

C2N20

C_2N_2O

1968

Hexter R.M.,
Hend C.W.

кременов.
дискрет

Appl. Optics, 1968, 7,

no 11, 2161

(См. Учен.
заметки) (III)

1970

 C_2N_2O

ИК-спектр

18 Б1031. Импульсный фотолиз смесей озон—дициан. Hand Clifford W., Hexter Robert M. Flash photolysis of ozone-cyanogen mixtures. «J. Amer. Chem. Soc.», 1970, 92, № 7, 1828—1831 (англ.)

При импульсном фотолизе смесей $C_2N_2 + O_3$ образуются два неустойчивых продукта с общей ф-лой C_2N_2O . Один из этих продуктов образуется по р-ции внедрения $O(^1D)$ по связи $C-C$: $N \equiv C-C \equiv N + O(^1D) \rightarrow \rightarrow N \equiv C-O-C \equiv N$ (полосы поглощения в ИК-спектрах при 2205 и 2282 $см^{-1}$), а другой по р-ции: $C_2N_2 + O(^3P) \rightarrow \rightarrow C_2N_2O$ (полосы поглощения при 2282 и 2252 $см^{-1}$).

А. Шведчиков

+1

X. 1970. 18.



10408.9041

Ch, Ph

$\text{CO}(\text{CN})_2$ (ном
стр 74)
35247

1971
XIV 490

Lees R.M. Microwave spectrum, dipole
moment, and quadrupole coupling constants
of carbonyl cyanide, $\text{CO}(\text{CN})_2$. "Can. J. Phys.",
1971, 49, N 3, 367-373

(англ.)

ЕСТЬ СВЯЗЬ
3338 ПИК
ВАНН.

319 323 329

ВИНИТИ

NCNCO

1973

12 Б210. Микроволновый спектр и структура изоцианата циана. Hocking W. H., Gerry M. C. L. Microwave spectrum and structure of cyanogen isocyanate. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1973, № 2, 47—48 (англ.)

Приведены предв. результаты исследования МВ-спектра молекулы NCNCO. Идентифицированы линии вращательных переходов типа «a» и «b» (наличие переходов типа «b» указывает на нелинейную структуру молекулы NCNCO) в основном и в первых 4 возбужденных колебательных состояниях. Определены вращательные постоянные $A=74358,7$, $B=2699,04$, $C=$

$=2597,87$ МГц и оценены значения длины связи $C-N$ (1,283 Å) и угла $C-N-C-140^\circ$. М. Р. Алиев

(м.ч.)

2/1/73
XIV-11X

2. 1973 №12

NCNCO

XIV-4712

1973

M.N.

(F) 90480u Microwave spectrum and structure of cyanogen isocyanate. Hocking, W. H.; Gerry, M. C. L. (Dep. Chem., Univ. B.C., Vancouver, B.C.). *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1973, (2), 47-8 (Eng). The microwave spectrum of NCNCO indicated that the mol. was a slightly asym. prolate rotor and was bent although there were significant contributions from linear resonance forms.

C.A. 1973. 78 N14

NCNCO

XIV-442

1973

Д 5 Д444. Микроволновый спектр и структура молекулы NCNCO. Hocking W. H., Gerry M. C. L. Microwave spectrum and structure of cyanogen isocyanate. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1973, № 2, 47—48 (англ.)

рем.

(vi)

Из исследования микроволн. переходов *a*- и *b*-типа молекулы NCNCO определены ее структурные параметры. В предположении линейности N—C—N и N—C—O цепей вычислено, что длина связи C—N равна 1,283 Å, а угол между этими цепями 140,0°.

Г. П.

ф. 1973 N 5

NCNCO

44-13625

1976

24 Б250. Микроволновый спектр циан изоцианата (NCNCO). Hocking W. H., Gerry M. C. L. The microwave spectrum of cyanogen isocyanate (NCNCO). «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 3, 338—354 (англ.)

