

**1115**  
MW

**C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>NO**

**Vinyl isocyanate**

**C<sub>s</sub> (*syn*)**  
**C<sub>s</sub> (*anti*)**

$r_0$	$\text{\AA}$		$\theta_0$	deg	
	<i>syn</i>	<i>anti</i>		<i>syn</i>	<i>anti</i>
C–N	1.382(5)	1.382(5)	C=C–N	122(1)	122(1)
C=C	1.339 <sup>a)</sup>		C–N=C	142.4(5)	138.4(15)
C–H	1.086 <sup>a)</sup>		C=C–H	121.73 <sup>a)</sup>	
N=C	1.207 <sup>a)</sup>		H–C–H(untilted)	116.6 <sup>a)</sup>	
C=O	1.171 <sup>a)</sup>		N=C=O	180 <sup>a)</sup>	180 <sup>a)</sup>

<sup>a)</sup> Assumed.

Kirby, C., Kroto, H.W.: J. Mol. Spectrosc. **70**  
(1978) 216.

See also: Bouchy, A., Roussy, G.: Compt. Rend. Acad.  
Sci. Paris, Ser. C **284** (1977) 411 (*anti*).

Bouchy, A., Roussy, G.: J. Mol. Spectrosc. **68** (1977)  
156 (*syn*, *anti*).

