

C-N-Se

C 1609

~~1704-111~~

8766

1952

$\text{Se}_3(\text{CN})_2$, $\text{S}(\text{CN})_2$, P_4S_3 , N_4S_4

Cl_3CSCl (Cmпыкмыра)

Rogers M.T., Gross K.J.

J. Am. Chem. Soc., 1952, 74, 5294-6

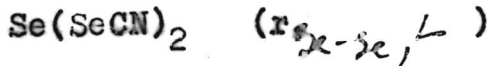
The electric moments of some
sulfur and selenium compounds

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

C.A., 1953, 1444c

5516

1954

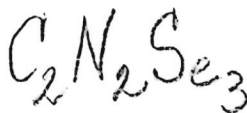


Aknes O., Foss O.

Acta chem., Scand., 1954, 8, № 4,
702-703

The structure of ...

J



$\text{Se}(\text{SeCN})_2$ [7e, $\angle xyz$]

5517 1959

Aksnes O., Foss O.

Acta chem. scand., 1954, 8, N10, 1787-1795. (ann.)

The crystal structure of selenium diselenocyanate.

P.M.X. 1955, 123, 544A.

10

2

5519

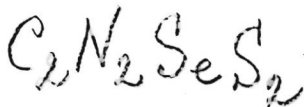
1954



Ohlberg S.M., Vanghan P.A.
J. Amer. Chem. Soc., 1954, 76, no 10,
2649-2651

The crystal structure of

J



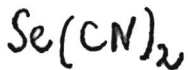
NCS⁻
Спектр

1961

10Б108. Колебательный спектр иона NCS⁻. Morgan H. W. Vibrational spectrum of the NCS⁻ ion. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1961, 16, № 3-4, 367—368 (англ.).—Получены ИК-спектр поглощения кристаллич. KNCS⁻ (таблетки с KBr и суспензии в нуйоле) при комнатной т-ре и 77° K и спектр комб. расс. водн. р-ров KNCS⁻. Произведено следующее отнесение частот для иона NCS⁻ при комнатной т-ре: ν_1 558, $\nu_2(a)$ 424, $\nu_2(s)$ 416, ν_3 2070, ν_3 (для C¹³) 2026 (вычислено 2021), $\nu_3 + \nu_1$ 2632, $\nu_3 + \nu_2(a)$ 2491, $\nu_3 + \nu_2(s)$ 2484, $2\nu_2(a)$ 847, $2\nu_2(s)$ 832 см⁻¹. В спектре комб. расс. найдены 2 частоты при 558 и 2075 см⁻¹, отнесенные соответственно к ν_1 и ν_3 . Расщепление частот ν_2 , $2\nu_2$ и $\nu_3 + \nu_2$ (компоненты обозначены выше через a и s) отнесено за счет влияния кристаллич. структуры по аналогии со спектрами кристаллич. KNCO и KNCS. На основании проведенного отнесения частот рассчитаны силовые коэф. $K(CSe) = 3,88$, $K(CN) = 15,1$ и $K_\sigma/r_1r_2 = 0,25$ в 10⁵ дн/см.

Ю. Харитонов

РЖХ 1962
10Б108



Крыжанов Г. Н.

1984

сим. $\text{no} \bar{1}$.

Ж. Phys. Chem., 1984, 43,
191

Формула симметричной функции
молекулы типа
 $\text{Z}(\text{XY})_2$.

[сим. $\text{S}(\text{CN})_2$]

SeCN

Харитонов Ю.Я.,
Цыццадзе Г.В.,
Норай-Кочин М.А.

1965

ДАН СЕР, 160, N6, 1351

К вопросу о природе цис-
кислых колебательных чае-
тов групп SCN и SeCN
при координировании.



(см. SCN) III

1965

-SeCN

V;

1 Д307. Инфракрасные спектры поглощения неорганических селеноцианатов. Харитонов Ю. Я., Скопенко В. В. «Ж. неорганич. химии», 1965, 10, № 8, 1803—1815

Описаны ИК-спектры поглощения 17 простых и комплексных селеноцианатов: $\text{NaSeCN} \cdot x\text{H}_2\text{O}$, $\text{KSeCN} \cdot x\text{H}_2\text{O}$, TlSeCN , $\text{M}(\text{SeCN})_2$ ($\text{M} = \text{Pb}, \text{Cd}, \text{Hg}$), $\text{Hg}(\text{SeCN})\text{Cl}$; $\text{Pb}(\text{OH})\text{SeCN}$, AgSeCN , $\text{ZnHg}(\text{SeCN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{MHg}(\text{SeCN})_4$ ($\text{M} = \text{Cd}, \text{Cu}, \text{Co}$), $\text{ZnPy}_2(\text{NCSe})_2$ (I) и $\text{MPy}_4(\text{NCSe})_2$ (II) ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Ni}, \text{Co}$). Идентифицированы частоты $\nu(\text{CN})$, $\nu(\text{CSe})$ и $\delta(\text{SeCN})$. В TlSeCN и $\text{Pb}(\text{OH})\text{SeCN}$ обнаружены SeCN -ионы, в I и II — изоселеноцианатогруппы, связанные с атомами металла через атомы азота.

ф. 1966. 10

В остальных соединениях обнаружены мостиковые SeCN-группы. Приведены приближенные частотные интервалы для вал. кол. групп SeCN: ион SeCN $\nu(\text{CN}) \sim 2050\text{—}2100$, $\nu(\text{CSe}) \sim 549\text{—}563$; изоселеноцианатогруппы M—NCSe $\nu(\text{CN}) \sim 2025\text{—}2105$, $\nu(\text{CSe}) \sim 605\text{—}614$; селеноцианатогруппы M—SeCN $\nu(\text{CN}) \sim 2080\text{—}2124$, $\nu(\text{CSe}) \sim 520\text{—}543$; мостиковые группы $\text{M—SeCN—M}^{\text{I}}$ $\nu(\text{CN}) \sim 2135\text{—}2154$, $\nu(\text{CSe}) \sim 528\text{—}639$ см^{-1} .

1965

M 1203

V: (OCN^- , SOCN^- , SeOCN^- , TeOCN^-)

Nagarajan G., Hariharan T.A.

Acta phys.austriaca, 1965, 19, N 4,
349-355

Mean amplitudes of vibration for the
cyanate, thiocyanate, selenocyanate,
and tellurocyanate ions

J

PF., 1966, 4D218

(NCSe) - Venkateswarlu K; Ma- 1965
viam S., Rajalakshmi K.

и. н. Bull. cl. Sci. Acad. roy. Belg;
51, 13, 359-370.

Угловые амплитуды колеба-
ний, эргодич. сокращения и
инвариантные свойства
линейных движений и
иногда XYZ.

БФ-А 589 / Б 20 А - 69

CH₃SeH

(Cuey)
V₂

1966

Vibrational spectrum of methaneselenol. Albert B. Harvey and M. Kent Wilson (Tufts Univ., Medford, Mass.). *J. Chem. Phys.* 45(2), 678-88(1966)(Eng). The ir spectra of CH₃SeH, CH₃SeD, CD₃SeH, and CD₃SeD have been investigated, 250-4000 cm.⁻¹, in both the vapor and the solid states. The Raman spectra of all 4 compds. in the liquid phase have been recorded. A complete vibrational assignment and normal-coordinate calcn. have been carried out. In CD₃SeH a large repulsion exists between the Me wagging mode and the Se-H bending vibration. The far-ir spectrum of CH₃SeH has a broad band centered at $\sim 145 \pm 40$ cm.⁻¹, which is assigned to the torsional vibration. A height of 320 ± 40 cm.⁻¹ for the barrier to internal rotation is calcd. from the torsional frequency. RCTQ

C.A. 1966.65.7
9947a

$(\text{CH}_3)_2\text{Se}$

1966

17 Б241. Микроволновый спектр, дипольный момент, структура и внутреннее вращение диметилселенида. Beecher James F. Microwave spectrum, dipole moment, structure, and internal rotation of dimethyl selenide. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 4, 414—424 (англ.)