Измерен МВ-спектр циан изоцианата NCNCO в основном и первых трех возбужденных состояниях наиболее низкочастотного колебания в области частот от 8 до 37 ГГц. Идентифицировано 70 переходов в основном состоянии и 60 переходов в возбужденных колебательных состояниях. При помощи гамильтониана в представлении Уотсона для всех состояний определены вращательные постоянные, моменты инерции и постоянные

ХИМ-409

м.п.; геометр.

Х. 1976. N 24

центробежного искажения четвертого и шестого порядка. В основном состоянии вращательные постоянные в Мгц: $A=74358,690$, $B=2699,0367$, $C=2597,8663$. По эффекту Штарка для пяти переходов определены в дебаях компоненты дипольного момента: $\mu_a=2,488\pm0,010$, $\mu_b=0,476\pm0,020$ и полный момент: $\mu=2,533\pm0,011$. При ряде предположений относительно структуры молекулы определены два структурных параметра: $r(\text{NC}=\text{NCO})=1,283 \text{ \AA}$, $\angle \text{CNC}=140^\circ$. Полученные результаты сопоставлены с данными для родственных молекул. На основе измеренных спектроскопич. постоянных вычислены частоты 29 МВ-переходов, представляющих астрофиз. интерес.

С. Н. Мурзин

NCNCO

XU-13625

1976

12 Д383. Микроволновый спектр NCNCO. Hocking W. H., Gerry M. C. L. The microwave spectrum of cyanogen isocyanate (NCNCO). «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 3, 338—354 (англ.)

В области 8—37 Гц при комнатной т-ре исследован микроволн. спектр газообразной молекулы NCNCO в основном и в первых трех возбужденных колебательных состояниях. Получены значения вращательных постоянных, постоянных центробежного искажения и моментов инерции. Показано, что молекула в основном состоянии плоская, типа асимметричного волчка. Найден дипольный момент и его компоненты: $\mu_{\text{общ}} = 2,533 \pm \pm 0,011$; $\mu_a = 2,488 \pm 0,010$ и $\mu_b = 0,476 \pm 0,020$ ед. Дебая. Определена молекулярная структура. Проведено ее сравнение со структурой родственных молекул. Библ. 22/

м. в. спектр
(м.м.)

XIV-4094

ф 1976 N 12

NCNCO

XU-13625

1976

184: 113835d. The microwave spectrum of cyanogen isocyanate (NCNCO). Hocking, W. H.; Gerry, M. C. L. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, B. C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, **59**(3), 338-54. (Eng). The microwave spectrum of cyanogen isocyanate was measured in the ground state and 1st 3 excited states of the lowest frequency vibration. Rotational constants, centrifugal distortion constants, and moments of inertia were obtained. The mol. is a planar asymmetric rotor in its ground state, but shows considerable evidence of quasi-linearity. The dipole moment was measured, and, along with the structure, is compared with that of related mole.

(M. B. Cunniff)

XU-13625

C. A. 1976.84 v16

70708.4679

Ph, Ch, AR

NCN₃, NCNCO

сменщик, массен. код. 1977-312

Frost D.C., Kretz H.W., McDowell C.A.,
Westwood N.P.C. "The HoI photoelectron spec-
tra of the isoelectronic molecules, cy-
anogen azide, NCN₃, and cyanogen isocyan-
ate, NCNCO." J. Electron. Spectrosc. and Relat.
Phenom.", 1977, 11, N 2, 147-156 (англ.)

881 888) U 1 0910 нск. БИНИТМ.

1978

CCNVO

Poppinger Dietes et al.

J. Amer. Chem. Soc. 1978,
100, N^o 12, 3674-85

расей
равнов.
весов

см. CHNO - III

NCNCO
NCOCN

литиса 6730

1978

21 Б55. Изоцианат циана и дициановый эфир: неэмпирическое изучение геометрий и электронных структур. Rosenberg Heidi, Olsen John F., Howell James M. Cyanogen isocyanate and dicyanoether: ab initio studies of geometries and electronic structures. «J. Mol. Struct.», 1978, 48, № 2, 249—258 (англ.)

