrosc.* 21, 353-61(1966)(Eng); cf. preceding abstr. The discrete band structures of the B and C vacuum uv absorption systems of the cyanogen halides have been analyzed and Franck-Condon calcs. used to det. excited state geometries. The mols. remain linear on excitation. For ICN/BrCN/ClCN, the electronic origins are at 58 887/66 290/73 331 (B system) and 63 471/68 278/74 468 cm^{-1} (C system). Upper-state vibrational frequencies are: $\nu_1(\sigma^+) = 547/(700)/648$ (B) and 526/(700)/641 cm^{-1} (C); $\nu_3(\sigma^+) = 2058/(2000)/1896$ (B) and 1953/1926/1840 cm^{-1} (C). Upper-state bond lengths are: $r(\text{XC}) = 1.94_3/1.7_2/1.65_4$ (B) and 1.91₁/1.70₃/1.64₄ A. (C); $r(\text{CN}) = 1.16_9/1.1_6/1.21_0$ (B) and 1.18₃/1.18₅/1.21₃ A. (C). Less certainty can be attached to the bond lengths given for ClCN, which behaves anomalously. Apart from this, the results are consistent with a Rydberg transition involving $\pi \rightarrow \sigma_x$ electronic promotion.

RCKP

+ 2

C.A. 1967. 66. 10

BrCN

(дублирует
изучения)

и.и.

v_i

22 Б88. Ультрафиолетовые спектры поглощения галогенидов циана. Часть II. Анализ систем В и С) King G. W., Richardson A. W. The ultraviolet absorption of cyanogen halides. Part II. Analysis of the B and C systems. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 4, 353—361 (англ.)

Дан колебательный анализ полос УФ-поглощения галогенидов циана, принадлежащих системам В и С. Показано, что молекулы остаются линейными в возбужденном состоянии. Получены колебательные частоты этих молекул для верхнего электронного состояния. Они оказались равными для молекул JCN, BrCN, ClCN соответственно: $\nu_1(\sigma^+) = 547, (700), 648 \text{ см}^{-1}$ (для В-системы) и $526, (700), 641 \text{ см}^{-1}$ (для С системы); $\nu_3(\sigma^+) = 2058, (2000), 1896 \text{ см}^{-1}$ (для В) и $1953, 1926, 1840 \text{ см}^{-1}$ (для С). Приведены длины связей JC и CN этих молекул в возбужденном электронном состоянии для В и С систем. Часть I см. РЖХим, 1967, 17Б154. А. Беляева

х. 1967. 22



JCN

1966

22 Б88. Ультрафиолетовые спектры поглощения галогенидов циана. Часть II. Анализ систем В и С. King G. W., Richardson A. W. The ultraviolet absorption of cyanogen halides. Part II. Analysis of the B and C systems. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 4, 353—361 (англ.)

Дан колебательный анализ полос УФ-поглощения галогенидов циана, принадлежащих системам В и С. Показано, что молекулы остаются линейными в возбужденном состоянии. Получены колебательные частоты этих молекул для верхнего электронного состояния. Они оказались равными для молекул JCN, BгCN, ClCN соответственно: $\nu_1(\sigma^+) = 547, (700), 648 \text{ см}^{-1}$ (для В-системы) и $526, (700), 641 \text{ см}^{-1}$ (для С системы); $\nu_3(\sigma^+) = 2058, (2000), 1896 \text{ см}^{-1}$ (для В) и $1953, 1926, 1840 \text{ см}^{-1}$ (для С). Приведены длины связей JC и CN этих молекул в возбужденном электронном состоянии для В и С систем. Часть I см. РЖХим, 1967, 17Б154. А. Беляева

x. 1967. 22

CECN

King G. W., Richard -
son H. W.

1987

Proc. Int. Conf. Spectrosc.,
Bombay, V. 1. S. 1., S. a., 222

Рудберговские и суб-руд-
берговские сепаратные
линии - [unclear] гранит.
распределение [unclear]
(см. I CN) III

СНС

Milligan D.E.,
Yasox M.E.

1967

307

1188

J. Chem. Phys.
47, N1, 278

спектр

Спектроскопическое изучение
гетеромера СН и изомеров
цианидов, изомеризованных
в матрице. ИК-спектры
СН и XNC. (см. HNC) III

CCCN

Milligan D.E.
Jacox M.E.

1967

1188

207

(vi)

"J. Chem. Phys"

1967, 47, N1, 278-85

1967

CCCN

Purcell K. F.

J. Amer. Chem. Soc., 89, 24,
6139.

Эффекты σ и π -связей в
координации цианофуни-
на.

(см. CCN) III

CCN

Reichman S.,
Overend J.

1987

J. Chem. Phys., 47, n 4, 1525

Важность квадратичных смещений по координатам для расчета ферми-резонанса.

(см. CO₂)

CC CN

Yoshimine M.,
McLean A.D.

1967

D₀

Int. J. Quantum. Chem.,
Symp. 1967 (N 1)

(see. LiF) III

CCN

Williams E. J.,
Ladd J. A.

1968

J. Mol. Struct.

См. ном.

2, N1, 57-66

Символы ностермие в
меллелеевских трукатаи-
ных лас-лах.



(См. FCN) III

1969

CCN

King Ch. M., 4 gr.

Diss. Abstn. B 1969,
29, n8, 2828

НК-список
в матрице

(Сел. HCN) III

CCCN

1969

Lojko M.S.,
Beers V.

Sp. noem.

J. Res. Nat. Bur. Stand.,

A73, N 2, 233.



(Cell. H₂O) III

1969

XIV - 1336

CCCN

7 Б73. Спектроскопическое изучение колебательных постоянных и статистических термодинамических функций некоторых изотопических модификаций цианогенхлорида. Nagarajan G., De Villiers Silvia J. Estudios espectroscópicos de constantes de vibración y de funciones de termodinámica estadística en algunas especies isótopas del cloruro de cianógeno. «Acta cient. venezol.», 1969, 20, № 1-2, 52-57 (исп.; рез. англ.)

По опытным значениям частот валентных и деформационных колебаний молекул $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ и $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ определены 4 силовые постоянные ($10^5 \text{ дин}\cdot\text{см}^{-1}$): Cl-C 4,8128; C-N 18,6232; Cl-C, C-N 1,3486; $\langle \text{ClCN} \rangle$ 0,1805. Вычислены средние квадратичные амплитуды колебаний, обобщенные (па-

м.ч.

vi;

Томми
шерин)

X. 1970. 7

+1



раллельные и перпендикулярные) средние квадратичные амплитуды колебаний и средние амплитуды колебаний для связей $Cl-C$, $C-N$ и расстояний $Cl-N$ при t -рах 298, 500 и $1000^\circ K$. Для этих же t -р вычислены эффекты сокращения Бастмансена — Моринно. В интервале t -р $200-2000^\circ K$ вычислены термодинамические функции всех 4 молекул. Приводятся численные значения их моментов инерции.

М. А. Ковнер

CLCN

XIV - 1336

1969

60962m Spectroscopic studies of vibrational constants and statistical thermodynamic functions in some isotopic species of cyanogen chloride. Nagarajan, G.; DeVilliers, Silvia J. (Dep. Fis., Allen Univ., Columbia, S.C.). *Acta Cient. Venez.* 1969, 20(1-2), 52-7 (Span). On the basis of theoretical group considerations, 4 valence force consts. have been calcd. from the fundamental frequencies of the isotopic species $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ and $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{15}\text{N}$, having a linear asym. structure with the symmetry point group $C_{\infty v}$. Mean-square and generalized mean-square amplitude values (mean-square parallel and perpendicular amplitudes, and mean cross products) as well as mean amplitudes of vibration for both the bonded and non-bonded atom pairs have been calcd. at 298, 500 and 1000°K by using symmetry coordinates. Shrinkages of the respective chem. bonds have been computed for the mol. at the same temps. In addn., the molar thermodynamic functions for the 4 isotopic species have been calcd. for the temp. range 200-2000°K assuming a rigid rotator, as an harmonic oscillator model.

R. Radicella

C.A. 1970. 72. R

1969

CCCN

Saxena M.K.

paciem

Indian. J. Pure and

Appl. Phys, 1969, 7, 12,

828

(C.C. 902) III

CCCN

curr. n

Thomas G. et al.

1969

J. molec. Struct.,
4(2-4), 179.

(coll. HCN) III

CECN

Bp-99-XIV

1970

~~136615w~~ Potential energy constants, mean amplitudes of vibration, Bastiansen-Morino shrinkage effect, and thermodynamic functions in some isotopic species of cyanogen chloride. Durig, James R.; Nagarajan, Govindaswamy (Dep. of Chem., Univ. of South Carolina, Columbia, S.C.). *Monatsh. Chem.* 1970, 101(2), 437-48 (Ger). Valence force consts. of the isotopic species (^{35,37}Cl, ^{14,15}N, ¹²C) of ClCN (linear asym. mol., space group $C_{\infty v}$) were detd. from the fundamental frequencies ν_1 and ν_2 of the corresponding species by using a group-theory method. Mean-square amplitude quantities and Bastiansen Morino shrinkage coeffs. were computed at 298, 500, and 1000°K. Enthalpy, free energy, entropy, and heat capacity were calcd. at 200-2000°K for each isotopic species by assuming a rigid-rotor harmonic oscillator model. FBJG

ν_1

Chem. U.

C.A. 1970. 72. 2B

СССН

Вар - XIV - 99

1970

10 Д173. Постоянные потенциальной энергии, средние амплитуды колебаний, эффект сокращения Бастиянсена—Морино и термодинамические функции некоторых изотопозамещенных хлорциана. Durig James R., Nagarajan G. Konstanten der potentiellen Energie, mittlere Schwingungsamplituden, Bastiansen—Morino-Schrumpfeffekt und thermodynamische Funktionen einiger isotope Arten des Chlorcyans. «Monatsh. Chem.», 1970, 101, № 2, 437—448 (нем.; рез. англ.)

Методом теории групп вычислены значения постоянных потенц. энергии колебаний атомов в молекулах 4-изотопозамещенных хлорциана. Вычислены также среднеквадратичные, обобщенные среднеквадратичные и средние амплитуды колебаний для связанных и несвя-

09. 1970.

102

занных пар атомов. Расчеты проведены для трех значений t -ры: 298, 500 и 1000°K . С использованием модели жесткий ротатор — гармонич. осциллятор проведено вычисление термодинамич. ф-ций для этих изотопозамещенных цианхлоридов в области t -р от 200 до 2000°K . Результаты расчетов приведены в таблицах и кратко обсуждаются.

В. А. Морозов

ВФ - 99 - XIV

1970

СССН

19 Б46. Константы потенциальной энергии, средне-
квадратичные амплитуды колебаний, эффект сокращения
Бастиянсена — Морино и термодинамические функции не-
которых изотопических разновидностей хлорциана. Du-
rig James R., Nagarajan G. Konstanten der potenti-
ellen Energie, mittlere Schwingungsamplituden, Bastian-
sen—Morino—Schrumpfeffekt und thermodynamische Funk-
tionen einiger isotoper Arten des Chlorcyans. «Monatsh.
Chem.», 1970, 101, № 2, 437—448 (нем.; рез. англ.)

По эксперим. данным о частотах нормальных колеба-
ний четырех изотопозамещенных линейных молекул хлор-
циана $C^{135}C^{12}N^{14}$ (I), $C^{137}C^{12}N^{14}$ (II), $C^{135}C^{12}N^{15}$ (III) и
 $C^{137}C^{12}N^{15}$ (IV) вычислены четыре силовых коэф. общего

Сил. к.

М. к.

Тер. макс. ф.

II

X. 1970.

19

+1 (II)

X

валентного силового поля молекулы хлорциана ($f_{\text{Cl-C}} = 4,8128$, $f_{\text{C-N}} = 18,6232$, $f_{\text{Dd}} = 1,3486$ и $f^{\ominus} = 0,1805 \times 10^5$ дн/см). Вычислены среднеквадратич. амплитуды кол. и эффект сокращения Бастиянсена — Моринно молекулы хлорциана при 298, 500 и 1000° К. В интервале т-р 200—2000° К вычислены термодинамич. функции ($H_0 - E_0^{\ominus}$)/T; $-(f_0 - E_0^{\ominus})/T$; S^{\ominus} и C_p^{\ominus}) молекул I-IV в приближении гармонич. осциллятора — жесткого ротатора.

CICN

39 - XIV - 120

1970

17 Б242. Абсолютные интенсивности полос поглощения либрационных колебаний кристаллов $CICN$ и $BrCN$.
 Friedrich H., Bruce. Absolute absorption intensities of the librational modes of $CICN$ and $BrCN$.
 «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 6, 3005—3011 (англ.)

Измерена суммарная абс. интенсивность B_t двух ИК-активных либрац. колебаний молекул $CICN$ ($\omega_1=93$, $\omega_2=114$) и $BrCN$ ($\omega_1=104$, $\omega_2=121$) в тв. фазе при t -ре $77^\circ K$: $B_t=750 \pm 90$ ($CICN$) и 800 ± 140 см/мм ($BrCN$).
 При помощи модели дипольной связи вычислены частоты и интенсивности полос либрац. колебаний $CICN$ и $BrCN$. Вычисленные частоты совпадают с опытными. Для B_t получены значения 970 ($CICN$) и 835 см/мм ($BrCN$). Из эксперим. значений B_t вычислены дипольные моменты $CICN$ ($2,46 \pm 0,15 D$) и $BrCN$ ($2,88 \pm 0,25 D$) в тв. фазе.

М. Р. Алнев

1/2

X. 1970

17

+1

X

се сн

XIV-1596

1970

18 Б123. Фотоэлектронные спектры хлор-, бром- и иод-цианов. Heilbronner E., Hornung V., Muszkat K. A. Die Photoelektron-Spektren von Chlor-, Brom- und Jodcyan. Vorläuf. Mitt. «Helv. chim. acta», 1970, 53, № 2, 347—351 (нем.; рез. англ.)

В области от 10 до 20 эв измерены фотоэлектронные спектры хлор-, бром и иод-цианов. Четыре полосы в по-

лученных спектрах отнесены к состояниям: $^2\Pi_{3/2}$ (1), $^2\Pi_{1/2}$ (1), $^2\Sigma^+$ (2), $^2\Pi_{3/2}$ (3), $^2\Pi_{1/2}$ (3), $^2\Sigma^+$ (4). Резюме

v;

(+2)



X. 1970. 18

CCCN

XIV-1596

1970

~~1162540~~ Application of photoelectron spectroscopy. 8. Photoelectron spectra of cyanogen chloride, bromide, and iodide. Heilbronner, Edgar; Hornung, V.; Muszkat, K. A. (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Helv. Chim. Acta* 1970, 53(2), 347-51 (Ger). Four bands were obsd. in the photoelectron spectra of ClCN, BrCN, and ICN at 10-20 eV. They were assigned to the $^2\Pi_{3/2}$ (1), $^2\Pi_{1/2}$ (1), $^2\Sigma^+$ (2), $^2\Pi_{3/2}$ (3), $^2\Pi_{1/2}$, and $^2\Sigma^+$ (4) states. CWJG

фотоспектр.
1 спектр.

у

C.A. 1970. 72. 22

$C \equiv N$

(4)

X. 1970.

22

22 Б189. Фотоэлектронные спектры некоторых молекул, содержащих группу $C \equiv N$. Lake R. F., Thompson Harold. The photoelectron spectra of some molecules containing the $C \equiv N$ group. «Proc. Roy. Soc. London», 1970, A317, № 1529, 187—198 (англ.)

