

$C_4 F_{10}$

C<sub>4</sub>F<sub>10</sub>

Noutary C. J.

1970

D<sub>0</sub>

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

● (C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>)<sup>III</sup>

$(CF_3)_3CF$

Ошищенко

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.)

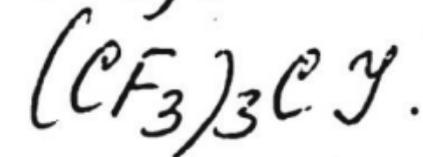
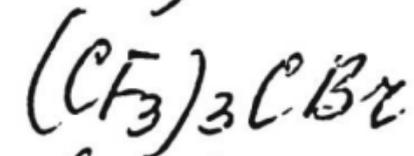
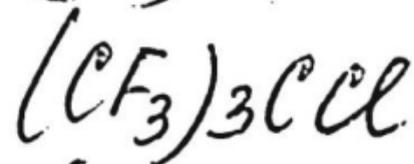
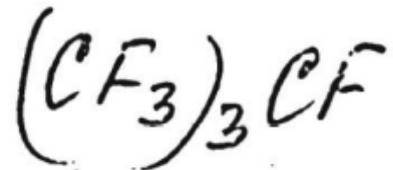
Д. Сид. Мст

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



(Vi; сил. пост.)

(+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  $(CF_3)_3CX$  ( $X=H, D, F, Cl, Br, J$ ). Силовые постоянные для нулевого приближения взяты из  $HCF_3$  и  $CX_4$ .  $K(C-C)$  растет с увеличением  $n$  и при переходе от F к J.  $K(C-F)$  также возрастает с ростом  $n$ , за исключением фторида: в случае  $X=F$   $K(C-F)$  максимальна. Групповые частоты фрагмента  $(CF_3)_3C$  в ряду изобутанов более четко выражены, чем в соотв-щем ряду пропанов  $(CF_3)_2CX_2$ . Сообщ. XXIV см. пред. реферат.

Е. Разумова

C<sub>4</sub>F<sub>10</sub>

1985

12 Б1262. Расчет колебательных спектров и поворотная изомерия перфторпарафинов. Молекулы  $n\text{-C}_4\text{F}_{10}$  и  $n\text{-C}_6\text{F}_{14}$ . Пирожная Л. Н., Зубкова О. В. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 6, 89—94

В приближении валентно-оптич. схемы выполнен расчет частот колебаний и интенсивностей полос поглощения молекул  $n\text{-C}_4\text{F}_{10}$  (I) и  $n\text{-C}_6\text{F}_{14}$  (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  $\text{cm}^{-1}$  в ИК-спектре, соотв., частотно-фазовой ветви симм. вал.  $\text{CF}_2$  в спектре политетрафторэтилена. Из резюме

расчет  $\nu_i$

(71)  $\nu_i$

х. 1986, 19, № 12

C<sub>6</sub>F<sub>14</sub>

H-C<sub>4</sub>F<sub>10</sub>

1987

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

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

(see ● CF<sub>4</sub>; III)