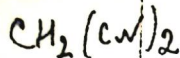


$C_3N_2H_2$





1960

1В51. О молекулярной структуре малонитрила. Hirota Eizi, Morino Yonezo. On the molecular structure of malononitrile, «Bull. Chem. Soc. Japan», 1960, 33, № 5, 705 (англ.).—Методами микроволн. спектроскопии исследована структура молекулы малонитрила, причем, помимо $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, использованы следующие изотопозамещенные: $\text{CHD}(\text{CN})_2$, $\text{CD}_2(\text{CN})_2$, $\text{CH}_2\text{CNC}^{15}\text{N}$. Найдены величины всех межатомных расстояний и углов связей. Оказалось, что геометрия группы $\text{C}-\text{C}-\text{N}$ слегка отличается от прямолинейной: $\angle \text{CCN} = 180^\circ - (3^\circ 40' \pm 2^\circ 54')$. Приведены значения экспериментально полученных и вычисленных моментов инерции. Расхождение между ними в четвертых — пятых знаках.

С. Ветчинкин

3 жид.

Ф-1961-1

1960



Синтез

ЗБ153. О структуре молекулы нитрила малоновой кислоты. Hirota Eizi, Morino Yonezo. On the molecular structure of malononitrile. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1960, 33, № 5, 705 (англ.).—С помощью метода наименьших квадратов произведен перерасчет структуры молекулы $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, определенной из микро-волнового спектра (РЖХим, 1960, № 20, 79998). Рассчитаны межатомные расстояния (в Å): $\text{C}-\text{C}$ $1,468 \pm 0,034$, $\text{C}\equiv\text{N}$ $1,167 \pm 0,026$, $\text{C}-\text{H}$ $1,088 \pm 0,010$ и углы CCC $109^\circ 22' \pm 2^\circ 54'$, HCH $108^\circ 42' \pm 1^\circ 22'$, CCN $180^\circ - (3^\circ 40' \pm 2^\circ 54')$. Поправки обусловлены в основном эффектом нулевых колебаний, который не учитывался в предыдущей работе (см. ссылку выше).

Г. Шипуло

20.1961.3

7985 - IV - B9P
CH₂(CN)₂, CD₂(CN)₂ (Di, Evans, nov. 1961)

Hirota E.

J. Molec. Spectrosc., 1961, 7, N 4,
242-260 (anal.)

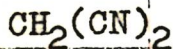
Microwave spectrum in the excited
...

C₃N₂H₂

PX., 1962, 16B104

Ю

ЕСТЬ ОПРИГН.



1963

Ames L.L., White D., Mann D.E.

J. Chem. Phys., 38, 910

ИК спектры поглощения субокиси углерода и малононитрила в матрицах твердого аргона.

i. (CH₂(CN)₂)

7736 - IV - BP

1963

Forel M.T., La faix A., Saumagne P.,
Josien M.-L.

J.chim.phys.et phys.-chim.biol.,
1963, 60, N 7-8, 875-883 ()

Etude par spectroscopie infrarouge...

P ., 1964, 3D201

J



1963

Infrared spectroscopic study of the vibrations of the CH bond of the dihalogenomethanes in the gaseous and in the condensed state. Marie Therese Forel, Anne Lafaix, Pierre Saumagne, and Marie Louise Josien (Fac. Sci., Paris). *J. Chim. Phys.* 60(7-8), 875-883(1963). The infrared spectra of $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, $\text{CH}_2\text{Cl}(\text{CN})$, CH_2F_2 , CH_2Cl_2 , CH_2BrCl , CH_2Br_2 , CH_2I_2 , and CD_2Cl_2 were detd. in the gaseous and (or) liquid state, and in soln. in CCl_4 , CS_2 , C_6H_6 , C_6H_{12} , and (or) MeNO_2 . A comparison of the results with those obtained with similar Ge and Si compds. showed that, in the gaseous state, the electronegativity of the substituents increases the ν_{SiH} and ν_{GeH} frequencies, but decreases the ν_{CH} frequency. This is explained by the relative electronegativities of the atoms: $\text{F} > \text{Cl} > \text{Br} > \text{I} > \text{C} > \text{H} > \text{Si} > \text{Ge}$. The intensities of the vibrations of the CH bond of the monohalogeno- and dihalogenomethanes were compared; in each series of mols. the total intensity decreases with the Taft const. (CA 51, 7117c), while the intensities of the antisym. and degenerate vibrations ($\nu_{\text{a.CH}_2}$ and $\nu_{\text{d.CH}_2}$) increase. The intensities of the vibrations were greatly affected by the change in environment.

C. L. Deasy

CA-1963-59.