Выполнены неэмпирич. расчеты в миним. гауссовом базисе ОСТ-3ГФ молекулы изоцианата циана NCNCO (I) и ее изомера — дицианового эфира NCOCN (II), а также изоэлектронной молекулы недоокиси углерода C_3O_2 (III). Проведена полная оптимизация геометрий I—III в предположении планарности этих молекул. Согласно расчету, равновесная конфигурация III линейна, а I—W-образна с длинами связей $R(N-C) = 1,16$ А, $R(C-N') = 1,384$ А, $R(N'-C') = 1,256$ А, $R(C-O) = 1,176$ А и углами $NCN' = 176^\circ,1$, $CN'C' = 123^\circ$, $N'C'O = 168^\circ,7$. Барьер инверсии центрального азота составляет ~ 5 ккал/моль, причем инверсия сильно связана с изгибом фрагментов OCN и NCN. Расчетная

гауссов

ΔE

□

2.1978, N21

равновесная конфигурация II аналогична таковой I и характеризуется параметрами $R(N-C)=1,159$ А, $R(C-O)=1,366$ А, $\angle OCN=175^\circ,7$, $\angle OSC=111^\circ,8$. Однако в отличие от довольно гибкой молекулы I II — весьма жесткая частица: барьер инверсии кислорода найден равным ≈ 50 ккал/моль, хотя, по всей вероятности, эта цифра преувеличена главным образом из-за дефектов, присущих миним. базису. Энергия изомеризации $\Delta E = E_{II} - E_I$ найдена равной ~ 7 ккал/моль. Приводятся орбитальные энергии (ОЭ) и результаты анализа заселенностей по Малликену для равновесной и линейной конфигураций I и II. Высшей занятой МО как I, так и II является МО π -типа с ОЭ 9,4 эв (I) и 11,0 эв (II). Расчетные дипольные моменты молекул I и II в их равновесных конфигурациях равны соотв. 2,38 и 1,42 D.

В. Я. Беспалов

Я
нно.

NCNCO
(NC)₂O

оттиски 6730 1978

11 Д223.- Изоцианат циана и дициановый эфир: неэмпирическое исследование геометрии и электронного строения. Rosenberg Heidi, Olsen John F., Howell James M. Cyanogen isocyanate and dicyanoether: ab initio studies of geometries and electronic structures. «J. Mol. Struct.», 1978, 48, № 2, 249—258 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовских ф-ций ОСТ-3ГФ исследовано электронное строение и равновесная геометрия изоцианата циана, NCNCO (I) и его изомера — дицианового эфира (NC)₂O (II). Молекула I найдена довольно гибкой с барьером инверсии вокруг центрального атома С ~5 ккал/моль, что больше значений, полученных из оценок по микроволн. спектрам (1,4—3 ккал/моль), тогда как II — жесткая молекула (барьер инверсии порядка 50 ккал/моль). Обе молекулы обладают транс-изогнутой плоской конформацией (М-образной), аналогичной системе изомеров HNCO—HOCN. Изомер I

рассчет
геометрии
и

ф. 1978 № 12

более стабилен. Дипольные моменты оценены в 2,38
(2,53) и 1,42 ед. Дебая соответственно.