На установке с разрешающей способностью 20 мв зарегистрированы фотоэлектронные спектры в области 6—21 эв молекул типа $RC \equiv N$. Для $R = Cl, Br, J$ спектры содержат 4 группы линии, соответствующие ионизации с удалением электрона с МО π_1, π_2, σ_N и σ_{-X} (X — атом галогена). Произведено отождествление этих групп на основании их колебательной структуры и расщепления, обусловленного спин-орбитальным взаимодействием. Вертикальные потенциалы ионизации (ВПИ) соотв. для $X = Cl, Br, J$ равны (эв): ~~с образованием иона с~~ МО $(\pi_2)^{-1} {}^2P_{3/2}$ и $(\pi_2)^{-1} {}^2P_{1/2}$ 12,34 и 12,37; 11,88 и 12,07; 10,91 и 11,45; иона с МО $(\sigma_N)^{-1}$ 13,80; 13,58, 13,17; иона

1970

181

1111

+7

18

с МО (π_1)⁻¹ $^2P_{3/2}$ и $^2P_{1/2}$ 15,38; 14,4; —; иона с МО ($\sigma_{с-x}$)⁻¹ 19,03; 18,07; 16,71. Для случаев R — углеводород измерены величины ВПИ (эв), связанные с удалением π -электрона группы C=C: $\text{CH}_2=\text{CH}$ 10,91; $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2$ 10,56; π -электрона группы C \equiv N: CH_3 12,20; CD_3 12,23; C_2H_5 12,11; $\text{CH}_2=\text{CH}$ 12,36; $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2$ 12,13; электрона из неподеленной пары атома N: CH_3 13,14; CD_3 13,14; C_2H_5 12,91; $\text{CH}_2=\text{CH}$ 13,04; $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2$ 12,95. Кроме того, обнаружен ряд неидентифицированных линий. Для случаев R=CH₂Cl, CHCl₂ и CCl₃ обнаружен ряд ВПИ, не идентифицированных из-за сложности спектров и отсутствия их колебательной структуры.

В. Е. Скурат

CNce

1970

~~209a~~ Photoelectron spectra of some molecules containing the C:N group. Lake, R. F.; Thompson, Harold (Phys. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Proc. Roy. Soc., Ser. A* 1970, 317(1529), 187-98 (Eng). The photoelectron spectra of a no. of mols. contg. the C:N group have been measured over the range 6-21 eV. For CNCl, CNBr, and CNI, ionization potentials have been detd. and assigned to particular MO on the basis of the vibrations coupled with the ionization processes, and of the splitting owing to spin-orbit coupling. Differences in these features among the 3 compds. are discussed in terms of the delocalization of electrons in these mols. From the spectra of methyl, ethyl, vinyl and allyl cyanides, potentials have been detd. for ionization from the C:C π , C:N π , and N lone pair orbitals, and other higher ionization potentials have been detd. but not assigned explicitly. A no. of ionization potentials have been detd. for mono-, di-, and trichloromethyl cyanides, but absence of accompanying vibrational structure and the addnl. complexity caused by the levels derived from 3p electrons in the Cl atoms make specific assignments impossible. RCPP

y

фотозелк
спектр

197-137

C.S. 1970.73.2



(+7)



CCN

Lide D. R.

1970

J. Mol. Spectrosc.,
33 (3), 448.

see. N.

N. N.

(see. N₂O) III

СССН

Вор-1932 - XIV

1970

19 Д370. Ферми-дублет ν_1 и $2\nu_2$ ClCN при высоком разрешении. Murchison Craig B., Overend John. The Fermi doublet, ν_1 and $2\nu_2$, of ClCN at high resolution. «Spectrochim. acta», 1970, A26, № 3, 599—609 (англ.)

В ИК-спектре газообразного ClCN (75% $^{35}\text{ClCN}$ + 25% $^{37}\text{ClCN}$) при разрешении, превышающем $0,03 \text{ см}^{-1}$, исследованы полосы переходов с основного уровня на ферми-взаимодействующие колебательные уровни 10^0 ($\nu_1 \sim 714 \text{ см}^{-1}$) и 02^0 ($2\nu_2 \sim 783 \text{ см}^{-1}$). Проведена расшифровка вращательной структуры обеих полос. Рассчитаны колебательные энергии и вращательные константы возбужденных состояний, а также ферми-резонансные операторы для попарно взаимодействующих уровней 10^0 , 02^0 , 11^1 , 03^1 ($^{35}\text{ClCN}$) и 10^0 , 02^0 , ($^{37}\text{ClCN}$). Библ. 8.

Л. В. Коновалов

ш. н.

Ф. 1970.92

CECN

Bp - 1932 - XIV

1970

вран. ност.

М.И.

~~126886~~ Fermi doublet, ν_1 and $2\nu_2$, of cyanogen chloride at high resolution. Murchison, Craig B.; Overend, John (Sch. of Chem., Univ. of Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1970, 26(3), 599-609 (Eng). The Fermi doublet, ν_1 and $2\nu_2$, of ClCN, at $\sim 13 \mu$ in the gas-phase ir spectrum, has been measured with a resolu. of better than 0.03 cm^{-1} . The sample was prepd. from natural chlorine and contained $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ ($\sim 75\%$) and $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ ($\sim 25\%$). The vibrational energies and rotational consts. were detd. for a no. of states of these mols., the Fermi-resonance operators are estd. for the 10^00 , 02^00 and 11^10 , 03^10 diads of $^{35}\text{ClCN}$ and the 10^00 , 02^00 diad of $^{37}\text{ClCN}$.

RCSO

C.A. 1970. 72. 24

CCCN

Olympia P.Z.,
Olympia M.K.

1970

Chess
Chess

J. Chem. Phys.,

1941, 54, 3, 1421.

(Ces. FCN) III

CCCN

Ruoff d.

R124-XIV / 1970

Spectrochim. Acta, A26 (3),
545

ν_i

cm. u.

u. u.

(cm. FCN) III

CCCN

1970

Ramaswamy K.,
Ranganathan V.

curr. no.

Z. Naturforsch., 25b (7),
657.

(curr. no.) III

Hal-CN

1971.

сссн⁺

4 Д364. Исследование геометрии положительных ионов галоидцианов методом фотоэлектронной спектроскопии. Hollas J. M., Sutherley T. A. Geometry of cyanogen halide positive ions from photoelectron spectroscopy. «Mol. Phys.», 1971, 22, № 2, 213—223 (англ.)

(м.п.)

По интенсивностям колебательных полос в фотоэлектронных спектрах газообразных ClCN , BrCN и JCN изучена геометрия положит. ионов HalCN^+ в различных состояниях. Обнаружено 5 систем полос и выполнено их отождествление. Первая и вторая системы отнесены к испусканию электрона с 2π МО в состояниях $\tilde{X}^2\Pi_{3/2}$ и $\tilde{X}^2\Pi_{1/2}$; величина спин-орбитального расщепления составляет 0,028 эв для ClCN^+ , 0,184 для BrCN^+ и 0,546 эв для JCN^+ . Третья система, отнесенная к состоянию $\tilde{I}^2\Sigma$, связана с испусканием с 4σ МО, а четвертая и пятая ($\tilde{I}^2\Pi$) характеризуются неразрешенным расщеплением. Приведены величины колебательных частот для всех электронных состояний ионов и изменений длин связей при ионизации. Библи. 9.

2

☒

Фр. 1972. 4 Д

С. Ф. Б.

XIV-3535

1941

ClCN⁺BrCN⁺ICN⁺Структур
параметры.

фотоэлектр. энергии

19893) Geometry of cyanogen halide positive ions from photoelectron spectroscopy. Hollas, J. M.; Sutherley, T. A. (Chem. Dep., Univ. Reading, Reading/Berkshire, Engl.). *Mol. Phys.* 1971, 22(2), 213-23 (Eng). The geometries of the $\bar{X}^2\Pi_{3/2}$ and $\bar{X}^2\Pi_{1/2}$ states of ClCN⁺, BrCN⁺, and ICN⁺, the $\bar{I}^2\Sigma^+$ states of ClCN⁺ and BrCN⁺, and the $\bar{2}^2\Pi$ state of ClCN⁺ were calcd. from vibrational-band intensities in the photoelectron spectra of ClCN, BrCN, and ICN. The results justify fairly well a simple picture of π MO's in these mols., but this is not the case for the σ MO's.

(+2)



C. H. 1949. 76 4

сссн
сссн *

XIV-3535

1971

1) 9 Б124. Геометрия положительных ионов галогенцианов из данных фотоэлектронной спектроскопии
Nollas J. M., Sutherley T. A. Geometry of cyanogen halide positive ions from photoelectron spectroscopy. «Mol. Phys.», 1971, 22, № 2, 213—223 (англ.)

Че

Системы полос колебательных электронных спектров ClCN (I), BrCN (II) и JCN (III) использованы для вычисления длин связей (R) молекул в основном состоянии. Рассчитаны значения R для положит. ионов I—III в $X^2\Pi_{3/2}$ - и $X^2\Pi_{1/2}$ -состояниях, I и II в $1^2\Sigma^+$ -состоянии и I в $2^2\Pi$ -состоянии. Полученные значения R (в Å) изменяются для связи C—галоген от 1,631 I до 1,994 III,

РЖХ, 1972, № 9

☒

(+2)

ВАН / ЧОН
ВАН / ЧОН

$R(C-N)$ равны: 1,159 (I), 1,158 (II), 1,159 (III). Показано, что интенсивности в первых двух системах полос I прямо пропорциональны изменению R при переходе от основного состояния молекул к одному из состояний иона. В третьей системе полос для I и II аналогичной пропорциональности не наблюдается. Результаты подтверждают простую картину молекулярных π -орбиталей, но не σ -орбиталей. Применимость метода ограничивается спектрами молекул, массы атомов к-рых значительно отличаются.

М. Туркина

1971

CNCl

156522f - Vibrational anharmonicity in cyanogen chloride.
Murchinson, Craig B. (Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.).
1970, 101 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor,
Mich., Order No. 71-18,785. From *Diss. Abstr. Int. B* 1971,
32(1), 209-10.

восьм
ангар. и

C.A. 1971. 75. 26

СССН
(спектр

в
матрице)

Di;
и.п.

XIV-3344

1971

5 Б284. Спектры инфракрасного поглощения матрично-изолированного C1CN и ангармоническое межмолекулярное силовое поле. Murchison Craig B., Overtend John. Infrared spectra of C1CN in matrix isolation and the anharmonic intramolecular force field. «Spectrochim. acta», 1971, A27, № 9, 1509—1524 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения C1CN, изолированного в Ar и Ne матрицах. В ИК-спектре, кроме основных колебаний, идентифицирован ряд обертонов и составных полос. На основании полученных данных вычислены коэф. ангармоничности χ_{13} и χ_{23} , величины к-рых оказались близки соотв-щим величинам, вычисленным из данных по ИК-спектру газ. C1CN. Т. обр. показано, что матричное окружение возмущает ангармонич. межмолек. силовые постоянные не более, чем гармонические.

Г. Кузьянц

X.1972.5

CLCN

XIV-3844

1971

no. 11

arrangement

~~135430~~ Infrared spectra of cyanogen chloride in matrix isolation and the anharmonic intramolecular force field. Murchison, Craig B.; Overend, John (Sch. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(9), 1509-24 (Eng). Infrared spectra of ClCN isolated in Ar and Ne matrices have been measured at temps. between 4-20°K. A no. of combination and overtone bands have been obsd. in addn. to the fundamentals and values of the anharmonic coeffs. x_{12} and x_{23} have been deduced. The values found for these anharmonic coeffs. in the matrix are close to the values found previously for ClCN in the gas phase. It is possible to account for the obsd. matrix shifts in the wavenos. of the vibrational lines by adjusting slightly the quadratic intramol. force consts. The results indicate that the matrix cage does not perturb the anharmonic intramol. force consts. any more than the quadratic ones.

C.A. 1971. 45. 22

се СН

2 Д557. ИК-спектр $CICN$ в матрице и ангармоничность внутримолекулярного силового поля. Murchison Craig B., Overend John. Infrared spectra of $CICN$ in matrix isolation and the anharmonic intramolecular force fields. «Spectrochim. acta», 1971, A27, № 9, 1509—1524 (англ.)

Исследованы ИК-спектры изотопных молекул $^{35}Cl^{12}C^{14}N$, $^{37}Cl^{12}C^{14}N$, $^{35}Cl^{13}C^{14}N$, $^{35}Cl^{12}C^{15}N$ в матрицах А и Ne при $4^{\circ}K$ и в матрице CF_4 при $20^{\circ}K$. Идентифицированы полосы обертонов и комбинаций частот. Рассчитанные коэф. ангармоничности χ_{23} и χ_{13} для молекул в матрицах и в газообразном состоянии близки между собой. Сделан вывод, что ячейка матрицы мало влияет на внутримолекулярные ангармонич. постоянные. Приведены спектры частот и силовых постоянных для изотопных молекул $CICN$ в матрицах. Библ. 6. Э. В. Б.

спектр
в
матрице

1971

4565-114

Ф. 1972. 22

1971

CICN

(135170z) Anharmonic force constants of cyanogen chloride. Murchison, Craig B.; Overend, John (Sch. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(9), 1801-9 (Eng). An attempt has been made to adjust the force const. in the general quartic force field of CICN to the vibrational energies and the rotational const. by using std. least-squares methods. The general quartic force field contained too many adjustable parameters and, therefore, a Morse function was used for bond-bond stretching potentials and the interaction force const. were modeled in a semi-empirical way. Numerical values have been obtained for the quadratic, cubic and quartic force const.

цианоб.
ностр,
ангарн.

C.A. 1971. 45. 22

CCCN

1971

2 Б42. Ангармонические силовые постоянные молекулы CICN . Murchison Craig B., Overend John H. Anharmonic force constants of CICN . «Spectrochim. acta», 1971, A27, № 9, 1801—1809 (англ.)

ν_i
 μ_i
 σ_i
 τ_i

Из эксперим. значений нулевых частот ω_i^0 , постоянных ангармоничности x_{ij} , постоянных α_i , характеризующих зависимость вращательной постоянной от колебательного состояния, и из постоянных λ_i и δ_I , характеризующих зависимость параметра резонанса Ферми от колебательного и вращательного состояний, соотв. методом наименьших квадратов вычислены квадратич., кубич. и квартнич. силовые коэф. молекулы CICN . Показано, что имеющихся эксперим. данных недостаточно для вычисления всех 19 параметров наиболее общего силового поля CICN .

X. 1972.2

Предложена приближенная модель силового поля для SiCN , в которой для связей используются функции Морзе, для определения коэф. взаимодействия связей используются соотношения, полученные ранее для других молекул, а большинство квартич. силовых коэф., соответствующих валентным координатам, полагается равным нулю. Это силовое поле удовлетворительно воспроизводит все имеющиеся эксперим. данные для трех изотопич. видов SiCN .

М. Р. Алнев

СССН

ВФ-ХIV-3559

1941

8 Б418. СССН: колебательная ангармоничность и рассмотрение резонанса Ферми. Murchison Craig B., Overend John. СССН: vibrational anharmonicity and the treatment of Fermi resonance. «Spectrochim. acta», 1971, А27, № 11, 2407—2423 (англ.)

Исследованы с высоким разрешением ИК-спектры поглощения образца СССН (газ) (с естественным содержанием изотопов) в области $\sim 360-4420 \text{ см}^{-1}$ (полосы ν_2 , $2\nu_3$, $2\nu_1$, $\nu_1+2\nu_2^0$ и $4\nu_3^0 \text{Cl}^{35}\text{CN}$ (I), полоса $\nu_2 \text{Cl}^{37}\text{CN}$ (II)). С использованием метода наименьших квадратов определены из вращательного анализа молек. постоянные I и II (для нижних колебательных состояний I, II при этом использовались МВ-значения постоянных; для верхних колебательных состояний (начала полос $\nu_0 - B'l^2 + B''l^2$) вращательные постоянные B' и постоянные центробежно-

X. 1942. 8

го искажения D'). Проанализирован резонанс Ферми между колебательными состояниями I и II $|v_1, v_2, l_2, v_3\rangle$ и $|v_1-1, v_2+1, l_2, v_3\rangle$ и экспериментально определялась зависимость матричного элемента оператора резонанса Ферми $\langle v_1, v_2, l_2, v_3 | H_1 | v_1-1, v_2+2, l_2, v_3 \rangle$ от вращательно квантового числа j и колебательных квантовых чисел v_2 и v_3 . Приведены с исправлением на эффекты резонанса Ферми величины гармонич. частот ω_s и коэф. ангармоничности X_{ss} I и II. Кубич. коэф. в разложении потенциальной функции I и II K_{122} равен $46,49 \text{ см}^{-1}$. С использованием этого значения K_{122} и вращательной постоянной α_3 вычислен коэф. I, II $K_{223} = 214,22 \text{ см}^{-1}$. На основании большой величины коэф. K_{223} предположено существование резонанса Ферми между состояниями $|v_1, v_2, l_2, v_3\rangle$ и $|v_1, v_2+2, l_2, v_3-1\rangle$, однако вклад этого взаимодействия в колебательные энергии незначителен ($\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$).