- 10 -

+7 $\text{C}_3\text{N}_2\text{H}_2$  $\text{CH}_2(\text{CN})_2$ $\text{CH}_2\text{Cl}(\text{CN})$ CH_2F_2 CH_2Cl_2 CH_2BrCl CH_2Br_2 CH_2I_2 CD_2Cl_2

Vi

10894 of

30904.3121

Ch. Ph.

$\text{CH}_2(\text{CN})_2$

Cr. H₂

96965

1973

XIV 5124

Obatake K., Tanisaki S. The crystal
structure of malononitrile. "Phys.
Lett.", 1973, A44, N 5, 341-342

(англ.)

0954

937 938 09 47

ВИНИТИ

$\text{CH}_2(\text{CN})_2$

11 Б315. Эффекты центробежного искажения в микроволновом спектре метиленицианида. Cook Robert L., Walden R. T., Jones Gordon E. Centrifugal distortion effects in the microwave spectrum of methylene cyanide. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 53, № 3, 370—378 (англ.)

1974

(м.н)

Исследован МВ-спектр метиленицианида $\text{CH}_2(\text{CN})_2$ (I) в области частот от 26,5 до 40,0 ГГц при комн. т-ре с точностью измерения частот не хуже 0,1 МГц. В приближении полужесткого волчка определены вращательные постоянные I в МГц: $A=20882,7537 \pm 0,017$; $B=2942,3003 \pm 0,0031$; $C=2616,7225 \pm 0,0031$ и постоянные центробежного искажения в МГц: $\Delta_J = (1,855455 \pm 0,014) \cdot 10^{-3}$, $\Delta_K = (8,621628 \pm 0,013) \cdot 10^{-1}$, $\Delta_{JK} = (-6,79218 \pm 0,027) \cdot 10^{-2}$, $\delta_J = (4,892607 \pm 0,016) \cdot 10^{-4}$, $\delta_K = (6,7501 \pm 0,29) \cdot 10^{-3}$. С помощью полученных величин вращательных постоянных и постоянных центробежного искажения определены постоянные τ -искажения I в МГц: $\tau_{aaaa} = -3,18438 \pm 0,0053$; $\tau_{bbbb} = -0,0113359 \pm 0,000057$; $\tau_{cccc} = -0,0035077 \pm 0,000057$; $\tau_1 = 0,24942 \pm 0,0011$; $\tau_2' = 0,021494 \pm 0,00012$.

ХУ-8120

Х1975N11

С. Н. Мурзин

$H_2C(CN)_2$

1974

8 Б73. Анализ нормальных координат малонитрилов. III. Валентное силовое поле малонитрила и его дейтерированных производных. Vcken R. J. van der, Desseyen H. O. Normal coordinate analysis of malononitriles. III. The valence force field of malononitrile and its deuterated derivatives. «J. Mol. Struct.», 1974, 23, № 3, 427—435 (англ.).

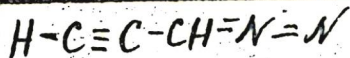
сил. пост.

Приближенным методом Бэхера—Маттеса вычислены силовые постоянные молекулы $H_2C(CN)_2$. Полученный набор постоянных воспроизводит частоты колебаний $HDC(CN)_2$ и $D_2C(CN)_2$ с точностью до 1%. Вычислено также распределение потенц. энергии колебаний по внутренним колебательным координатам и дано отнесение частот по форме колебаний. Сообщ. II см. РЖХим, 1973, 2Б73. М. Р. Алиев

жс. 1975, № 8

51127.2000

TC, MGU, Ch



31603

1975

* 4-10389

Chi F.K., Leroi G.E. The i.r. and Raman
spectra of diazopropyne.

"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 11,

1759-1771

(англ.)

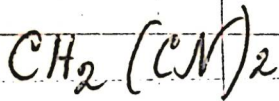
0487 604K

480 482

4 8 9

ВИНИТИ

1975

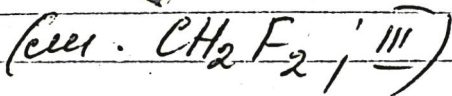


Cook R. L;

сис. нос.
нос. центр.
расм.м.

J. Mol. Struct.

1975, 26 (1), 126-8.





omnuu 6589

1978

2d. empy.

Weber J; et al.

2d. empy
nonces.

Chem. Phys. Lett.,

2d. empy.

1978, 54 (2) 230-34.

Electronic structure

of ...



$\text{CH}_2(\text{CN})_2$

1985

20 Б1285. Измерение постоянных квадрупольного взаимодействия азота-14 в пропандинитриле, $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, при помощи микроволновой спектроскопии. Nitrogen-14 quadrupole coupling constants in propanedinitrile, $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, by microwave spectroscopy. Cox A. P., Kawashima Y., Fliege E., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1985, A40, № 4, 361—367 (англ.)

