

CNHO

7277 - IV

1875

HON

м.

HN CN

кр.

HONO

CHI

кр.

CN

CHCl

п.

HT^o

Berthelot

25. Ann. chim. phys. 5, 433 (1875)

M. V

CNHO

8255 -

112

(4160)

1899

 CNO^- (s), CH_2N_2 (cr, s), HCNO (s), $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$ (g), $\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_4$ (cr, s) (Hf^o)

Lemoult P.,

1. Ann. chim. phys., 1899,
16, 338; ~~1899~~

M, Be, W

CNHO

IV-811b

1923

Keating

1. J. prakt. Chem. 105, 242 (1923)

HNCO; T_m ;

CNHO

Circ. 500

5

HNCO

Bp-8274-IV

1938

Lenhard M.

($\text{Te}, 4\text{H}_2$)

Z. anorg. und allgem.
Chem., 1938, 236, 200-8.

HNCO

Bp - 1783-IV

1938

(Tm)

Linhard M.

Z. anorg. und allgem.
Chem., 1938, 239, 155-160

830 - IV

1948

Δ G (HSeO_4^- , H_3AsO_3 , H_3BO_3 , H_2GeO_4 , HCrO_4^- ,
 H_2SO_3 , HSO_3^- , H_3PO_4 , H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} , H_3AsO_4 ,
 H_2AsO_4^- , HAsO_4^{2-} , H_2SeO_3 , HSeO_3^- , H_2CO_3 , HCO_3^- ,
 H_4GeO_4 , H_3GeO_4^- , H_4SiO_4 , H_3SiO_4^- , HNO_3 , HNO_2 ,
 HClO , HCl , HClO_2 , HClO , HJO_3 , HJO , HBrO , HSO_4^-)

McGowan J.C.

Chemistry & Industry, 1948, 632-634.

Relationship between certain dissociation constants.

Ch.A., 1949, 2074hi

● CNHO *chem* p.k.

B

1784 - IV

1954

HNCO (S , Φ^* , $\text{H}-\text{N}$, C_p 298-1500)

Luft H. W., Kharbanda O. P.

J. Chem. Phys., 1954, 22, 956-7

Thermodynamic functions of hydrogen
isocyanate

to

✓ do



2

C. A., 1954, 124968

HOON

Kc

Boughton J. H. and
Keller R. N.

1966

J. Inorg. Nucl. Chem.,
28 (12), 2851.

Dissociation constants
of hydro-pseudohalic
acids.

(see HOON) I

MOCN

Keller R.N.

1966

AD 631282. Avail. CFSTY

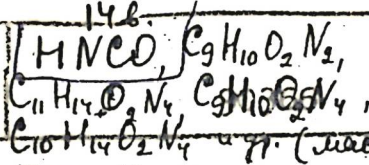
10 pp.

k
guc.

(Guc. MCN) T

80813.3092

Ch



A-1390

Уэмура Иэаки, Гото Мики.

Mass spectra of 8-substituted lumazine derivatives. ~~"Нихон катану дзасси,~~
~~Nippon Kagaku Zasshi~~, J. Chem. Soc. Japan,
 Pure Chem. Sec.", 1968, 89, N 5, 520-527, A29
 (японск., рез. англ.)

Б. 10

с. 169. К.
ВИНИТИ

797 802

1969

HNCO

Rowland C. J., ugr.

(y)

Internat. J. Mass
spectrom. and Ion
Phys, 1969, 2, N 6,
454

I

● (Cu. HNCO) III

HNCO

Okabe H.

1930

J. Chem. Phys., 53(9),
3507.

ΔH_f

D_0

(Calc. HNCO) III

HCNO (р-р, H_2O)

1971

(ΔfH)

1325-IV-7KB

Александрова С.А.

Стандартная энтальпия образования циановой
кислоты HCNO в водном растворе, 2 с.

HCNO (р-р, H₂O)
(46, 5)

1971

1325-IV-7KB

Александрова С.А.

Изобарный потенциал образования и энтропия
циановой кислоты и иона CNO^- в водном
растворе, 9 с.

