

C - N - Gal

Всего 110 разделителей (1/VII-68)

R.B.

8454

1931

Mooney and Reid H. G.

1. Nature 128, 271 (1931)

2 [CN Cl; CN Br; CN Y; (CN)₂]

Circ. 500

10.11

Cl CN

Br CN

I CN

(2)

BP-5117-15 | 1947.

Goldfinger P.,

Bull. Soc. Chim. Belg,

1947, 58, 282-90.

JCN;
BrCN

KCN
H.B. Cury

W. Gordy

1952

Ann. N.Y. Acad. Sci. 55, 774

Amphibian-like compounds
behave like Me.

10000-150000 Me.

JCN, BrCN, KCN

1962

 CH_3NH_3 X

X-галогенид

и.к

11 Б94. Инфракрасные спектры твердых метиламмонийгалогенидов. Cabana A., Sandorev C. The infrared spectra of solid methylammonium halides. «Spectrochim. acta», 1962, 18, № 6, 843—861 (англ.)

Исследованы ИК-спектры кристаллич. пленок $\text{CH}_3\text{NH}_3 \cdot \text{Hal}$ (I) (полученных сублимацией в вакууме при 80—150° на пластинках NaCl, KBr, AgCl или BaF₂) при т-рах от —190 до 22°, а в ряде случаев до 200°. При ~20° спектры I свидетельствуют о наличии оси симметрии 3-го порядка группы N—CH₃ йона метиламмония вокруг оси C—N. При низких т-рах наблюдается расщепление полос, что объясняется снятием вырождения вследствие понижения симметрии, а также межмол. взаимодействием в элементарной ячейке.

М. Дейчмейстер

X. 1966. II

1963

M.B.
Cueyph
moaeny
C₂CN₃
C₂CNBr
h sp.

Microwave spectroscopic studies of molecules. J. Sheridan (Univ. Birmingham, Engl.). U.S. Dept. Com., Office Tech. Serv., AD 417,348, 9 pp.(1963). Approx. 180 absorption lines were measured for acetylacetylene, 50 of which were assigned to give accurate rotational consts. A preliminary analysis was made of the splittings due to internal rotation of the Me group. Work was begun on deuterated species of this substance. Preliminary values of the *a*- and *b*-components of the dipole moment were obtained. About 100 lines were measured for trifluoroethylene, and work on a tentative assignment was begun. Preliminary work on the linear mols. iodocyanoacetylene and bromocyanoacetylene was also initiated in the period covered. From U.S. Govt. Res. Rept. 39(2), 7(1964). TCVD

C.A. 1964. 61. 11

12812 d

X. CH₂.CN

1964

(X = F, Cl, Br, I)

ν_i

Molecular parameters and bond structure. I. Vibrational frequencies and electronegativities. R. G. Jones and W. J. Orville-Thomas (Univ. Coll. Wales, Aberystwyth). *Spectrochim. Acta* 20(3), 291-4(1964)(in English). Relations are found for the methylene deformation frequencies in CH₂XY mols. and the electronegativity product $\chi(X)\chi(Y)$. These correlations are used (i) to predict "group" electronegativities for CN, OMe, SMe, COCl, COBr, and CONH₂; and (ii) to predict CH₂ frequencies in X:CH₂.CN (X = F, Cl, Br, I) mols. RCSQ

C.A. 1964. 60. 8

8774h

CN-Hal

BD - M1866 - IV | 1966

Hal = Cl, Br, I

King G. W.,
Richardson A. W.

(mat. no. 6)

J. Mol. Spectrosc., 1966,

21 (4), 339-52.

ICN, Br CN,

CCCN

(связ. параметры)

BO-M1865-IV | 1966

King G. W.,

Richardson A. W.

J. Mol. Spectrosc., 1966,

21, № 4, 353-61

C(NO)_n-Hal

(Красн, До)

Назин Т.М., Манелме Т.Б,
Фудовицкий Ф.И.

"Докинды А.Н.ССР."

Физическая химия:

1964, том 177, №6.