В области 9—31 Гц исследованы МКВ-спектры 5 изотопич. модификаций молекулы $(\text{CH}_3)_2\text{Se}$. Найдены следующие значения структурных параметров: $r(\text{CSe}) = 1,943$ и $r(\text{CH}) = 1,093$ А, $\angle \text{CSeC} = 96^\circ 11'$, $\angle \text{HCH} = 110^\circ 18'$ и $2\Theta = 100^\circ 7'$ (2Θ — угол между осями симметрии CH_3 -группы). Из измерений эффекта Штарка найден дипольный момент молекулы, равный $1,41 \pm 0,02$ D. Изучена тонкая структура вращательных спектров в основном состоянии. Определена высота потенциального барьера внутреннего вращения, равная 1500 ± 20 кал/моль.

И. Б.

x. 1987. 17

Se (CN)₂

Linke K. H.,
Gemmer F.

[1966]

Z. Naturforsch., b 21(2), 192

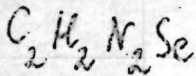
Chemistry of sulfur. LXXXII.

Crystal structures of sulfur
cyanide and selenium
cyanide.

[cr. S(CN)₂]

11-1513

1987



54 Д134. Микроволновый спектр, дипольный момент и постоянные квадрупольной связи 1,2,5-селенодиазола. Blackman G. L., Brown R. D., Burden F. R., Kent J. E. Microwave spectrum, dipole moment and quadrupole coupling constants of 1,2,5-selenadiazole. «Chem. Phys. Letters», 1967, 1, № 9, 379—381 (англ.)

Исследован микроволн. спектр 1,2,5-селенодиазола ($C_2H_2N_2Se^{80}$ и $C_2H_2N_2Se^{78}$) в диапазоне 8—26,5 Гц. Из частот 8 переходов типа 2—1 и 3—2 методом наименьших квадратов найдены следующие значения вращательных постоянных: $A=7855,36$, $B=3875,07$ и $C=2593,58$ Мгц для $C_2H_2N_2Se^{80}$ и $A=7854,40$, $B=3908,21$ и $C=2608,38$ Мгц для $C_2H_2N_2Se^{78}$. Малое значение дефекта инерции $\Delta=0,104$ и $0,096$ аналогично диазолам и фуранам свиде-

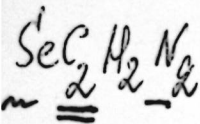
09.1988.4

тельствует о плоском строении молекулы (симметрия C_{2v}). По величине штарковского расщепления линий перехода $2 \leftarrow 1$ ($M=1$) найдено значение дипольного момента $\mu = 1,11 \pm 0,03$ ед. Дебая. Приведены предварительные данные о сверхтонкой структуре ряда переходов и определены приближенные значения постоянных квадрупольной связи $|\chi_{AA}| < 1$ Мгц и $\chi_{CC} (-\chi_{VV}) = 5,2$ Мгц. Из значений вращательных постоянных при некоторых предположениях относительно строения молекулы найдена длина связи N—Se (1,80 Å) и величина валентного угла N—Se—N ($94,31^\circ$).

М. Р. Алиев

ВФ-ХIV-1794

1969



12 Д384. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент 1,3,4-селенадиазола. Levine David M., Krugh William D., Gold L. Peter. The microwave spectrum, structure, and dipole moment of 1,3,4-selenadiazole. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 30, № 3, 459—465 (англ.)

В микроволновом диапазоне исследованы сильные переходы α -типа R -ветви изотопич. образцов молекулы $^{80}\text{SeC}_2\text{H}_2\text{N}_2$ и $^{78}\text{SeC}_2\text{H}_2\text{N}_2$ при комнатной т-ре и давлении 25—50 м. Использован спектрометр со штарковской модуляцией. Показано, что молекула плоская с C_{2v} -симметрией. Определены вращательные постоянные и дипольный момент ($3,40 \pm 0,05$ ед. Дебая). Найдены структурные параметры: длина связи C—Se равна 1,868 Å и угол C—Se—C равен $81,8^\circ$. Г. П.

М.И.

Стр-жа

Ф. 1969. 12В

B9P-XIV-1794

1969

SeC₂H₂N₂

u.b.
Muench

8230m. Microwave spectrum, structure, and dipole moment of 1,3,4-selenadiazole. Levine, David M.; Krugh, William D.; Gold, L. Peter (Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 30(3), 459-65 (Eng). Anal. of the microwave spectrum of 1,3,4-selenadiazole shows the molecule to be planar with C_{2v} symmetry. Rotational consts. of ⁸⁰SeC₂H₂N₂ in MHz. are $A = 8479.55 \pm 2.06$, $B = 3342.64 \pm 0.05$, and $C = 2396.37 \pm 0.04$; for ⁷⁸SeC₂H₂N₂, $A = 8480.70 \pm 1.20$, $B = 3372.69 \pm 0.03$, and $C = 2411.80 \pm 0.03$. Stark effect measurements give a dipole moment of 3.40 ± 0.05 D. An approx. structure assuming some bond lengths from 1,3,4-thiadiazole was fit to the observed moments of inertia giving a C—Se bond length of 1.863 Å. and a C—Se—C bond angle of 8.18°.

RCKP

C.A. 1969. H.2

$(CH_3)_2NCS_2$ $\overset{C-N-S}{\text{---}}$ Мельникова Н.В. 1970

$(C_2H_5)_2NCS_2$ $\overset{C-N-S}{\text{---}}$ пс. приме. спектро-
скопии, 12 (6), 1041

$(C_2H_5)_2NCS_2$

ν_i

(сое. C-N-S-H) III

1970

C-N-Se-coeg

Paetzold R.,
Rönsch &

1

Spectrochim. acta, A26(3),
569.

Anal. not.

(Cell. C-N-S-H) III

$\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$

1970

$\text{SeC}(\text{ND}_2)_2$

6 Б388. К вопросу об интерпретации ИК-спектров поглощения селеномочевины и дейтероселеномочевины. Харитонов Ю. Я., Брега В. Д., Аблоу А. В. «Ж. неорган. химии», 1970, 15, № 11, 3162—3163

Проведен расчет нормальных колебаний $\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$ и $\text{SeC}(\text{ND}_2)_2$ методом вариации. Вычисленные частоты находятся в соответствии с наблюдаемыми. Диагональные силовые коэф. $\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$ равны: $K(\text{CSe}) = 4,80$, $K(\text{CN}) = 11,65$, $K(\text{NH}) = 10,20$, $K(\text{NCN}) = 1,75$, $K(\text{NCSe}) = 1,88$, $K(\text{HNN}) = 0,74$, $K(\text{HNC}) = 0,98$. Результаты расчета показывают, что большинство колебаний $\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$ являются сложными по форме. Я. М. Кимельфельд

см. и.

vi

X. 1971. 6

$\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$

C-N-Se

1970

$\text{SeC}(\text{ND}_2)_2$

72 (47574h) Interpretation of ir absorption spectra of selenourea and deuterioselenourea. Kharitonov, Yu. Ya.; Brega, V. D.; Ablov, A. V. (Inst. Obshch. Neorg. Khim. im. Kurnakova, Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1970, 15(11), 3162-3 (Russ). Anal. of normal vibration modes of $\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$ and $\text{SeC}(\text{ND}_2)_2$ was performed and the assignment of absorption max is tabulated. HMJR

C. A. 1971. 74. 10.

F_3CSeCN

ком.
сп-ра

X. 1972. 12

139-XIV-3749

1971

12 B97. Электронографическое определение молекулярной структуры трифторметилцианида селена. Margden C. J., Sheldrick G. M. An electron diffraction determination of the molecular structure of trifluoromethyl selenium cyanide. «J. Mol. Struct.», 1971, 10, № 3, 413—418 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы F_3CSeCN (I). Найдено, что с полученными эксперим. данными в равной мере согласуются две модели I, различающиеся углом поворота группы CF_3 относительно связи $Se-C(F_3)$. Межъядерные расстояния и углы для физически более разумной модели равны: $C-F$ $1,332 \pm 0,007$, $Se-C(F_3)$ $1,984 \pm 0,020$, $Se-C(N)$ $1,854 \pm 0,016$, $N-C$ $1,152 \pm 0,020$ Å, $CSeC$ $92,2 \pm 2,0^\circ$, $SeCF$ $109,6 \pm 1,2^\circ$, FCF $109,4 \pm 1,2^\circ$; угол отклонения группы CF_3 от шахматного расположения относительно связи $Se-C(N)$ $16,1 \pm 4,0^\circ$. В. Спиридонов

$(\text{Se}(\text{NH})_2)_2$ (vi)
 $(\text{S}(\text{NH})_2)_2$

14 XIV 2859 1971

taken G. B. Duncan J. D.,
McQuillan G. P.