HCNO

(p-p)

K_c

①

X. 1971. 13

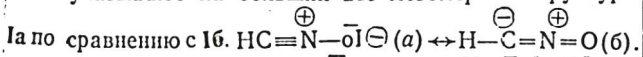
13 Б986. Свойства и инфракрасные спектры гремучей кислоты HCNO. Beck Wolfgang, Swoboda Peter, Feldt Klaus, Tobias R. Stuart. Eigenschaften und IR-Spektrum der Knallsäure HCNO. «Chem. Ber.», 1971, 104, № 2, 533—543 (нем., рез. англ.)

Потенциометрическим титрованием водн. р-ра фульмината K, насыщ. N₂ 0,1 н. HClO₄ найдена константа диссоциации HCNO (I) $\leq 5(25^\circ)$ по сравнению с 9,22 и 4,72 для HCN и HN₃ соотв. Параллельные полосы в ИК-спектре газ. I при 3336 (ν_1), 2198 (ν_2) и 1256 (ν_3) см⁻¹ отнесены к вал. кол. связи CH, псевдоасимм. и симм. вал. кол. связи CNO соотв. Перпендикулярные

⑦ III



полосы при 538 и 331 см^{-1} отнесены к деф. кол. HCN и CNO. При переходе от I к DCNO ν_1 и ν_2 смещаются к 2580 и 2066 см^{-1} , в то время как положение ν_3 не изменяется. Из анализа нормальных колебаний рассчитаны силовые коэф. I; f_{CN} I=5,92 по сравнению с 5,82 и 5,90 для HCN и C_2H_2 ; эти значения характерны для sp^3 -гибридизации атома C; силовые коэф. f_{CN} , f_{NN} и f_{NO} I мало отличаются от таковых N_2O . Полученные результаты указывают на бóльший вес мезомерной структуры



М. Дейчмейстер

10604, 1287 HNCO^+ (зем. спек.)

XIII 1376

Ch

41197

A. Ридкович HNCO (HNCO^+ , NCO^+ , NO^+ , HCO^+ , NH^+)

Bogan Denis J., Hand Clifford W. Mass
spectrum of isocyanic acid.

174

"J. Phys. Chem.", 1971, [redacted], N [redacted], 1532-
1536 75 10

(англ.)

ИЮ

0386 пик

363 367 375

ВИНИТИ

НОСН (к, м)

1971

(ΔVH, S)

1325-IV-ТХВ

Суровой Ю.Н.

Фазовые превращения циановой кислоты, 4 с.

HNCO (г) (Термод. ф.)

1974

Юнгман В.С.

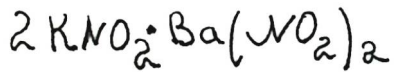
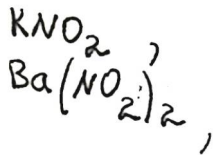
1326-IV ТКВ

Термодинамические функции изоциановой кислоты HNCO (г) , 2 с.

HNCO(I); (HCO⁺) (A Hf) 1972
XIV-4446

Rowland C. G. Edland J. H. D.,
Danby C. J.

On the existence of a spin-
forbidden predissociation
in the mass spectrum of
isocyanic acid. "J. Phys.
Chem.", 1972, 76, N18, p. 2636-2637



НСНО

оттиски 3214

1975

(ΔHf)

1949-6451

22 Б815. Масс-спектр и теплота образования изоциановой кислоты. Образование HCO^+ из дискретного электронного состояния молекулярного иона. Comp. polle F. Mass spectrum and heat of formation of isocyanic acid. Production of $[\text{HCO}]^+$ from discrete electronic state of molecular ion. «Org. Mass Spectrom.», 1975, 10, № 4, 289—294 (англ.)