В. Л. Лебедев



NCNCO

Оттиск 6730

1978

расчет
геометрии
и

11 Д223. Изоцианат циана и дициановый эфир: неэмпирическое исследование геометрии и электронного строения. Rosenberg Heidi, Olsen John F., Howell James M. Cyanogen isocyanate and dicyanoether: ab initio studies of geometries and electronic structures. «J. Mol. Struct.», 1978, 48, № 2, 249—258 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовских ф-ций ОСТ-3ГФ исследовано электронное строение и равновесная геометрия изоцианата циана, NCNCO (I) и его изомера — дицианового эфира ~~(NC)₂O~~ (II). Молекула I найдена довольно гибкой с барьером инверсии вокруг центрального атома С ~5 ккал/моль, что больше значений, полученных из оценок по микроволн. спектрам (1,4—3 ккал/моль), тогда как II — жесткая молекула (барьер инверсии порядка 50 ккал/моль). Обе молекулы обладают транс-изогнутой плоской конформацией (М-образной), аналогичной системе изомеров HNCO—HOCN. Изомер I

Ф. 1978 №11

NCNCO

оттиски 6896

1978

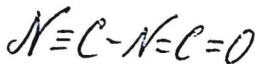
5 Б51. Изучение геометрической структуры NCNCO в рамках метода частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Samanta Swadesh Ranjan, Shaikh Ali Uddin, Ali Mahamed Asgar. Indo study of the geometrical structure of NCNCO. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1978, 75, № 7—8, 703—705 (англ.)

геометрич.
структура

В рамках метода ЧПДП изучена геометрия и электронное строение молекулы NCNCO (I). Длины связей были взяты из эксперимента, а угол $\angle \text{CNC}$ (α) варьировали от 90° до 180° . Минимуму полной энергии отвечает угловая геометрия $\alpha = 120^\circ$, что согласуется с данными МВ-спектров. Дипольный момент I, оцененный в 4,26 D, обусловлен главным образом атомными вкладками (связанными с гибридизацией АО). Найдено, что центральный атом N и связанные с ним атомы C заряжены положительно, а концевой атом N и кислород — отрицательно. Расчет индексов Уайберга, показывает, что I можно описать структурой $\text{N}=\text{C}-\text{N}=\text{C}=\text{O}$ с крайне небольшим π -сопряжением через центральный атом N.

П. Н. Дьячков

2.1979/15



[патент 8755]

1979

7 Б260. О молекулярной структуре газообразного цианизоцианата $\text{N} \equiv \text{C} - \text{N} = \text{C} = \text{O}$. Bak Borge, Svanholt Henrik, Holm Arne. On the molecular structure of gaseous cyanogen isocyanate, $\text{N} \equiv \text{C} - \text{N} = \text{C} = \text{O}$. «Acta chem. scand.», 1979, A33, № 8; 597—599 (англ.)

масс-спектр.

Получены микроволновые спектры молекул $\text{N} \equiv \text{C} - {}^{15}\text{N} = \text{C} = \text{O}$ и ${}^{15}\text{N} \equiv \text{C} - \text{N} = \text{C} = \text{O}$, являющихся продуктами пиролиза 5-оксо-1,3-2,4-дитиadiaзола, обогащенного изотопом ${}^{15}\text{N}$. На основе анализа спектров предложены две структурные модели молекулы с несколько отличающимися параметрами: I $\text{N} \equiv \text{C}$ 1,164, $\text{C} - \text{N}$ 1,303, $\text{N} = \text{C}$ 1,218, $\text{C} = \text{O}$ 1,165 Å, $\angle \text{N} \equiv \text{C} - \text{N}$ 180, $\angle \text{C} - \text{N} = \text{C}$ 138,47, $\angle \text{N} = \text{C} = \text{O}$ 180°; II $\text{N} \equiv \text{C}$ 1,164, $\text{C} - \text{N}$ 1,345, $\text{N} = \text{C}$ 1,218, $\text{C} = \text{O}$ 1,165 Å, $\angle \text{N} \equiv \text{C} - \text{N}$ 172, $\angle \text{C} - \text{N} = \text{C}$ 129,0, $\angle \text{N} = \text{C} = \text{O}$ 169°.

В. Спиридонов

Х. 1980 N 7

Х. 1980 N 7

$N:C-N:C:O$.

