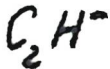


Ca H-

Пламена.

Отрицательные
ионы.



V 15 B615. Идентификация отрицательных ионов пламени. Feugier A., Van Tiggelen A. Identification of negative flame-ions. «Preprint. 10th Sympos. (Internat.) Combust.», s. a., [N3], 15/1—15/3 (англ.)

Масс-спектрометром идентифицированы отрицательные ионы в пламенах тройных смесей с кислородом и азотом ацетилена, пентана и метана. Опытами с полностью дейтерированным ацетиленом проверено содержание водорода в отрицательных ионах. Кол-во свободных электронов по сравнению с отрицательными ионами незначительно. В наибольшем кол-ве обнаружены ионы: в пламени ацетилена C_2H^- , пентана $CO_3H_2^-$, метана OH^- и O^- . Ион C_2H^- обнаруживается при низкой концентрации радикала C_2H ; сделан вывод, что радикал C_2H имеет высокое сродство к электрону. Добавка малых кол-в аммиака к исследованным топливам дает ионы массы 43,26 (очевидно CN^-) и 48 (O_3^-). При слабых следах хлора обнаруживаются ионы $(Cl^{36})^-$ и $(Cl^{37})^-$. При более значительных добавках хлора (до 1%) все другие отрицательные ионы заменяются этими двумя ионами Cl^- . При добавлении щел. солей конц-ия отрицательных ионов, как и положительных, возрастает.

Е. Семенов

Ж. 1965. 15

C_2H^-

Feldmann H.

1970

(He)

Z. Naturforsch. A,
1970, 25(5), 621-6

● $(\text{C}_{60}\text{H}^-)_{\text{III}}$

CH_2^-

Zocht R., 1970
Momingny J.

D_0^0

Chem. Phys. Lett.,
1970, 6, ~4, 273

III



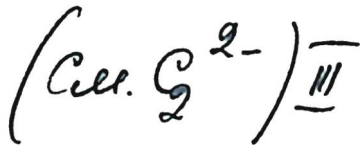
(Cer. CH) III

C_2H^-

Hopkinson A.C. 1971
Cis & trans I.G.

електр.
стр-ца;
сродство
к
протону

Chem. Commun, 1971,
v20, 1291.



C_2H^-

1972

(y) 34053v Dissociative electronic attachment on acetylene and acetylene- d_2 . Azria, R.; Fiquet-Fayard, F. (Lab. Collisions Electron., Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1972, 33(7), 663-7 (Fr). Four neg. ion peaks are obsd. as a function of energy for the dissociative attachment of electrons in the gases C_2H_2 and C_2D_2 by means of a total ionization chamber. The 1st peak is due to $C_2H^-(C_2D^-)$ ions, the 2nd to the $H^-(D^-)$, C_2^- , and $C_2H^-(C_2D^-)$ ions, and the 2 last peaks are of the type C_2^- . The authors have measured the abs. cross sections and detd. the ionization efficiency curves; the onset of the ionization curve for C_2H^- is 2.3 ± 0.1 eV; this curve exhibits the shape characteristic of a vertical onset process, and the cross section at the max. is $(2.2 \pm 0.3) \times 10^{-20}$ cm². A large isotope effect is obsd. for the peak $C_2H^-(C_2D^-)$ and a small one for the peaks C_2^- . The possible states of the fragments were detd. by kinetic-energy considerations.

C.A. 1973, 78, N6

1973

C_2H^-
 CN^- (A $\bar{e}$)
 HCN^-
 C_2N^-
 $CHCN^-$
 CH_2CN^-
 C_3N^-
 (J; ϵ_i)