Масс-спектральным методом изучена газ. молекула НСНО. Установлено, что ион HCO^+ в масс-спектре НСНО образуется в ионном источнике с потенциалом появления $[\text{AP}(\text{HCO}^+)]_{\text{НСНО}} = 15,84$ эВ и за счет метастабильного перехода $[\text{AP}(\text{HCO}^+)]_{\text{НСНО}} = 15,52$ эВ. С помощью лит. и эксперим. данных показано, что эти значения P_t появления отвечают соотв. 3-му вертикальному и 3-му адиабатич. P_t ионизации HNCO . По эксперим. определенному значению $\text{AP}[\text{NH}]^+_{\text{НСНО}} - \text{AP}[\text{NH}]^+_{\text{N}_2} = 2,88 \pm 0,1$ эВ и из $\text{AP}(\text{HCO}^+)_{\text{НСНО}}$ для метастабильного перехода получены значения ΔH° (НСНО , газ., образования) соотв. -23 ± 4 ккал/моль и -28 ккал/моль. Рекомендовано значение ΔH° (НСНО , газ., образования) $= -25 \pm 3$ ккал/моль. М. В. Коробов

Л. 1975 № 22

CHNO+

1977

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,

1977, 6.

Suppl. v1, p 1324

T.G. Evans

HNCO

1985

11 Б4058. Кинетическое изучение термического разложения изоциановой кислоты в ударных волнах. Kinetic study of the thermal decomposition of isocyanic acid in shock waves. Kajimoto Okitsugu, Kondo Osamu, Okada Kazuo, Fujikane Jiro, Fueno Takayuki. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1985, 58, № 12, 3469—3474 (англ.)

За падающими ударными волнами при t -рах 2100—2500 К и давл. 500—1500 Торр изучался термич. распад HNCO. Использовались сильно разбавленные (98% и выше) инертным газом смеси. Записывалось поглощение света на длинах волн 206 и 336 нм, соответствующих поглощению HNCO и NH. Определена эффективная константа скорости распада HNCO. Предложен механизм разложения HNCO, в к-ром первич. р-цией является бимолек. распад HNCO на NH и CO. Методом РРКМ проведен расчет константы скорости мономолек. распада HNCO. Показано, что измеренные ее величины находятся в переходной по давлению области.

В. В. Лисянский

термический
распад

X. 1986, 19, 11

CN⁻·(H₂O)_n(2) [om. 2.5191] 1986

Keese R.G., Castlemar
A.W., Jr.,

$\Delta_f H$, $\Delta_f S$,
 $\Delta_f G$

J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1986, 15, N3,
1011-1071.

$H_2CN^+(H_2O)_n^{(2)}$ [om. 25191] 1986

#2 Reese R.G., Castleman
A.W., Jr.,

$\Delta_f H, \Delta_f S,$
 $\Delta_f G.$ J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1986, 15, N3,
1011-1041.

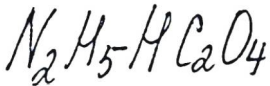
$H_2CN^+(H_2O)_n(z)$ [om. 25468] 1986

Keezee R.G., Castleman

$\Delta_z H,$ A.W., Jr.,

$\Delta_z G;$ J. Phys. Chem. Ref.
Data, 1986, 15, N3,

● 1011-1071.


$$C_p, T_{tr}, \Delta H_{tr}$$

X. 1987, 19, N 8

1986

8 Б3021. Фазовый переход в гидрооксалате гидразиния. Калориметрическое исследование системы с короткой водородной связью. Phase transition in hydrazinium hydrogen oxalate. A calorimetric study of the short hydrogen bond system. Matsuo Takasuke, Suga Hiroshi. «Thermochim. acta», 1986, 109, № 1, 63—73 (англ.)

Измерена C_p кристалла $\text{N}_2\text{H}_5\text{HC}_2\text{O}_4$ (I) в интервале 14—300 К. При 299,47 К $C_p = 157,64$ Дж/К·моль. Обнаружен фазовый переход 1-го рода при 217,6 К, $\Delta H = 1,09$ кДж/моль, $\Delta S = 4,18$ Дж/К·моль. Высокотемпературная фаза переохлаждается до 165—170 К. При этом C_p высокотемпературной фазы существенно выше C_p низкотемпературной формы. Приведением в соответствие разности теплоемкостей с фазой теплоемкости Шоттки найдено, что энергетич. уровень Шоттки лежит на 135 ± 4 см⁻¹ выше основного состояния и относится к туннельному расщеплению энергетич. уровней короткой Н-связи активного атома Н. Предложена термодинамич. модель фазового перехода 1-го рода, в которой главную роль играет аномалия Шоттки. Представлены спектры I в дальней ИК-области (интервал частот 400—30 см⁻¹) при T -рах 295 и 90 К. Р. Г. Сагитов