А. П. Александров

BP - XIV - 3559

1941

CLC

(197584) Cyanogen chloride. Vibrational anharmonicity and the treatment of Fermi resonance. Murchison, Craig B.; Overend, John (Sch. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(11), 2407-23 (Eng). The ir spectra of the $\nu_2, 2\nu_3, 2\nu_1, \nu_1 + 2\nu_2^0$ and $4\nu_2^0$ bands of $^{35}\text{ClCN}$ were measured at high resolution and the spectra were analyzed to obtain rotational consts. and vibrational band origins. Combining these data with those in the literature, it is possible to det. a set of ω_e and $x_{e,ij}$ cor. for the effects of the Fermi resonance between the states $|v_1, v_2, l_2, v_3\rangle$ and $|v_1 - 1, v_2 + 2, l_2, v_3\rangle$. The dependence of the matrix element of the Fermi-resonance operator on the rotational quantum no. J and on the vibrational quantum nos. v_2 and v_3 was also detd. exptl.

n.n.

ω_s, x_{ss}

C.A. 1942. 76. V

CCCR

1971

Malishek, Vladimer.

"Acta Univ. Palaski. Olomus.
Fac. Regum Natur."

1971, N33, 309-23.

Служба .

(с. HF; III)

СССН

1971

12 Д384. Спектры комбинационного рассеяния жидких и кристаллических ClCN и BrCN . P é z o l e t M., S a v o i e R. Raman spectra of liquid and crystalline ClCN and BrCN . «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 12, 5266—5270 (англ.)

см. н.

Исследованы спектры комб. рас. жидких и кристаллич. образцов ClCN и BrCN при различных t -рах до 77°K . В качестве источника возбуждения использовался He—Ne-лазер. Обнаружено, что с низкочастотной стороны линий, соответствующих валентным колебаниям, наблюдается плечо, которое авторы приписывают образованию димеров XCN—XCN . Вычислены силовые постоянные для свободных молекул ClCN и BrCN и их димеров. Выполнена интерпретация частот, наблюдаемых в спектрах кристаллич. образцов ClCN и BrCN . Библ. 20.

Н. А. С.



Б. 1971. 12 Д



Финна 466



CCCN

1971

21 Б213. Спектры комбинационного рассеяния жидких и кристаллических ClCN и BrCN . Pézolet M., Savoie R. Raman spectra of liquid and crystalline ClCN and BrCN . «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 12, 5266—5270 (англ.)

Получены спектры КР жидк. и крист. ClCN и BrCN (BrCN исследован в монокристалле). Появление низкочастотных линий-саттелитов у колебаний ν_1 и ν_3 этих молекул в жидк. состоянии и их положение не может быть объяснено изотопич. эффектом и связано с образованием линейных димеров типа $\text{X}-\text{C}-\text{N}\dots\text{X}-\text{C}-\text{N}$

Di

X. 1971. 21

+1

☒

Di

(X=Cl, Br). Произведенный расчет частот нормальных колебаний димеров с использованием данных по поглощению в далекой ИК-области для определения силовой постоянной межмол. связи N...X дал хорошие результаты. На основе поляризац. спектров КР монокристалла CNBr дана полная (включая крист. частоты) интерпретация спектров КР кристаллов, кристаллам приписана симметрия D_{2h}^{13} с двумя молекулами в элементарной ячейке, локальная симметрия молекул C_{2v} , фактор-группа — D_{2h} . А. Бобров

CCCN (mc)

1971

Raman-
спектр

27907m Raman spectra of liquid and crystalline cyanogen chloride and cyanogen bromide. Pezolet, M.; Savoie, R. (Cent. Rech. At. Mol., Univ. Laval, Quebec, Que.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(12), 5266-70 (Eng). Raman spectra of liq. and solid CICN and BrCN were recorded at various temps. down to 77°K. Shoulders on the low-frequency side of the stretching fundamentals in the spectra of the liqs. are believed to arise from assocd. mols. The spectra of the solids are consistent with the reported crystal structures, and polarization effects in a BrCN single crystal have allowed an unambiguous assignment of all the bands in the Raman spectrum.

(1) BrCN

C.A. 1971. 45.4.

CECN

BP - XIV - 3405

19 Feb

BrCN

(ν_1)

the assignment
to structure)

39569m Infrared matrix-isolation studies of cyanogen bromide and cyanogen chloride. Fermi resonance and dimer structure. Freedman, Teresa B.; Nixon, Eugene R. (Dep. Chem., Univ. Pennsylvania, Philadelphia, Pa.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(2), 698-707 (Eng). The ir spectra of ClCN and BrCN in Ar and Kr matrixes at 20°K were investigated. There is good evidence that for the monomeric species the bending mode is split by the matrix environment and that the 1st overtones of these 2 bending components form a Fermi resonant triad with the ν_1 fundamental. The frequencies and intensities of the unperturbed levels and the Fermi-coupling consts. were calcd. The absorption bands due to dimeric species are consistent with a linear or nearly linear configuration for the dimer.



C. A. 1972. 76. 8

CCCN

1972

Freedman T. B.

Vi Diss. Abstr. Int., 1972, 33,
1478.

■ (see FCN) III

CLCN

1972

Smith D. Fross, Jr., 49p.

(c.n.)

"J. Chem. Phys.", 1972, 57, N1,
.523-29.

(cu. CO₂, III)

СССР

1973

Обзор современной литературе
за период с 1971 г. по декабрь
1972 г., а в некоторых
месяцах по 1972 г.

Книжки и
книжки -
- справ.
список

London Chem Soc 1973, xvi
блрр ill (англ).

(с Cl₂; III)

CCN

обзор

1973

Chadwick B.M.

Edwards H.G.

количество
коид. в р
списки

" Mol Spectrosc Vol 7
1973, 446-522 (англ)

(англ. III)

H-CN ; III)

40227.754I

TE, Ph, Ch

CCN

40892

1973

X-15-3805

Miller A., Mohan N., Alix A. On some
aspects of the first-order centrifugal
distortion constants in polyatomic mole-
cules. "J. Chem. Phys.", 1973, [REDACTED] 6112-6118

59, NII,

(англ.)

0054

039 040 0046

ВИНИТИ

30907.4631

Fh, TE, Ch

CCCN

(C.N)

31603

*

1973

У-1689

Wang Victor K., Overend John.

Vibrational anharmonicity in the cyano-
gen halides; a preliminary study using
the anderson potential function.

"Spectrochim. acta", 1973, A29, N 8,
1623-1633 (АНТИ.)

СМ. FCN, III

938 939 00 5 1 0958 ВИНИТИ

31008.8362
TE, Ch, Ph

Смитаев 1201

СССН

41125

1973

Wang Victor K., Goplen Thomas G.,
Overend John.

Determination of anharmonic potential
constants in linear XYZ molecules.

"J. Mol. Spectrosc.", 1973, 46, N 3,
509-512

(англ.)

См. № 20. III

0975

957 962

959

ВИНИТИ

ClCN

U-80H

1974

161950t Some theoretical aspects of the l-type doubling constant q_e . Application to XYZ ($C_{\infty v}$) type molecules. Mohan, N.; Mueller, A. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *Z. Naturforsch., Teil A* 1974, 29(12), 1782-6 (Eng). The relations between the l-doubling const. q_e and the centrifugal distortion const. D_e and the range of real values of q_e for XYZ ($C_{\infty v}$)-type mols., e.g. ClCN, were derived in detail showing that the known exptl. value of q_e for many mols. is in the neighborhood of its min. The mass effect on q_e was also studied and discussed with respect to the 1st order Coriolis coupling const.

(u.n)

C. A. 1975, 82 v 24.

40906.1819

Ph, TC, Ch

СССН

40892 02

1974

2350

Mukamel Shaul, Jortner Joshua. Molecular photodissociation.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 12, 4760-4777 (англ.)

0186 1974

152 156

ВИНИТИ

1974

с.с.л

Отчет по научно-исслед.
работе ИВТАН отдела №8
"Периодика на микро-
электронике в области
водородов и их соеди-
нений"

и.п.



40904.7345
Ch, Ph, TC

СССН 30526

1974

02X 2388

Simons J.P., Tasker P.W.

Further comments on energy partitioning
in photodissociation and photosensiti-
zation: vacuum u.v. photolysis of
[redacted] cyanogen halides.

"Mol. Phys.", 1974, 27, N 6, 1691-1695
(англ.)

150 153

1

0185

ВИНИТИ

1974

ClCN

(CN)₂

Hg(CN)₂

(Di; cur. noc)

97071g Kinematic effects in the studies of frequency shifts from free to complexed ligands. Cyvin, Sven J. (Inst. Theor. Chem., Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *Rev. Chim. Miner.* 1974, 11(1), 1-12 (Eng). The kinematic effects on vibrational frequencies of complexes were studied theor. for the linear models MAB, (AB)₂, and M(AB)₂ where the AB groups are considered as ligands. Two nonvanishing force consts. were assumed for the linear vibrations in each of the models. The theory was applied to ClCN, (CN)₂, and Hg(CN)₂ as numerical examples. The obsd. frequencies in these compds. were reproduced satisfactorily after proper adjustments of the force consts.

(+2)

C.A. 1974. 81 N16

CCCN

1975

Diab S., Simons G.,

Chem. Phys. Lett.,

1975, 34(2), 311-316.

ii, chem. no. 5.

(H₂O; III)

6 Б180. Межмолекулярные силовые постоянные в конденсированной фазе: ClCN и BrCN . Ghosh Pra-
dip N. Intermolecular force constants in the condensed
phase: ClCN and BrCN . «Indian J. Phys.», 1975, 49,
№ 10, 776—782 (англ.)

Проведен расчет меж- и внутримолек. силовых по-
стоянных ClCN и BrCN для жидк. (димер) и крист.
фаз в предположении решеточной структуры в виде
бесконечной трехатомной линейной цепи и аддитивности
межмолек. и внутримолек. сил. Рассчитанные межмо-
лек. силовые постоянные вдоль цепи K_x — изменяются
в пределах от 0,1 до 0,15 мди/А для жидк. фазы и
0,5—0,7 мди/А для кристаллов. Величины K_x в крист.
фазе почти не зависят от т-ры. Значения вал. силовых
постоянных $K(\text{C}-\text{X})$ и $K(\text{C}\equiv\text{N})$ в кристаллах пример-
но те же, что в жидк. димерах. Полученные результа-
ты согласуются с ранее сделанными оценками для жид-
кости и с данными ЯКР и структурного анализа для
кристаллов. Сделан вывод, что в тв. состоянии связи
внутри цепи значительно сильнее, чем между цепями, и
имеют явно выраженный ковалентный характер.

Е. Разумова

Х. 1977 № 6

1975

3251-52

(71)



ClCN
 BrCN

сид.
пост.

CLCN

number 3412

1975

Isotani S.

cu. noem.

"J. Mol. Struct."
1975, 28, N1, 61-76
(anus)

CL-CN

EST. 4824

1975

(Do)

Kerr J. A., et al.
Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

CCCN

[BP-4581-XI]

1975

Müller A.,

Z. chem. phys. et phys. chem. biol.,

1975, 72, N2, 158-162

раствор
дифракта
миссисипи
и т.д.

● (с H_2O ; III)

CCN

1975

D. Salim, S. Gary,

"Chim. Phys. Lett."

когда

судоро

наше

1975, 34, N2, 311-316

(see H₂O; III)

СССН⁺

У-14743

1976

BrCN⁺

JCN⁺

1 Д363. Спектры испускания катион-радикалов CICN⁺, BrCN⁺ и JCN⁺: системы полос $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$. Allan M., Maier J. P. The emission spectra of CICN⁺, BrCN⁺, JCN⁺ radical cations: $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ band systems. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 2, 231—235 (англ.)

ш.п.

Спектры испускания катион-радикалов CICN⁺, BrCN⁺ и JCN⁺, возбуждаемые электронным ударом (~40 эв) в парах соответствующих соединений, исследованы в области 400—900 нм с разрешением 1,8 Å для CICN⁺ и 1,3 Å для BrCN⁺ и JCN⁺. Обнаружены 2 системы полос $B^2\Pi - X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$, идентифицированные на основании сравнения с фотоэлектронными спектрами цианогалондов. С использованием импульсного возбуждения (40 эв, 70 нсек, 80 кГц) и техники задержанных совпадений измерены времена жизни уровней O_0^0 состояний $A^2\Sigma^+$ и $B^2\Pi$. Библ. 3.

(+2) X

ф. 1977 №1

CCCN⁺

*U-14743

1976

BrCN⁺

ICN⁺

See. circump

85: 101871v The emission spectra of ClCN⁺, BrCN⁺, ICN⁺ radical cations: $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ band systems. Allan, M.; Maier, J. P. (Phys.-Chem. Inst., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 41(2), 231-5 (Eng). The emission spectra of the ClCN⁺, BrCN⁺ and ICN⁺ radical cations, excited in the gaseous phase by electron impact were obsd. in the 400-900 nm wavelength region. The 2 band systems, $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ were identified by ref. to the photoelectron spectra of the cyanogen halides. The lifetimes of the 0_0^0 level of the $A^2\Sigma^+$ state and of the $B^2\Pi$ state were also measured.

XIV-7328

(42)

C.A. 1976 85 N 14

СЕСМ -

УЗ - 14743

1976

BrCN -

JCN -

2 Б145. Спектры испускания радикалов CICN^+ , BrCN^+ , JCN^+ : системы полос $\tilde{B}^2\Pi - \tilde{X}^2\Pi$ и $\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi$.
 АИПан М., Maier J. P. The emission spectra of CICN^+ , BrCN^+ , JCN^+ radical cations: $\tilde{B}^2\Pi \rightarrow \tilde{X}^2\Pi$ and $\tilde{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \tilde{X}^2\Pi$ band systems. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 2, 231—235 (англ.)

В области 400—900 нм измерены спектры испускания положительно заряженных радикалов CICN^+ (I), BrCN^+ (II), JCN^+ (III). Спектры возбуждали электронным ударом. Обнаружено по две системы полос, отнесенных на основании данных по фотоэлектронным спектрам соответствующих галогенидов циана, к переходам $\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi_\Omega$ и $\tilde{B}^2\Pi_\Omega - \tilde{X}^2\Pi_\Omega$ ($\Omega = 3/2, 1/2$).

В случае перехода $\tilde{A} - \tilde{X}$ идентифицированы нулевые полосы подсистем с $\Omega = 3/2$ и $1/2$: 11 696 и 11 420 cm^{-1} (I), 13 700 и 12 225 cm^{-1} (II), 18 265 и 13 930 cm^{-1} (III).

Определены времена жизни I—III в состояниях $\tilde{A}^2\Sigma^+$ (нулевой уровень) и $\tilde{B}^2\Pi_\Omega$, равные, соотв., (нсек) 4400 и 205 (I), 3000 и 270 (II), 1200 и 300 (III). В. М. К.

(м.н.)

(+2) 

X 1974 N2

XIV - 7328

CCCN

ammuea 4941

1976

Böhlig Heinz

Z. Chem. 1976, 16 N^o 11,
430-5

(coll. uoef.)