1964

726

N-C-Hal Чаркин О.Н., 1968
Дейкина М.Б.

Ж. Структ. Химии, 1968,
9, ~ 4, 675.

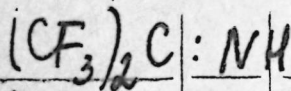
Рассматриваются следующие
молекулярные ионы пента

$MX'X^+$; $MXX''X^+$; MYX^+ ; $MX'X''X'''X^+$, ...
 $MY'X^+$; $MY'Y^+$, где

$X = F, Cl, Br, I, CH_3$ ●

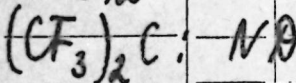
$Y = O, S, Se, ...$

(см. В-Нал) II



C-N-Hal

1970



103782t Vibrational spectrum of $(CF_3)_2C:NH$. Blick, Kenneth E.; Niedenzu, Kurt (Dep. of Chem., Univ. of Kentucky, Lexington, Ky.). *U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform.*, AD 1970, No. 703895, 19 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rep.* 1970, 70(11), 69. The vibrational spectra of $(CF_3)_2C:NH$ and $(CF_3)_2C:ND$ were recorded in the liq. and gaseous phases. Exptl. data can be discussed on the basis of C_{2v} symmetry which permits unequivocal assignment of all fundamentals.

TCVL

C.A. 1970 43. 20

C-N-Hal

1970

$C_2Cl_2(CN)_2$

$C_2Br_2(CN)_2$

$C_2I_2(CN)_2$

chemp,

M.N.

103726c). Vibrational spectra of dichloro-, dibromo-, and diiodofumaronitrile. Lie, S. B.; Klaeboe, Peter; Christensen, Daniel H.; Hagen, Georg (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Spectrochim. Acta, Part A* 1970, 26(9), 1861-76 (Eng). The ir spectra of dichloro, dibromo and diiodofumaronitrile were recorded at 4000-50 cm^{-1} . Raman spectra of the solids were obtained and semiquant. polarization data calcd. from spectra recorded of satd. solns. The fundamental frequencies have been assigned and the spectra interpreted on the basis of C_{2v} symmetry. A force const. calcn. has been carried out and a force field derived for each mol. which exactly reproduces the obsd. frequencies. Thermodynamic functions and the root mean square amplitudes of vibration for these mols. have been obtained. RCSQ

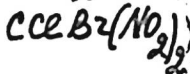
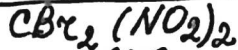
(+1) I

C.N. 1970. 73. 20



C-N-Hal

1971



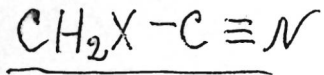
2c.

12 Д370. Колебательные спектры галогенопроизводных динитрометана. Diallo Alpha O. Spectres de vibration des dérivés halogénés du dinitrométhane. «C. r. Acad. sci.», 1971, С272, № 22, 1777—1779 (франц.)

Исследованы ИК-спектры газообразных $\text{CBr}_2(\text{NO}_2)_2$ (I) и $\text{CClBr}(\text{NO}_2)_2$ (II). Проведен сравнительный анализ спектров I, II и $\text{CCl}_2(\text{NO}_2)_2$ (III). При переходе от III к I частоты антисимметрического вал. кол. $\nu_{as}(\text{NO}_2)_2$ и $\nu_{as}(\text{CN}_2)$ повышаются, в то время как симметрич. частоты $\nu_s(\text{NO}_2)_2$ и $\nu_s(\text{CN}_2)$ понижаются. Приведены спектры и таблицы частот.

Э. В. Б.

Ф. 1971.120

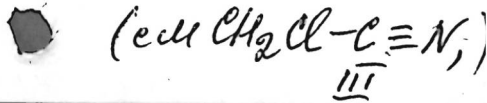


X = F, Cl, Br, I. Crowder G.A.

1972

(M.H., Vi)

"Mol. Phys.", 1972, 23,
N 4, 707-715.



C-H-N-кар.

