



CH₃COF

Bp - 9885 - <u>IV</u>	1957
-----------------------	------

Спектр

Susz B.P., Wukermann J.
Helv. Chem. Acta, 1957, 40
N 3, 722-730.

CH_3COF

Pierce L., Krisher L. C.

1959

спектр

J. Chem. Phys. 1959, 31, 875.

и В

и В спектр, базис вращательного

струк-

бращательный, структурная, конформационная и дипольный момент

группа

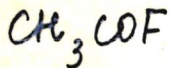
акцентируется.

$\text{Z}_{\text{C}-\text{C}}$ 1,507 Å LCCF 110° 18'

$\text{Z}_{\text{C}-\text{F}}$ 1,348 Å LCCO 128° 21'

$\text{Z}_{\text{C}-\text{O}}$ 1,181 Å LHCH 109° 30'

$\text{Z}_{\text{C}-\text{H}}$ 1,084 Å (6 предположений
связанных с метильной группой).



Boulet G. A.

1964

Dissert. Abstrs, 1964, 25, n6,
3283.

Исследование структуры мо-
лекул CH_3COCl , CF_3COCl , CH_3COF ,
 CF_3COF и CF_3COCF_3 методом
дифрак-  уще электронов.
(см. CH_3COCl)

CH_3COH

1970

~~CD_3COOH~~ (2)

3 Б284. Инфракрасные спектры мономеров уксусных кислот, изолированных в матрицах. Berney C. V., Redington R. L., Lin K. C. Infrared spectra of matrix-isolated acetic acid monomers. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 5, 1713—1721 (англ.)

Изучены ИК-спектры мономеров уксусных к-т $\text{CH}_3\text{COOH}(\text{D})$ (I) и $\text{CD}_3\text{COOH}(\text{D})$ (II), изолированных в матрицах Ar и N_2 при 4°K . Наблюдается сильный изотопич. сдвиг частоты деф. кол. δ_{OH} , к-рый не может быть объяснен с помощью гармонич. части потенциальной ф-ции. Предполагается, что при деф. кол. COH атом H туннелирует от одного кислородного атома к другому через потенциальный барьер высотой 2000 см^{-1} . Барьер

ν_i

δ_o

(+1)

см. также
 CH_3COOH (III)



X. 1974. 3

вращения метильной группы равен 170 см^{-1} . Применение матрицы N_2 , обладающей сильным возмущающим действием, позволило разделить близко расположенные частоты ν_{CO} и $\delta_{\text{OH(D)}}$. Дополнительно получены спектры матрично изолированного CH_3COF и паров I и II при низком давл. и большой длине свободного пробега.

Т. Ю. Лисовская

2I202.7567
Ph, Ch, Ex-C

CH₃CF₃; CD₃CF₃ (di)
3I603

XIV 4361

B9P-4361-XIV

Berney C. V., Cormier A. D. Vibrational
spectra of acetyl fluoride and acetyl
fluoride -d₃. "Spectrochim. acta", 1972,
A28, N10, I813-I822

(англ.)

10

0762

746 749 755

ВИНИТИ

$\text{CH}_3\text{-CHO}$

1972.

Mollendal Harald

"Acta chem. Scand"

(Uo)

1972, 26, N9, 3804-06.

ca. $\text{CH}_2\text{Cl-CHO}$; III

40418.6721

Fb, TE, Ch

 CH_3CFO

1974

96501

02. 2034

Chadwick D., Katrib A. Photoelectron spectra of acetaldehyde and acetyl halides. "J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.", 1974, 3, N 1, 39-52

(англ.)

0091 мкм

066 073

0083

ВИНИТИ

ommu 4158

1974

Me COF

CH₃ COF

Shimanouchi T.

J. Phys Chem Ref Data
1974, 3(1) 269-308 (Eng)

v:

(all O₃; III)

CH₃COF

оттиск 2422

1974

2 Б89. Молекулярная структура ацетилфторида и ацетилиодида. Tsuchiya Shuzo. Molecular structures of acetyl fluoride and acetyl iodide. «J. Mol. Struct.», 1974, 22, № 1, 77—95 (англ.)