J. Chem. Soc., 1971, A, N16, 2695-2698
(ann.)

Normal co-ordinates for the
planar vibrations of thiowear,
and frequency assignment for
selenowear.

Bikuni, 1972, 45230

10 7

(7)

1971

CS(NH₂)₂CSe(NH₂)₂

Di

17 Б60. Расчет и интерпретация ИК-спектров поглощения тиомочевин, селеномочевин и их дейтеро-производных. Харитонов Ю. Я., Брега В. Л., Аблов А. В., Проскина Н. Н. «Бул. Акад. Шти-инце РССМолд., Изв. АН МолдССР. Сер. биол. и хим. н.», 1971, № 1, 68—77

Произведен анализ плоских нормальных колебаний тиомочевин (I), селеномочевин (II) и их дейтеропро-изводных. Полностью приведены элементы *U*-матриц, рассчитанные значения частот и нормированные формы колебаний. Получено удовлетворительное совпадение ре-зультатов вычислений с эксперим. данными. Показано, что к чисто валентным можно отнести только колеба-ния, связанные с растяжением связи N—H. Параметры силовых полей I и II весьма близки; значения $K(C-S)$ и $K(C-Se)$, принятые в расчете, равны 4,74 и $4,80 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ соотв. В. А. Сипачев

X. 1971. 17

1973

SecN

Hase H.L. Schweig A.

Theor. Chim. Acta. 1973

31(3), 215-20 (Eng)

Ze; 4, 7

CNDO 2 (complete neglect

of differential overlap)

method for third-row molecules.

(em. CeH_x ; III)

41018.6015

Ch, Ph, TC

31603

 $(CH_3)_2NCHSe$

on

1974

2592

Anthony U., Henriksen L., Nielsen P.H.,
Borch G., Klaboe P. Tentative assign-
ments of fundamental vibrations of thio-
and selenoamides. I. N,N-dimethylselenofo-
rmamide. "Spectrochim. acta", 1974, A30,
N7, 1351-1364 (англ.)

0215 пик

175 175 2 0 7

ВИНИТИ

40319.407

Ch, Ph, Te

 CH_3SeCN 31603
колебательный спектр

1974

44 4261

Franklin W. J., Werner R.L., Ashby R.A.
The vibrational spectra of alkyl seleno-
cyanates. "Spectrochim. acta", 1974,
A30, N. 2, 387-398 (англ.)

0065

053 053 0058

ВИНИТИ

CH₃ Se CN (Di)

1974

(X4-4261)

Franklin W. J., Werner R. L.,
Ashby R.

Spectrochim. Acta, A, 1974, 30(A),
387-98

Vibrational spectra of alkyl
selenocyanates

C.A. 1974. 80. N25. 144978z

CH₃NCSe

1974

161545u Vibrational spectra alkyl isoselenocyanates.
Franklin, W. J.; Werner, R. L.; Libby, R. A. (Chem. Dep.,
New South Wales Inst. Technol., Sydney, Aust.). *Spectrochim.
Acta, Part A* 1974, 30A(C), 1293-304 (Eng). The ir spectra of
solid, liq., and gaseous RNCSe (R = Me, Et, Pr, iso-Pr) were
obsd. at 250-4000 cm⁻¹ and vibrational assignments made.
Rotational isomerism about the C α -N bond in the liq. state and
free internal rotation of the Me group in gaseous MeNCSe were
deduced.

(161545u)

C.A. 1974. 84 N24

50504.4702

TC, Ch

58811 GR

CF_3SeCN

(снелр)

1975

*4-8787

Marsden C.J. Spectroscopic investigations of CF_3Se -derivatives. "J. Fluor. Chem.", 1975, 5, N 5, 401-422

(англ.)

ан. CF_3SeH ; III

0350 07/8

329 329

05 4 2

ВИНИТИ

60531.4374

Ph, Ch, TC

31603

 $(NH_2)_2 CSe$

1976

*5-13209

Hadži D., Kidrič J., Knežević Ž.V.,
Barlič B. The normal coordinate analysis
of urea, thiourea, selenourea, and
their isotopic analogues in the solid
phase and in solution. "Spectrochim.
acta", 1976, 432, N 4, 693-704
(англ.)

598 603

627

0635 ЛИХВИНИТИ

CF₃SeCN

1977

3 Б251. Колебательные спектры CF₃SeCl, CF₃SeBr, CF₃SeCN, CF₃SeCH₃, (CF₃)₂Se и (CF₃Se)₂. Clase H. J., Wahi P. K., Bomford D. R. L. Vibrational spectra of CF₃SeCl, CF₃SeBr, CF₃SeCN, CF₃SeCH₃, (CF₃)₂Se and (CF₃Se)₂. «Can. J. Spectrosc.», 1977, 22, № 4, 92—97 (англ.; рез. франц.)

Измерены ИК-спектры газов в области 200—4000 см⁻¹ и спектры КР жидкостей в области 100—4000 см⁻¹ след. соединений: CF₃SeCl (I), CF₃SeBr (II), CF₃SeCN (III), CF₃SeCH₃ (IV), (CF₃)₂Se (V) и (CF₃Se)₂ (VI). Для соединений I—VI вычислены моменты инерции и найдено расстояние между *P*- и *R*-ветвями для контуров полос типа *A*, *B* и *C* в газовой фазе. ИК- и КР-спектры соединений I—III сходны, предложено отнесение наблюдаемых частот в спектрах I—III, используя эффективную симметрию молекул *C_s*, локальную симметрию CF₃Se-группы *C_{3v}*, данные по контурам полос в газовой фазе, данные по степени деполяризации линий КР. Аналогичным образом предложено отнесение наблюдаемых частот в ИК- и КР-спектрах IV (симметрия молекулы *C_s*), V (симметрия *C_{2v}*) и VI (симметрия *C₂*).

С. Б.

4.11.

⊕ A

2.1978,
N3

$(NH_2)_2NH$
• (Se)

И. К.
спектр

Л. 1974
№ 23

23-Б301. — Отнесение колебаний тиосемикарбазидов, селеносемикарбазидов и их дейтероаналогов. Sathya-
nagara D. N., Volka K., Geetharani K. Vib-
rational assignments for thiosemicarbazide and selenose-
micarbazide and their deuterio analogues. «Spectrochim.
acta», 1977, A33, № 3—4, 517—522 (англ.)

Получены ИК-спектры (200—4000 см^{-1}) NH_2-NH-
 $-CX-NH_2$, где $X=S$ (I) и Se (II) и их дейтероана-
логов- d_5 в тв. состоянии. В приближении поля Юри —
Бредли проведен расчет частот и форм норм. кол. для
модели I, II с симметрией C_s . Найденное силовое поле
обеспечивает соответствие рассчитанных частот экспери-
ментальным с точностью до 1%. Полученные данные о
распределении потенциальной энергии по нормальным
координатам показывают, что колебание связи $C=S$
смешано с колебаниями групп $NH_2(ND_2)$ и NCN , а вал.
кол. $C=Se$ в еще большей степени смешаны с коле-
баниями $NH_2(ND_2)$ (754 и 728, 651 см^{-1} для d_5). Не-
характеристичность вал. кол. $C=S$ является причиной
малого сдвига полосы 800 см^{-1} при координации I с
металлами через атом серы (в случае сохранения исход-
ной конфигурации лиганда) и, следовательно, непригод-
ности этой полосы для характеристики связи металл-
лиганд.

