

C3 N20

$\text{Co}(\text{CN})_2$ Kemula W. 1953
Wierzechowski K. L.,
Roczniki Chem., 27, 522, 1953

Co(CN)₂

Tramer A. Wierzbowski K.Ł. 1957

Bull. acad. polon. sci. Classe III,
5, 411-15 (англ.).

Ковед. сел. Co(CN)₂

м.к. доб. 2,5-14 м. разотр.

раман сел. нигмодн.

разнесение разотр

CA. 52

878 B.

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

A. Trauer, K. H. Wierzchowski: 1957

Bull. acad. polon. sci. Classe III 5,
417-19 (англ.)

Синтез $\text{CO}(\text{CN})_2$

Равновесные конст.

$\frac{z(\text{C}=\text{O})}{z(\text{C}-\text{C})}$ в равновесии = в азоте
и несут
молекулы nitrile

CA 52

828c

139-5139-17

1961

(CN)₂CO

структура

Л.В. Амир

4 Б181. Исследование асимметричных волчков в микроволновом диапазоне. II. Карбонилцианид и перфтородиметиловый эфир. Westerkamp J. F. Estudios de giroscopos asimétricos en la región de microondas. II. Cianuro de carbonilo y eter perfluoro-dimetílico. «Bol. Acad. nac. cienc.», 1961, 42, № 2—4, 191—202 (исп., рез. англ.)

Проведен расчет микроволнового спектра молекул асимметричных волчков (CN)₂CO (I) и (CF₃)₂O (II). Для I предполагались следующие значения длин связей и углов C=O 1,220 Å; C—C 1,460 Å; C≡N 1,156 Å; ∠CCC 120°; для II O—C 1,436 Å; C—F 1,358 Å; ∠COC 110°. Уровни энергии рассчитывались по ф-ле $2W/h = (A+C)J(J+1) + (A-C)E_J^J$ (ж) без учета центробежного возмущения. Для I рассчитаны уровни энергии при $J \leq 8$ и частоты переходов R-, Q- и P-ветвей с $J \leq 8$, лежащие в диапазоне 16,9—30,6 кМГц. Для II уровни энергии при $J \leq 18$ и частоты переходов P-, Q- и R-ветвей с $J \leq 10$, лежащие в диапазоне 15,0—31,6 кМГц. Сообщение I см. РЖХим, 1963, 12Б134. Т. Бирштейн

X. 1964. 4.

10025
(CA)₂CO;O(CF₃)₂ (спав. нсг.) 1963

Hesterkamp J.F.

Estudios de giroscopos asimétricos
en la región de microondas. II. Cianuro
de carbonilo y eter perfluoro-dimetí-
lico.

"Bol. Acad. nac. cienc.", 1961, 42,
N 2-4, 191-202 (нм.; ртз. нмн.)

C₃N₂O

Рф., 1963, 3 D103

10

Есть оригинал.

~~50224.3103~~

~~15, CH~~

$\text{Co}(\text{CN})_2$ (A.)

1964
M 601

Tramer A. Charge-Transfer complexes of carbonyl cyanide $\text{CO}(\text{CN})_2$. " Bull. Acad. polon. sci. Sér. sci. math. astron. et phys.", 1964, 12, N 10, 669-671

(англ., рез. русск.)

$\text{C}_3\text{O N}_2$

ЕСТЬ ОПРЕД.

~~ВНИТИ 717~~ 60

CO(CN)₂

ВФМ-1599-IV

1966

Спектр поглощения
и флуоресценции

Сильно осциллирующий

9 Д171. $n \rightarrow \pi^*$ -переходы в карбонильных группах. Электронный спектр карбонилцианида. Prochownik J., Tramer A., Wierzchowski K. L. $n \rightarrow \pi^*$ transitions in carbonyl group electronic spectrum of carbonyl cyanide. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 1, 45—62 (англ.)

Исследованы спектры поглощения и флуоресценции $\pi^* \leftarrow n$ (${}^1A_2 \leftarrow {}^1A_1$)-перехода в CO(CN)₂ на приборах с высокой и средней дисперсией. Спектр поглощения состоит из двух переходов: сильного поглощения с началом $\sim 43\,000\text{ см}^{-1}$, отнесенного к $\pi^* \leftarrow \pi$ (${}^1A_1 \leftarrow {}^1A_1$) или $\sigma^* \leftarrow n$ (${}^1B_1 \leftarrow {}^1A_1$)-переходу, и слабого поглощения $4100\text{—}2600\text{ Å}$ — запрещенный $\pi^* \leftarrow n$ (${}^1A_2 \leftarrow {}^1A_1$)-переход. Сила осциллятора, определенная из интегральной интенсивности запрещенного перехода, равна $(0,85 \pm 0,15) \cdot 10^{-4}$.