1972



T_m

ΔH_m

13 Б739. Изучение теплот переходов некоторых дибензазепинов, карбазолов и фенотиазинов [методом] дифференциальной сканирующей калориметрии. Gipsstein Edward, Barrall Edward M., II, Bredfeldt Karin, Need Omar U. Differential scanning calorimetric study of the transition heats of some dibenzazepines, carbazoles and phenothiazines. «Thermochim. acta», 1972, 3, № 4, 253—258 (англ.)

Измерены т. пл. и энтальпии плавления (ΔH) 5-хлор-ацетил-5-Н-дибенз(*b, f*)азепина (I), 5-деканонил-5-Н-дибенз(*b, f*)-азепина (II), N-(β -хлорпропионил)-карбазола (III), N-ацетилкарбазола (IV), N-формилкарбазола (V), N-формилфенотиазина (VI), N-ацетилфенотиазина (VII) и N-(β -хлорпропионил)-фенотиазина (VIII). Далее приведены: соединение, т. пл. ($^{\circ}C$), ΔH (кал/моль), чистота

X. 1972. 13

образца (мол. %): I; 143,2; 5847; 99,24; II; 3,30; 1001;
>99,99; III; 122,2; 5332; 99,80; IV; 77,2; 3333: —; V; 98,4;
3854; 99,37; VI; 144,5; 5895; 99,58; VII; 202,6; 8778; —;
VIII; 140,5; 6964; 98,29. Полученные результаты сопо-
ставлены с данными для дибензазенина и формил-, аце-
тил-, пропионил-, изобутирил-, хлорпропионил-, хлорбу-
тирил-, бромацетил-, бромизобутирил-, трифторацетил-,
акрилил- и метакрилилдибензазепина. Сопоставлено по-
ведение алкильной цепи в ацилзамещ. дибензазепинах,
карбазолах и фенотиазинах с др. алкилзамещ. циклич.
системами.

И. Васильев

60112.7505

Ch, Ph, TC, MGU

29422 $(C_2H_5)_4NCl$

1975

$(C_2H_5)_4NBr$; $(C_2H_5)_4NI$ #3-10871

К р. N 60112.7504

(vi)

Hamann S. D. Infrared spectra and phase transitions of solids under pressure. 2. "High Temp.-High Pressures", 1975, 7, N 2, 177-186

(англ.)

0527. пкк

511 513

5 1 5

ВИНИТИ

$(CH_3)_2NF_2$; CH_3NCl_2 , CH_3NI_2

60401.3609

Ch, Ph, Ex-C,

TC, MGU

54970 CH_3NBz_2

CH_3NF_2

1976

3996

Elbel Susanne, Dieck Heindirk tom.

Photoelektronenspektren von Verbindungen
der V. Hauptgruppe. III. Methylhalogen-
verbindungen $MeEHal_2$ und Me_2EHal . "Z.
Naturforsch.", 1976, 31b, N 2, 178-189

(нем., рез. англ.)

0584 ББК

568 569

5 76

ВИНИТИ

606II.9695

X

МС(NO₂)₃ (ггач.с7)
00778

M = H, Cl, Br

XIV - 4403
— 1976

Электроннографическое исследование
строения молекул HC(NO₂)₃, ClC(NO₂)₃ и
BrC(NO₂)₃ в газовой фазе. Садова Н.И.,
Попик Н.И., Вилков Л.В.

"Ж. структур. химии", 1976, 17, № 2,
298-303

0635 лик

10

6II 6I5 0627

реф ВИНТИ

CF_3NO

CCl_3NO

CCl_3NO_2

τ ;

(summary 7145)

1978

Allston T. D. et al

Chem. Phys. Lett., 1978, 60,
n₁ 97-101.

(see CF_3NO ; III)

1978

 $(\text{CH}_3)_2\text{CClNO}$ $(\text{CH}_3)_2\text{CBrNO}$ $(\text{CH}_3)_2\text{CNO}_2$ $(\text{CH}_3)_2\text{CCNNO}$ расчет энергии
разрыва связей.

