

C2NO

5133

1953

COCN (v_i)

Kemula W., Tramer A.

Roczniki Chem., 1953, 27, 522-3.

Vibrational spectrum of carbonyl cyanide

2

10

C.O., 1954, 6255 f

1961

CXCO

$(CF_3)_2O$

MS check

Asymmetric top molecules in the microwave region. II.
Carbonyl cyanide and perfluorodimethyl ether. J. F. Westerkamp (Univ. Buenos Aires, Argentina). *Bol. Acad. Nacl. Cienc.* (Cordoba, Rep. Arg.) 42, No. 2-4, 191-200(1961). Calcns. were made of the microwave spectra. Jasper D. Hepworth

C.A. 1963. 58. 6

5770 bc

COCN

1974

150459a Various mean-square amplitude quantities in carbonyl cyanide. Nayar, V. Unnikrishnan; Aruldas, G.; Cyvin, S. J. (Phys. Dep., Cochin Univ., Cochin, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1974, 12(1), 78-9 (Eng). The at. vibration mean-square amplitudes, the generalized mean-square amplitudes, and perpendicular amplitude correction coeffs., helpful in electron diffraction studies, were evaluated for carbonyl cyanide.

C.A. 1974. 80. N26

COCN

2

1974

1 Д203. Различные среднеквадратичные амплитуды колебаний карбонилцианида. Unnikrishnan Nagar V., Aruldas G., Cyvin S. J. Various mean-square amplitude quantities in carbonyl cyanide. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1974, 12, № 1, 78—79 (англ.)

По литературным данным для силовых постоянных вычислены обобщенные среднеквадратичные амплитуды колебаний, амплитуды колебаний атомных пар и параллельные и перпендикулярные амплитуды декартовых смещений для молекулы карбонилцианида. М. Р. Алиев.

ф. 1975 №1

CCCN

1980

15 Б83. Молекулярная структура карбонилцианида. Турке V., Dakkouri M., Schlumberger F. The molecular structure of carbonyl cyanide. «J. Mol. Struct.», 1980, 62, 111—120 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы карбонилцианида (I). Найдены след. значения межъядерных расстояний ($r_{\alpha A}$) и углов: C=O 1,2056(38), C—C 1,4649(15), C≡N 1,1452(21); $\angle$ CCC 114,91(56)°. В r_{α} — структуре обнаружен небольшой изгиб цепочки C—C≡N на 1,6° в положение анти по отношению к связи C=O. Однако при совместной обработке электронографич. и микроволновых данных эта цепочка в структуре r_{av} почти линейна. Это означает, что угол CCN меняется на 1,5° при переходе от r_{α} — структуры к r_{α}° структуре. Длины связей в I согласуются с эффектом втор. окружения, установленного для ряда кислород- и азотсодержащих соединений.

В. Спиридонов

молек.
структ.

20 1980 №15

NCCO

1983

De Paz J.L.G., Yanez M.

J. Mol. Struct., 1984, 107,

вомер., Suppl.: Theochem, 16: Theochem,
ссылка. Chem. 1983. Proc. XIV Congr.

Theor. Chem. Latin Express-
sion, Louvain-la-Neuve,
30 May-2 June, 1983, 59-62

(ссылка. HCOOH; iii)

OCCN

1984

3 Л232. Электронный спектр поглощения молекулы ONCN в ближней ИК-области. Near-IR electronic absorption spectrum of ONCN. Bell Stephen, McNee Ewan R. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 111, № 1—2, 105—112 (англ.)

Исследован спектр поглощения молекул нитрозилцианида ONCN в газовой фазе в области $11\,340—11\,690\text{ см}^{-1}$. Разрешающая способность использованного спектрографа в указанной области была не хуже $3,8\text{ см}^{-1}$. Идентифицирована структура, относящаяся к системе переходов ${}^1A'' \leftarrow {}^1A'$. Дан анализ вращательной структуры полос. Обсуждена качеств. модель деформационной потенц. ф-ции для молекул ONCN. Библ. 20.

спектр, и.п.

ф. 1985, 18, № 3

CNCO

1984

Nadler I., Reiser H.,
et al.

Стекмп
Спомогуе.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 108, N2, 115-

● - 122.