наши

ф. 1966. 9А

Проведен колебательный анализ электронного спектра. Молекула, очевидно, сохраняет плоскую конфигурацию в возбужденном состоянии. На основании распределения интенсивностей сделан вывод об удлинении С—О связи и изменении валентных углов при центральном С-атоме в A_2 -состоянии. Уширения высших колебательных уровней объясняется преддиссоциацией. Величина $\omega_{00} = 23\,550\text{ см}^{-1}$. Красный сдвиг карбонильного поглощения объясняется сопряжением и индуктивными эффектами. Библ. 22 назв. Э. Броун

CO(CN)₂

XIV - 1087

1970

27008a Infrared and Raman spectra of carbonyl cyanide. Bates, John B.; Smith, William Hayden (Dep. of Chem., Univ. of Kentucky, Lexington, Ky.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1970, 26(3), 455-64 (Eng). The ir and Raman spectra of Co(CN)₂ in the gas, liq., and solid phases were measured at 10-2500 cm⁻¹. The spectral measurements are discussed in terms of a planar C_{2v} mol. structure. Results of a vibrational anal. by using a modified valence force field are presented. X-ray diffraction expts. and vibrational spectra of the polycryst. solid suggest that CO(CN)₂ crystallizes in the orthorhombic system with 2 equiv. mols. located in a primitive C_{2v} lattice and occupying either C₁ or C₂ sites. RCSQ

W - check

C.A. 1970. 72. 24

CO(CN)₂

XIV - 1950

1970

chem.
noct.

(12877c) Force field and Coriolis coupling coefficients of carbonyl cyanide. Nayar, V. Unnikrishnan; Aruldas, G. (Dep. Phys., Kerala Univ., Cochin, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1970, 8(12), 840-1 (Eng). On the basis of general valence and Urey-Bradley potential functions, a set of force consts. has been obtained for the CO(CN)₂ mol. The Coriolis coupling coeffs. have also been detd. A weakening of the C—C bond is found from the force const. data.

C.S. 1974. 752.

CO (CN)₂

1971

ν_i

(52451m) Vacuum ultraviolet absorption spectrum of carbonyl cyanide. Duncan, A. B. F.; Whitlock, Rodger F. (Dep. Astron., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(12), 2539-41 (Eng). In the vacuum uv absorption spectrum (46,900-78,100 cm^{-1}) of $\text{CO}(\text{CN})_2$, 1 resolved transition with oscillator strength 0.07 was obsd. between 46,900 and 63,000 cm^{-1} . Integrated intensity and frequency of the transition were too low for assignment to a $\pi^* \leftarrow \pi$ transition. Vibrational structure was obsd. at 48,900-78,100 cm^{-1} ; band origin was taken as 48,943 cm^{-1} . The vibrational structure is interpreted in terms of 3 excited-state frequencies ν_1' 1903, ν_2' 1269, and ν_3' 583 cm^{-1} .

C.A. 1972 76 10

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

1971

4 Д366. Спектр поглощения карбонилцианида в вакуумной УФ-области. Duncan A. B. F., Whitlock Roger F. Vacuum ultraviolet absorption spectrum of carbonyl cyanide. «Spectrochim. acta», 1971, A27, № 12, 2539—2541 (англ.)

(м.п.) Получен спектр поглощения газообразного $\text{CO}(\text{CN})_2$ в области $47\,000\text{--}78\,000\text{ см}^{-1}$ при давл. $0,01\text{--}1\text{ мм рт. ст.}$ и длине оптич. пути до 4 м. Зарегистрирован один разрешенный электронный переход, представляющий собой колебательную прогрессию с началом при $48\,943\text{ см}^{-1}$; сила осциллятора перехода найдена равной 0,07. Определены значения колебательных частот в возбужденном состоянии: $\nu_1' = 1903$ ($\nu \text{C} \equiv \text{N}$); $\nu_2' = 1269$ ($\nu \text{C}=\text{O}$), $\nu_3' = 583\text{ см}^{-1}$ ($\nu \text{C}=\text{C}$). В области выше $63\,000\text{ см}^{-1}$ предположено наличие множества перекрывающихся неразрешенных полос электронных переходов.
С. Ф. Б.

ф. 1972.42

CO(CN)₂

1971

15 Б220. Микроволновый спектр, дипольный момент и постоянные квадрупольной связи карбонилцианида CO(CN)₂. Lees R. M. Microwave spectrum, dipole moment, and quadrupole coupling constants of carbonyl cyanide, CO(CN)₂. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 3, 367—373 (англ.)