6 Б128. Изучение потенциалов появления в некото-
рых геминальных замещенных С-нитрозосоединений.
Day John S., Gowenlock Brian G., Johnson
Christopher A. F., McNally Ian D., Pfab
Josef. Appearance potential studies of some geminal
substituted C-Nitrosocompounds. «J. Chem. Soc. Perkin
Trans.», 1978, Part 11, № 10, 1110—1112 (англ.)

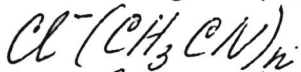
Измерены потенциалы появления основных ионов в
масс-спектрах $\text{Me}_2\text{CR}(\text{NO})$ ($\text{R}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{NO}_2, \text{CN}, \text{Ac},$
 $\text{OAc}, \text{CH}_2\text{Ac}$ и COOMe) и определены энергии разрыва
связей $\text{C}-\text{N}$ в молек. ионах.

Д. В. Загоревский


 2. 1979, № 6



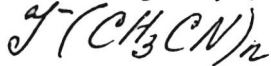
1980



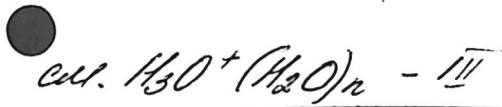
Бекмуфратова З.М.
и др.



Ж. физ. химии, 1980,
54, N1, 52-5



физ. химии
гидролиза



1980

10 B216. Инфракрасные спектры некоторых пергалонитрозометанов в газовой фазе. Ernsting N. P., Pfab J. The gas phase i. r. spectra of some perhalo-

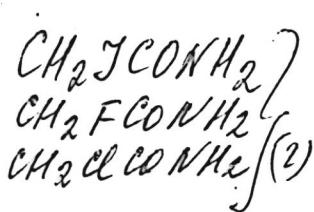
nitrosomethanes. «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 1, 75—84 (англ.)

В области частот 3300—200 см^{-1} с разрешением 0,6 см^{-1} в ВЧ и средн. областях и 2,5 см^{-1} в низко-частотной области спектра измерены ИК-спектры поглощения пергалонитрозометанов, CClF_2NO (I), CCl_2FNO (II), CCl_3NO (III), CBrCl_2NO (IV), CBr_2ClNO (V) и CBr_3NO (VI), в газ. фазе. Из сравнения ИК-спектров III, IV, V и VI установлено, что спектр V намного более сложный, чем для др. образцов, что объясняют существованием двух стабильных изомеров у V. Два конформера V отличаются цис- и транс-положениями замещенной метильной группы по отношению к атомам хлора и кислорода. Для этих соединений спектральная область между 1000 и 500 см^{-1} , по-видимому, содержит большинство фундаментальных колебаний. В спектрах I и II наблюдается сильное влияние внутреннего вращения.

С. Н. Мурзин

 CClF_2NO CCl_2FNO CCl_3NO CBrCl_2NO CBr_2ClNO CBr_3NO и.к. спектр
I

2-1080. No



молекул.
супра.

Commu 9374

1980

Sandal S; Seip R.

J. Mol. Struct., 1980,
62, 131-141.

HCN...HX

1983

X = F, Cl Buckingham A.D.,
Fowler P.W.

J. Chem. Phys. 1983,
79 (12), 6426-8.

re, δ ,
meop.
pacrim.

(see $\bullet$ H₂CO...HX; III)

Галогенцианиды

1984

8 Д66. Оценка анигармонического силового поля для галогенцианидов. An assessment of the anharmonic force fields of the halogen cyanides. Lacy M. «Spectrochim. acta», 1984, A40, № 2, 141—146 (англ.)

С помощью развитого ранее («Mol. Phys.»), 1981, 43, 47) метода сравнительного анализа различных силовых полей, основанного на расчете средних абсолютных процентных разностей, изучены силовые поля, найденные различными авторами для галогенцианидов. Найдено, что известные силовые поля воспроизводят истинную потенциалную поверхность с точностью 2—5%. Е. А. Ж.

См. лссм.

