

1599
MW

C₄H₅NO

Cyclopropyl isocyanate

C_s (*cis*)
C_s (*trans*)

<i>r</i> ₀	Å	<i>θ</i> ₀	deg	
C(1)–C(2)	1.520 ^a	H–C–H	116.2 ^a	
C(2)–C(3)	1.515 ^a	N=C=O	172.6 ^a	
C–H(<i>cis</i>)	1.086 ^a	C(2)–C(1)–H	116.1 ^a	
C–H(<i>trans</i>)	1.082 ^a		<i>cis</i>	<i>trans</i>
C(1)–H(<i>sec</i>)	1.079 ^a	C(1)–N=C	138.6(13)	136.9(38)
N=C	1.210 ^a	C(2)–C(1)–N	120.3(24)	117.9(11)
C=O	1.170 ^a			
C(1)–N	<i>cis</i> 1.407(14) <i>trans</i> 1.417(10)			

$$\Delta H = H(\textit{cis}) - H(\textit{trans}) = 112(14) \text{ cal mol}^{-1}.$$

^a) Assumed.

Durig, J.R., Berry, R.J.,
Wurrey, C.J.: J. Am.
Chem. Soc. **110** (1988)
718.