В диапазоне 8—40 ГГц исследован МВ-спектр молекулы CO(CN)₂. Идентифицировано 49 линий основного колебательного состояния, 10 линий состояния с $\nu_5=1$ ($\nu_5 \approx 100 \text{ см}^{-1}$) и 3 линии состояния с $\nu_5=2$. Определены значения вращательных постоянных $A_0=6761,19$, $B_0=2924,67$, $C_0=2037,99 \text{ Мгц}$, постоянных центробежного искажения $\tau_{aaaa}=-0,1328$, $\tau_{bbbb}=-0,01224$, $\tau_{aabb}=0,03777$, $\tau_{abab}=-0,00523 \text{ Мгц}$ и постоянных колеба-

М.В. Спектр

X. 1971.15

тельно-вращательного взаимодействия $\alpha_5^A = -13,396$,
 $\alpha_5^B = -13,367$ и $\alpha_5^C = -1,924$ Мгц. Из штарковского
расщепления 4 линий Q-ветви вычислен дипольный мо-
мент $\mu_b = 0,704 \pm 0,007$ ед. Дебая, а из квадрупольной СТС
большого числа линий — постоянные квадрупольной свя-
зи ядра N^{14} : $\chi_{aa} = -2,846 \pm 0,024$, $\chi_{bb} = 0,045$ и $\chi_{cc} =$
 $= 2,801 \pm 0,032$ Мгц. Проведена предварительная оценка
структурных параметров.

М. Р. Алиев

1971

CO(CN)₂структ.
наращеири

Di,

мв. черкп

93228w Microwave spectrum, dipole moment, and quadrupole coupling constants of carbonyl cyanide, CO(CN)₂. Lees, Ronald M. (Dep. Phys., Univ. New Brunswick, Fredericton, N.B.). *Can. J. Phys.* 1971, 49(3), 367-73 (Eng). The microwave spectrum of CO(CN)₂ has been investigated between 8 and 40 GHz. The rotational consts. are $A = 6761.1933$ MHz, $B = 2924.6686$ MHz, and $C = 2037.9934$ MHz. The inertial defect is consistent with a planar structure. Spectra have been obsd. for the 1st and 2nd excited states of a low-frequency in-plane vibration, which is assigned to ν_5 , the symmetric A_1 CCC or CCN bending mode. The vibration-rotation interaction consts. are $\alpha_5^A = -13.396$ MHz, $\alpha_5^B = -13.367$ MHz, and $\alpha_5^C = -1.924$ MHz. The dipole moment is $\mu_b = 0.704 \pm 0.007$ D. The ¹⁴N quadrupole coupling consts. are $\chi_{aa} = -2.846 \pm 0.024$ MHz, $\chi_{bb} = 0.045 \pm 0.016$ MHz, and $\chi_{cc} = 2.801 \pm 0.032$ MHz. With values of 1.22 and 1.165 Å assumed for $r(\text{C:O})$ and $r(\text{C:N})$ and a linear CCN chain, the moments of inertia I_a and I_b are reproduced by values of 1.45 Å and 115°19' for $r(\text{C-C})$ and $\angle \text{CCC}$, resp. RCCN

C. A. 1971. 74. 18

C₃N₂O

1971

(cr.)

105982u Raman spectra of solid carbonyl cyanide. Thomas, Dwaine M.; Bates, John B.; Lippincott, Ellis R. (Cent. Mater. Res., Univ. Maryland, College Park, Md.). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1971, 9(11), 969-71 (Eng). Raman spectra of cryst. and non-cryst. forms of solid carbonyl cyanide (C₃N₂O) were studied at 77°K in the region from 15 to 2500 cm⁻¹. Five bands obsd. at low frequencies ($\nu < 150$ cm⁻¹) were assigned to the lattice modes of cryst. C₃N₂O, and several of the C₃N₂O fundamental modes were obsd. to be split in the spectra of the polycryst. solid. The spectra are interpreted in terms of an orthorhombic C_{2v} space group for cryst. C₃N₂O.

ν_i

C.A. 1972

76.18

1972

CO(CN)₂

170174r Vibrational analyses and mean amplitudes for some simple molecules. III. Carbonyl cyanide. Nayar, V. Unnikrishnan; Aruldas, G.; Joseph, K. Babu; Cyvin, Sven J. (Dep. Phys., St. Thomas Coll., Kozhencherry, India). *Mol. Struct. Vib.* 1972, 237-42 (Eng). Edited by Cyvin, Sven Josef. Elsevier: Amsterdam, Neth. The symmetry coordinates are defined for the planar mol. model WX(YZ)₂ having linear XYZ chains and symmetry C_{2v}. By using this model, the symmetry force consts., mean vibrational amplitudes, and shrinkage effect were calcd. for CO(CN)₂.

аннот.

Ср. квант.

аннот.

Календар.