ср. 1984, 18, № 8

XCN

1984

X-галоген

17 Б1198. Оценка ангармонических силовых полей для галогенцианидов. An assessment of the anharmonic force fields of the halogen cyanides. Lacy M. «Spectrochim. acta», 1984, A40, № 2, 141—146 (англ.)

Исследованы различные ангармонич. силовые поля, предложенные для галогенцианидов. Сравнительная оценка силовых полей выполнена с помощью вычисл. средн. абс. процентных разностей (см. «Molec. Phys.», 1981, 43, 47). Отмечено, что согласно этой оценке различные силовые поля могут отличаться от истинного молек. потенциала не более чем на 2—5%. Лучшие результаты получены для C1CN. Предложено новое ангармонич. силовое поле, построенное на основе модельных Пт Морзе в криволинейных координатах.

Б. И. Жилинский

X. 1984, 19, N 17

XCN

1984

$X = F, Cl, Br,$
 y

100: 218034u An assessment of the anharmonic force fields of the halogen cyanides. Lacy, M. (Dep. Phys. Chem., Univ. Newcastle-upon-Tyne, Newcastle-upon-Tyne, UK NE1 7RU). *Spectrochim. Acta, Part A* 1984, 40A(2), 141-6 (Eng). Anharmonic force fields in the ρ representation for XCN ($X = F, Cl, Br, I$) were calcd. using the matrix diagonalization technique. A simple model force field and comparison method were used to assess the force fields currently available for these mols. From this anal., the potential surfaces defined by the present force fields were estd. to be within 2-5% of the actual mol. potential.

(calc. no cm.)

C.A. 1984, 100, N 26

HCN... H(D)F [Oct. 19962] 1984

Legon A.C., Willoughby
L.C.,

спектр.
построен.

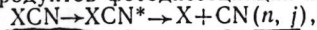
Chem. Phys. Lett., 1984,
109, N5, 502-508.



где $X = Cl, Br, I$

4 Д264. Классический модельный анализ диссоциации трехатомных молекул, сопровождающей фотовозбуждение из линейной конфигурации в изогнутую. Classical model studies of dissociation following linear to bent triatomic photoexcitation. Waite B. A., Helvajian H., Dunlap B. I., Baronavski A. P. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 111, № 6, 544—548 (англ.)

Изучается распределение по вращательным уровням продуктов фотодиссоциации в процессе



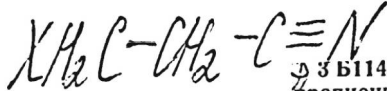
где $X = Cl, Br$ или I . В частности, рассмотрена зависимость этих распределений от вида потенц. поверхности для возбужденного состояния. Расчет проводился в два этапа: а) классический франк — кондоновский переход в возбужденное состояние и б) эволюция по этой потенц. поверхности возбужденного состояния. Для этой потенц. поверхности использовались две параметризации, отличающиеся величиной потенц. барьера у

Ф. 1985, 18, № 4.

изгибной моды. Для описания вращения принималась модель плоских конфигураций, а начальные условия выбирались стандартной процедурой Монте-Карло. Эксперимент проводился в импульсном сверхзвуковом молекулярном пучке, который возбуждался с помощью перестраиваемого лазера. Полученные в эксперименте для CICN распределения по вращательным уровням CN хорошо согласуются с рассчитанными и отличаются только небольшим сдвигом главного максимума в сторону малых j . Основные выводы проведенного сравнения таковы: а) вращательные заселенности продуктов слабо зависят от начальной вращательной t -ры в пучке и б) даже при малой начальной вращательной t -ре конечная вращательная t -ра продуктов значительна.

А. В. Богданов





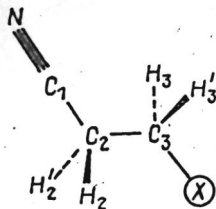
1988

ЭЗ Б1142. Конформация и строение молекул 3-хлорпропионитрила и 3-бромпропионитрила по данным газовой электронографии и молекулярной механики. Conformation and molecular structure of 3-chloropropionitrile and 3-bromopropionitrile as determined by gas-phase electron diffraction and molecular mechanics calculations / Stavnebrekk P. J., Stolevik R., Seip R., Vol-den H. V., Gundersen S. // Acta chem. scand. A.— 1988.— 42, № 6—7.— С. 398—408.— Англ.