C.A. 1973
 79 n 18

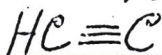
109471m Measurement of negative ions formed by electron impact. IX. Negative ion mass spectra and ionization efficiency curves of negative ions of m/e [mass/charge] 25, 26, 27, 38, 39, 40, and 50 from acrylonitrile. Tsuda, Satoru; Yokohata, Akira; Umaba, Toshikatsu (Fac. Eng., Univ. Hiroshima, Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1973, 46(8), 2273-7 (Eng). Neg. ion mass spectra of acrylonitrile were measured for electron energies of 80, 40, and 9.5 eV. Emphasis is placed on the abundance of the neg. ions relative to the pos. ions measured for energies of 80, 40, and 15 eV, resp. The ionization efficiency (IE) curves were also detd. at ≤ 25 eV for the ions of m/e 25- (C_2H^-) , 26- (CN^-) , 27- (HCN^-) , 38- (C_2N^-) , 39- $(CHCN^-)$, 40- (CH_2CN^-) , and 50- (C_3N^-) . The electron impact of 80 eV and 40 eV gave almost the same distribution of m/e for neg. ion mass spectra. Besides the most intense peak of CN^- ions, relatively strong peaks of C_3N^- , C_2H^- , C_2^- , and C_2N^- ions were obsd. In 9.5 eV, CN^- ions predominated over other ions. Yields of the ions showed a good linearity against the pressure in the range used for usual chem. anal., irresp. of electron energy. Comparison of the yield of CN^- ions with that of $C_2H_3CN^+$ gave 1.2×10^4 and 1.9×10^4 for $C_2H_3CN^+/CN^-$ at 80 eV and 40 eV, resp., and 47.6 at 9.5 eV (15 eV for the pos. ions). The plausible reaction schemes expected to occur at each onset observed in the IE curves were also sought thermochem. by using ΔH_f values of the reactant and products. A value ≥ 2 eV was obtained for the electron affinity of C_2H .

(+5)

☒

70429.6749

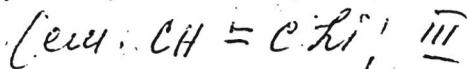
Ch, Ph, TC

21. ~~0867~~ 11.

1977

* 18-183020

Hinchliffe Alm. The electronic structure of lithium acetylene and related molecules. "J. Mol. Struct.", 1977, 37, N 1, 145-152 (англ.)



0867. лнк

834 840

5 8

ВИНИТИ

C_2H^-

Omura 5683

1977

Lischka H, et al

u.u.

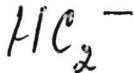
work,

coll. work.

Chem. Phys., 1977,
25, 19-25



1977



↗

электр.
структ.

6 Д239. Исследование методом ССП энергетических поверхностей основных состояний HC_2 и HC_2^- . P a - c a n s k y J., O r r G. Studies on the SCF ground state energy surfaces of HC_2 and HC_2^- . «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 12, 5952—5955 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовских ф-ций $12s7p/6s$, сгруппированном в $5s4p/3s$, исследовано электронное строение HC_2 (I) и HC_2^- (II) в основных состояниях $^2\Sigma^+$ и $^1\Sigma^+$ соотв. Рассчитаны потенц. кривые, орбитальные энергии, квадратичные сило-



↗

р. 1978, № 6

1977
12 Б53. Расчеты методом ССП энергетических по-
верхностей основного состояния HC_2 и HC_2^- . P a s a n s -
ky J., Orta G. Studies on the SCF ground state ener-

gy surfaces of HC_2 and HC_2^- . «J. Chem. Phys.», 1977,
67, № 12, 5952—5955 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП проведен
расчет потенциальных поверхностей HC_2 и HC_2^- .
Использован сгруппированный базисный набор ГФ.
Полные энергии HC_2 и HC_2^- вычислены как функции
длин связей СН и СС при линейной геометрии молекул.
Минимуму энергии соответствуют след. длины связей —
 HC_2 : $R_{\text{CH}}=1,98$ ат. ед., $R_{\text{CC}}=2,25$ ат. ед.; HC_2^- :
 $R_{\text{CH}}=1,99$ ат. ед., $R_{\text{CC}}=2,34$ ат. ед. Дополнительный
электрон в отриц. ионе вызывает существенное удлине-
ние связи С—С и не меняет длину связи С—Н. Приве-
дены вычисленные силовые константы молекулы и иона,
орбитальные энергии и атомные заселенности по Мал-
ликену. Сродство к электрону HC_2 получено из расчета
равным 1,94 эв. Анализ МО HC_2 показывает, что неспа-

HC_2^-
 HC_2
расчет
потенц.
поверхности

(+1) [X]