М. Комарова

1974

71102.4412

35260GR

1977

^{Ch}
 CF_3SeH , CF_3SeD , CF_3SeCN and CF_3SeCH_3

Wahi P.K., Patel N.D. Normal

Co-ordinate analysis of CF_3SeH , CF_3SeD ,
 CF_3SeCN and CF_3SeCH_3 . "Can. J. Spectrosc.",
1977, 22, N 4, 88-91

(англ., рез. франц.)

XIV-9390

0994 лнк

973 974

ВИНИТИ

отмечен 5-813

E-H-N-Sr

1978

12 B242. Селеноацетамид: отнесение частот колебаний и анализ нормальных координат. Gayathri Devi K. R., Sathyanarayana D. N., Volka K. Selenoacetamide: vibrational assignments and normal coordinate analysis. «Spectrochim. acta», 1978, A34, № 12, 1137—1139 (англ.)

(2i)

Получены ИК-спектры ($3600-250\text{ см}^{-1}$) селеноацетамида и селеноацетамида- d_2 . Дано отнесение частот колебаний. Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний молекул, используя силовые поля тиацетамида и ацетамида. Полученное распределение потенциальной энергии колебаний по нормальным координатам позволило уточнить отнесение частот колебаний. Вычислена частота торсионного колебания Ме-группы, 153 см^{-1} . Барьеры внутреннего вращения вокруг CN связи и барьер вращения Ме-группы составляют $13,4$ и 469 см^{-1} соотв. Величины барьеров близки к найденным для ацетамида и тиацетамида. И. А. Гарбузова

2.1979, N12

CH_3SeCN

ammuch 7298

1978

90: 63830z The microwave spectrum of methyl selenocyanate (CH_3SeCN). Landsberg, B. M. (Phys.-Chem. Inst., Univ. Giessen, Giessen, Ger.). Z. Naturforsch., A 1978, 33A(11), 1333-40 (Eng). The microwave spectra was detd. for the isotopic species $^{12}\text{CH}_3^{80}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{12}\text{CH}_3^{78}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{12}\text{CH}_3^{77}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{12}\text{CH}_3^{76}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{12}\text{CH}_3^{82}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{13}\text{CH}_3^{80}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ and $^{13}\text{CH}_3^{78}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$. For the main isotopic species, a full centrifugal distortion anal. is reported and internal rotation splittings were analyzed for the ground and 1st excited torsional states, and also for the $v_{10} = 1$ and $v_{10} = 2$ excited vibrational states. A structure based on a mixt. of r_s and r_o arguments is reported, and also the principal components of the dipole moments.

Mr. B. Cuckrip

C.A. 1979, 90, N8

CH_3SeCN

mmmm + 298

1978

13 Б238. Микроволновый спектр метилселеноцианата (CH_3SeCN). Landsberg B. M. The microwave spectrum of methyl selenocyanate (CH_3SeCN). «Z. Naturforsch.», 1978, A33, № 11, 1333—1340 (англ.)

Измерены в области частот от 16 до 40 ГГц МВ-спектры семи изотопич. образцов метилселеноцианата $^{12}\text{CH}_3^{80}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (I), $^{12}\text{CH}_3^{78}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (II), $^{12}\text{CH}_3^{77}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{12}\text{CH}_3^{76}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{12}\text{CH}_3^{82}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, $^{13}\text{CH}_3^{80}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (III), $^{13}\text{CH}_3^{78}\text{Se}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ в основном колебательном состоянии, I в трех возбужденных колебательных состояниях и II и III в одном возбужденном колебательном состоянии. При анализе спектров использован гамильтониан с пятью квартичными постоянными центробежного искажения. Для всех образцов и состояний определены вращательные постоянные и дефекты инерции. Для I вращательные постоянные равны (в МГц) $A=10143,867(31)$, $B=3483,6892(24)$, $C=2631,6454(24)$ и постоянные центробежного искажения (в кгц) $D_J=1,101(34)$, $D_{JK}=13,79(17)$, $D_K=223(16)$, $\delta_J=0,4026$.

М. В. Скляр

2. 1979, № 13

(47), $\delta_K = 10,8(2,4)$. Из анализа полученных данных определена возможная структура молекулы $r[(H_3)C-Se] = 1,956 \text{ \AA}$, $r[Se-C(N)] = 1,837 \text{ \AA}$, $r(C \equiv N) = 1,170 \text{ \AA}$, $r[C-H] = 1,08 \text{ \AA}$, $\angle H-C-Se = 107,0^\circ$, $\angle C-Se-C = 96,1^\circ$. Из величины расщепления линий из-за внутреннего вращения вычислены параметры $V_3 = 1243,7(10)$ и $1258,2(5)$ кал/моль, соотв., для основного и первого возбужденного торсионных состояний. По эффекту Штарка для двух переходов измерены компоненты дипольного момента $\mu_a = 4,18(5) D$ и $\mu_b = 0,74(3) D$ и полный дипольный момент $\mu = 4,24(5)$. С. Н. Мурзин

CH_3SeCN

оптисси 7298

1978

м. в. спектр

6 Д529. Микроволновый спектр метилселеноцианата. Landsberg B. M. The microwave spectrum of methyl selenocyanate (CH_3SeCN). «Z. Naturforsch.», 1978, A33, № 11, 1333—1340 (англ.)

В диапазоне 18—40 Гц исследован микроволн. спектр молекулы CH_3SeCN . Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 42$ молекулы $^{12}\text{CH}_3^{80}\text{Se}-^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ и ряда переходов 6 ее изотопич. разновидностей (с замещением Se и C) в основном колебательном состоянии и в первых двух возбужденных состояниях колебания ν_{10} (крутильное колебание метильной группы) для основных изотопич. видов. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных, барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3 \approx 1570$ ккал/моль) и дипольного момента ($\mu_a = 4,18$, $\mu_b = 0,74$, $\mu_{\text{общ}} = 4,24$ ед. Дебая). Вычислены структурные r_s -параметры CH_3SeCN : $\text{H}_3\text{C}-\text{Se} = 1,956$, $\text{Se}-\text{CN} = 1,837$, $\text{C} \equiv \text{N} = 1,170$, $\text{C}-\text{H} = 1,08$ Å, $\text{H}-\text{C}-\text{Se} = 107,0^\circ$, $\text{C}-\text{Se}-\text{C} = 96,1^\circ$.

М. Р. Алиев

Ф. 1979, № 6

CH_3SeCN

оттиски 4487

1978

14 Б240. Микроволновый спектр, барьер внутреннего вращения и дипольный момент метилселеноцианата. Sakaiizumi Takeshi, Kohri Yoshio, Ohashi Osamu, Yamaguchi Ichiro. Microwave Spectrum, Barrier to Internal Rotation, and Dipole Moment of Methyl Selenocyanate. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1978, 51, № 12, 3411—3417 (англ.)

Измерены в области частот от 8,0 до 35,5 ГГц МВ-спектры метилселеноцианата $\text{CH}_3^{80}\text{SeCN}$ (I) и его ^{82}Se , ^{78}Se , ^{77}Se , ^{76}Se -изотопозамещенных в основном колебательном состоянии, а также $\text{CD}_3^{80}\text{SeCN}$ (II) и ^{78}Se -изотопозамещенных I в основном и первом возбужденном состояниях торсионной моды метила. Во всех случаях в приближении жесткого волчка определены вращательные постоянные, главные моменты инерции и дефекты инерции. Для I и II, соотв., вращательные постоянные в основном колебательном состоянии равны (в МГц) $A=10146(2)$ и $8322,31(81)$, $B=3483,57(4)$ и

м. в. спектр
I
м. и

ж. 1979, № 14

3308,06(2), $C=2631,58(4)$ и $2436,92(1)$. Из анализа $A-E$ расщепления в спектрах I и II, вызванного внутренним вращением метильной группы, определены высота барьера внутреннего вращения для CH_3 и CD_3 , соотв., 1241(50) и 1223(50) кал/моль. По эффекту Штарка для 4 переходов определены для I и II, соотв., компоненты дипольного момента $\mu_a=4,35(4)$ и $4,31(4)$ D, $\mu_b=0,76(10)$ и $0,67(7)$ D и полный дипольный момент $\mu=4,42(5)$ и $4,36(4)$ D. При ряде допущений определены структурные параметры I: $r(C\equiv N)=1,160$ Å, $r(Se-CN)=1,851$ Å, $r(C-Se)=1,950$ Å, $\angle H-C-H=112,0^\circ$, $\angle C-Se-C=95,57^\circ$ и расстояния между несвязанными атомами водорода метильной группы I $r(H...H)=1,795(4)$ Å и атомами дейтерия II $r(D...D)=1,799(1)$ Å.