Qmmu 8755

1979

BP-XIV-9017

✓92: 85156c On the molecular structure of gaseous cyanogen isocyanate, $N:C-N:C:O$. Bak, Boerge; Svanholt, Henrik; Holm, Arne (Chem. Lab. V, Univ. Copenhagen, Copenhagen, DK-2100 Den.). *Acta Chem. Scand., Ser. A* 1979, A33(8), 597-9 (Eng). The microwave spectra of $N:C-^{15}N:C:O$ and $^{15}N:C-N:C(O)$ were obtained after the pyrolysis of 5-oxo-1,3,2,4- $\equiv$ dithiadiazole. The mol. model of $N:C-N:C:O$ presented by W. H. Hocking and M. C. L. Gerry (1976) may be slightly modified.

молеку.

сфигур.

CA 1980 92 N10

СННСО

оттиски 8141

1979

22562. Изомеризация цианид — изоцианид в структурных изомерах изоцианата циана. Moffat J. B. Cyanide-isocyanide isomerization in the structural isomers of cyanogen isocyanate. «Int. J. Quantum Chem.», 1979, 15, № 5, 547—557 (англ.; рез. франц., нем.)

полнены неэмпирич. расчеты в миним. базисе Г-3ГФ с оптимизацией геометрии 7 изомеров состава C_2N_2O : NCNCO (I), CNNCO (II), NCOCN (III), NCO-NC (IV), NCCNO (V), CNCNO (VI), CNONC (VII), а также 4 изомеров HNCO (IX), HO-CN (X), HONC (XI) и HCNO (XII). Из перечисленных молекул линейными ($C_{\infty v}$) оказываются только V, VI и XII. Найден след. порядок стабильности изомеров: $VI < VII < V < IX < XII < XI < I$ и $XII < XI < IX < X$. При пересчете IX—XII в базисе 6-31ГФ, однако, IX оказывается более стабильным, чем X. Оптимизированы геометрии переходных состояний 4 р-ций изомеризации цианид — изоцианид и найдены след. энергии и барьеры изомеризации (ккал/моль): $V \rightarrow VI$, 29,8, 67,5; $I \rightarrow II$, 42,2, 84,3; $IV \rightarrow VII$, 41,4, 106,8; $III \rightarrow IV$, 44,6, 107,9. Обнаружена грубая

изв. м.м.
расчет

и_v

х. 1979, 122

корреляция между энергиями изомеризации и изменениями полного заряда группы CN (q_{CN}), а также изменениями заселенностей перекрывания рвущихся и образующихся связей. Найдена также приближенная линейная зависимость между барьерами изомеризации $XCN \rightarrow XNC$ и величинами полной вариации заряда CN (определяемой как $|q^{\neq}_{CN} - q_{CN}(XCN)| + |q^{\neq}_{CN} - q_{CN}(XNC)|$), а также заселенностями перекрывания связей C—X и N—X в переходном состоянии. В. Я. Беспалов

NCDCN

Omniuck 13819

1982

Barone V., Cristinziano P.,

Lehy F., Russo N.,

государств.,
Институт
структур,
М, У.

J. Biol. Struct., 1982,
● 86, N3, 239-253.

НССНО

[дей. 24/95]

1986

растений
Европы и
Барьер
измер.

Чаркун О. П.,
Зюбинска Т. С.

Координат. системы,
1986, 12, N 8, 1011-1037.

NCNCD

(OM. 28650)

1987

lik crump,
Londan-
racmonn

Devore T. C.,

y. dol. Street, 1987,
162, N3-4, 287-304.



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

1987

№ 6 Б1329. Внутримолекулярное силовое поле карбонилцианида. Intramolecular force field of carbonyl cyanide. Mohan S., Durai S. «Indian J. Phys.», 1987, В61, № 2, 125—129 (англ.)

