

Wiele cząsteczek obecnych lub postulowanych w przestrzeni międzygwiazdowej (oraz w atmosferach planetarnych) wciąż nie zostało scharakteryzowanych spektroskopowo w obszarze UV-Vis-IR. Znaczącą grupę takich cząsteczek stanowią te należące do rodziny cyjanoacetyleny (HC_3N). Częściowo spowodowane jest to brakiem istniejących ścieżek syntezy oraz faktem, że cząsteczki te, choć dość proste, są niestabilne w zwykłych warunkach laboratoryjnych. Do badania nietrwałych i niedostępnych tradycyjnie cząsteczek niezbędny jest wyspecjalizowany warsztat badawczy, co tłumaczy stosunkowo skromną wiedzę na temat ich spektroskopii i fotochemii. Jednym z rozwiązań jest stosowanie matrycy z zestalonego gazu szlachetnego.

Część badanych molekuł, w tym metylocyjanoacetylen ($\text{CH}_3\text{C}_3\text{N}$) i niektóre z jego izomerów, metylocyjanodiacetylen ($\text{CH}_3\text{C}_5\text{N}$) oraz cyjanodiacetylen (HC_5N), dostępne były na drodze preparatywnej syntezy organochemicznej. Pozostałe zostały otrzymane jako produkty reakcji fotochemicznych przeprowadzanych głównie w zestalonym kryptonie, z wykorzystaniem techniki stymulowanego ultrafioletem kriogenicznego wydłużania łańcuchów węglowo-azotowych. Podejście to pozwoliło na otrzymanie HC_9N w reakcji $\text{C}_4\text{H}_2 + \text{HC}_5\text{N}$, a także na otrzymanie C_{10}N_2 w reakcjach $\text{C}_4\text{H}_2 + \text{HC}_5\text{N}$ lub $\text{HC}_5\text{N} + \text{HC}_5\text{N}$. Metoda ta została dalej rozszerzona na syntezę cząsteczek metylowanych i z sukcesem doprowadziła do tworzenia się $\text{CH}_3\text{C}_5\text{N}$ z $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + \text{HC}_3\text{N}$, oraz $\text{CH}_3\text{C}_7\text{N}$ z $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + \text{HC}_5\text{N}$. Ponadto, w eksperymentach fotochemicznych z matrycami kriogenicznymi zawierającymi HC_5N , wykryto HC_7N oraz anion C_5N^- . Zaproponowany został ogólny schemat wydłużania badanych łańcuchów.

Stymulowana ultrafioletem fotoliza $\text{CH}_3\text{C}_3\text{N}$ w zestalonym argonie doprowadziła do formowania się dwóch jego izomerów: cyjanku allenylu oraz cyjanku propargilu, których obecność wśród produktów fotolizy została stwierdzona na podstawie zmierzonych widm IR tych cząsteczek oraz dostępnych przewidywań teoretycznych. Procesy fotochemiczne prowadzące do ich powstania zostały opisane jako konwersja cząsteczki wyjściowej w cyjanek propargilu, z cyjankiem allenylu jako produktem pośrednim.

Kompleksowe zbadanie właściwości spektroskopowych gazowego, stałego oraz izolowanego w matrycach kriogenicznych $\text{CH}_3\text{C}_5\text{N}$ zostało przeprowadzone z użyciem spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni, spektroskopii Ramana oraz spektroskopii elektronowej (zarówno absorpcji w zakresie UV-Vis jak i luminescencji). Uzupełniony został opis znanej już fosforescencji cząsteczki HC_5N .

Wspomniane wyżej detekcje produktów fotochemicznego wydłużania łańcuchów nie byłyby możliwe, gdyby nie silna fosforescencja $\text{CH}_3\text{C}_5\text{N}$, $\text{CH}_3\text{C}_7\text{N}$, HC_9N , C_{10}N_2 oraz C_5N^- , zauważona tu po raz pierwszy. Przeanalizowana została struktura wibronowa tej emisji. Pomiar odpowiednich widm wzbudzenia fosforescencji umożliwiły natomiast opis wzbudzonych stanów singletowych, łącznie z ich poziomami oscylacyjnymi.

Podobieństwa, prawidłowości i istotne różnice znalezione dla szeregów homologicznych HC_{2n+1}N , NC_{2n}N i $\text{CH}_3\text{C}_{2n+1}\text{N}$ (np. wynikające z obecności grupy metylowej lub jej braku) zostały przedyskutowane ze zwróceniem szczególnej uwagi na spektroskopowe reguły wyboru, strukturę wibronową, energie przejść elektronowych i czasy zaniku fosforescencji. Dla każdego z badanych szeregów, długość fali towarzysząca przejściu $0-0$ systemu $\tilde{a} - \tilde{X}$ była liniowo zależna od długości nienasyconego szkieletu węglowo-azotowego. Ekstrapolacja otrzymanych wyników pozwala na przybliżenie odpowiednich długości fali dla jeszcze niepoznanych cyjanopolinyów.