С. Н. Мурзин

Commun. 7481 1978

CH_3SeCN

M. S. Chuvp
M. N. No.

90. 129736g Microwave spectrum, barrier to internal rotation, and dipole moment of methyl selenocyanate. Sakaizumi, Takeshi; Kohri, Yoshio; Ohashi, Osamu; Yamaguchi, Ichiro (Fac. Sci. Technol., Sophia Univ., Tokyo, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1978, 51(12), 3411-17 (Eng). Microwave rotational spectra of 5 isotopic species of Me selenocyanate (MeSeCN with ^{82}Se , ^{80}Se , ^{78}Se , ^{77}Se , and ^{76}Se). Microwave rotational spectra of 5 isotopic species of Me selenocyanate (MeSeCN with ^{82}Se , ^{80}Se , ^{78}Se , ^{77}Se , and ^{76}Se) in the ground vibrational state, and 2 isotopic species of Me selenocyanate- d_3 (CD_3SeCN with ^{80}Se and ^{78}Se) in the ground and 1st excited states of the Me torsional mode were assigned in the 8.0 to 35.5 GHz frequency range. For the most abundant species in the ground vibrational state, the rotational consts. detd. are $A_a = 10147 \pm 2$, $B_a = 3483.57 \pm 0.04$,

C.A. 1979, 90, N16

A and $C = 263.58 \pm 0.04$ MHz for $\text{Me}^{80}\text{SeCN}$ and $A = 8322.57 \pm 0.81$, $B = 398.06 \pm 0.02$, and $C = 2436.92 \pm 0.01$ MHz for $\text{CD}_3^{80}\text{SeCN}$. Anal. of the splittings gave a barrier ht. to the Me internal rotation of 1241 ± 50 and 1228 ± 50 cal/mol for the Me and CD_3 sp. lies, resp. Stark measurements yielded the principal axis dipole moments of $\mu_a = 4.35 \pm 0.04$, $\mu_b = 0.76 \pm 0.10$, and the total dipole moment of $\mu = 4.42 \pm 0.05$ D for $\text{Me}^{80}\text{SeCN}$, and $\mu = 4.31 \pm 0.04$, $\mu_b = 0.67 \pm 0.07$, and $\mu = 4.36 \pm 0.04$ D for $\text{CD}_3^{80}\text{SeCN}$. The direction of the dipole moment in the molecule is discussed.

CH_3SeCN

фотоэл.
спектр

x. 1979, № 6

16 Б132. Исследование с помощью УФ фотоэлектронной спектроскопии электронного строения некоторых тиио- и изотиоцианатов и их селеносодержащих аналогов. Andreocci M., Bossa M., Furlani C., Piancastelli M. N., Cauletti C., Tarantelli T. Ultraviolet photoelectron spectroscopic investigation of electronic structure of some organic thio- and isothio- cyanates and their selenium analogues. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 1, 105—112 (англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры (ФС) CH_3SCN (I), CH_3SeCN (II), Ph_2CHSCN , Ph_2CHSeCN , Ph_2CHNCS , $\text{Ph}_2\text{CHNCSSe}$, Ph_3CNCS , и Ph_3CNCSSe . Отнесение орбитальных потенциалов ионизации (ПИ) дано на основании эмпирич. корреляций ФС между собой и расчетов I и CH_3NCS неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО и методом ППДП/2. Первые ПИ I и II отнесены к ионизации n , π и σ орбиталей фрагментов SCN и SeCN. ПИ I и II имеют след. значения (эВ): I 10,04, 12,08, 12,90; II 9,68, 11,76 12,6. Замена атома S на Se приводит к небольшому понижению ПИ в ряду тииоцианатов, в ряду изотиоцианатов этот эффект отсутствует. В ФС фенилзамещенных ионизац. полосы NCS и SCN фрагментов перекрываются с ионизац. полосами фенильных колец.

В. Фаустов

Оттиски 7112 1979

HNCSe

9 Б216. Микроволновый спектр изоселеноциановой кислоты, HNCSe. Landsberg B. M. The microwave spectrum of isoselenocyanic acid, HNCSe. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 2, 265—270 (англ.)

Измерены в области частот от 14 до 24 Гц МВ-спектры четырех изотопич. образцов изоселеноциановой кислоты. $\text{H}^{14}\text{N}^{12}\text{C}^{80}\text{Se}$ (I), $\text{H}^{14}\text{N}^{12}\text{C}^{78}\text{Se}$ (II), $\text{H}^{14}\text{N}^{13}\text{C}^{80}\text{Se}$ (III) и $\text{D}^{14}\text{N}^{12}\text{C}^{80}\text{Se}$ (IV). Анализ спектров выполнен в приближении квазилинейной молекулы без учета центробежного искажения. Для I, II, III и IV, соотв., вращательные постоянные в основном колебательном состоянии равны (в Мгц) 3933,242; 3956,495; 3896,277 и 3661,358. Из анализа СТС I определена постоянная квадрупольного взаимодействия $eQq=1,17$ Мгц. По штарковскому сдвигу трех М-компонент перехода $J=3-2$ определен дипольный момент $I \mu_a=1,98 D$. Полученные данные использованы для расчета r_s -структуры I. При ряде допущений структурные параметры равны $r(\text{H}-\text{N})=0,99$, $r(\text{N}=\text{C})=1,195$, $r(\text{C}=\text{Se})=1,717$ А, $\text{HNC}=143^\circ$. Значения структурных параметров согласуются с данными для родственных молекул HNCO и HNCS .

С. Н. Мурзин

м. в. спектр,
гравитационный
модуль

2. 1979, № 9

XIV-9219

HNCSe emmuc 7112
XIV-2219

1979

А. В. Савин
Савин.
Савин.

90: 94705s The microwave spectrum of isoselenocyanic acid, HNCSe. Landsberg, B. M. (Phys.-Chem. Inst., Justus-Liebig- Univ., Giessen, Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 60(2), 265-70 (Eng). A new mol. species was detected by passing HBr gas through AgNCSe, which is shown by consideration of the rotational consts. of the 4 isotopic species $H^{14}N^{12}C^{80}Se$, $H^{14}N^{12}C^{78}Se$, $H^{14}N^{13}C^{80}Se$ and $D^{14}N^{12}C^{80}Se$ to be HNCSe. The spectrum is consistent with that of a quasilinear mol. A preliminary structure was detd. having $r(H-N) = 0.99 \text{ \AA}$, $r(N=C) = 1.195 \text{ \AA}$, $r(C=Se) = 1.717 \text{ \AA}$ and mean H-N-C angle of 143° . The quadrupole interaction parameter $eQq = 1.17 \text{ MHz}$ and the dipole moment component $\mu_a = 1.98 \text{ D}$ were also detd.

C.A. 1979, 90 n 12

HNCSe

Оттиски 7112

1979

5 Д462. Микроволновый спектр изоселеноциановой кислоты (HNCSe). Landsberg B. M. The microwave spectrum of isoselenocyanic acid HNCSe . «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 2, 265—270 (англ.)