(coll. HeO, III)

CCN

1976

Černiák V., et al.

(используя
Теннинга)

J. Electron Spectrosc. and
Relat Phenom., 1976, 8, N 2,
109-121.

● $(Cu(CN)_2)^{II}$

CCEN
CEN

XU-12614

1976

84: 171591k On the electronic structure of cyanogen chloride and nitrosyl chloride. Gilberg, E.; Schaetzl, W.; Schrenk, H. W. (Sek. Phys., Univ. Muenchen, Munich, Ger.). *Chem. Phys.* 1976, 13(2), 115-20 (Eng). The ionization potentials and relative x-ray intensities were calcd. for CNCl and NOCl by means of an ab initio LCAO SCF program. The data obtained are compared with the Cl $K\beta$ spectra which were recorded by using a high-resolution curved crystal spectrograph. The agreement between theory and expt. is satisfactory and allows for a reliable assignment of the prominent spectral features to the corresponding mol. x-ray transitions. A strong conjugation of the Cl lone pair electrons with the π bonds of the CN group was found for CNCl. In the case of NOCl, a corresponding conjugation of the Cl lone pair electrons with the double bonds of the NO group is absent.

y, kb. mex.
pactes

(71) ☒



C.A. 1976 84 N24

CNCl

NOCl

У-12614

1976

8 Д163. Электронное строение CNCl и NOCl. Gilberg E., Schätzl W., Schrenk H. W. On the electronic structure of CNCl and NOCl. «Chem. Phys.», 1976, 13, № 2, 115—120 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение CNCl (I) и NOCl (II). Используются базисы лепестковых гауссовских функций C, N(9s5p)Cl (12s9p) для I и O, N(5s4p)Cl (10s4p) для II. Исследованы рентгеновские спектры Cl K β I и II. Рассчитаны потенциалы ионизации и относит. интенсивности в рентгеновских спектрах I и II. На основании полученных результатов проведена детальная интерпретация рентгеновских и фотоэлектронных спектров. Показано, что в I имеется сильное сопряжение неподеленной пары электронов атома Cl с π -связью группы CN, а в II такое сопряжение с двойной связью группы NO отсутствует.

В. Л. Лебедев.

электр. спектры.

(41)



сп. 1976. № 8.

СНСЕ

НОСЕ

ЖУ-12614

1976

17 Б30.. Электронное строение CNCl и NOCl. Gilberg E., Schätzl W., Schrenk H. W. On the electronic structure of CNCl and NOCl. «Chem. Phys.», 1976, 13, № 2, 115—120 (англ.)

С целью интерпретации рентгеновских эмиссионных ClK_{β} -, $ClL_{2,3}$ -, NK_{α} -, CK_{α} - и OK_{α} -спектров неэмпирич. методом ССП ЛКАО МО в базе лепестковых гауссовых орбиталей рассчитано электронное строение молекул CNCl(I) и NOCl(II). Расчет I проведен в базе $[C, N; 9s5p/Cl; 12s9p]$, а расчет II был проведен в меньшем базе $[N, O; 5s4p/Cl; 10s4p]$. Результаты расчета I сопоставлены с неэмпирич. расчетом I в базе хартри-фоковских АО. Орбитальные энергии валентных уровней в обоих расчетах отличаются не более, чем на 0,5 эв. Энергетич. положение пиков в рентгеновских спектрах определено без учета эффектов релаксации МО. С использованием полученных волновых функций проведены расчеты матричных элементов вероятностей переходов. Для интерпретации спектров привлечены также фотоэлектронные спектры I, II. В ClK_{β} -спектре I наблюдаются три хорошо разрешенных пика A, B и E, а также два наплыва C и D в низкоэнергетич. обла-

Электр. спектра

(+1) R

X-1976

117

сти пика *E*. Теоретически рассчитанный спектр сдвинут и нормирован т. обр., чтобы наиболее интенсивный пик *B* соответствовал МО 2л. В этом случае пик *A* соответствует МО 8σ, отвечающей связывающему взаимодействию C—Cl, при этом вклады от $2p=AO$ атома азота в этой МО крайне малы, что подтверждается формой рентгеновских NK_{α} , CK_{α} и $Cl_{L_{2,3}}$ эмиссионных спектров. Наплыв *C* отвечает переходу с МО 9σ, к-рая соответствует σ-связи C—N. Этот вывод также подтверждается формой CK_{α} - и NK_{α} -спектров. Пик *E* соответствует переходу с МО 3л, причем с учетом колебательной структуры соотв-щей полосы в фотоэлектронном спектре его можно интерпретировать как переход не из основного ($v'=0$), а из возбужденного колебательного состояния с $\chi'=1$ или даже $v'=2$. Наплыв *D* связан с колебательным состоянием с $v'=3$. При интерпретации ClK_{β} -спектра II два наиболее интенсивных перехода с МО $12a'$ и $3a''$, к-рые соответствуют неподеленным парам атома Cl (отличающихся по энергии менее чем на 0,1 эв), совмещены с главным пиком *B*. В результате сильно размытый пик *A* с малой интенсивностью отнесен к МО $10a'$, $11a'$ и $2a''$, лежащим в диапазоне ~3 эв. Наплыв *D* отнесен к связывающей МО $13a'$, соответствующей взаимодействию Cl—N и Cl—O. Это отнесение подтверждено положением пиков и их интенсивностями в OK_{α} - и NK_{α} -спектрах. Природа наплыва *C* и малоинтенсивного пика *E* не установлена. Первый может быть связан с примесями HCl, а второй — с радикал или многоэлектронными переходами. В обеих системах прямой расчет вероятностей переходов с использованием волновых функций находится в неплохом колич. соответствии с опытом. Отмечено, что в I обнаружено сильное сопряжение неподеленных пар Cl с л-связями группы CN. В II такого сопряжения неподеленных пар Cl с двойной связью N=O не обнаружено.

С. Долгин

CCCN

1976

Quade C.R.,

J. Chem. Phys., 1976,
64, N7, 2783-95.

(расчет
колеб. в.р.
ЭМ.)

(all O_2) III

60323.1301

41197

4976

Ex-G, Ch, TC, MGJ

CCCN

3967

Politzer Peter, Kasten Stephen D.
Analysis of the charge distributions in
molecules of the types XCCH and XCN.
"J. Phys. Chem.", 1976, 80, №3, 283-287 (англ.)

(сч. НССН: 14)
0575

559 559 567

ВНИИТИ

CCCN

* U.S.-12862

1976

(photos.
energy,
A₁g)

Staley R.M., et al
J. Amer. Chem. Soc., 1976,
98, No. 8, 2081-85.

(all MCN)

CECN

OTT. 4394

1976

CENO

85:83487t Ab initio calculations on cyanogen chloride and nitrosyl chloride. Støgaard, Ase (Dep. Chem., Univ. Bergen, Bergen, Norway). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 40(3), 429-32 (Eng). Ab initio calens. are presented for the mols. C₂ClN and ONCl with optimization of all geometric parameters. Calcd. equil. geometries for C₂ClN are in good agreement with microwave data; however, the calcd. N-Cl distance in ONCl is ~0.1 Å shorter than obtained by electron diffraction. Orbital energies are calcd. by means of Koopmans' theorem and also by ΔSCF calens. The importance of relaxation energy is shown by comparing the calcd. orbital energies with exptl. data from photoelectron spectra of the valence levels.

kb. selx.
factor

(71)

☒



C.A. 1976 85 N 12

СССН

отписки 4394

1976

~~СССН~~

22 Б25. Неэмпирические расчёты CICN и ONCl.
Stogard Ase. Ab initio calculations on CICN and
ONCl. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 40, № 3, 429—432
(англ.)

ОНСЕ

Методом ССП в расширенном базисе гауссовых орбиталей (ГО) проведены неэмпирич. расчёты электронного строения молекул CICN и ONCl. Для С, N и О базис 9s5p сгруппирован в базис 4s2p. Для Cl базис 12s9p сгруппирован в 6s4p. Ряд расчётов проводился также с базисом, включающим в себя $d=AO$ Cl. Для обеих молекул проводилась полная оптимизация геометрии для симметрии $C_{\infty v}$ (CICN) и C_s (ONCl). Рассчитанная геометрия для CICN хорошо согласуется с данными МВ спектров; в ONCl теор. длина связи N—Cl на 0,1 Å меньше эксперим. значения. Потенциалы ионизации определялись по теореме Купменса и из прямых расчётов разностей полных энергий нейтральной и ионизированной молекулы (Δ ССП). Хорошее согласие с эксперим. потенциалами ионизации, полученное при Δ ССП, указывает на существенную роль учета релаксац. эффектов.

Кв. метод
расчётов
Э. В. Суворов

(+1) X

7 1976

N 22

И. Тополь

1976.

СССН
ОНСЕ

11 Д123. Неэмпирические расчеты ClCN и ONCl. Støgaard Asc. Ab initio calculations on ClCN and ONCl. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 40, № 3, 429—432 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовских ф-ций C, N, O (9s5p), Cl(12s9p), сгруппированном в 4s2p/6s4p, а также в базисе с включением d-ф-ций атомов Cl, исследовано электронное строение ClCN (I) и ONCl (II). В обоих базисах проведена полная оптимизация геометрии. Для линейной I длины связей C—Cl и C—N найдены равными в базисе с учетом d-ф-ций 1,657 Å (эксперим. значение 1,630Å) и 1,151Å (1,163Å), причем учет d-ф-ций несколько улучшает результаты. Для II длины связей O—N и N—Cl в sp-базисе найдены равными 1,148Å (1,14Å) и 1,961Å (1,95Å), причем включение в базис d-ф-ций сильно

кв. метр.
расчет
м.п.; газифр

(+1) ☒

155 ЕР / 33 мм

ф. 1976 №11

завышает длины этих связей; валентный угол в обоих базисах оценен в 114° (116°). Рассчитанные по теореме Купманса потенциалы ионизации завышены на 1—2 эв; расчет потенциалов ионизации как разностей энергий соответствующих форм приводит к хорошему согласию с опытом, демонстрируя важность учета эффектов релаксации при ионизации. Кратко рассмотрены распределения электронной плотности. Отмечено, что в I атом Cl обладает небольшим положительн. зарядом, а в II — небольшим отрицат. зарядом, но заселенности $3d$ -АО атома Cl в обеих молекулах очень малы. В. Л. Лебедев

CCCN

number 5462 · 1974

Ashfold M. N. R.

Simons J. P.

gomo-
gucous.

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. II, 1977, 75,

858-868

CRCN ommeck 5530 1974

Beswick J. A.; et al

Chem. Phys., 1974, 24,

gino-
gucces. 1-11.

Absorption lineshapes for
the photodissociation of ...

CCCN
BrCN

1977

2 Д391. Микроволновое измерение колебательно-вращательной константы α_3 для молекул CICN и BrCN. Перенос колебательной энергии от активного азота. Cazzoli G., Favero P. G., Degli Esposti C. Microwave measurement of the α_3 vibration-rotation constant of CICN and BrCN. Vibrational energy transfer from active nitrogen, «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 2, 336—338 (англ.)

В диапазоне 90—150 Гц измерены микроволн. спектры молекул CICN и BrCN в возбужденном состоянии

(71) ✕

ф. 1978 № 2

$\nu_3=1$, заселенном путем переноса колебательной энергии от активного азота к исследуемым молекулам. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J=7\div 8, 9\div 10$ ($^{35}\text{ClCN}$), $8\div 9, 9\div 10$ ($^{37}\text{ClCN}$) и $14\div 15, 16\div 17$ ($^{79,81}\text{BrCN}$). Определены значения вращательной и центробежной постоянных и α_3 -постоянной колебательно-вращательного взаимодействия. Вычислены равновесные длины связей: $\text{C}-\text{N}=1,1606$, $\text{C}-\text{Cl}=1,6290$ А. М. Р. Алиев

ClCN
BrCN

1977

87: 175078e Microwave measurement of the α_3 vibration-rotation constant of chlorine cyanide and bromine cyanide. Vibrational energy transfer from active nitrogen. Cazzoli, G.; Favero, P. G.; Esposti, C. Degli (Ist. Chim. "G. Ciamician", Univ. Bologna, Bologna, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 50(2), 336-8 (Eng). Vibrational energy transfer between active nitrogen N_2^* , and the (0,0⁰,1) state of ClCN and BrCN allowed the detn. of the α_3 vibration-rotation const. by microwave spectroscopy, with the values: $\alpha_3(^{35}\text{ClCN}) = 32.35$ MHz, $\alpha_3(^{37}\text{ClCN}) = 31.68$ MHz, $\alpha_3(^{79}\text{BrCN}) = 20.37$ MHz and $\alpha_3(^{81}\text{BrCN}) = 20.24$ MHz. For $^{35}\text{ClCN}$ the α_1 vibration-rotation const. has also been detd. with a std. technique, giving $\alpha_1 = 24.65$ MHz. A new evaluation was made of the equil. structure of ClCN as follows: $r_e(\text{CN}) = 1.1606$ Å, $r_e(\text{CCl}) = 1.6290$ Å.

min

C.A. 1977. 87. n.d.

(+) NJ

1977

CCCN
BrCN

3 Б254. Микроволновое измерение колебательно-вращательной постоянной α_3 ClCN и BrCN. Перенос колебательной энергии от активного азота. Cazzoli G., Favero P. G., Degli Esposti C. Microwave measurement of the α_3 vibration-rotation constant of ClCN and BrCN. Vibrational energy transfer from active nitrogen. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 2, 336—338 (англ.)

Измерены МВ-спектры ClCN и BrCN в состояниях 0,0°, 1, заселенных путем переноса колебательной энергии от молекул активированного азота. Получены след. постоянные для $^{35}\text{ClCN}$ (0,0°, 1) $B=5938,488$, $D_I=1,77 \pm 0,07 \times 10^{-3}$, $\alpha_3=32,35 \pm 0,02$ Мгц, для $^{35}\text{ClCN}$ (1,0°, 0) $B=5970,934$, $D_I=2,11 \times 10^{-3}$, $\alpha_1=24,65 \pm 0,05$ Мгц, для $^{37}\text{ClCN}$ (0,0°, 1) $B=5815,575$, $D_I=1,38 \times 10^{-3}$, $\alpha_3=31,68 \pm 0,02$ Мгц, для $^{79}\text{BrCN}$ (0,0°, 1) $B=4099,824$, $D_I=8,53 \times 10^{-4}$, $\alpha_3=20,37 \pm 0,02$ Мгц, для $^{81}\text{BrCN}$ (0,0°, 1) $B=4076,550$, $D_I=8,70 \times 10^{-4}$, $\alpha_3=20,24 \pm 0,02$ Мгц. Для параметров равновесной структуры ClCN получены след. значения: $r_e(\text{CN})=1,1606$ А, $r_e(\text{CCl})=1,6290$ А. Для BrCN полученные значения α_3 хорошо согласуются с лит. данными. С. Б. Осин

44:11

(41)

2.1978,
113

CCCN number 6045 . 1974

Mishra K.C., et al.

Cum grat. Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1974, 15

829-33

CCN

#4-18338

1977

Spence David

J. Chem. Phys 1977, 66,
No. 669-674 (aug.)

(8i)

coll. HCL-III

CCCN

summa 6646

1978

Bazquez J.L., et al.

cu.1.
no.5.

Theor. chim. acta

1978, 49, 1-11

CCCN

Lovas F. J.

1978.

(M.N.)

J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1978, 7(4), 1445-1750

Медведев М. В. спектры.

II. Механические свойства

СССМ

резонанс
Ферми

(4) 17

Ф. 1979/15

1978

5 Д208. Зависимость резонанса Ферми от вращательного состояния в молекулах HCN и ClCN. Mishra K. S., Mohanty B. S. Rotational dependence of Fermi resonance in HCN and ClCN. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 5, 2064—2066 (англ.)