C.A. 1975. 83 N20

$(CN)_2CO$

#45 - 1544

1973

23 Б35. Теоретическое изучение электронного спектра карбонилцианида. Warren Charles H., Ching Chorman. Theoretical study of the electronic spectrum of carbonyl cyanide. «Theor. chim. acta», 1973, 30, № 1, 1—8 (англ.; рез. нем.)

Электр.
спектр.

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2, а также по схеме ППДП Дель Бенне и Джаффе с учетом взаимодействия 30 однократно возбужденных конфигураций исследовано электронное строение карбонилцианида, $(CN)_2CO$. Рассчитаны распределения электронной плотности и электронный спектр (только по 2-й схеме). Обе схемы свидетельствуют о значит. поляризации (в отличие от формальдегида) π -электронов в направлении C^+-O^- . Частоты вал. кол. $C=O$ 1710 и 1711 соотв. близки к опытной 1712 cm^{-1} . Делокализация электронов в молекуле мала и не должна существенно понизить тройной характер связи $C\equiv N$. Дипольные моменты сильно занижены (0,12 и 0,14D соотв.; опыт

Х. 1973 № 23

0,70). Показано, что низшим по энергии является запрещенный переход $n \rightarrow \pi^*$ -типа $\tilde{A}^1A_2 - \tilde{X}^1A_1$ при 24168 см^{-1} , причем при таком возбуждении связь $\text{C}=\text{O}$ ослабляется и ее длина увеличивается. Два следующих перехода при 39434 и 40777 отнесены к малоинтенсивным $^1A_2 - \tilde{X}^1A_1$ и $^1B_1 - \tilde{X}^1A_1$ (оба $\pi \rightarrow \pi^*$). В области квазинепрерывного поглощения обнаружены два $\pi \rightarrow \pi^*$ -перехода $^1B_2 - \tilde{X}^1A_1$ и $^1A_1 - \tilde{X}^1A_1$ при 43578 и 44040; последний локализован на цианогруппе. Переходы при 47023 и 47034 (оба $\pi \rightarrow \pi^*$) отнесены к $^1A_2 - \tilde{X}^1A_1$ и $B_1 - \tilde{X}^1A_1$ и тоже локализованы на цианогруппе. Переход при 54780 ($n \rightarrow \pi^*$) отнесен к $^1B_2 - \tilde{X}^1A_1$, а переходы при 58183, 60260 и 62240 (все $n \rightarrow \pi^*$) к $^1B_1 - \tilde{X}^1A_1$, $^1A_1 - \tilde{X}^1A_1$ и $^1A_2 - \tilde{X}^1A_1$ соотв. Подробно обсуждены изменения в распределении электронной плотности при возбуждении.

В. Л. Лебедев

41014.185

Ch, TC, Ph

CO(CN)₂
34469

02

1974

2548

Unnikrishnan Nayar V., Aruldas G., Cyvin
S.J. Various mean-square amplitude quan-
tities in carbonyl cyanide.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1974,
12, N 1, 78-79

(англ.)

Р

0210 пик

172 179

ВИНИТИ



кв. мех.
расчет
равнов.
геометрии

В

21980.V6

1979

6 Б18. Структура трициано-иона. DeKock Roger L., Caswell Debra S. Structure of the tri-cyano ion «Inorg. chim. acta», 1979, 37, № 1, L469—L470 (англ.)

Выполнены расчеты полуэмпирич. методом МПДП равновесных геометрий трициано-иона $(CN)_3^-$ (I) и изоэлектронной I молекулы карбонилцианида $OC(CN)_2$ (II). Результаты расчета геометрии II полностью согласуются с экспериментом. Для I исследованы 4 конфигурации: неразветвленные $NCCNCN^-$ [линейная (C_{8v} , Ia) и изогнутая (C_s , Ib)], аналогичная II $[NC(CN)_2]^-$ (C_{2v} , Iv) и циклическая с трехуглеродным циклом (D_{3h} , Ig). Расчеты приводят к след. порядку стабильности структур I: $Iv > Ib > Ia > Ig$. Этот результат согласуется с наблюдаемым в ковалентных молекулах стремлением наиболее электроположит. атомов занимать наиболее центральные положения.

В. Я. Беспалов

OC(CN)₂ [символ 9372] 1980

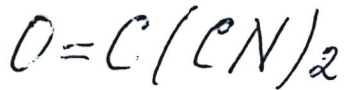
Тыре V, et al.

молекул.
символ.

J. Mol. Struct., 1980,
62, 111-120.

$C_3 N_2 O^+$
 $((CN)_2 CO^+)$ om. 30490 1988
Jacob M. E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 495.



1996

Demailson J.,
Wlodarczyk G. et al.

и.п.

Электронно-
граф. + ИК
спектр,
ab initio
расчет

J. Mol. Struct., 1996,
376, 399 - 411.