По микроволн. спектру в диапазоне 8—40 Гц впервые идентифицирована молекула HNCSe , полученная при реакции HBr с AgNCSe . Идентифицированы линии вращательных переходов с $J=2 \leftarrow 1$ и $3 \leftarrow 2$ шести изотопич. разновидностей HNCSe и пяти изотопич. разновидностей DNCSe в основном колебательном состоянии и в трех возбужденных колебательных состояниях. Определены значения вращательной постоянной B , из которых вычислены структурные параметры HNCSe : $\text{HN} = 0,99$, $\text{NC} = 1,195$, $\text{CSe} = 1,717$ Å; $\text{HNC} = 143^\circ$. Измерены также дипольный момент (1,98 ед. Дебая) и постоянная квадрупольной связи ядра азота (1,17 МГц).

М. Р. Алиев

м. в. спектр
структур.
параметр.

XIV-9219

Ф. 1979.15

C_2H_5-SeCN

1979

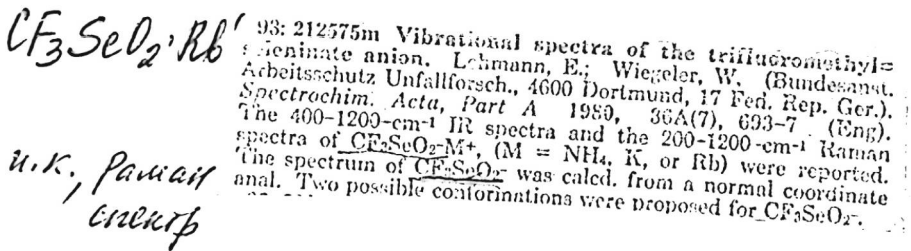
М. В. Суслов, ✓
Суслов,
Япония.

93: 176230j Microwave spectra of ethyl selenocyanate. Sakaizumi, Takeshi; Itakura, Takayaki; Ohhashi, Osamu; Yamaguchi, Ichiro (Coll. Sci. Technol., Sophia Univ., Tokyo, Japan). *Koen Yoshishu - Bunshi Kozo Sogo Toronkai* 1979, 158-9 (Japan). Chem. Soc. Japan: Tokyo, Japan. Stark-modulated microwave spectra were measured at 8.2-35.0 GHz, and rotational consts. and inertial defects detd. for gauche $Et^{80}SeCN$ and $Et^{78}SeCN$. The results are discussed in relation to the rotational isomers.

C. A. 1980. 93 n 18



1980

(+2) ☒

C. A. 1980. 93 v 22

ClSeCN

1981

2 Д793. УФ фотоэлектронная спектроскопия нестабильных молекул ClSeCN и BrSeCN и стабильной молекулы $\text{Se}(\text{CN})_2$. Ultraviolet photoelectron spectroscopy of the unstable molecules ClSeCN and BrSeCN and the stable $\text{Se}(\text{CN})_2$. Jonkert G., Mooyman R., De Lange C. A. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 3, 655—667 (англ.)

спектры, I

Изучены HeI-фотоэлектронные спектры нестабильных молекул ClSeCN (I) и BrSeCN (II) и HeI- и HeII-фотоэлектронные спектры стабильного соединения $\text{Se}(\text{CN})_2$ (III). Вертикальные потенциалы ионизации I—III равны (в эв): I—10,19, 12,43, 12,9, 12,82, 13,49, 13,85, 14,90, 16,95; II—9,99, 11,69, 12,24, 12,56, 13,25, 13,54, 14,41, 16,76; III—10,96, 13,13, 13,25, 13,36, 13,82, 13,95, 14,39, 13,21, 18,70. Спектры I—III интерпретированы при помощи неэмпирич. расчетов энергий МО I—III, анализа колебательной структуры полос, анализа относит. интенсивностей в HeI- и HeII-спектрах III, сравнения с фотоэлектронными спектрами родственных соединений. Библ. 28.

Ю. В. Чижов

⊠
(+2)

Ф. 1982, 18, № 2.

ClSeCN

1981

Vi;

4 Б222. Ультрафиолетовые фотоэлектронные спектры нестабильных молекул ClSeCN и BrSeCN и стабильной молекулы Se(CN)₂. Jonkers G., Mooyman R., Lange C. A. Ultraviolet photoelectron spectroscopy of the unstable molecules ClSeCN and BrSeCN and the stable Se(CN)₂. «Mol.-Phys.», 1981, 43, № 3, 655—667 (англ.)

Исследованы ФЭ-спектры нестабильных молекул ClSeCN (I) и BrSeCN (II) и стабильной молекулы Se(CN)₂ (III). Проведено отнесение полос сопоставлением со спектрами родственных молекул и на основании результатов расчета орбитальных энергий I—III. Расчет выполнен методом ХФ в базе функций слэтеровского типа.

Из резюме.

72

X. 1982, 19, ~4

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

1981

Jonkers G., et al.

ν_1 ; Mol. Phys., 1981, 43, 13,
655-667.

(cur. ClSeCN ; III)

BrSeCN

1981

Jonkers G., et al.

Mol. Phys., 1981, 43,

vi;

N3, 655-667.

●
(cur. ClSeCN; III)

BrSeCN

1981

Jonkert G., et al.

Mol. Phys., 1981, 43, N3,
655-667.

список,
γ.

●
(см. ClSeCN; III)

$(\text{NH}_2)_2 \text{Ce}$

Оммуек 15679

1982

сильно. поле
и среднем
амплитуды
колебаний

Campos M., Diatk G.,

Z. Naturforsch., 1982,
A37, n 11, 1289-1291.

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

1982

2 Б138. Эффекты нарушения симметрии в фотоэлектронном спектре с возбуждением He-I валентных уровней $\text{Se}(\text{CN})_2$. Broken symmetry effects in the He(I) valence photoelectron spectrum of $\text{Se}(\text{CN})_2$. Jonkers G., de Lange C. A., Noodleman L., Baerends E. J. «Mol. Phys.», 1982, 46, № 3, 609—620 (англ.)

С помощью дискретного вариационного X_α -метода (ДВМ- X_α) в базисе аналитич. слэтеровских функций рассчитаны электронное строение и энергии ионизации (ЭИ) молекулы $\text{Se}(\text{CN})_2$. Расчеты проводились в представлении о симметрии молекулы C_{2v} (симм. решения) и C_s (решения с нарушенной симметрией). Результаты расчетов ЭИ сопоставлены с эксперим. фотоэлектронным спектром (ФЭС). Локализация МО неподеленной пары азота в $\text{Se}(\text{CN})_2$ лучше описывается результатами расчета с нарушением симметрии молекулы. Энергия релаксации в C_s -случае имеет большую величину, чем в C_{2v} случае, и теор. ЭИ лучше согласуются с экспериментом. Для π_{CN} — МО при нарушении симметрии мо-

У, электрон-
строение

X. 1983, 19, № 2

лекулы можно ожидать существенного взаимодействия «правого» и «левого» состояний фрагментов CN. Результаты расчетов ЭИ при нарушении симметрии устранили противоречия в предыдущем отнесении структур ФЭС молекулы $\text{Se}(\text{CN})_2$. Локализованное описание фотоионизации является предпочтительным, когда происходит существенное увеличение энергии релаксации электронной системы вследствие образования локализованной вакансии.

И. А. Тополь

SeF_5NCO

1983

Oberhammer Heinz,
Seppelt Konrad, et al.

рефер.,
ссылки.

J. Mol. Struct., 1983,
101, N 3-4, 325-331.

(ссылка SF_5NCO ; III)

HNCSe

отт. 19291

1984

21 Б1233. Инфракрасный спектр изоселеноциановой кислоты, HNCSe. Infrared spectrum of isoselenocyanic acid, HNCSe. Vogt J., Winnewisser M. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1984, 88, № 5, 439—443 (англ.)