Теоретически рассмотрена зависимость параметра k_{122} резонанса Ферми от вращательного квантового числа J в линейных трехатомных молекулах. С учетом эффектов ангармонизма и колебательно-вращательного взаимодействия вплоть до 4-го порядка выведено общее выражение параметра δ_{122} этой зависимости через молекулярные параметры. По литературным данным для молекулярных параметров вычислены значения δ_{122} для молекул HCN, $H^{13}CN$, $HC^{15}N$, $^{37}ClCN$ и $^{35}Cl^{13}CN$. Вычисленные значения δ_{122} согласуются с эксперим. данными.

М. Р. Алнев

CCIN

| ammee 7528 | 1978

Ramaswamy K., et al.

Si

prerogee.

amocin.

nomes.

steyvii

Acta phys. polon.

1978, A53, (5)

733-36

1978

СРСМ

6 Д253. Силовые поля цианогалогенидов. II. Хлорциан. Whiffen D. H. The force fields of cyanogen halides. II. Cyanogen chloride. «Spectrochim. acta», 1978, А34, № 12, 1173—1181 (англ.)

В приближении ангармонич. гамильтониана методом прямой диагонализации матрицы найдены параметры силового поля молекулы ClCN . Общий подход к решению задачи и система обозначений такие же, как и в ч. I (Whiffen D. H., «Spectrochim. Acta», 1978, 34A, № 12, 1165—1172). Приведены значения вычисленных частот колебаний и вращательных постоянных для двух изотопных молекул $^{35}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ и $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$. Результаты сравниваются с имеющимися эксперим. данными. Отмечено, что в методе диагонализации удовлетворительное объяснение резонанса Ферми получается без использования каких-либо дополнительных процедур или введения специальных констант. Ч. I см. реф. 6Д252.

А. Чесный

Силовое поле

Ф. 1079 Л6

1978

СССН

12 Б75. Силовые поля галогенцианов. II. Хлорциан. Whiffen D. H. The force fields of cyanogen halides. II. Cyanogen chloride. «Spectrochim. acta», 1978, A34, № 12, 1173—1181 (англ.)

В естественных координатах определены 12 силовых постоянных (гармонич., кубич. и квартичных) молекулы хлорциана $CICN$, а также значения равновесных межъядерных расстояний $Cl-C$ и $C-N$. Используются эксперим. данные по частотам переходов и вращательным постоянным. Общий подход к задаче таков же, как и в случае молекулы фторциана (см. пред. реф.), хотя существование двух изотопов хлора обеспечивает наличие большего числа доступных эксперим. данных. Отмечено, что для $CICN$ резонанс Ферми частот ν_1 и $2\nu_3$ значительно сильнее, чем у фторциана, что позволяет проверить применимость использованного силового поля.

А. В. Немухин

СССН. Коси.

2-1079, N12

CCN

1979

обзор:
гормональный
суперинформационный

Ashifold et al. N.P., et al.
Pop. Curr. Chem. 1979,
86, 1-90.

суд. H₂O-10.

Оттиски 8266

1979

С.С.А.

3 Б231. Измерение квадрупольного взаимодействия Cl и N в ClCN. Cosley C. D., Fry H. A., Kukulich S. G. Measurement of Cl and N quadrupole coupling in ClCN. «I. Mol. Spectroscopy», 1979, 75, № 3, 447—453 (англ.)

Исследована СТС переходов $J=1 \leftarrow 0$ и $J=2 \leftarrow 1$ молекул $^{35}\text{ClCN}$ и $^{37}\text{ClCN}$. Получены след. значения вращательной постоянной B и параметров сверхтонкого взаимодействия $eqQ(\text{Cl})$, $C(\text{Cl})$, $eqQ(\text{N})$, $C(\text{N})$ указанных молекул (в мгц): $^{35}\text{ClCN}$ — 5970,820, —83,26, —0,006, —3,59, 0,013; $^{37}\text{ClCN}$ — 5847,246, —65,61, —0,004, —3,16, 0,010.

М. П.

В. М. Ковба

2.1980.13

CCCN

omnuck 8266

1979

91: 11577y Measurement of chlorine and nitrogen quadrupole coupling in cyanogen chloride. Cogley, C. D.; Fry, H. A.; Kukolich, S. G. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(3), 447-53 (Eng). $J = 1 \leftarrow 0$ And $J = 2 \leftarrow 1$ transitions in $^{35}\text{ClCN}$ and $^{37}\text{ClCN}$ were measured using a C-band waveguide spectrometer and phase-locked sources. Parameters obtained from the data are: $B(^{35}\text{ClCN}) = 5970.820 \pm 0.010$ MHz, $B(^{37}\text{ClCN}) = 5847.246 \pm 0.008$ MHz, $eqQ(^{35}\text{Cl}) = -83.26 \pm 0.04$ MHz, $eqQ(^{37}\text{Cl}) = -65.61 \pm 0.04$ MHz and $eqQ(^{14}\text{N}) = -3.60 \pm 0.08$ MHz.

M.H.

C.A., 1979, 91, N2

CNCN

1 Д417. Измерение квадрупольного взаимодействия Cl и N в ClCN. Measurement of Cl and N quadrupole coupling in ClCN. Cogley C. D., Fry H. A., Kukulich S. G. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 3, 447—453 (англ.)

Исследованы параметры сверхтонкого расщепления вращательных линий $J=1 \leftarrow 0$ и $J=2 \leftarrow 1$ газообразного ClCN, приведены таблицы частот отдельных компонент. Определены вращательные постоянные B и параметры квадрупольной связи $eqQ(Cl)$ и $eqQ(N)$, равные для $^{35}ClCN$: $B=5970,820(10)$, $eqQ(Cl)=-83,26(6)$, $eqQ(N)=-3,59(8)$ Мгц, а для $^{37}ClCN$: $B=5847,246(8)$, $eqQ(Cl)=-65,61(6)$, $eqQ(N)=-3,61(8)$ Мгц. Найденные значения параметров хорошо согласуются с менее точными значениями, полученными ранее. Н. Филиппов

M, 17,

Оттиск 90171979

Cl-CN

Br-CN

CN

спектр
поглощ.

(+2)

Л. 1980. N12

12 B1319. Фотодиссоциационная спектроскопия циангалогенидов в вакуумной ультрафиолетовой спектральной области. Macpherson Martyn T., Simons John P. Photodissociation spectroscopy of the cyanogen halides in the vacuum ultraviolet. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 11, 1572—1592 (англ.)

Проведены исследования оптич. спектров поглощения соединений типа XCN (где X=Cl, Br, J) в области 120—180 нм, ~~спектров возбуждения~~ фотофрагмента CN($B^2\Sigma^+$), его относит. квантовых выходов и поляризации флуоресценции в переходе CN($B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$) в зависимости от длины волны. Отождествление спектров осложняется неопределенностями в схемах связи моментов кол-ва движения и трудностями предсказания ожидаемого числа и природы оптически возбуждаемых электронных состояний. Спектры ридберговских состояний BrCN при $\lambda > 126$ нм, ClCN при $\lambda > 122$ нм и HCN при 105—130 нм обнаруживают большое сходство, указывающее на сходство моментов кол-ва движения типа Λ, s -связи. Однако спектр JCN в области коротких длин волн обнаруживает существенные отличия, обусловленные сильным спин-орбитальным взаимодействием и тен-

90172
Оттиск

денцией перехода к (Ω_c, ω) -связи, к-рая повышает число оптически достижимых ридберговских состояний. Другой осложняющий фактор состоит в сильной зависимости интенсивности ридберговских состояний от перекрывания ридберговской электронной волновой функции с внутренними электронными оболочками. Когда ридберговские состояния наложены на континуум с симметрией, допускающей взаимодействие с этими дискретными состояниями, происходит взаимное возмущение дискретных и континуумных уровней, приводящее к появлению антирезонансов, к-рые проявляются в спектре в виде провалов или др. особенностей структуры. В исследованных молекулах состояния B и C возникают в перпендикулярных переходах в подсостояния ${}^3\Pi(3/2, 1/2)_1$ и ${}^1\Pi(1/2, 1/2)_1$ ридберговских состояний $2\pi \rightarrow n\sigma$. В ClCN обнаружен новый переход внутривалентного типа $6\sigma \rightarrow 3\pi$, аналогичный переходу системы полос $C^1A^1 \leftarrow X$ в спектре HCN . В ClCN и BrCN ряд коротковолновых полос приписан ридберговским состояниям; нек-рые из них имеют изогнутую форму, обусловленную возмущениями под действием внутривалентных состояний. Эти ридберговские состояния связаны с электронными переходами с орбит, к-рые имеют связывающий характер.

В. Е. Скурат

CCCN

Domestic 9177

1980

исследования
структуры,
математический

модель,
структура, M

модель взаимодействия

in

Molecular-beam
electric-resonance
Study of ...

Reinartz J.M.L.J;
et al.

Chem. Phys., 1980, 45,
387-92.

CCCV

Tommen 10359

1980

CCVC

Schmiedekampff et al.

publ.

Z. Mol. Struct., 1980,

empir.

crit. rev.

67, 107-119

kb. ref.

fact

CCN

BrCN

ICN

спектр
поглощ.



Ф. 1981. N 7

7 Д596. Энергетическое распределение продуктов фотодиссоциации. Исследование селективных состояний циангалогенидов. Energy partitioning in photodissociation: state selective studies of the cyanogen halides. Ashfold Michael N. R., Georgiou Andreas S.,

Quinton Alan M., Simons John P. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1981, Part 2, 77, № 2, 259—271 (англ.)

На основании исследования поляризованной флуоресценции фотофрагментов выполнен систематич. анализ ВУФ-спектров поглощения молекул CICN, BrCN и ICN. Исследовано колебательное и вращательное распределения энергии образующихся при диссоциации радикалов CN ($A^2\Pi_i$ и $B^2\Sigma^+$). Возбуждение в диссоциационный континуум и в преддиссоциационные полосы приводит к значительным различиям в энергетич. распределениях радикалов. Показано, что обобщенный франк-кондоновский подход качественно правильно описывает процесс диссоциации. Обсуждены эксперим. трудности, связанные с получением информации о вращательном распределении продуктов фотодиссоциации. Библи.: 41.

В. А. Е.

1981

Отмеч 11163

СССР

Оттиск 11614

1981

18 Б183. Молекулярные ридберговские переходы. Хлорид циана. Felps W. S., McGlynn S. P., Findley G. L. Molecular Rydberg transitions. Cyanogen chloride. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 71—85 (англ.)

В области 2200—1250 А измерены электронные спектры поглощения газообразного хлорида циана ($p \sim 0,02$ —20 мм). Использовалась проточная система с предв. удалением возможных примесей (CO_2 , Cl_2 , HCl , CH_3Cl , $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$). На основании данных по фотоэлектронным спектрам и результатам расчетов (схема Малликена — Вольфсберга — Гельмгольца, ППДП/1, ППДП/2) дана схема МО и переходов для ClCN . Наблюдаемая в спектре широкая бесструктурная полоса в области 1800 ($\lambda_{\text{макс}} = 1775$ А, осцилляторная сила $f = 6,47 \times 10^{-3}$) отнесена к валентному переходу $\pi - \sigma^*$. Полоса в области 1450 А с разрешенной колебательной структурой (ν_1 , ν_2) связана с возбуждением типа $\pi_2 - \pi^*$. Согласно теории (МВГ, ППДП), такой переход сопровождается изменением длины связи С—Сl и активностью колебания ν_1 . Учитывая проявление в спектре колебательной структуры, связанной с ν_2 , и величину f , полоса отнесена к пе-

М.М.; Д.
гос. ун-та

Ж 1981. N 18

реходам $X^1\Sigma\pm^1\Sigma$ и $X^1\Sigma\pm^1\Delta$, причем в возбужденных со-
 строящих молекула имеет изогнутую конфигурацию. По-
 лоса 1427 А отнесена к первому ридберговскому s -пере-
 ходу $X^1\Sigma\pm^3\Pi_1$. В интервале 1410—1300 А выделено, по
 крайней мере, два перехода с разрешенной колебатель-
 ной структурой: компонента первого ридберговского s -
 перехода $X^1\Sigma\pm^1\Pi_1$ и неидентифицированный валентный
 переход. Переход в области 1340—1270 А предвари-
 тельно интерпретирован как валентный $X^1\Sigma\pm^1\Pi_1$ ($\sigma-\pi^*/\pi-$
 σ^*). Ридберговские переходы p -типа наблюдались в диа-
 пазоне 1290—1250 А. Значения энергий (E), частот ко-
 лебаний (в см^{-1}), сил осцилляторов эффективных кван-
 товых чисел (n^*) и квантовых дефектов (δ): состояние
 $^1\Sigma$, $^1\Delta$ (вал.) — 68 650, $\nu_1=665$, $\nu_2=300$, f (полная) $1,53\cdot$
 10^{-2} ; состояние $^3\Pi_1$ (S — ридб.) — 70 075, $\nu_3=1990$, f
 $=3,44\cdot 10^{-5}$, $n^*=1,93$, $\delta=0,93$; состояние $^1\Pi_1$ (S —
 ридб.) — 71 385, $\nu_1=640$, $\nu_2=315$, $\nu_3=1950$, $f=1,33\cdot 10^{-3}$
 (E и f для отдельных полос колебательной структуры —
 $E(2_1^0)=71\ 020$, $f=2,75\cdot 10^{-5}$, $E(2_0^1)=71\ 680$, $f=2,99\cdot$
 10^{-4} , $E(3_0^1)=73\ 330$, $f=2,23\cdot 10^{-3}$, $E(2_3^13_0^1)=73\ 600$,
 $f=4,13\cdot 10^{-5}$, $E(1_0^13_0^1)=73\ 960$, $f=7,99\cdot 10^{-4}$), f (полная) =
 $4,5\cdot 10^{-3}$, $n^*=1,97$, $\delta=0,97$; состояние $^1\Pi_1$ (вал.) =
 $74\ 450$, $\nu_1=650$, $\nu_3=1870$, $f=3,85\cdot 10^{-3}$ (для полосы
 $3_0^1-E=76\ 320$, $f=3,45\cdot 10^{-3}$), f (полная) $=1,10\cdot 10^{-2}$;
 состояние $^1\Pi_1$ (p — ридб.) $=78\ 100$, $\nu_1=670$, $\nu_2=280$, ν_3
 $=1875$, f (полная) $=8,62\cdot 10^{-2}$, $n^*=2,26$, $\delta=1,26$; состоя-
 ние с энергией $79\ 755\ \text{см}^{-1}$ (p — ридб. или вал, последнее
 более вероятно) — $f=1,5\cdot 10^{-1}$, $n^*=2,34$, $\delta=1,34$. Полу-
 ченные результаты сопоставляются с данными по рид-
 берговским s -состояниям молекул CH_3Cl , HCl , HCN .

В. М. Ковба

СССР

Оттиск ИВУ 1981

10 Д431. Молекулярные ридберговские переходы: ClCN . Molecular Rydberg transitions. Cyanogen chloride. Felps W. S., McGlynn S. P., Findley G. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 71—85 (англ.)

Спектр поглощения молекулы ClCN исследован в области 1250—2200 Å. Идентифицированы первые ридберговские S -переходы: $X^1\Sigma^+ - ^3\Pi_1$ и $X^1\Sigma^+ - ^1\Pi_1$ и определены параметры обменного и спин-орбитального взаимодействия. Относит. интенсивности этих двух переходов согласуются с предположением о промеж. типе связи. Обсуждены валентные $\Pi \rightarrow \Pi^*$ -переходы в состоянии $^{1,3}(\Sigma^-, \Delta \text{ и } \Sigma^+)$. Показано, что одно или оба $^1\Sigma$ и $^1\Delta$ -состояния имеют изогнутую геометрию. Состояние $^1\Sigma^+$ предположительно локализовано при $79\,755 \text{ см}^{-1}$. Полосы $56\,340$ и $74\,450 \text{ см}^{-1}$ приписаны переходам $\sigma \rightarrow \Pi^*$ и $\pi \rightarrow \sigma^*$. Библ. 23.