На штарковском МВ спектрометре в области частот 18—30 ГГц и МВ-фурье-спектрометре в области частот 5—18 ГГц измерена СТС вращат. переходов в спектре пропандинитрила, $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, в основном колебат. состоянии. Определены постоянные ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия в МГц $\chi_{aa} = -2,368$ (28), $\chi_{bb} = 0,318$ (20), $\chi_{cc} = 2,050$ (20). В предположении цилиндрич. симметрии тензора градиента электрич. поля вдоль связи $\text{C}\equiv\text{N}$ и с использованием значений χ_{aa} , χ_{bb} , χ_{cc} соотв., вычислены величины постоянной квадрупольного взаимодействия вдоль связи $\text{C}\equiv\text{N}$ $\chi_{\text{CN}} = -4,09$ (5), $-4,04$ (25) и $-4,10$ (4) МГц. Согласно между вычисленными величинами χ_{CN} подтверждает предположение о цилиндрич. симметрии тензора градиента эл. поля около связи $\text{C}\equiv\text{N}$ в пределах точности измерений. С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1985, 19,
N 20



1985

(148 cm⁻¹mp)

102: 228608q Nitrogen-14 quadrupole coupling constants in propanedinitrile, $\text{CH}_2(\text{CN})_2$, by microwave spectroscopy. Cox, A. P.; Kawashima, Y.; Fliege, E.; Dreizler, H. (Dep. Phys. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *Z. Naturforsch., A: Phys., Phys. Chem., Kosmophys.* 1985, 40A(4), 361-7 (Eng). ¹⁴N quadrupole hyperfine structure was resolved in the microwave spectrum of $\text{CH}_2(\text{CN})_2$ (I). Measurements between 5 and 30 GHz by Fourier transform and Stark modulation spectroscopy were analyzed. The general matrix elements for nuclear quadrupole interaction in mols. contg. 2 equiv. coupling nuclei were derived. The quadrupole coupling consts. detd. for the inertial axis system of I are $\chi_{aa} = -2.368(28)$ MHz, $\chi_{bb} = 0.318(20)$ MHz, and $\chi_{cc} = 2.050(20)$ MHz. These values were used to establish that the elec. field gradient tensor at N is cylindrically sym. about the C : N bond with a value of $\chi_{\text{CN}} = -4.09(4)$ MHz, close to values found for other org. cyanides.

C.A. 1985, 102, N26

NC-C₃N₂N₂

1986

1 22 Б4355. Динамика фотодиссоциации молекулы фумаронитрила под действием УФ-излучения. UV photodissociation dynamics of the fumaronitrile molecule. Xie Xiaovian g, McCrarty Victor R., Halpern J. B., Pugh E., Jackson W. M. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 12, 2670—2676 (англ.)

Do
При фотодиссоциации (ФД) паров фумаронитрила (транс-1,2-дицианоэтилена) (I) при давл. 1—50 мТорр светом ~~193-нм~~ импульсного эксимерного лазера на AgF методом лазерно-индуцированной Фл с использованием перестраиваемого лазера на красителе изучены энергетич. состояния CN-основного продукта ФД I. Спектр поглощения I представляет собой широкую полосу с максимумом при 216-нм и сечением поглощения $(6 \pm \pm 0,6) \cdot 10^{-19}$ см² при 193 нм. При низких энергиях лазерных импульсов в процессе однофотонной ФД образуются только свободные радикалы CN(X²Σ⁺) в колебат. состояниях $v''=0$ и $v''=1$ с больцмановскими

X. 1986, 19, № 22

вращат. распределениями, к-рые соответствуют вращат. т-рам 1330 ± 10 и 1340 ± 10 К. Найденные распределения показывают, что энергия диссоциации хим. связи $\text{NC}-\text{C}_3\text{N}_2\text{H}_2$ равна $5,83$ эВ. При повышенных энергиях лазерных импульсов радикалы CN образуются в возбужденных состояниях вследствие двухфотонной ФД I при последоват. поглощении двух фотонов. При этом образуются колебательновозбужденные радикалы $\text{CN}(A^2\Pi)$ и $\text{CN}(B^2\Sigma^+)$. Последующее возбуждение $\text{CN}(A^2\Pi)$ светом 193 нм дает $\text{CN}(E^2\Sigma)$ и $\text{CN}(F^2\Delta)$.

В. Е. Скурат



$\text{H}_2\text{C}(\text{CN})_2$

(DM-25618)

1986

Dammel R., Bock H.,

J. Electron. Spectrosc.

and Relat. Phenom.,

1986, 41, N3-4; 311-

323.

применение -
спектр.
энергетик,
гидроэнергетика.



1987

Cambi R., von
Niessen W.