Методом кинетич. постоянных рассчитано силовое поле молекулы карбонилцианида, $\text{CO}(\text{CN})_2$ (I), имеющей плоскую структуру симметрии C_{2v} . Обсуждены корреляции между полученными силовыми постоянными и внутримолек. динамикой I. С полученным силовым полем рассчитаны величины среднеквадратичных и средних амплитуд колебаний, постоянных центробежно-го искажения и кориолисовых постоянных колебательно-вращат. взаимодействия. Г. М. Курамшина

М.П.

Х. 1988, 19, № 6

(CO)(CN₂)

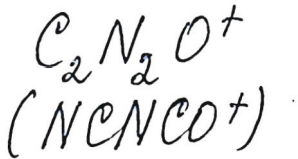
1987

З Д77. Внутримолекулярное силовое поле карбонилцианида. Intramolecular force field of carbonyl cyanide. Mohan S., Durai S. «Indian J. Phys.», 1987, B61, № 2, 125—129 (англ.)

Методом FG-матриц Вильсона выполнен анализ норм. координат карбонилцианида (CO)(CN₂). На основе обобщенного валентно-силового поля найдены характеристические силовые постоянные связей молекулы. Для получения наиболее реального набора силовых постоянных использованы среднеквадратичные амплитуды, средние амплитуды и постоянные центробежного искажения молекулы. Силовая постоянная f_{C-C} оказалась меньше, чем ожидалось для C—C связи, имеющей гибридизацию sp^2-sp . Это объяснено удлинением связи и увеличением эффективного положительного заряда на центральном атоме C вследствие индуктивного влияния C≡N-группы, что приводит к увеличению ионного характера C—C связи.

И. П. Яковлев

ф 1988, 18, №3



[om. 30490]

1988

Jacox M. E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N2, 447.

NCNCO

Ross S.C.

1988

(ν_7, ν_9) *J. Mol. Spectrosc.*
1988, 132 (1), 48-49.

($\text{car. } \bullet \text{OCCCS; III}$)

NCNCO

1995

5) 18 Б145. Теоретическое исследование NCNCO и его изомеров. Theoretical study of NCNCO and its isomers / Fehér Miklós, Pasinszki Tibor, Veszprémi Tamás // Inorg. Chem. — 1995. — 34, № 4. — С. 945—951. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31ГФ* с учетом электронной корреляции по МП2 исследовано электронное строение 25 цианатов, изоцианатов, нитрилоксидов и фульминатов, содержащих CN- и NC-группы, и их серу- и селенсодержащих аналогов. Приведены равновесная геометрия, гармонические колебательные частоты, обсуждена относит. стабильность изомеров и проанализированы возможные пути изомеризации.

Н. Л.

М.Л.

Х. 1995, N 18

NCNCO

1995

122: 170650s Theoretical Study of NCNCO and Its Isomers. Feher, Miklos; Pasinszki, Tibor; Veszpremi, Tamas (Institut fuer Physikalische Chemie, Universitaet Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Inorg. Chem.* 1995, 34(4), 945-51 (Eng). Various cyanates, isocyanates, nitrile oxides, and fulminates substituted with CN- or NC- groups, as well as their sulfur and selenium analogs, were investigated by ab initio calcns. at the MP2/6-31G* level. Equil. geometries were detd., and harmonic vibrational frequencies were calcd. at these points. Relative stabilities of different isomers were compared. Transition states connecting the stable structures were also investigated, and possible isomerization pathways were suggested.

структур.
парам., ν ,
стабильн.,
теор. расчет

С.А. 1995, 122, N 14

1995

F: NCCNO

P: 3

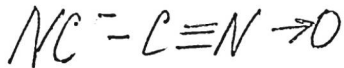
11B1235. Образование в газовой фазе и спектроскопия нестабильных молекул NCCNO. Gas-phase generation and spectroscopy of the unstable NCCNO molecule / Pasinszki Tibor, Westwood Nicholas P. C. // J. Chem. Soc. Chem. Commun. - 1995. - N 18. - С. 1901-1902. - Англ.