HNCO

От. 25332 1986

7 Б4483. Исследования фотодиссоциации HNCO.
Теплота образования и соотношения различных каналов
образования продуктов. Photodissociation studies of
HNCO: heat of formation and product branching ratios.
Spiglanin Thomas A., Perry Robert A., Chandler
David W. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 23, 6184—6189
(англ.)

ΔH_f;

На трех различных эксперим. установках изучены продукты фотодиссоциации (ФД) паров HNCO в различных условиях под действием света 193 нм импульсного эксимерного лазера на AgF или света 228—245 нм лазера на красителе с удвоением частоты и сдвигом КР в H₂. На установке с эффузионным молек. пучком и времяпролетным масс-спектрометром с использованием методов многофотонной ионизации и лазерно-индуцированной Фл измеряли распределения по внутр. энергиям продуктов ФД HNCO—CO и NH($\alpha^1\Delta$). Вблизи порога ФД HNCO и измерений порога ФД найдено, что теплота

X. 1987, 19, № 7.

образования $\Delta H,^{298\text{K}}(\text{HNCO}) = -24,9(+0,7; -2,8)$ ккал/моль, если принять $\Delta H,(\text{NH}) = 85,2$ ккал/моль. Отношение выходов каналов ФД HNCO при 193 на $\text{NCO} + \text{H}$ и на $\text{NH}(a^1\Delta) + \text{CO}$ по оценке имеет верхний предел 0,10. Это показывает, что Фт HNCO представляет собой эффективный источник $\text{NH}(a^1\Delta)$. Показано, что спектр возбуждения Фл HNCO и спектр действия NH^* довольно сильно различаются, что свидетельствует об участии в ФД HNCO двух различных возбужденных состояний.

В. Е. Скурат



$(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_2\text{HNO}_3$

1986

1 Б3020. Термодинамические свойства кристаллов диглициннитрата. Thermodynamical properties of diglycine nitrate (DGN) crystals. Strukov B. A., Taras-kin S. A., Savilova Z. V. «Phys. status solidi.», 1986, A95, № 2, 447—451 (англ.; рез. рус.)

Для кристаллов $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_2\text{HNO}_3$ определены электрокалорич. эффект, спонтанная поляризация и C_p в широком т-рном интервале и особенно в обл. фазово-го перехода $T_c = 206,5$ К. Данные интерпретированы в рамках термодинамич. теории сегнетоэлектричества. Определены коэф. в разл. термодинамич. Пт и их т-рная зависимость. Из кривой $C_p - T$ для теплоты и ΔS перехода получено 960 ± 40 Дж/моль и $5,2 \pm \pm 0,2$ Дж/К·моль. Исследовано влияние γ -излучения на св-ва диглициннитрата. Р. Г. Сагитов

C_p ;

X. 1987, 19, №1

CO(NH₂)

(K, 2)

[om. 25758]

1987

Краулен А. П., Козыро
А. А. и др.

термод-
ф-ии

Ис. преект. Хелленс,
1987, 60, N 1, 104-108.



CHNO

1992

Дм 36 686

3 Б1016. Сравнительное неэмпирическое исследование и изодесмические расчеты теплот образования изомеров HNCO и HPCO /Борисов Е. В., Мебель А. М., Князев Б. А., Забродин В. Б., Коркин А. А. //Изв. РАН. Сер. хим. —1992.—№ 7.—С. 1585—1590.—Рус.;рез. англ.

Не эмпирическим методом рассчитаны структурные, электронные и энергетич. х-ки изомеров CHNO и CHOP, а также ряда родственных соед. Приведены оценки энтальпии образования указанных изомеров, полученные методом изодесмич. р-ций. Библ. 35.

