

$C_4 F_{10}$

C₄F₁₀

Noutary C. J.

1970

D₀

Inform. Comis. nac.
energ. atom., N 268, 22



$(CF_3)_3CF$

Омичен

8182

1979

23 Б227. Колебательные спектры и анализ нормальных колебаний соединений, содержащих группы CF_3 . XXIV. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния изобутанов $(CF_3)_3CX$ ($X=F, Cl, Br, J$). Bürger H., Pawelke G. Schwingungsspektren und Normalkoordinatenanalyse von CF_3 -Verbindungen. XXIV. IR- und Raman-Spektren der Isobutane $(CF_3)_3CX$ ($X=F, Cl, Br, J$). «Spectrochim. acta», 1979, A35, № 6, 559—564 (нем.; рез. англ.)

Д. Сид. Нос

Измерены ИК ($4000-50\text{ см}^{-1}$) спектры газ. $(CF_3)_3CX$ ($X=F, Cl, Br, J$) и спектры КР жидкостей. Записаны также спектры крист. йодида. Дано отнесение колебаний (симметрия C_{3v}) на основании контуров ИК-полос в газ. фазе, поляризации линий КР и аналогии с $(CF_3)_2CX_2$, $(CF_3)_2CH_2$ и с тетрагалогенидами. В данном ряду группа CF_3 спектроскопически аналогична атому Br. Хотя отнесение дано в терминах симметрии C_{3v} , имеется ряд доказательств того, что реальная симметрия изученных соединений более низкая. Спектр фторида резко отличается от спектров др. соединений изученного ряда. Сообщ. XXIII см. пред. реферат. Е. Разумова



2.1979N23

1979

$(CF_3)_3CF$
 $(CF_3)_3CCl$
 $(CF_3)_3CBr$
 $(CF_3)_3CY$

(V_1 ; сил. пот.)

(+3) ☒

2.10.79, 123

23 Б228. Колебательные спектры и анализ нормальных колебаний соединений, содержащих группы CF_3 . XXV. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния $(CF_3)_3CH$ и $(CF_3)_3CD$. Анализ нормальных колебаний соединений $(CF_3)_3CX$ ($X=H, D, F, Cl, Br, J$). Bürger H., Pawelke G. Schwingungsspektren und Normalkoordinatenanalyse von CF_3 -Verbindungen. XXV. IR- und Raman-Spektren von $(CF_3)_3CH$ und $(CF_3)_3CD$. Normalkoordinatenanalyse der Verbindungen $(CF_3)_3CX$ ($X=H, D, F, Cl, Br, J$). «Spectrochim. acta», 1979, A35, № 6, 565—571 (нем.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры ($4000-200\text{ см}^{-1}$) газ. $(CF_3)_3CH$ и $(CF_3)_3CD$ и спектры КР жидкостей. Дано отнесение колебаний (симметрия C_{3v}) на основании контуров ИК-полос в газе, изотопич. сдвигов, поляризации линий КР и аналогии с другими рядами $(CF_3)_nCX_{4-n}$. Проведен анализ нормальных колебаний и вычислены силовые по-

стоянные в модифицированном валентно-силовом поле для молекул ряда $(\text{CF}_3)_3\text{CX}$ ($\text{X}=\text{H}, \text{D}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{J}$). Силовые постоянные для нулевого приближения взяты из HCF_3 и CX_4 . $K(\text{C}-\text{C})$ растет с увеличением n и при переходе от F к J . $K(\text{C}-\text{F})$ также возрастает с ростом n , за исключением фторида: в случае $\text{X}=\text{F}$ $K(\text{C}-\text{F})$ максимальна. Групповые частоты фрагмента $(\text{CF}_3)_3\text{C}$ в ряду изобутанов более четко выражены, чем в соотв-щем ряду пропанов $(\text{CF}_3)_2\text{CX}_2$. Сообщ. XXIV см. пред. реферат.

Е. Разумова

C₄F₁₀

1985

12 Б1262. Расчет колебательных спектров и поворотная изомерия перфторпарафинов. Молекулы н-C₄F₁₀ и н-C₆F₁₄. Пирожная Л. Н., Зубкова О. Б. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 6, 89—94

В приближении валентно-оптич. схемы выполнен расчет частот колебаний и интенсивностей полос поглощения молекул н-C₄F₁₀ (I) и н-C₆F₁₄ (II) в различных конформациях. Сопоставление расчетных спектров с наблюдаемыми показывает, что I в газовой и жидкой фазах содержит молекулы в T- и G-формах, а II — в конформациях TTT, TTG, TGT и GTG''. Крист. фаза I и II состоит из молекул в вытянутой форме. Наиболее информативной областью для определения поворотных изомеров у перфторпарафинов является интервал частот 720—1150 см⁻¹ в ИК-спектре, соотв., частотно-фазовой ветви симм. вал. CF₂ в спектре политетрафторэтилена.

Из резюме

расчет ν_i

(11) ν_i

х. 1986, 19, № 12

C₆F₁₄

H-C₄F₁₀

1987

Hunter S. R., Carter J. G.,
et al.

Chem. Phys., 1987, 86,
N2, 693-703.

( CF₄; III)