В области $400-4000\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры газ. HNCSe (I) и изолированной в Ag-матрице при 10 K (Ag:к-та=1:500). К плоскостным колебаниям ν_1 (ν_{NH}), ν_2 ($\nu_{\text{as}}\text{NCSe}$), ν_3 ($\nu_{\text{s}}\text{NCSe}$) в газ. фазе и матрице отнесены, соотв., полосы 3535 ; 1957 ; 625 см^{-1} и $3516,4$; $1957,9$; $617,6\text{ см}^{-1}$. Измерение интегральной интенсивности полосы ν_2 во времени показало, что разложение I является р-цией второго порядка ($\text{HNCSe} \rightleftharpoons \text{HCNSe}$).

Н. Л. Арюткина

ИК спектр

Х. 1984, 19, № 21

HNCSe

от. 19291

1984

11 Л264. ИК-спектр изоселеноциановой кислоты, HNCSe. Infrared spectrum of isoselenocyanic acid, HNCSe. Vogt Jürgen, Winnewisser Manfred. «Ber. Bunsenges. Phys. Chem.», 1984, 88, № 5, 439—443 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($3800\text{--}400\text{ см}^{-1}$), молекул HNCSe (I) в газовой фазе и в твердой аргоновой матрице при $t\text{-ре } 10\text{ К}$. Проведено сопоставление колебательных спектров I, HNCO и HNCS. Изучена кинетика разложения молекул I в газовой фазе. Выполнен колебательный анализ спектров I. ИК-полосы 3535 , 1957 и 625 см^{-1} приписаны колебаниям ν_1 , ν_2 и ν_3 соответственно. Показано, что точное положение максимумов ИК-полос 760 , 583 , 521 и 419 см^{-1} маскируется наборами подуровней ИК-полос деформационных колебаний ν_4 , ν_5 и ν_6 . Предположено, что молекулы I обладают квазилинейным строением и принадлежат к группе симметрии C_s . Отмечено, что быстрый изотопный обмен H/D в дейтерированных аналогах I препятствует регистрации ИК-спектров этих молекул. Библи. 29. И. В. А.

ИК-спектр,
 ν_i , л.п.,
структура
ф. 1984, 18,
№ 11

HNCSe

(Om. 19291) 1984

(1984)

101: 14285n Infrared spectrum of isoselenocyanic acid, HNCSe. Vogt, Juergen; Winnewisser, Manfred (Phys. Chem. Inst., Justus-Liebig-Univ., D-6300 Giessen, Fed. Rep. Ger.). *Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem.* 1984, 88(5), 439-43 (Eng). The prepn. of gaseous isoselenocyanic acid, HNCSe, has been considerably improved. This unstable mol. decays in the gaseous phase according to a 2nd-order reaction. In the IR region, the vibrational spectrum of HNCSe was measured in the gaseous phase and in an Ar matrix at low resolu. The combined anal. of the vibrational spectra of HNCSe yielded the assignment of the A' fundamental vibrations. From the gaseous phase absorptions $\nu_1 = 3535 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2 = 1957 \text{ cm}^{-1}$, and $\nu_3 = 625 \text{ cm}^{-1}$ could be assigned. The bands in the gas phase spectrum at 760, 583, 521, and 419 cm^{-1} cannot be considered as band centers. They are the result of the superposition of the subband structures of the bonding modes ν_4 , ν_5 and ν_6 exhibiting quasilinear behavior. This can be deduced from the wavenumber positions of $\nu_4 = 508 \text{ cm}^{-1}$ and $\nu_5 = 419 \text{ cm}^{-1}$ obsd. in the Ar matrix spectra. Due to the rapid H/D exchange the IR spectrum of DNCSe could not be measured.

(ν_1, ν_2)

C.A. 1984, 101, N2

HNCSe

DM 29280

1984

1'Л145. Миллиметровый спектр и структура изо-селеноциановой кислоты HNCSe . Millimeter wave spectrum and structure of isoselenocyanic acid, HNCSe . Vogt Jürgen, Winnewisser Manfred. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1984, 88, № 5, 444—450 (англ.)

Определены константы вращения и центробежного искажения для основного колебательного состояния пяти изотопных модификаций молекул кислоты HNCSe . Значения указанных констант использованы для оценки параметра квазилинейности молекулы (определяемого как соотношение значений энергий низшего состояния, соответствующих единичному и нулевому значениям колебательного квантового числа). Представлены рассчитанные и наблюдаемые частоты вращательных переходов основного колебательного состояния, обсуждена схема их классификации. На основе сравнения с молекулярными параметрами других представителей группы 4-атомных кислот (HNCO и HNCS) обоснован вывод о большей линейности рассматриваемых соединений, характеризующихся соответственно большей величиной центробежной деформации. Библ. 21. В. И. Л.

М.Л.

ср. 1985, 18, №1

HNCSe

(Am. 19280)

1984

101: 100413j Millimeter wave spectrum and structure of iso-selenocyanic acid, HNCSe. Vogt, Juergen; Winnenwieser, Manfred (Phys. Chem. Inst., Justus-Liebig-Univ., D-6300 Giessen, Fed. Rep. Ger.). *Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem.* 1984, 88(5), 444-50 (Eng). The rotational a -type spectra of the 5 most abundant isotopomers of HNCSe were recorded in natural abundance. By using Watson's S -reduced Hamiltonian, the rotational and some centrifugal distortion consts. were detd. for the ground vibrational state of the various isotopic species. With the aide of these consts., the r_e -structure of HNCSe was refined, and the parameter specifying the quasilinearity of the mol. was estd.

(run cncmp)

C.A. 1984, 101, N12

HNCSe

от. 19280

1984

22 Б1269. Миллиметровый спектр и структура изо-селениановой кислоты, HNCSe. Millimeter wave spectrum and structure of isoselenocyanic acid, HNCSe. Vogt J., Winnewisser M. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1984, 88, № 5, 444—450 (англ.)

На миллиметровом спектрометре с 2, 6м-поглощающей ячейкой измерены в области частот 15—221 ГГц вращательные спектры 5 изотопич. образцов нестабильной квазилинейной молекулы изоселениановой кислоты [HNC⁸²Se (I), HNC⁸¹Se (II), HNC⁷⁸Se (III), HNC⁷⁷Se (IV) и HNC⁷⁶Se (V)] в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с использованием S-представления гамильтониана Ватсона с учетом квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения. В предположении, что для всех изотопич. образцов вращательная постоянная $A=1700$ МГц определены вращательные постоянные I, II, III, IV и V

И. Л. Шенер,
структура

X. 1984, 19, № 22

соотв. $B=3918,7995$ (10), $3941,0395$ (5), $3964,3844$ (8), $3976,4752$ (7) и $3988,9173$ (9) МГц, $C=3903,3977$ (10), $3925,4638$ (5), $3948,6243$ (8), $3960,6188$ (7) и $3972,9620$ (9) МГц. Полученные результаты вместе с данными по МВ-спектру использованы для определения r_s -структуры молекулы. Длины связей равны $r(\text{SeC})=1,719$, $r(\text{CN})=1,192$, $r(\text{NH})=0,99$ А; углы между связями составляют $\angle \text{SeCN}=175^\circ$, $\angle \text{CNH}=140^\circ$. Из полученных данных оценен параметр нелинейности молекулы $\gamma_0=0,46$.
С. Н. Мурзин

$\text{HCN} \cdot \text{H}_2\text{Se}$

1986

Minckley Alan.

ab initio THEOCHEM 1986,
pariem 29(1-2), 193-99.

(ca. $\text{HCN} \cdot \text{NH}_3$; III)

CH_3NCS

1986

Krieglewski Marek.

Wiad. Chem. 1986,
40 (11-12), 803-29.