($\Delta_f H$)

△
(4)

Х. 1993, №3

HNCO

1994

East A.L.L.,

Ph D. Stanford University
1994, 334 pp. Adviser
Wesley D. Allen

Diss. 'Post. Int. B 1994,
55, N 3, 916-19 (Order N = DA 942207
(all. HENCO; III)

RNCO

1996

$b_3 H \geq 27.7 \pm 1.1 \text{ K}$

J. Chem. Phys., 1996, 105, 518, p. 810B

RNCO

R'CO

$$\nu_g(\text{RNCO}) = 273 \pm 0.4 \text{ kcal/mol}^{-1}$$

$$\nu_g(\text{NCO}) = 303 \pm 0.4 \text{ kcal/mol}^{-1}$$

1996

J. Chem. Phys. 1996, 105,
w18, p. 8111

HNCO

1996

126: 82038a The HNCO heat of formation and the N-H and C-N bond enthalpies from initial state selected photodissociation. Brown, Steven S.; Berghout, H. Laine; Crim, F. Fleming (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, WI 53706 USA). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(18), 8103-8110 (Eng), American Institute of Physics. We measure upper limits for the bond enthalpies of the N-H and C-N bonds in HNCO by observation of photodissocn. appearance thresholds for the NCO ($X^2\Pi$) and NH ($a^1\Delta$) fragments from initially selected HNCO vibrational states. The upper limit of the dissocn. energy of the H-N bond is $D_0(\text{H-NCO}) \leq 109.6 \pm 0.4$ kcal/mol and that of the N-C bond is $D_0(\text{HN-CO}) \leq 122.1 \pm 0.3$ kcal/mol. Observation of unrelaxed fragment quantum state distributions at fixed energies supports the bond enthalpy measurement. The two appearance thresholds, together with known heats of formation of NH, NCO, H, and CO, provide two independent methods of calcg. the HNCO heat of formation. Both methods give a value of $\Delta H_f^\circ(\text{HNCO}) \geq -27.7 \pm 1.1$ kcal/mol. The consistency of the two methods for calcg. $\Delta H_f^\circ(\text{HNCO})$ suggests that the actual bond enthalpies for the N-H and C-N bonds are close to the upper limits

($\Delta_f H$)

C. A. 1997, 126, N 6

HNCO

1996

16B318. Определение теплоты образования HNCO и энтальпий связей N—H и C—N из данных о начальном состоянии селективной фотодиссоциации. The HNCO heat of formation and the N—H and C—N bond enthalpies from initial state selected photodissociation / Brown Steven S., Berghout H. Laine,

Crim F. Fleming // J. Chem. Phys.— 1996 .— 105, № 18 .— С. 8103—8110 .— Англ.

(ΔH_f)

На основе результатов наблюдений порогов появления фотодиссоциации для фрагментов NCO и NH из первоначально отобранных колебат. состояний HNCO определены верхние пределы для энтальпий связей N—H и C—N в HNCO. Найдено, что верхний предел энергии диссоциации связи H—N равен $D_0(\text{H—NCO}) \leq 109,6 \pm 0,4$ ккал/моль, а верхний предел энергии диссоциации связи N—C равен $D_0(\text{HN—CO}) \leq 122,1 \pm 1,0$ ккал/моль. С использованием двух порогов появления фотодиссоциации в сочетании с известными теплотами образования NH, NCO, H и CO рассчитана теплота образования HNCO $\Delta_f/\text{H}^0(\text{HNCO}) \geq -27,7 \pm 1,1$ ккал/моль. Полученные результаты сравнены с имеющимися лит. данными. Библ. 53.

Х. 1997, N 16

В. Ф. Байбуз

HNCO

1997

18Б4278. Фотодиссоциация HNCO: три конкурирующих пути. Photodissociation of HNCO: Three competing pathways / Droz-Georget Th., Zyrianov M., Sanov A., Reisler H. // Ber. Bunsen-Ges. phys. Chem.— 1997.— 101, № 3.— С. 469-477.— Англ.

фотодиссоц.

Х. 1997, № 18