М. П.

Ф. 10. 1981

CCCN

Lemmonia 11378 | 1981.

Liška M., et al.

M.M.

J. Mol. Struct., 1981.
72, 174-81.

CCCN

молекула.
Ридберг.
переходы

1981

7 Д550. Молекулярные ридберговские переходы. Переход $\pi \rightarrow 4s$ молекулы C1CN. Molecular Rydberg transitions. The $\pi \rightarrow 4s$ transition of C1CN. McGlynn S. P., Felps W. S., Findley G. L. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 78, № 1, 89—92 (англ.)

С целью устранения имеющихся разногласий в отношении полос спектра поглощения молекулы C1CN, первый ридберговский s-переход проанализирован с точки зрения возможных значений эффективного квантового числа, силы осциллятора и параметров модели промеж.

связи. Показано, что отношение сил осцилляторов $f(\tilde{X}-B)/f(\tilde{X}-C)$ может быть очень малым (вплоть до 10^{-2}). Последнее является доводом в пользу одного из предложенных ранее отнесений полос в области первого ридберговского s-перехода молекулы C1CN.

В. С. Иванов

ор. 1981. № 4

1981

CICN

12 Б180. Молекулярные ридберговские переходы. Переход $\pi-4s$ CICN. McGlynn S. P., Felps W. S., Findley G. L. Molecular rydberg transitions. The $\pi \rightarrow 4s$ transition of CICN. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 78, № 1, 89—92 (англ.)

Обсуждается полученный авторами ранее спектр CICN и его отнесение в области первого ридберговского S-перехода $\pi^4X^1\Sigma^+ - \pi^3\sigma(4s)^1,3\Pi$ ($70\,000 - 77\,000 \text{ см}^{-1}$). Рассматриваются энергии B и C состояний (ν), энергии ионизации (I), эффективные квантовые числа ($n^* = [(I + \nu)/R]^{-1/2}$), силы осцилляторов (f) и параметры модели промежут. связи (ξ, K — соотв., интегралы спин-орбитального взаимодействия и обменный). Приведены аналогичного рода данные по молекулам ICN и BrCN. Показано, что отношение $f(B-X)/f(C-X)$ должно быть порядка 10^{-2} . В. М. Ковба

Спектр,
Ридберг.
переходы



д. 1981. N12

CLIN

ommuck 12128 | 1981.

Person W.B., et al.

Кв. мех.
факт
коллат.
св-б.

J. Phys. Chem., 1981, 85,
1998-2004

Part I

CCN

1982

спектр

ЗД653. Распределение избыточной энергии при фотоллизе цианистого хлора и цианистого брома под действием излучения с длиной волны 193 нм. Partitioning of excess energy in the photolysis of cyanogen chloride and cyanogen bromide at 193 nm. Halpern Joshua B., Jackson William M. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 18, 3528—3533 (англ.)

С помощью метода индуцированной лазером флуоресценции измерены распределения заселенностей вращательно-колебательных уровней фрагментов $CN(X^2\Sigma^+)$, образующихся при фотодиссоциации $ClCN$ и $BrCN$ под действием излучения ArF-лазера (193 нм). Показано, что в возбужденном электронном состоянии из которого идет диссоциация, молекулы $ClCN$ и $BrCN$ являются изогнутыми, а образование фотофрагментов Cn сопровождается их сильным вращательным возбуждением. Предложена параметризация, основанная на квазиклассич. модели, позволяющая описать наблюдаемые вращательные распределения CN путем введения только двух параметров. Библ. 18.

А. В. Н.

(+2)

Ф. 1983, 18,
N 3

Br_2CN , CN

CCN

[Ummu 15883]

1982

म० चक्रम

Johri G. K., Gupta S.,
et al.,

Indian. J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
● 508-509.

CC CN

OM. 18144

1983

8 B1228. Прямые l -дублетные переходы в состоянии $01^1 0$ хлорциана и бромциана. Direct l -doublet transitions in the $01^1 0$ state of cyanogen chloride and cyanogen bromide. Cazzoli G., Cervellati R., Lister D. G., Damiani D., Degli Esposti C. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 94—103 (англ.)

На радиоспектрометре со штарковской модуляцией измерены в области частот 4—22 ГГц с точностью лучше, чем 0,05 МГц, МВ-спектры прямых l -дублетных переходов в состоянии $01^1 0$ двух изотопич. образцов хлорциана, $^{55}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (I) и $^{37}\text{Cl}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (II), и двух образцов бромциана, $^{79}\text{Br}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (III) и $^{81}\text{Br}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (IV). Анализ спектров выполнен с учетом эффектов l -удвоения нулевого 1- и 2-го порядков по угловому моменту, а также галоген-ядерных квадрупольных взаимодействий. Для I—IV, соотв., определены постоянные l -удвоения $q^0 = 7,46751(1)$, $7,17304(3)$, $3,91420(1)$ и $3,87142(2)$ МГц, $q^1 = -13,45(1)$, $-12,67(3)$, $-5,313(6)$ и $-5,223(9)$ Гц, $q^2 = 50(2)$, $59(6)$, $20,3(8)$ и $21(1)$ мкГц и параметры асимметрии тензора галоген-ядерного квадрупольного

И.А.

(4) X

X. 1984, 19, № 8

Br CN

взаимодействия $\eta e Q q_z = -0,83(2)$, $-0,62(4)$, $6,55(3)$ и $5,46(4)$ МГц. Полученные значения q^0 для всех образцов, за исключением III, несколько выше соотв. величин, полученных из переходов R -ветви, что связано с пренебрежением членом q^1 при выводе q^0 из переходов R -ветви. Постоянные l -удвоения q^1 , вычисленные из данных о колебательном силовом поле, в пределах 10% согласуются с эксперим. значениями. При этом вклад в q^1 от гармонич. члена для всех образцов составляет приблизительно 50% от величины q^1 . Параметры асимметрии тензора квадрупольного взаимодействия, вычисленные при учете кинематич. эффекта на основе модели, в к-рой тензор предполагается цилиндрически симметричным относительно связи углерод—галоген и постоянным во время изгибного колебания, согласуются с эксперим. значениями в случае I, II и несколько хуже согласуются в случае III, IV. С. Н. Мурзин

CCCN

DM. 18144

1983

99: 148847w Direct l-doublet transitions in the 01¹⁰ state of cyanogen chloride and cyanogen bromide. Cazzoli, Gabriele; Cervellati, Rinaldo; Lister, David G.; Damiani, Damiano; Esposti, Claudio Degli (Ist. Spettrosc. Mol., CNR, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 101(1), 94-103 (Eng). Direct l doublet transitions were obsd. for the 01¹⁰ state of ³⁵Cl¹²C¹⁴N and ³⁷Cl¹²C¹⁴N and ⁷⁹Br¹²C¹⁴N and ⁸¹Br¹²C¹⁴N at 4-22 GHz. The l-doubling consts. (q^0, q^1, q^2) and the asymmetry parameters ($\eta_e Qq_1$) of the halogen nuclear quadrupole coupling tensors were derived. The consts. q^1 were calcd. from the vibrational force fields of D. H. Whiffen (1978) for the 4 cyanogen halides using the formulation of J. K. G. Watson (1983). Agreement with the obsd. values is 10% or better and for cyanogen fluoride and cyanogen chloride the isotopic shifts in q^1 are also predicted.

l-quadrupole

C.A. 1983, 99, N18

CCCN

1983

5 Л192. Прямые переходы между компонентами l -удвоения в состоянии 01^1_0 цианистого хлора и цианистого брома. Direct l -doublet transitions in the 01^1_0 state of cyanogen chloride and cyanogen bromide. Cazzoli Gabriele, Cervellati Rinaldo, Lister David G., Damiani Damiano, Degli Esposti Claudio. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 94—103 (англ.)

В диапазоне 4—22 ГГц исследованы микроволновые спектры молекул $^{13}\text{C}^{13}\text{N}$ с $n=35$ и 37 и $^{81}\text{Br}^{13}\text{N}$ с $n=79$ и 81. Идентифицированы линии прямых переходов между компонентами l -удвоения вращательных уровней с $J \leq 57$ первого возбужденного состояния деф. кол., а также квадрупольная сверхтонкая структура линий. Частоты линий описываются ф-лой

М.П.

фр. 1984, 18, № 5

$$v = q^{(0)}J(J+1) + q^{(1)}J^2(J+1)^2 + q^3J^3(J+1)^3 + \eta e Q q_z Y(J, F),$$

где $Y(J, F)$ — ф-ция Казимира, а последний член описывает асимметрию тензора квадрупольной связи ядра галогена. Определены значения параметров l -удвоения ($q^{(n)}$) и квадрупольной связи. Выполнен расчет $q^{(1)}$ по известным значениям кубич. коэф. ангармоничности по ф-ле Уотсона: расхождения между измеренными и вычисленными значениями $q^{(1)}$ не превосходят 10%.

М. Р. Алиев

CCN

1983

Knözinger F., Witten-
beck R.

спектр
в

Ber. Bunsenges. phys.

магнитное

Chem., 1983, 87, N2,
149 - 154.

(сд. H(α)CCCN; III)

CCCN

[Om. 20765]

1984

Burdett J.K., Lawrence N.J.,
et al.,

Inorg. Chem., 1984, 23,
N 16, 2419 - 2428.

Электро-
отрицат.,
Структура
и
св836 в
мод-лах.

BrCN

[Om. 20765]

1984

Burdett J.K., Lawrence N.J.,
et al.,

Inorg. Chem., 1984, 23,
N 16, 2419-2428.

Электро-
отрицат.,
структура
и связь
в молекулах.

CCN

1984

6 Л254. Влияние электронного и ядерного спина на ориентацию фотофрагментов. Применение к диссоциации CICN при 157,6 нм. Influence of electron and nuclear spin on photofragment alignment. Application to CICN dissociation at 157.6 nm. Guest J. A., O'Halloran M. A., Zare R. N. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 103, № 4, 261—265 (англ.)

Показана необходимость учета деполяризационных эффектов ядерного и магн. спина фотофрагментов при анализе вращательно-разрешенных спектров излучения CN , образующихся при фотодиссоциации CICN . При учете этих эффектов обнаружена анизотропия квадрупольного момента вектора ядерного вращения N' для $\text{B}^2\Sigma^+$ -состояния CN , что указывает на то, что диссоциация CICN происходит посредством прямого механизма, не зависящего от вращения. Библ. 18.

А. В. Головин

диссоциация

ср. 1984, 18, № 6

DLCA

(OM. 20666)

1984

Lee R., Malpera F.B.,
Jackson W.M.,

Фотодис-
социация
в молекуле
пурке.

J. Phys. Chem., 1984,
88, N16, 3419-3425.

CCCN

DM. 20365

1984

2 Д109. Влияние заместителей в ряду цианидов ClCN , BrCN , NaCN и KCN . Исследование спектров ионизации валентных оболочек методом функций Грина. The effect of the substituent in the cyanide series ClCN , BrCN , NaCN and KCN : A Green's-function approach to the valence ionization spectra. Von Niessen W., Cambi R. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1984, 34, № 3, 291—304 (англ.)

Неэмпирическим методом ф-ций Грина в больших ба-
зисах сгруппированных гауссовых ф-ций ~~рассчитаны по-~~
~~тенциалы ионизации валентных электронов для ClCN ,~~
 ~~BrCN , NaCN и KCN .~~ Использована эксперим. геомет-
рия. Для сравнения также рассмотрены линейные NaCN
и KCN и изоцианиды LiNC и NaNc . Обнаружено, что
при замещении H на более электроотрицательные Cl и
Br потенциал ионизации орбитали неподеленной элект-
ронной пары атома N не изменяется, что обусловлено
локализованным характером этой орбитали; в то же
время при замене на Na и K ввиду ионного характера
связи происходит значительный перенос заряда на
группу CN, приводящий к значительному уменьшению
всех потенциалов ионизации. Библ. 18. В. Л. Л.

У. теор.
расчет

13

Ф. 1985, 18, №2

CCN

От 20365

1984

3 Б1155. Влияние заместителя в рядах цианидов ClCN , BrCN , NaCN и KCN . Применение метода функции Грина для расчета спектров ионизации валентных оболочек. The effect of the substituent in the cyanide series ClCN , BrCN , NaCN , and KCN : a Green's-function approach to the valence ionization spectra. Von Niesen W., Cambi R. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1984, 34, № 3, 291—304 (англ.)

Многочастичным методом функции Грина (МФГ) рассчитаны энергии ионизации (ЭИ) молекул ClCN , BrCN , ~~NaCN и KCN~~ при эксперим. значениях структурных параметров. С целью изучения влияния заместителей на электронное строение и фотоэлектронные спектры (ФЭС) аналогичные расчеты спектров ЭИ проведены также для линейных конфигураций молекул NaCN и KCN , а также изоцианидов LiNC и NaNc . Сопоставление ЭИ ClCN и BrCN с ЭИ HCN показало, что замена атома Н на атомы галогенов в ряду молекул XCN не приводит к сдвигу энергии МО неподеленной

у;

X
(43)

X. 1985, 19, N3.

пары азота n_N . Совершенно другая картина наблюдается в спектре ЭИ NaCN и KCN, где большой перенос заряда от атомов М к группе CN приводит к существенному сдвигу всех линий ФЭС в область низких значений ЭИ. В NaCN и KCN по сравнению с ClCN и BrCN верхние занятые МО имеют различную симметрию. Отличающиеся электроотрицательности атомов X и М и соотв. перенос заряда приводят к различной локализации орбиталей подсистемы CN в молекулах XCN и MCN. В молекулах XCN имеется МО неподеленной пары азота n_N , тогда как в MCN такая МО отсутствует. В то же время π -орбитали в молекулах XCN распределены по всем атомам, тогда как в молекулах MCN они локализованы в основном на группе CN.

CCCN

1985

Boyd Russell F.,
Choi Sai Cheng.

реферат,
англ.

Chem. Phys. Lett., 1985,
120, N 1, 80-85.

(Сср. HF; III)

СССН⁺


1985

2 Д331. Безызлучательные переходы и мономолекулярная диссоциация ионов ClCN⁺, BrCN⁺ и JCN⁺ в возбужденных электронных состояниях. Nonradiative transitions and unimolecular dissociation of excited electronic states of ClCN⁺, BrCN⁺, and JCN⁺. Braitbart O., Castellucci E., Dujardin G., Leach S. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 15, 3252—3260 (англ.)

Безызлучательные переходы

С помощью методов фотоэлектрон-фотоионного совпадения и фотоион-фотонного совпадения исследована радиационная и безызлучательная релаксация электронно-возбужденных ионов ClCN⁺, BrCN⁺ и JCN⁺, получаемых при фотоионизации молекул ClCN, BrCN и JCN излучением с $\lambda=584$ Å от гелиевой или неоновой ламп. Обнаружено, в частности, что релаксация состояния $V^2\pi$ происходит по биэкспоненц. закону. Изучена также диссоциативная ионизация указанных молекул XCN (X=Cl, Br, J), в частности, фрагментация по каналам X^++CN , CX^++N и CN^++X .