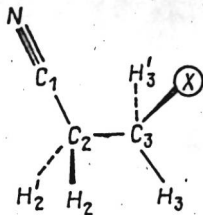
структура

Методом газовой электронографии исследована смесь анти- и гош-конформеров $\text{XH}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{N}$ с $\text{X}=\text{Cl}$ (I) и Br (II). Первая форма является преобладающей и составляет $64 \pm 24\%$ в I и в $63 \pm 17\%$ в II. Найдены след. значения геометрич. параметров (расстояния r_a , углы r_α), усредненных по обоим конформерам, для I и II, соотв.: C—H 1,097(17) и 1,119(31), C≡N 1,160(4) и 1,151(11), C₁—C₂ 1,515(16) и 1,512(27), C₂—C₃ 1,478(11) и 1,489(22), C—X 1,784(5) и 1,942(8) Å, вал. углы CCC 110,6(1,0) и 111,8(1,3), CCX 110,8(0,8) и 111,7(1,3)°, торсионный угол гош-конформера, отсчиты-

X. 1989, №3



анти



гаш

ваемый от син-формы, 71(11) и 65(8)°. На основании полученных структурных данных найдены новые значения параметров, описывающих невал. взаимодействия для пар $H...N\equiv$, $Cl...C\equiv$, $Br...C\equiv$, $Cl...N\equiv$ и $Br...N\equiv$ в рамках представления их взаимодействия с помощью Пт Морзе.

В. С. Мاستрюков

C-N-hal-Hcy. (Dm. 32 952)

1989

Stavnebrekk P. J.,
Stølevik R.,

суд. пост.,
структура

J. Mol. Struct., 1989,
213, 279-292.

C-N-hal. [Om. 32952] 1989

C-N-hal.-H.

Stavnebrekk P. Z.,
Stølevik R.,

суд. пост.,
структура

J. Mol. Struct.,
1989, 213, 279-292.

CX_3NO

1990

$X = F, Cl$

113: 178672k An ab initio study on the molecular structures and stabilities of CX_3NO ($X = F, Cl$). Yu, Qingsen; Cai, Guoqiang; Dong, Nan; Wu, Nianci (Chem. Dep., Zhejiang Univ., Hangzhou, Peop. Rep. China). *Wuli Huaxue Xuebao* 1990, 6(4), 399-402 (Ch). The structure in which Cl is on same side with O is more stable than the geometry in which F is in same side with O. The stabilities of the mols. decrease from 1 to 4. The results are in agreement with exptl. data.

структура,
до, кв. мех-
анизм

C.A. 1990, 113, N 20

XCN^+

1993

$\text{X} = \text{Cl, Br, I}$

смакнута,
уел. 10 см,
Pi

118: 156926x Determination of geometries and molecular properties of halocyanide cations, HCN^+ ions (where X is Cl, Br, I) through Franck-Condon analyses on the corresponding photoelectron spectra. Chau, F. T.; McDowell, C. A.; Tang, Y. W. (Dep. Appl. Biol. Chem., Technol. Hong Kong Polytech., Hung Hom, Hong Kong). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1993, 61(2), 217-29 (Eng). | Vibrational intensity calcns. were carried out on photoelectron spectra of ClCN , BrCN , and ICN to deduce ion geometries of ClCN and BrCN in the $\text{X}^2\Sigma^+$, $\text{A}^2\Sigma^+$, and $\text{B}^2\Sigma^+$ states and ICN in the $\text{X}^2\Sigma^+$ states. Results obtained are compared with the exptl. values and with those obtained by other workers. Force consts. are also obtained for these ions through normal coordinate analyses on the obsd. ionic frequencies. The calcd. data provide information on changes in structural and bonding properties of the XCN mols. upon ionization.

C.A. 1993, 118, N16