Молекулы NCCNO, образующиеся в результате газофазного пиролиза (550°) дицианофуроксана при низком давлении, исследованы методами фотоэлектронной спектроскопии (eI), ИК-фурье-спектроскопии и фотоионизационной (линии H L['альфа','бета','гамма']) масс-спектрометрии. В ФЭС наблюдали полосы, связанные с ионизацией следующих МО: 11,28 эВ, 'пи'[nb](CNO); 17,08 эВ, 'пи'[b](CNO); 13,8-14,5 эВ, N[p'сигма'], 'пи'(CN). В ИК-спектре наблюдали интенсивные полосы 1442 и 2328 см⁻¹, связанные с симметричным и антисимметричным валентными колебаниями фрагмента CNO, полоса

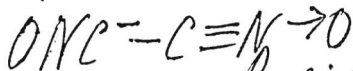
X. 1996, N11

валентного колебания азот-углерод при 2129 см^{-1} и ряд малоинтенсивных полос - $722, 511, 409\text{ см}^{-1}$, отнесенных соотв. к $\nu_4(\text{C-C, вал.})$, $\nu_5(\text{CNO, 'дельта'})$, $\nu_6(\text{NCC, 'дельта'})$. Остальные полосы интерпретированы как обертоны и составные переходы. Согласно выполненным неэмпирич. расчетам молекула имеет линейную структуру, рассчитаны $B_e=2,2493\text{ ГГц}$ и $\mu=0,072\text{ Д}$.





1996



Pasinszki Tiber et al.,

M.H. 23 Eur. Congr. Mol. Spectrosc.,
Balatonfured, 25-30 Aug,
1996. C. 70

P.M.H.N 12, 1997, 12 5 1256

NCCNO

OT 38475

1996

125: 311178v Ground, Excited, and Ionic States of the NCCNO Molecule: A He I Photoelectron, Infrared, Ultraviolet, and ab Initio Investigation. Pasinszki, Tibor; Westwood, Nicholas P. C. (Guelph-Waterloo Centre for Graduate Work in Chemistry, University of Guelph, Guelph, ON Can. N1G 2W1). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(42), 16856-16863 (Eng). The cyanogen N-oxide mol. NCCNO was recently identified in the gas phase. NCCNO, generated from its stable ring dimer dicyanofuroxan by low-pressure thermolysis, is characterized by He I UPS, photoionization mass, UV, and IR spectroscopies. From stop-flow and revaporization expts. the mol. may be categorized as semistable, having a lifetime of a few hours in the dil. gas phase. The ground state mol. geometry and vibrational frequencies are explored with ab initio calcns. at the MP3, QCISD, and QCISD(T) levels for comparison with expt. The std. correlated methods have some difficulty with the structure; d. functional theory gives results closer to recent microwave data and suggests that bigger basis sets are necessary. The mol. is predicted to have a large amplitude deformation, suggesting possible quasi-linear behavior. For the ionic states, the semiempirical HAM/3 method gives

photoion., UK,
y p u ab
initio param.
cmp-PA
u M.H.

C.H. 1996, 125, v24

very good agreement with the measured ionization energies. The low lying singlet excited states, optimized at the CIS level of theory, assist with the interpretation of the UV spectrum. Taken together, the ab initio calcns. and the spectroscopic data suggest that both the ground state mol. and the ion have linear structures, but the lowest $\pi^* - \pi$ electronic transition leads to a mol. strongly bent in the lowest excited singlet state.