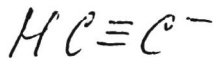
2, 1978, № 12

ренный электрон помещается на 5 σ МО, к-рая состоит из 2 s и 2 p АО концевых атома С. При образовании отриц. иона дополнительный электрон помещается на 5 σ МО, образуя неподеленную пару. Приведены карты электронной плотности обеих систем. Установлено, что электронная структура HC_2 и HC_2^- сходна с таковой CN и CN^- . На основании этого, в предположении, что изменение энергий корреляции при добавлении электрона в обеих системах примерно одинаково, и с учетом изменения энергии корреляции в CN , предсказано значение сродства к электрону HC_2 , равное 2,5 эв.

Ю. А. Борисов

НСС- Commen 10504 | 1974
Summers N.L.; et al

(min)
кв. мех.
фактор J. Amer. Chem. Soc.,
1977, 99 (12), 3960-65



ommuch 7247 1978

Pross A, et al.

Rb. exx.
facet

J. Amer. Chem. Soc.

1978, 100 (21), 6572-75

HC_2^-

1)

6 Б100. Экспериментальное и теоретическое определение сродства к электрону этинильного радикала, $\text{HC}_2^\cdot$. Janousek Bruce K., Brauman John I., Simmons Jack. An experimental and theoretical determination of the electron affinity of the ethynyl radical, $\text{HC}_2^\cdot$. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 5, 2057—2061 (англ.)

Ar; Do

2)

3)

С использованием ионного циклотронного резонанса и возбуждения источником Хе измерено сечение фотоотрыва электрона от аниона ацетиленида (HC_2^-). Вычисление формы кривой сечения фотоотрыва вблизи порога и оценка факторов Франка—Кондона дали для сродства к электрону (СЭ) аниона HC_2^- значение $2,94 \pm \pm 0,1$ эВ. Вычислены теор. значения СЭ аниона HC_2^- при различных приближениях. Расчет методом возмущений 8-го порядка дал значение СЭ $3,18 \pm 0,25$ эВ в хорошем согласии с экспериментом. Дополнительное привлечение лит. данных по диссоциации ацетилена в газовой фазе ($\text{C}_2\text{H}_2 = \text{H}^+ + \text{HC}_2^-$) позволило оценить энергию связи С—Н в ацетилене в 132 ± 5 ккал/моль. На основе простейшей модели теории возмущений проведена качеств. интерпретация увеличения энергии связи С—Н в ацетилене и СЭ в радикале $\text{C}_2\text{H}^\cdot$ по сравнению с соотв. значениями для этилена и этана.

В

а: 1980. № 6

8760
эмми

GH⁻

ommick 10624 1980

Aug 2, et al.

recomp.
et. (F)

Theor. chim. acta, 1980, 57,
NR, 10430



ell. H₂-III

1980

 C_2H^- C_2^- CN^- межзв.
ионы

6 Б164. О возможном обнаружении отрицательных ионов в межзвездной среде. Sarrge P. J. On the possible detection of negative ions in the interstellar medium. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1980, 77, № 7—8, 769—771 (англ.; рез. франц.)

Рассмотрены физ. и хим. характеристики молек. ионов C_2H^- , C_2^- , CN^- , предсказаны вероятные частоты переходов, проанализированы возможные механизмы их образования в межзвездной среде (диссоциативное присоединение электронов, радиац. ассоциация, обмен зарядами и т. д.). Обсуждена возможность существования этих ионов в межзвездной среде и обнаружения их радиоастрономич. методами.

С. Б. Осин

(+2) ☒

Q. 1981. N6



1982

Kühnel W., Gey E.,
et al.

ΔH_f ,
геодетр.
структ.

Z. phys. Chem. (DDR),
1982, 263, N3, 641-645.

● (cor. C_2 ; $\overline{\text{I}}$)

CCN-

[Oct. 20 1983]

1983

Dwivedi C. P. D.,

वर्तमान,
गुरुवार
सुबह,
सुबह.
नोट.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1983, 21,
N 10, 605-608.

C_2H^-

1984

Tamassy - Lentei I.,
Szariszló J.

Ap; Acta Phys. Chem. Debre-
cina 1984, 25, 17-27.