повиборн.
спектр,
структура

(сери.  CH_3NCS ; III)

$C_2H_5NCS_2$

DM. 24591 1986

23 Б1327. Микроволновый спектр этилизоселенидната. The microwave spectrum of ethyl isoselenocyanate. Sakaizumi T., Iida K., Ohashi O., Yamaguchi I. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1986, 59, № 6, 1991—1995 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 10—28 ГГц с ширинами линий поглощения менее 1,5 МГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов этилизоселенидната, $CH_3CH_2NC^{80}Se$ (I) и $CH_3CH_2NC^{78}Se$ (II), в основном ~~колебат.~~ состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения. Для I и II, соотв., вращат. постоянные равны (МГц): $A = 15\,140(23)$ и $15\,112(28)$, $B = 1090,443(16)$ и $1099,865(12)$, $C = 1029,261(16)$ и $1037,745(12)$. На основе полученных МВ-данных определена возможная структура I с 4 тяжелыми атомами и 4 атомами водорода, расположенными в плоскости и вне плоскости симметрии соотв. При нек-рых допущениях вычислены структурные параметры $r(C-N) = 1,444(10) \text{ \AA}$, $r(N-C) = 1,210(10) \text{ \AA}$, $\angle CNC = 158,0(3,0)^\circ$. С. Н. Мурзин

(и.п.)

X. 1986, 19, N 23

CH₃NCSe

[Am. 24171]

1986

Sakaizumi T., Yasuka-
wa A., Miyamoto H., et al.,

УФ-излучение.

Спектр,

и т.д.

Bull. Chem. Soc. Jap.,
1986, 59, N 5, 1614-1616.

CH_3SeCN

(Im. 25879) 1986

У 11 Б1276. Микроволновый спектр и молекулярная структура метилселенцианата. The microwave spectrum and molecular structure of methyl selenocyanate. Sakai zumi T., Obata M., Takahashi K., Sakaki E., Takeuchi Y., Ohashi O., Yamaguchi I. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1986, 59, № 12, 3791—3795 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре

М.П.

Х. 1987, 19, № 11

в обл. частот 8,0—37 ГГц измерены вращат. спектры 6 изотопич. образцов метилселеницианата, $\text{CH}_3^{80}\text{SeCN(I)}$, $\text{CH}_3^{78}\text{SeCN}$, $\text{CH}_3^{80}\text{Se}^{13}\text{CN}$, $\text{CH}_3^{87}\text{SeC}^{15}\text{N}$, асимм- $\text{CH}_2\text{D}^{80}\text{SeCN}$ и симм- $\text{CH}_2\text{D}^{80}\text{SeCN}$ в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров 6 образцов вместе с МВ-данными для образца $^{13}\text{CH}_3^{80}\text{SeCN}$ выполнен с учетом квартичного центробежного искажения. Вращат. постоянные I равны (МГц): $A=10\,143,93$ (35), $B=3483,665$ (33), $C=2631,619$ (33). Определена полная замещ. структура молекулы. Группа CH_3 ориентирована зигзагообразно по отношению к группе CN . При этом группа CH_3 не обладает симметрией C_{3v} , а длина связи $\text{Se}-\text{C}(\text{CN})$ намного короче связи $\text{Se}-\text{C}(\text{CH}_3)$ и последовательность связей $\text{Se}-\text{C}-\text{N}$ линейна.

С. Н. Мурзин

$(CH_3)_3NSO_2$

1987

9 Б1223. Микроволновый спектр и структура комплекса с переносом заряда триметиламин-диоксид серы. Microwave spectrum and structure of the trimethylamine-sulfur dioxide charge-transfer complex. LaBarge M. S., Matos J., Hillig II, K. W., Kuczkowski R. L. «J. Amer. Chem. Soc.», 1987, 109, № 23, 7222—7223 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом с точностью около 2,6 кГц измерены вращат. спектры двух изотопич. образцов комплекса с переносом заряда, триметиламин — $^{32}SO_2$ (I) и триметиламин — $^{34}SO_2$ (II), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квартичного центробежного искажения и ^{14}N -ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I и II, соотв., вращат. постоянные равны в МГц $A=3179,789(6)$ и $3172,628(50)$, $B=1720,319(1)$ и $1703,240(3)$, $C=1503,603(1)$ и $1492,122(2)$. Длина связи $r(NS)$ ле-

М.А.

X. 1988, 19, 119

жит между 2,25 и 2,30 Å, а углы наклона по отношению к N—S-оси осей симметрии триметиламина равны $\alpha = 19(5)^\circ$ и SO_2 $\beta = 91(2)^\circ$. С. Н. Мурзин



CCLNSe^+ [om. 30490] 1988

(ClSeCN^+) Jacob M.E.,

J. Phys. and Chem. Ref.
Ti, Vi; Data, 1988, 17, N2, 395.

CBrNSe^+

(BrSeCN^+)

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 395.

$C_2N_2Se^+$ [om. 30490] 1988
($Se(CN)_2^+$) Jacob M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N 2, 457.

CH₃NCSe

OM 33579

1990

KON. GRAUS.
НОСМОВИЧ.

112: 16S127b The microwave spectrum of methyl isoseleno-
cyanate: CH₃NCSe as a quasi-symmetric top. Koput, J.; Stroh,
F.; Winniewisser, M. (Dep. Chem., Adam Mickiewicz Univ., 60-780
Poznan, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 140(1), 31-45 (Eng).
The microwave spectrum of MeNCSe was measured at 18-40 GHz.
The a-type $J + 1 \leftarrow J$ rotational transitions ($J = 5-10$) in the
ground vibrational state of MeNCSe were assigned for the 3 isotopic
species with ⁸²Se, ⁸⁰Se, and ⁷⁶Se. For the most abundant isotopic
species(⁸²Se), the rotational transitions in the excited states of the
CNC bending mode $\nu_{10} = 1$ and 2 were assigned. Contrary to the
previous investigation (Sakaizumi, T., 1986), the obsd. spectrum is
consistent with that of a quasi-sym. top mol. The rotation-vibration
const's. were detd., showing an unusual variation with excitation of
the CNC bending mode. The CNC bending potential function was
detd. in preliminary calcs. using a quasi-sym. top model. The
potential function was calcd. as anharmonic, with an equil. CNC
angle of $\sim 162^\circ$ and a barrier to linearity of the CNCSe skeleton of
 ~ 25 cm⁻¹. From accidental resonances obsd. for the ground state
transitions the barrier to internal rotation of the Me group was estd.
as ~ 3 cm⁻¹.

c.A. 1990, 112, N 18

1991

HNCSe. Palmer Michael H.

U.N. J. Mol. Struct. 1991.
246, N3-4. C. 321-338.

(cur.  HN₃; III)

HNCS

структура.
параметры
барьер, теор.
расчет и
эксперим.

1992

Palmer M.H.,
Guest M.F.

Chem. Phys. Lett.
1992, 196 (1-2),

● 183-90.
(см. HN_3 ; III)

CH_3NCSe

структурн.
параметры
барьер, теор.
расчёт и
эксперим.

1992

Palmer M. H.,
Guest M. F.

Chem. Phys. Lett.
1992, 196 (1-2),
183-190.

(ссылка на HN_3 ; III)

$(\text{NH}_2)_2\text{C}:\text{Se}$

1994

Ma, Tae-Kyu; Puebla,
Claudio,

Vi, ab initio

Chem. Phys. 1994,
181 (1-2), 47-55

(all. $(\text{NH}_2)_2\text{C}:\text{O}; \text{III}$)

2000

F: CH3SeCN

P: 3

133:110242 A theoretical study of the molecular structure and vibrational spectra of methyl cyanate and its sulfur and selenium analogues.

Babinec, P.; Leszczynski, J. Computational Center for Molecular Structures and Interactions, Department of Chemistry, Jackson State University

Jackson, MS 39217, USA THEOCHEM, 501-502, 277-284 (English) 2000. Ab initio electronic

structure calcns. at the MP2, Becke3LYP, and CCSD levels in conjunction with 6-311++G(d,p) basis set are used for detg. the structure of equil. and the

top-of-barrier Me conformers of $\text{CH}_3\text{-XCN}$ ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$) mols. Energy min. structures for all substituents correspond to the staggered and top-of-barrier structures to the eclipsed conformations, each having C_s point-group symmetry.

At the MP2 and Becke3LYP levels vibrational anal. was performed. For Me cyanate and Me thiocyanate, the theor. IR spectra are compared with the exptl. obtained values. For the structural and vibrational parameters, there is excellent agreement between the theor. and the available exptl. data.