(Сел. CN; III)

$NCCO^+$

1991

✓ 1 Д95. Неэмпирические исследования тенденций изменений связей. Ч. 8. 26-электронные системы $A \equiv B - C \equiv D^n$ и 30-электронные системы $A = B = C = D^n$. Ab initio studies of bonding trends. Pt 8. The 26-electron $A \equiv B - C \equiv D^n$ and the 30-electron $A = B = C = D^n$ systems / Pyykkö P., Runeberg N. // J. Mol. Struct. Theorchem.— 1991.— 234.— С. 269—277.— Англ.

В приближении Хартри—Фока (ХФ) и методом Меллера—Плессета 2-го порядка (МП2) в базисе 6-31 ГФ* исследованы 26-электронные системы типа $A \equiv B - C \equiv D^n$, к которым, в частности, относятся C_4^{2-} , $CCCP^-$, катионы $NCCO^+$, $NCNN^+$ и $NNNN^{2+}$. Рассмотрены также 30-электронные линейные системы, включающие $NCCN^{4-}$, $OSBO^{3-}$, $FNCF^+$ и $FNNF^{2+}$. Для аниона $ONCO^-$ найдено, что кольцевая структура лежит выше линейной. Анион N_4^{2-} имеет предпочтительную структуру D_{4h} . Кольцевая структура $O_4^{2+} (D_{4h})$ стабильна в приближении ХФ и нестабильна в приближении МП2.

М.Н.

⊕

(73)

ф. 1992, №1

COCN

1991

115: 120560x Ab initio calculations of the equilibrium geometries and vibrational frequencies of carbonyl cyanide, thiocarbonyl cyanide and thiopropynal. Tyrrell, James (Dep. Chem. Biochem., South. Illinois Univ., Carbondale, IL 62901 USA). *THEOCHEM* 1991, 77, 87-94 (Eng). Ab initio calcs. using 6-31G* or D95** basis sets were carried out at the MP2 level on the mol. carbonyl cyanide, thiocarbonyl cyanide and thiopropynal. In each case an optimized equil. geometry was obtained and vibrational frequencies were calcd. at these geometries. The geometries and frequencies were compared with each other and with exptl. data where possible.

homomeric,
Di, param

⊕ ⊕

CSCN

C.A. 1991, 115, N12

C_2NO^+ ($NCCO^+$, $CNCO^+$, $CCNO^+$)

1992

118: 69349t The isomeric C_2NO^+ ions $NCCO^+$, $CNCO^+$, $CCNO^+$ and their neutral counterparts are stable species in the gas phase. McGibbon, Graham A.; Kingsmill, Carol A.; Terlouw, Johan K.; Burgers, Peter C. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1992, 121(1-2), R11-R18 (Eng). The isomeric $[C_2NO]$ cations $NCCO^+$, 1^+ , $CNCO^+$, 2^+ and $CCNO^+$, 3^+ , were identified on the basis of their distinct collisional activation mass spectra. Redn. of these ions in a neutralization-reionization expt. produced intense survivor signals and characteristically different spectra which reveal the existence of $NCCO^+$, 1^+ , $CNCO^+$, 2^+ , and $CCNO^+$, 3^+ , as stable radicals in the dild. gas phase. Ab initio (UMP3/6-31G*//6-31G* + ZPVE) MO calcns. show that ions and neutrals 1 are more stable than their counterparts 2, by 7.4 and 15.8 kcal mol⁻¹, resp. These calcns. are not amenable to the detn. of relative energies for ions and neutrals 3.

стабильность,
массспектр,
ab initio
расчет

C.A. 1993, 118, N 8

OCCN
OCCN⁺

DM. 38949

1997

127: 300494k An ab initio study of OCCN and OCCN⁺. Francisco, Joseph S.; Liu, Ruifeng (Department of Chemistry and Department of Earth and Atmospheric Sciences, Purdue University, West Lafayette, IN 47907-1393 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(10), 3840-3844 (Eng), American Institute of Physics. The structure and vibrational frequencies are reported for the OCCN radical and its cation using quadratic CI and complete active space SCF methods. The heat of formation for the OCCN radical is estd. as 50.2 kcal mol⁻¹. The adiabatic ionization potential is estd. as 8.5 eV. Vertical excitation energies for low-lying excited states of OCCN are also reported.

ab initio
param,
chem,
cmr - pa,
 $\Delta_f H$

C. A. 1997, 127, N 21