(see O_2 ; III)

C₂H⁻

(Om. 23844)

1985

103: 166435r Systematic study of molecular anions within the self-consistent-field approximation: hydroxide, cyanide, acetylide (C₂H⁻), amide (NH₂⁻), and methane ion (CH₃⁻). Lee, Timothy J.; Schaefer, Henry F., III (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(4), 1784-94 (Eng). The title mol. anions were studied at the SCF level of theory with several different basis sets. The smallest of these bases was triple zeta in quality, and the largest was near the Hartree-Fock limit. A study was made of the dependences of the proton affinities, dipole moments, harmonic frequencies, and IR intensities on the inclusion of diffuse functions in the basis set. At the SCF level of theory, the addn. of diffuse *s* and *p* functions (for 1st row elements) was necessary to obtain reliable results. This was true esp. for NH₂⁻ and CH₃⁻. A method to extend any std. Gaussian basis set is suggested. Predictions were made for some of the vibrational frequencies of the anions, which have not yet been obsd. exptl.

microp. pac.
sem

(+2) ☒



NH₂⁻; CH₃⁻

C.A. 1985, 103, N 20

CaH⁻(2) 10m. 26/15 1986

Baker J., Nobes R. H.,
Radom L.,

u.n.

J. Comput. Chem., 1986,
7, n3, 349-358.

MCC-

[Om. 27155]

1987

Cybulski S., Scheiner S.,

ΔH° ,

KB-Mex.
расчет

J. Amer. Chem. Soc.,
1987, 109, N14, 4199—
4206.

C_2H^-

[Om. 27522]

1987

Bruebele M., Polak M.,
Saykally R. F.,

двойной
лазерный
спектр,
м.п.

J. Chem. Phys.,
1987, 87, N 2,

1448 - ● 1449.

C_2H^-

1987

2 Б4407. Дiodно-лазерная спектроскопия модуляции по скоростям карбанионов. Валентное колебание по связи CC в анионе C_2H^- . Diode laser velocity modulation spectroscopy of carbanions. The CC stretching vibration of C_2H^- . Gruebele Martin, Polak Mark, Saykally Richard J. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 2, 1448—1449 (англ.)

М.А., Di

Методом диодно-лазерной спектроскопии с модуляцией по скоростям в обл. от 1735 до 1789 см^{-1} зарегистрированы колебательно-вращат. спектры карбанионов C_2H^- , к-рые получали в разрядах (частота 25 кГц , энергия 200 Вт) в смесях He: ацетилен: NF_3 при давл. $900, 60$ и 40 мТорр соотв., содержащих примесь стабилизирующей добавки O_2 . Образование C_2H^- не обнаружено при использовании CF_4 или C_2F_6 вместо NF_3 или метана и этилена вместо ацетилена. Отождествлено 12 спектральных линий и с точностью $0,005—0,010\text{ см}^{-1}$

Х. 1988, 19, №2.

определены их положения. Определены след. молек. постоянные C_2H^- (cm^{-1}): ν_3 1758,621(3); B'' 1,38145(26); B' 1,36213(22); D $3,5 \cdot 10^{-6}$. Здесь в скобках дана удвоенная стандартная погрешность величин. Частота ν_3 значительно ниже, чем в ацетилене (1974 cm^{-1}) или радикале C_2H (1840 cm^{-1}), что указывает на ослабление хим. связи $C-C$ в анионе C_2H^- и ее удлинение.

В. Е. Скурат

C2H-

1987

Konrad Braun
Chemist, M.N.

(107: 123529q Diode laser velocity modulation spectroscopy of carbanions: the carbon-carbon stretching vibration of acetylide (C_2H^-). Gruebele, Martin; Polak, Mark; Saykally, Richard J. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(2), 1448-9 (Eng). The vibration-rotation spectra of C_2H^- were obtained by diode laser velocity modulation. The frequencies and residuals for the 12 assigned lines of the C-C stretching vibration are given. The mol. consts. for C_2H^- are given.

C.A. 1987, 107, N 14

HCC-

1987

Zi Wai-Kee, Nobes

Ross H., et al.

4.17.