J. Electron Spectrosc. and
Relat. Phenom., 1987, 42,
N3, 245-253.

ll. 17.

(see CH_3CN ; III)

H₂C(CN)₂

[Om. 28656]

1987

помощник-
чекер

MacDonald C.B., Wad-
dell D.I. et al.,

J. Mol. Struct., 1987,
162, N 3-4, 341-350.



OM 33899

1990

113: 141089z Dicyanomethane: microwave spectrum, quadrupole coupling and structure. Randell, Jeremy; Cox, A. Peter; Merke, Ilona; Dreizler, Helmut (Dep. Phys. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1990, 86(11), 1981-9 (Eng). The microwave spectra of 7 isotopic species of $\text{CH}_2(\text{CN})_2$ were studied in the ground vibrational state. The zero-point av. structure is detd. to be: $r(\text{C}-\text{C}) = 1.459(2) \text{ \AA}$, $r(\text{C}:\text{N}) = 1.160(2) \text{ \AA}$ and $r(\text{C}-\text{H}) = 1.109(2) \text{ \AA}$ with $\angle\text{CCN} = 180 - 1.4(3)^\circ$, $\angle\text{CCC}/2 = 56.3(2)^\circ$ and $\angle\text{HCH}/2 = 53.5(2)^\circ$. A near-equil. structure has also been estd. using an r_m method tested by a similar calcn. for formaldehyde. Microwave Fourier-transform spectroscopy was used to investigate the main species and single-nitrogen-15 species under high resoln. For $\text{CH}_2(\text{CN})\text{C}^{15}\text{N}$ accurate ^{14}N quadrupole coupling consts. were detd. as $\chi_{aa} = -2.364(9) \text{ MHz}$, $\chi_{bb} = 0.313(6) \text{ MHz}$ and $\chi_{cc} = 2.051(5) \text{ MHz}$. These results were combined with those previously obtained for the main species to show that the quadrupole tensor is almost sym. about the $\text{C}:\text{N}$ bond direction. There is some disagreement between the consts. for the 2 isotopic mols. close to exptl. error; possibly indicating zero-point vibrational effects on the coupling tensor. The quadrupole tensor is of special interest in $\text{CH}_2(\text{CN})_2$ in view of the bent CCN moieties.

48 cramp,
2, <

C.A. 1990, 113, N 16

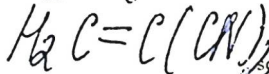
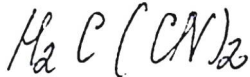
$\text{CH}_2(\text{CN})_2$ [Am. 34 939] 1990

Yield check mp,
reommp. Randell Z., Cox A.P.,
Z. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1990, 86, N11,
1981-1989.

Dicyanomethane ● re: Microwave

Spectrum, Quadrupole
Coupling and Structure.

1996



M.N.

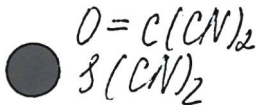
Знакомство

+ 146 знаком

ab initio (+2)
param

C.A. 1996, 124, N 18

124: 242832u Accurate structures of simple dicyanides. Demaison, J.; Wlodarczak, G.; Rueck, H.; Wiedenmann, K. H.; Rudolph, H. D. (Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne, URA CNRS 249, Bat. P5, Universite de Lille I, 59655 Villeneuve D'Ascq, Fr.). *J. Mol. Struct.* 1996, 376, 399-411 (Eng). Accurate structures have been detd. for dicyanomethane, $\text{H}_2\text{C}(\text{CN})_2$, vinyl dicyanide, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}(\text{CN})_2$, carbonyl cyanide, $\text{O}=\text{C}(\text{CN})_2$, and sulfur dicyanide, $\text{S}(\text{CN})_2$, by combining the results of electron diffraction, microwave spectroscopy, and ab initio calcns. The different methods are compared. The influence of the correlations between the rotational consts. when calcg. the r_m^o structure and the weighting scheme in the least-squares fits ($r_{s,1}$ and r_o methods) are analyzed. The possibility of obtaining the true equil. C=O distance from ab initio calcns. is also discussed.



F: NCCH₂CN

P: 3

1999

131:107072 Electronic structure and frequencies
of normal vibrations of dicyanomethane NCCH₂CN.

Panina, N. S.; Kukushkin, Yu. N. (St.-
Peterb. Gos Tekhnol. Inst. (Tekh. Univ.), St.
Petersburg, Russia). Zh. Neorg. Khim., 44(4), 630-
632 (Russian) 1999 The authors calcd. the electronic
structure of dicyanomethane mol. detg. the normal
vibrations in comparison with acetonitrile. The presenc
of 2 sym. nitrile groups increases the relative rigidity
of dicyanomethan the mutual influence of these groups on
the chem. bonds is negligible.

C.A. 1999, 131