NCCNO

1996

125: 341483h High resolution infrared spectroscopy of cyano-gen N-oxide, NCCNO. Guo, Bujin; Pasinszki, Tibor; Westwood, Nicholas P. C.; Zhang, Keqing; Bernath, Peter F. (Cent. Mol. Beams Laser Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(11), 4457-4460 (Eng). The authors report here on the 1st high resolu. IR absorption spectra of the semistable nitrile oxide, NCCNO. All of the fundamental modes of vibration (except for the lowest-frequency bending mode) and several combination bands were measured with a Fourier transform spectrometer at a resolu. of 0.005 cm^{-1} . The authors present analyses of ν_4 , the C-C stretching mode at $714.75394(6) \text{ cm}^{-1}$, ν_6 , the NCC bending mode at $403.92597(6) \text{ cm}^{-1}$, $\nu_6 + \nu_7$ at $490.12362(6) \text{ cm}^{-1}$, and the tentatively assigned $\nu_3 + \nu_6$ combination band at $826.29186(8) \text{ cm}^{-1}$. A simultaneous least squares fit of these 4 bands gives ground state rotational consts. of $B_0 = 0.077, 08554 - (34) \text{ cm}^{-1}$ and $D_0 = 4.570(30) \times 10^{-9} \text{ cm}^{-1}$.

UK chemist,
M.A., Bo, Do

C.A. 1996, 125, n 26

1996

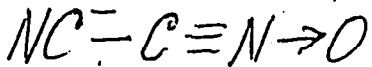
F: N2C2O

P: 3

16Б134. Основное, возбужденные и ионизированные состояния молекулы NCCNO. Исследование методами фотоэлектронной (HeI), ИК-, УФ-спектроскопии и методами неэмпирического расчета [квадратичным методом КВ и методом МПЗ]. Ground, excited, and ionic states of the NCCNO molecule: A HeI photoelectron, infrared, ultraviolet, and ab initio investigation / Pasinszki Tibor, Westwood Nicholas P. C. [Journal of Physical chemistry] // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 42. - С. 16856-16863. - Англ.

Место хранения ГПНТБ

РЖХ 1994



1996



23 Eur. Congr. Mol. Spectrosc.,
a.n. Balatonfured, 25-30 Aug.,
1996; Book Abstr. S.L., [1996].

C. 70.



NCCNO

1997

126: 284239c Microwave spectrum and geometry of cyanogen N-oxide, NCCNO. Brupbacher, Th.; Bohn, R. K.; Jager, W.; Gerry, M. C. L.; Pasinski, T.; Westwood, N. P. C. (Department Chemistry, University British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Z1). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 181(2), 316-322 (Eng), Academic. The microwave spectrum of cyanogen N-oxide, NCCNO, was studied at $\nu = 4-23$ GHz, using a pulsed jet Fourier transform microwave spectrometer. The spectrum is that of a linear mol. Transitions of 5 isotopomers were analyzed, and r_0 , r_s , and r_{ls} geometries were detd. The geometry and the ^{14}N nuclear quadrupole coupling consts. were used to compare NCCNO to similar mols. Though the present data indicate strongly that the mol. is truly linear, they are insufficient to rule out quasi-linear behavior completely.

(Yb crrmp)

C. A. 1997, 126, N21

F: C₂N₂O

P: 3

130:257531 Electronic structure and hybridization effects in hypothetical orthorhombic carbon oxynitride. Ivanovskii, Alexander L.; Medvedeva, Nadezhda I.; Shveikin, Gennady P. (Institute of Solid State Chemistry, Ur Branch, Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg 620219, Russia). Mend Commun., (1), 34-35 (English) 1999

The quantum-chem. examn. of the electronic structure and hybridization of the valence states in the orthorhombic Si₂N₂O and hypothetical C₂N₂O comp suggests that the cohesive properties can be improved by the substitution carbon for silicon in a silicon oxynitride crystal.

NCCNO [Dm. 41173]

2001

Jack Koput[†],

J. Phys. Chem., 2001, A105,
11347-350

Ab Initio Study on the
Equilibrium Structure

and CCN Bending Energy
Levels of Cyanofulminate
(NCCNO).