J. Mol. Struct. Theo-
chem, 1987, 149, N1-2,
61-79.

(see CH_3CH_2^- ; III)

HC₂⁻

1987

УДК 10 Б1120. Структура и процессы перегруппировки модельных алкильных, алкенильных и алкинильных анионов. Теоретическое изучение этильного, этенильного и этинильного анионов. Structures and rearrangement processes for the prototype alkyl, alkenyl and alkynyl anions: a theoretical study of the ethyl, ethenyl and ethynyl anions. Li Wai-Kee, Nobes Ross H., Radom Leo. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 149, № 1-2, 67—79 (англ.)

М.П.

Неэмпирическим методом ССП с полной оптимизацией геометрии вычислены равновесные структуры анионов HCC^- (I), CH_2CH^- (II) и CH_3CH_2^- (III), а также переходные конфигурации реакций 1,2-сдвига атома водорода, инверсии анионов II и III, вращения и инверсии — вращения III. Использованы расширенные базисы ГФ, включающие диффузные ф-ции. При сопоставлении относительных энергий отдельных структур учтены энергии нулевых колебаний. Энергия корреляции вы-

2

X. 1987, 19, N 10

числена по теории возмущений Меллера—Плессета 3-го порядка. Переходные конфигурации (ПК) для р-ции 1,2-сдвига атома Н интерпретированы, как комплексы между соотв. двухзарядными анионами и протоном. ПК имеют симметрию: C_{2v} для I, C_2 и C_s для II и C_2 для III. Барьеры р-ций, протекающих через эти ПК равны 73, 235 и 248, 202 кДж/моль. Из анализа вычисленных значений сродства к электрону следует, что I и II стабильны, а III нестабилен по отношению к соотв. нейтр. радикалам. Э. Д. Герман



CCH- [OM. 29227] 1988

Owzetsky J., Rosen-
baum N., et al.

(V-c, Be) Phil. Trans. Roy. Soc.
London, 1988, A 324,
97-108.

HC₂⁻

1991

116: 181586c At initio calculations for acetylide(1-) and chloride(1-)--hydrogen fluoride. Botschwina, P.; Sebald, P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Goettingen, D-3400 Goettingen, Germany). NATO ASI Ser., Ser. C. 1991, 347(Fundam. Gas Phase Ion Chem.), 231-3 (Eng). The vibration frequencies and potential energy surfaces were calcd. of HC₂⁻ ion and Cl⁻—HF complex by the CEPA method. Deuterium isotope effects were also considered.

Vi a nometes.
q-ud, pacem



C. A. 1992, 116, N 18

CaH-

(om. 35364)

1991

Ervin K.M., Lineberger
W.C.,

J. Phys. Chem.,

1991, 95, N3, 1167-1177

Photoelectron ● Spectra of

Cl^- and CaH^- .

HCC-

1991

Marudarajan Vijaya,
Scheiner Stere.

u.n. J. Phys. Chem. 1991.
95, N25, C. 10280-10284.

(see  HCCM; III)

HCC⁻

1994

122: 145657s Calculation of the rovibrational spectrum of the acetylide anion. Mladenovic, Mirjana (Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, YU-11001 Belgrade, Yugoslavia). *J. Serb. Chem. Soc.* 1994, 59(7), 483-90 (Eng). Rovibrational states of HCC⁻ for $J = 0-2$ were calcd. using body-fixed, mass-scaled Jacobi coordinates together with the discrete variable representation of the angular coordinate and a 2-dimensional distributed Gaussian basis for the radial degrees of freedom. The potential energy surface of P. Sebald (1990) and P. Botschwina (1991) was used. The importance of Coriolis coupling is discussed. The influence of the shallow local energy min. in the C_{2v} configuration is shown. Comparison is made with available exptl. data.

calc. mp.
kon. - tp.

C. A. 1995, 122, N 12

HCC-

1995

Botschwina P., Seeger S.,
et al.,

структурн.
параметри, Int. Rev. Phys. Chem.
Di 1995, 14(2), 169-204.

(all. NH₂⁻; III, ●)

CaH^-

(OM 37961)

1995

ab initio
pacem

David E. Woon,

Chem. Phys. Lett., 1995,
244, 45-52.