Б. Ф. Гордиец

(72) 
ср. 1986, 18, № 2

ClCN⁺

1985

[103: 61851v Nonradiative transitions and unimolecular dissociation of excited electronic states of cyanogen chloride(1+) (ClCN⁺), cyanogen bromide(1+) (BrCN⁺), and cyanogen iodide(1+) (ICN⁺). Braitbart, O.; Castellucci, E.; Dujardin, G.; Leach, Sydney (Lab. Photophys., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Phys. Chem.* 1985, 89(15), 3252-60 (Eng). Radiative and nonradiative relaxation processes of electronic excited states of ClCN⁺, BrCN⁺, and ICN⁺ formed by He I and Ne I lamp excitation were studied by photoelectron-photoion and photoion-fluorescence photon (PIFCO) coincidence techniques. The B²Π states of these ions fluoresce with an intrinsic biexponential decay. The results are interpreted in terms of the small mol., resonance limit model of radiationless transitions. Av. values of the interelectronic state mixing coeffs. and coupling matrix elements are detd. Morse function sections of the potential energy surfaces of the X²Π, A²Σ⁺, and B²Π states of the representative ion ClCN⁺ are calcd. and are shown to be propitious for B state relaxation via interelectronic interactions. Dissociative ionization processes of the XCN⁺ species are also studied, in particular fragmentation into the 3 channels X⁺ + CN, CX⁺ + N, and CN⁺ + X. Electronically excited CN radicals are detected in He I excited dissociative ionization of BrCN and ICN.

nonradiative processes

$\tilde{X}^2\Pi$, $\tilde{A}^2\Sigma^+$,

$B^2\Pi$

C. A. 1985, 102, N 8

CCCN⁺

DM. 22507

1985

7 Б1200. Спектры испускания катионов галоцианидов, XCN^+ ($X=Cl, Br, J$), охлажденных в сверхзвуковой струе. Системы полос $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ и $\bar{B}^2\Pi \rightarrow \bar{X}^2\Pi$. Emission spectra of supersonically cooled halocyanide cations, XCN^+ ($X=Cl, Br, J$): $\bar{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \bar{X}^2\Pi$ and $\bar{B}^2\Pi \rightarrow \bar{X}^2\Pi$ band systems. Fulara J., Klapstein D., Kuhn R., Maier J. P. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 20, 4213—4219 (англ.)

Измерены спектры испускания катионов XCN^+ ($X=Cl, Br, J$), охлажд. в сверхзвуковой струе. Спектры возбуждали электронным ударом. Наблюдали полосы переходов $\bar{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \bar{X}^2\Pi_\Omega$ и $\bar{B}^2\Pi_\Omega \rightarrow \bar{X}^2\Pi_\Omega$ ($\Omega=1/2, 3/2$). Выполнен анализ колебат. структуры переходов. Положение полос O_0^0 и частоты колебаний молекул (в cm^{-1}): $ClCN^+ - \nu(O_0^0, \bar{A} \rightarrow \bar{X}^2\Pi_{3/2}) = 11\,690$, $\nu(\bar{A} \rightarrow \bar{X}^2\Pi_{1/2}) = 11\,414$, $\nu(\bar{B}^2\Pi_{3/2} \rightarrow \bar{X}^2\Pi_{3/2}) = 22\,220$, $\nu(\bar{B}^2\Pi_{1/2} \rightarrow \bar{X}^2\Pi_{1/2}) = 22\,307$; состояние $X^2\Pi_{3/2} - \nu_1 = 823$, $\nu_3 = 1916$, $A = -276$ (постоянная спин-орбитального рас-

М.П.

(12) Δ

X. 1986, 19, IV 7-

$BrCN^+$, JCN^+

щепления); состояние $\tilde{X}^2\Pi_{1/2}-\nu_1=827$, $\nu_3=1924$; со-
 стояние $\tilde{A}^2\Sigma^+-\nu_1=774$; состояние $\tilde{B}^2\Pi_{3/2}-\nu_1=525$,
 $A=-363$, состояние $\tilde{B}^2\Pi_{1/2}-\nu_1=526$; $\text{BrCN}^+-\nu(\tilde{A}-$
 $\tilde{X}^2\Pi_{3/2})=13\ 698$, $\nu(A-\tilde{X}^2\Pi_{1/2})=12\ 220$, $\nu(\tilde{B}^2\Pi_{3/2}-$
 $\tilde{X}^2\Pi_{3/2})=19\ 232$; состояния $X^2\Pi_{3/2}-\nu_1=650$, $\nu_2=288$,
 $\nu_3=1906$, $A=-1477$; состояние $A^2\Sigma^+-\nu_1=584$, $\nu_2=421$,
 $\nu_3=1930$; состояние $\tilde{B}^2\Pi_{3/2}-\nu_1=471$, $\nu_2=394$, $\nu_3=$
 $=1939$; $\text{JCN}^+-\nu(\tilde{A}-\tilde{X}^2\Pi_{3/2})=18\ 262$, $\nu(\tilde{A}-\tilde{X}^2\Pi_{1/2})=$
 $=13\ 919$, $\nu(\tilde{B}^2\Pi_{1/2}-\tilde{X}^2\Pi_{1/2})=16\ 173$; состояние $\tilde{X}^2\Pi_{3/2}-$
 $\nu_1=535$, $\nu_2=239$, $\nu_3=2083$, $A=-4343$, состояние
 $\tilde{X}^2\Pi_{1/2}-\nu_1=559$, $\nu_2=253$; состояние $\tilde{A}^2\Sigma^+-\nu_2=274$;
 состояние $\tilde{B}^2\Pi_{1/2}-\nu_1=473$.

В. М. Ковба

XCN^+
($X = Cl, Br, I$)

DM-22507 1985

4 Л240. Спектры испускания охлажденных в сверхзвуковой струе катионов галогенцианидов XCN^+ ($X = Cl, Br, I$): системы полос $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ и $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$. Emission spectra of supersonically cooled halocyanide cations, XCN^+ ($X = Cl, Br, I$): $\tilde{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \tilde{X}^2\Pi$ and $\tilde{B}^2\Pi \rightarrow \tilde{X}^2\Pi$ band systems. Fulara Jan, Klapstein Dieter, Kuhn Robert, Maier John P. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 20, 4213—4219 (англ.)

В области 11 000—23000 cm^{-1} получены спектры испускания катионов XCN^+ ($X = Cl, Br, I$), образование которых происходило в условиях сверхзвукового пучка под действием электронного удара. В полученных спектрах идентифицированы полосы, отвечающие системам переходов $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ и $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$. Рассчитаны все колебательные частоты исследованных ионов в состояниях X, A и B с точностью до 2 cm^{-1} , а также величины спин-орбитального расщепления состояний X . Отмечена роль глубокого охлаждения ионов в сверхзвуковой струе, позволившего существенно упростить вид спектров. Библ. 28.

М. Т.

Ри, М. П.

ср. 1986, 18, № 4

XCN^+

(Om 22507)

1985

 $X = Cl, Br, I$

103: 186144y Emission spectra of supersonically cooled halo-cyanide cations, XCN^+ ($X = Cl, Br, I$): $A^2\Sigma^+ \rightarrow B^2\Pi$ and $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ band systems. Fulara, Jan; Klapstein, Dieter; Kuhn, Robert; Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Phys. Chem.* 1985, 89(20), 4213-19 (Eng). The $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_u$ and $B^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_u$ ($\Omega = 3/2, 1/2$) emission band systems of rotationally cooled chloro-, bromo-, and iodocyanide cations were obtained by electron impact excitation of seeded He supersonic free jets. The narrowing of the vibronic bands and particularly the resolu. of the transitions of the individual isotopic species enable a vibrational anal. of most of the spectral features to be made. This leads to almost all the vibrational frequencies ($\pm 2 \text{ cm}^{-1}$) of these cations in their $X^2\Pi$ states, as well as to many values in the $A^2\Sigma^+$ and $B^2\Pi$ states. The spin-orbit splittings in the $X^2\Pi$ states are also obtained, for $X = Cl$ also in the $B^2\Pi$ state, and better values for the higher ionization energies are given by combining the data of the present emission spectra with those from photoelectron spectroscopy.

 $A^2\Sigma^+ \rightarrow B^2\Pi$ $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$

c.A. 1985, 103, N 22

CCCN⁺

От. 23819

1985

11 Б1187. Спектры электронного поглощения ClCN^+ , BrCN^+ и JCN^+ в матрицах из неона. The electronic absorption spectra of ClCN^+ , BrCN^+ , and JCN^+ in neon matrices. Leutwyler S., Maier J. P., Spittel U. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 2, 506—510 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Измерены электронные спектры поглощения ионов ClCN^+ , BrCN^+ и JCN^+ , изолированных в матрицах из Ne при 4,5 К. Молекулярные ионы генерировали в матрицах, содержащих молекулы ClCN , BrCN и JCN , посредством ионизации резонансной линией с энергией 16,6/16,8 эВ неоновой разрядной лампы. В спектрах наблюдали прогрессии, связанные с переходами $\tilde{B}^2\Pi_{3/2} - \tilde{X}^2\Pi_{3/2}$ в исследуемых ионах. Отмечено, что существенное упрощение спектров по сравнению с газ. фазой связано с быстрой колебат. релаксацией на нулевой колебат. уровень нижней спин-орбитальной компоненты основного состояния и проявлением переходов только с этого уровня. Выполнен анализ колебат.

М.А.

⊗ (+2)

X. 1987, 19, N 11

структуры наблюдаемых систем полос и определены частоты колебаний в возбужденных состояниях (см^{-1}):
 $\text{CICN}^+ - \nu_1 = 539 \pm 4$, $\text{BrCN}^+ - \nu_1 = 478 \pm 10$, $\nu_2 = 377 \pm 10$,
 $\nu_2 = (1830 \pm 10)$, $\text{JCN}^+ - \nu_1 = 400 \pm 20$. В случае JCN^+
определено положение нулевого перехода в системе
 $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_{3/2} - 18\,265 \pm 10 \text{ см}^{-1}$. С. Б. Осин



ClCN⁺

(Im. 23819)

1985

103: 131545z The electronic absorption spectra of chlorocyanide (ClCN⁺), bromocyanide (BrCN⁺), and iodocyanide (ICN⁺) ions in neon matrixes. Leutwyler, Samuel; Maier, John P.; Spittel, Uta (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(2), 506-10 (Eng). The optical absorption spectra of the $B^2 \Pi_{3/2} \leftarrow X^2 \Pi_{3/2}$ transitions of chloro-, bromo-, and iodocyanide cations in Ne matrixes at 4.5 K were obtained and vibrationally analyzed. The origin band of the $A^2 \Sigma^+ \leftarrow X^2 \Pi_{3/2}$ transition of ICN⁺ was obsd. as well as the absorption bands of the CN radical in the spectra of ClCN⁺ and BrCN⁺. These features and the vibrational frequency data are discussed.

$B^2 \Pi_{3/2} \leftarrow X^2 \Pi_{3/2}$

$A^2 \Sigma^+ \leftarrow X^2 \Pi_{3/2}$

we;

C.A. 1985, 103, N16.

CCN

1985

Zheng Qike:

ИК спектр
высокого
разрешен.
в матрице
(обзор)

Wuli 1985, 14 (2),
127, 114.

●
(см. HCN; III)

ClCN^+

1986

6 Б1252. Спектр лазерного возбуждения перехода $\tilde{B}^2\Pi - \tilde{X}^2\Pi$ ClCN^+ в газовой фазе. The $\tilde{B}^2\Pi - \tilde{X}^2\Pi$ laser excitation spectrum of ClCN^+ in the gas phase. C. E. Francis G., Fulara Jan, Maier John P., Rösslein Matthias. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 131, № 4-5, 325—330 (англ.)

В области 365—450 нм с использованием перестраиваемого лазера на красителе измерены спектры возбуждения ионов ClCN^+ (электронный переход $B^2\Pi - \tilde{X}^2\Pi$), получавшихся в результате пеннинговской ионизации с участием метастабильных атомов He или Ne, возбужденных в охлаждаемом жидк. азотом эл. разряде. Определены волновые числа начал подсистем $\Omega = 3/2$ и $\Omega = 1/2$ для $^{35}\text{ClCN}^+ - 22514,2 (0,5)$ и $22606,2 (0,5) \text{ см}^{-1}$ и на основании полученных значений предложена новая интерпретация спектров ионизации ClCN^+ в сверхзвуковом потоке, возбужденных элект-

М.П.

X. 1987, 19, № 6

ронным ударом («J. Phys. Chem.», 1985, 89, 2481).
 В результате совместного анализа спектров возбужде-
 ния и испускания рассчитаны спектроскопич. постоян-
 ные для $^{35}\text{ClCN}^+$ (см^{-1}): $X^2\Pi_{3/2}-v_1''=827$ (2), $v_3''=$
 $=1915$ (2), $A_0''=-276$ (2), $B^2\Pi_{3/2}-v_1'=531,8$ (0,7),
 $v_2'=303,1$ (0,7), $v_3'=2128,5$ (0,7), $A_0'=-368$ (2),



ClCN⁺

1986

№ 4 Л166. Спектр лазерного возбуждения перехода $\tilde{B}^2\Pi \leftarrow \tilde{X}^2\Pi$ молекулы ClCN⁺ в газовой фазе. The $B^2\Pi \leftarrow X^2\Pi$ laser excitation spectrum of ClCN⁺ in the gas phase. Celi Francis G., Fulara Jan, Maier John P., Rösslein Matthias. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 131, № 4—5, 325—330 (англ.)

Получен спектр возбуждения иона ³⁵ClCN⁺ в области 365—450 нм. Определены пороги возбуждения подполос, связанных с переходами из состояний $\tilde{X}^2\Pi_{3/2}$ и $X^2\Pi_{1/2}$, равные $(22514,2 \pm 0,5)$ см⁻¹ и $(22606,2 \pm 0,5)$ см⁻¹ соответственно. С привлечением данных по спектрам возбуждения электронным ударом в сверхзвуковой струе определен ряд спектроскопич. постоянных для изученных состояний. М. А.

(М. А.)

фр. 1987, 18, N4

ClCN⁺

1986

106: 10755w The B²Π ← X²Π laser excitation spectrum of cyanogen chloride ion(1+)(ClCN⁺) in the gas phase. Celi, Francis G.; Fulara, Jan; Maier, John P.; Roesslein, Matthias (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 131(4-5), 325-30 (Eng). The laser excitation spectrum of the B²Π ← X²Π electronic transition in ClCN⁺ was obsd. at 365-450 nm. The origins of the Ω = 3/2, 1/2 sub-systems are unambiguously located for ³⁵ClCN⁺ at 22514.2 (0.5) and 22606.2 (0.5 cm⁻¹, resp. Anal. of the excitation spectrum together with a reinterpretation of the electron-impact emission spectrum of the cation in a supersonic jet yield the following spectroscopic consts. for ³⁵ClCN⁺ (in cm⁻¹): X²Π_{3/2}:ν''₁ = 827(2), ν''₃ = 1915(2), A₀' = -276(2); B²Π_{3/2}:ν'₁ = 531.8(0.7), ν'₂ = 303.1(0.7), ν'₃ = 2128.5(0.7), A'₀ = -368(2).

(B²Π ← X²Π)

лазерный спектр

и.п., и,

вращам-ночт.



с. А. 1987, 106, №2

СССН

от 24-195

1986

Варшавский О.П., Зюбенева
Т.С.

расчет

Е.щом. и
барьер
щомер.

Координат. жмеее,
1986, 12, №8, 1017.

- 1037

ClCN⁺

1986

18 Б1209. Спектр системы $B^2\Pi-X^2\Pi$ ClCN⁺ с низкой вращательной температурой. Rotationally cold spectrum of the $B^2\Pi-X^2\Pi$ system of ClCN⁺. Grieman F. J., McIlroy A., Perkins J. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 5, 2481—2488 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Измерена колебат. структура электронного спектра испускания катионов ClCN⁺ (переход $B^2\Pi-X^2\Pi$, обл. ~420—530 нм). Спектры возбуждали электронным ударом молекул ClCN, охлажденных в сверхзвуковой струе. Наиболее интенсивные полосы в спектре представляли собой прогрессии по ν_3'' и ν_3'' подсистем $^2\Pi_{1/2}-^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}-^2\Pi_{3/2}$ (положение полос 0_0^0 соотв. 22 220 и 22 307 см⁻¹). Значения частот колебаний $\nu_3(\text{C}-\text{Cl})$, $\nu_1(\text{C}\equiv\text{N})$ и величина спин-орбитального взаимодействия A ClCN⁺ (в см⁻¹): состояние $B^2\Pi$ — 526, 1355, —362; состояние $X^2\Pi$ — 823, 1915, —275. В полосе 3_2^0 удалось частично разрешить вращат. структуры, оценить величину $B''-B'=0,025$ см⁻¹, $T_{\text{вр.}} \approx 75$ К.

В. М. Ковба

(М. П.)

X. 1986, 19, N 18

ClCN⁺

1986

№ 11 Л231. Спектр $B^2\Pi-X^2\Pi$ вращательно-охлажденных ионов $ClCN^+$. Rotationally cold spectrum of the $B^2\Pi-X^2\Pi$ system of $ClCN^+$. Grieman Fred J., McIlroy Andrew, Perkins Jonathan. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 5, 2481—2488 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом электронного удара в сверхзвуковой струе получены спектры излучения $\bar{B}^2\Pi-X^2\Pi$, вращательно-охлажденных ионов $ClCN^+$. Определены частоты валентного колебания $Cl-C$ для основного и возбужденного электронных состояний (823 и 526 см^{-1} соответственно) и колебания $C\equiv N$ для основного состояния (1915 см^{-1}). Также определена разность между константами спин-орбитального взаимодействия в состояниях $\bar{B}^2\Pi$ и $\bar{X}^2\Pi$, равная 87 см^{-1} . Полученные результаты проанализированы с привлечением аналогичных данных для изоэлектронных молекул ClC_2H^+ и SCN .

М. А.

(М. П.)

Фр. 1986, 18, N 11.

Cl CN⁺

Om. 23 714

1986

104: 138644k Rotationally cold spectrum of the $\tilde{B}^2\Pi-\tilde{X}^2\Pi$ system of cyanogen chloride ion(1+) (CICN⁺). Grieman, Fred J.; Mellroy, Andrew; Perkins, Jonathan (Chem. Dep., Pomona Coll., Claremont, CA 91711 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(5), 2481-5 (Eng). The rotationally cold spectrum of the $\tilde{B}^2\Pi-\tilde{X}^2\Pi$ system of CICN⁺ was obtained by the crossed free jet-electron beam method. The narrowing of vibrational bands has allowed the assignment of many of the major features in the spectrum. The (Cl-C) stretching vibrational frequencies are 823 and 526 cm⁻¹ for the ground and excited electronic states, resp., and the (C:N) stretching vibrational frequency for the ground electronic state is 1915 cm⁻¹. The difference in spin-orbit coupling consts. for these 2 electronic states is 87 cm⁻¹. The difference in vibrational frequencies and the difference in spin-orbit coupling consts. for these electronic states, in comparison with similar values for the isoelectronic mols. ClC₂H⁺ and SCN, allow a fairly complete picture of the π bonding in these mols. to be formed.

(Di)

C.A. 1986, 104, N 16

CCCN

(OM. 23526)

1986

CCNH

Marriott S., Topson R. D.,

Ap, meop.
paarem.

J. Mol. Struct. Theochem,
1986, 137, N1-2, 133-
-141.

CLCN

1987

Andrews D. A.,
Baker J. G.

J. Phys. B: At. Mol.

Phys. 1987, 20(21),

5705-22.

(see OCS; III)

спектр,
μв-μв
резонанс.

ClCN⁺

От. 29777

1987

7)10 Л389. Вращательный анализ лазерного спектра возбуждения $\tilde{B}^2\Pi_{3/2}-\tilde{X}^2\Pi_{3/2}$ катиона хлорцианида. Rotational analysis of the $\tilde{B}^2\Pi_{3/2}-\tilde{X}^2\Pi_{3/2}$ laser excitation spectrum of chlorocyanide cation. Celi F. G., Rösslein M., Hanratty M. A., Maier J. P. «Mol. Phys.», 1987, 62, № 6, 1435—1447 (англ.)

С высоким разрешением получен спектр возбуждения флуоресценции $\text{ClCN}^+(\tilde{B}^2\Pi_{3/2}-\tilde{X}^2\Pi_{1/2}) 1_0^v (v=0-2)$. Выполнен его вращательный анализ. Определены вращательные постоянные для уровня $v''=0$ основного состояния двух изотопич. молекул, $^{35}\text{ClCN}^+$ и $^{37}\text{ClCN}^+$, а также для ряда колебательных уровней возбужденного состояния \tilde{B} . Во многих полосах обнаружены и проанализированы вращательные возмущения. Библ. 31.
В. С. Иванов

М. П.

ф. 1988, 18, N 10

CCCN⁺

OM 29777

1987

№ 19 Б1273. Вращательный анализ системы $B^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ в спектре лазерного возбуждения катиона хлорцианида. Rotational analysis of the $B^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ laser excitation spectrum of chlorocyanide cation. Celli F. G., Rösslein M., Hanratty M. A., Maier J. P. «Mol. Phys.», 1987, 62, № 6, 1435—1447 (англ.)

С высоким разрешением измерена и проанализирована вращат. структура полос 0_0^0 , 1_0^1 и 1_0^2 (вал. кол. C—Cl) перехода $B^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ в спектре лазерного возбуждения катионов $^{35}\text{CClN}^+$ и $^{37}\text{CClN}^+$. Ионы получались при пеннинговской ионизации нейтральных молекул метастабильными атомами гелия. Начала полос (в см^{-1}): $^{35}\text{CClN}^+ - 22515,540$ (0_0^0), $23047,435$ (1_0^1), $23572,730$ (1_0^2) $^{37}\text{CClN}^+ - 23043,077$ (1_0^1), $23566,198$ (1_0^2). Значения эфф. вращат. постоянных B_v (в см^{-1}): $^{35}\text{CClN}^+ - B_0'' = 0,20443$, $B_0' = 0,17660$, $B_1' = 0,17523$; $^{37}\text{CClN}^+ - B_0'' = 0,20041$, $B_2' = 0,17147$. Во вращат. структуре полос отмечены многочисленные возмущения, анализ к-рых не проводился. В. М. Ковба

М.А.

X. 1988, 19, N 19

CCN⁺

om. 29777

1987

108: 140063w Rotational analysis of the $B^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ laser excitation spectrum of chlorocyanide cation. Celli, P. G.; Roccaforte, M.; Hennrich, M. A.; Maier, J. P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Mol. Phys.* 1987, 42(6), 1435-47 (Eng). High-resoln. laser excitation spectra of the $B^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2}$ 1st ($v = 0-2$) bands of CCN^+ were recorded and rotationally analyzed. The rotational const. for both $^{13}CCN^+$ and $^{14}CCN^+$ in the $v'' = 0$ level of the ground electronic state and some levels in the excited B state were detd. Rotational perturbations were obsd. in many of these bands.

лазерной
спектр,
и.п.

C.A. 1988, 108, N 16

CCN⁺

DM · 26578


1987

19 Б1238. Некоторые подходы к спектроскопическим исследованиям многоатомных катионов. Some approaches to spectroscopic characterization of polyatomic cations. Maier John P. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1987, Pt 2, 83, № 1, 49—59 (англ.)

Краткий обзор результатов исследований колебательно-вращат. структуры электронных спектров многоатомных молекулярных ионов. Рассмотрены основы методов возбуждения флуоресценции электронным ударом и лазерным излучением, в т. ч. в сверхзвуковой молек. струе и в матричной изоляции. Обсуждаются результаты анализа колебательно-вращат. структуры электронных спектров ионов триацетилена, XCN⁺ (X = Cl, Br, J), CH₃-C≡C-X⁺, X-C≡C-H⁺ и ряда др. ионов. Библи. 57. Е. В. Алиева

колебат.
вращат.
структура
электрон. спектров
(обзор)

X · 1987, 19, N 19

(+2) 



BrCN⁺, ICN⁺

CINC

OM 29224

1988

9 Д123. Неэмпирическое исследование связи N—Cl. An. ab initio study of the N—Cl bond. Destro Riccardo, Merati Felicita, Ortoleva Emanuele. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 145, № 3, 193—199 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ, 3-21ГФ и 6-31ГФ* исследовано электронное строение молекул со связью N—Cl: CINC, CINO, CINO₂, CINCO, CINNN, Cl₃N, Cl₂NH, CINH₂, CINCH₂ и CINCH(NH₂). Приведены равновесная геометрия, распределения электронной плотности. Обнаружена линейная корреляция заряда суммарной атомной заселенности атома Cl с длиной связи N—Cl. Рассчитанные энергии гидрирования $RNCl + H_2 \rightarrow RNH + HCl$ обнаруживают корреляцию с величиной угла R—N—Cl и суммарной атомной заселенностью атома Cl. Наилучшие результаты получены в базисе 6-31ГФ* но базис 3-21ГФ также является приемлемым. Отмечено, что связь N—Cl стабилизируется при наличии донорных групп у атома N.

В. Л. Лебедев

М.П.

(19)

ср. 1988, 18, 29

СНС

01129204

1988

20 Б1031. Неэмпирическое исследование связи N—Cl. An ab initio study of the N—Cl bond. Destro R., Merati F., Ortoleva E. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 145, № 3, 193—199 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока в базисах ОСТ-3 ГФ, 3—21 ГФ и 6—31* ГФ выполнена оптимизация геометрии 10 молекул, включающих группу N—Cl: CINC, CINO, CINO₂, CINCO, CINNN, Cl₃N, Cl₂NH, ClNH₂, ClNCH₂ и ClNCH(NH₂). Оценены энергии р-ции гидрирования R—N—Cl + H₂ → R—N—H + HCl и найдена их корреляция с валентным углом R—N—Cl и заселенностью по Малликену атомов Cl. Наилучшие результаты получены в базисе 6—31* ГФ. Для рассмотрения молекул прочность связи N—Cl, увеличивающаяся при увеличении длины этой связи, растет по мере уменьшения валентного угла R—N—Cl. Для самых коротких связей N—Cl не обнаружено сколько-нибудь заметного двоевязного характера. Расчеты в базисе ОСТ-3 ГФ приводят к результатам, плохо согласующимся с получаемыми в др. базисах и с эксперим. данными.

Ю. Н. Панченко

М.П.

Х. 1988, 19, N 20

CINC

Om-29 224

1988

109: 99133z An ab initio study of the nitrogen-chlorine bond. Destro, Riccardo; Merati, Felicita; Ortoleva, Emanuele (Dip. Chim. Fis. Electrochim., 20133 Milan, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 145(3), 193-9 (Eng). Closed-shell SCF MO calcns. and geometry optimization were performed with the STO-3G, 3-21G and 6-31G* basis sets for ten mols. contg. the -N-Cl group: CINC, ClNO, ClNO₂, CINCO, CINNN, Cl₃N, Cl₂NH, ClNH₂, ClNCH₂ and ClNCH(NH₂). The hydrogenation energies were evaluated and qual. correlated with the R-N-Cl bond angle and the Cl gross at. population. For the mols. considered here, the N-Cl bond is rather weak and its stability-larger for longer than for shorter N-Cl distances-increases as the R-N-Cl angle narrows. There appears to be no significant double-bond character for the shortest N-Cl bonds.

(meop-
pazem)

(+9)



C. A. 1988, 109, N 12.

CCCN⁺

1988

Maier J. P.

Phil. Trans. Roy. Soc.

ser. A, London, 1988, A324,

N1578, 209-221.

(see MCP⁺; III)

CCN

1988

Martin Peter S.,
Yates Keith et al.

J. Mol. Struct. Theochem.
M. N. 1988, 181, N 3/4. C. 267-
-283.

(C_{int} \bullet FCN; III)

^{37}Cl ^{12}C ^{14}N

1988

^{35}Cl ^{13}C ^{14}N

Watson James K. G.

J. Mol. Spectrosc. 1988.

et. al.

132, N2. C. 477-482.

(cell. CO_2 ; III)

1989

СССН

8 Б4549. Фотодиссоциация CICN излучением с длинами волн между 190 и 213 нм. Photodissociation of CICN between 190 and 213 nm / Barts S. A., Halpern J. B. // J. Phys. Chem.— 1989.— 93, № 21.— С. 7346—7351.— Англ. Место хранения. ГПНТБ СССР

Методом лазеро-индуцированной Фл измерены вращат. распределения свободных радикалов CN, получающихся при фотодиссоциации (ФД) CICN при давл. ~0,2 Торр под действием импульсов излучения лазера на красителе с удвоением частоты, перестраиваемого по длинам волн в диапазоне от 190 до 213 нм. При длинах волн короче 206 нм измеренные распределения могут быть вычислены на основе приложения принципа вращат. отражения к вычисленной неэмпирич. методом потенциальной Пв процесса ФД. Выше указанного предела ФД происходит из второго электронно-возбужденного состояния CICN с потенциальной Пв, расположенной приблизительно параллельно Пв первого возбужденного состояния. Библ. 30. В. Е. Скурат

фотодиссоциация

X.1990, N8

CCN⁺

1989

9 Б1244. Геометрическая структура катиона хлорцианида. Geometric structure of chlorocyanide cation / Rösslein M., Maier J. P. // J. Phys. Chem.— 1989.— 93, № 21.— С. 7342—7346.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

Методом возбужденной лазерным излучением Фл с использованием эксимерного лазера с шириной полосы $0,04 \text{ см}^{-1}$ измерена в обл. частот $22\,460\text{—}22\,520 \text{ см}^{-1}$ вращат. структура электронного перехода $B^2\Pi_{3/2} \leftarrow X^2\Pi_{3/2} 0_0^0$ четырех изотопич. образцов катиона хлорцианида, $^{35}\text{Cl}^{13}\text{CN}^+$ (I), $^{37}\text{Cl}^{13}\text{CN}^+$ (II), $^{35}\text{ClC}^{15}\text{N}^+$ (III) и $^{37}\text{ClC}^{15}\text{N}^+$ (IV). Образцы катиона генерировались в разряде Пеннинга в присутствии метастабильного гелия. Из анализа вращат. структуры определены для I, II, III и IV, соотв., центры полос $\nu_0 = 22516,273(4)$, $22518,404(3)$, $22514,104(3)$ и $22516,120(3) \text{ см}^{-1}$, вращат. постоянные в возбужденном $B^2\Pi$ электронном со-

л. л.

X. 1990, № 9

стоянии $B_0' = 0,174990(56)$, $0,171281(44)$, $0,169441(40)$
и $0,165973(54)$ см^{-1} и в основном $X^2\Pi$ электронном со-
стоянии $B_0'' = 0,203729(54)$, $0,199592(45)$, $0,196876(42)$
и $0,192851(56)$ см^{-1} . С учетом данных для $^{35}\text{ClCN}^+$ и
 $^{37}\text{ClCN}^+$ определена замещенная структура катиона в
 $X^2\Pi$ состоянии $r(\text{C}-\text{Cl}) = 1,559(12)$ А, $r(\text{C}-\text{N}) =$
 $= 1,215(12)$ А, $r(\text{Cl}-\text{N}) = 2,774(12)$ А. С. Н. Мурзин

ClCN

1989

113: 46581v^{*} MCSCF study on the potential surfaces of excited states in chlorine cyanide (ClCN) photodissociation. Zheng, Shijun; Yabushita, S.; Morokuma, K. (Hebei Teach. Coll., Peop. Rep. China). *Huaxue Wuli Xuebao* 1989, 2(5), 359-66 (Ch).
- By means of MCSCF(MC9/12) method, with the polarization basis set of double zeta (DZP), the potential curves and surfaces of ground state and excited states of linear mol. ClCN and those of the excited states $^1A'$, $^1A''$ of bent mol. were calcd. The lowest singlet excited state does not cross other upper ones in photodissocn. The most possible channel in ClCN photodissocn. is through the excited state $^1\Pi_{(1)}-^1A''_{(0)}$.

расчет по
методу кри-
вых волновых
функций
состояний

С.А. 1990, 113, № 6

CCN

[Dm. 35352]

1991.

Felps W.S., Reepnik K.,
et al.,

микрон.
спектр
компл.
анализ
энергет.
переходов,
компл. расщепл.

J. Phys. Chem., 1991,

95, 639 - 656

Electronic spectroscopy of the

Cyanogen Halides.