Строение молекул ацетилфторида, CH₃COF (I) и ацетилиодида, CH₃COI (II), определено методом газовой электронографии и вычисления усредненной структуры при нулевой т-ре. В результате расшифровки электронографич. данных получены усредненные межъядерные расстояния (r_g) при комн. т-ре, а валентные углы (φ_z) пересчитаны на нулевую т-ру: Для I: C—O 1,185 (2), C—F 1,362 (2), C—C 1,505(2), C—H 1,101(4) Å, CCF 110,5 (0,5), OCF 120,7(0,4), HCH 109,3(0,6), угол наклона группы CH₃ 0,1(1)°. Для (II): C—O 1,198(13), C—I 2,217(9), C—C 1,492(15), C—H 1,101(4) Å, OCI 119,5 (0,8), CCJ 111,7(0,9), HCH 110,8(0,8), угол наклона группы CH₃ 1,7 (5,4)°. Барьеры внутреннего вращения оценены для I 1039 кал/моль, для II 1176 кал/моль.

И. Ронова

(+1) ☒

(геометр.
структ.
исс.)

2. 1975
N 2

CH₃COF

геометр.
структ.
ио

1974

ф. 1975
N 1

✓ 1 Д155. Молекулярная структура ацетилфторида и ацетилиодида. Tsuchiya Shuzo. Molecular structures of acetyl fluoride and acetyl iodide. «J. Mol. Struct.», 1974, 22, № 1, 77—95 (англ.) 1974

Методом дифракции электронов измерены расстояния между атомами и среднеквадратичные амплитуды колебаний для молекул ацетилфторида и ацетилиодида. Из полученных значений расстояний между атомами в сочетании с микроволн. данными для моментов инерции с учетом внутреннего вращения метильной группы вычислены эффективные значения структурных параметров и получено: (C=O)=1,185 и 1,198 Å, (C—C)=1,505 и 1,492 Å, (C—H)=1,101 и 1,101 Å, HCH=109,3° и 110,8°, CF=1,362 Å и CJ=2,217 Å, OCF=120,7° и OCl=119,5°, CCF=110,5° и CCl=111,7° для ацетилфторида и ацетилиодида соответственно. Для барьера внутреннего вращения метильной группы в ацетилфториде и ацетилиодиде получены значения 1039 и 1176 кал/моль соответственно. По литературным данным для силовых постоянных вычислены среднеквадратичные амплитуды колебаний. Вычисленные амплитуды согласуются с измеренными. М. Р. Алиев

2422

отлич

(+1)

✗

50328.7205
CH, TC, Ex-C

92073
 CH_3COF

1975

3088

Yonezawa Yoshiro, Fueno Takayuki.

The electronic structures of several
aliphatic carbonyls. The effects of
polar substituents.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1975, 48, N 1, 22-25

(англ.) 0328 пик

312 312 8 2 0

ВИНИТИ

CH₃COF

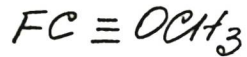
mmuch 5792

1977

(vi)

Shimanouchi T.

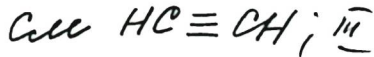
J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 993-II02.



1980
Okubo Katsutoshi, et al

Кв. эк.
расем
Г; номер.

Bull. Chem. Soc. Jap., 1980,
53, N2, 533-534.



CH₃COF

Оттиск 12439 1981

5 Б59. Изучение методом конфигурационного взаимодействия низколежащих возбужденных состояний ацетилфторида. Vasudevan K., Grein F. Configuration interaction studies on lowlying excited states of acetyl fluoride. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 83, № 3, 526—528 (англ.)

По методу ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) выполнены расчеты вертикальных энергий возбуждения (ВЭВ) состояний $^1(n, \pi^*)$, $^3(n, \pi^*)$ и $^3(\pi, \pi^*)$ молекулы CH₃COF с использованием базиса $(10s5p)/[3s1p]_{C,O,F} + (5s)/[2s]_H$ и при эксперим. геометрии. Расчеты КВ выполнялись по программе и в соответствии с методикой из работ (Buenker R. J., et. al., «Theor. Chim. Acta», 1974, 35, 33, 1975, 39, 217) с учетом всех одно- и дважды возбужденных конфигураций и последующим отбором. Для состояний $^1(n, \pi^*)$, $^3(n, \pi^*)$ и $^3(\pi, \pi^*)$ получены след. значения ВЭВ: 3,74, 4,21, 5,07 и 4,81, 5,27, 6,15 при вычислении по ΔE_{SSP} и ΔE_{KB} , соотв. Сопоставление ВЭВ для состояний $^3(n, \pi^*)$ и $^3(\pi, \pi^*)$ из КВ расчетов с эксперим. лит.

расчет $\mathcal{I}$,
м.п., $\mathcal{E}_i$

X.1982, 19, 15

данными показывает, что для $^3(n, \pi^*)$ расхождение между теор. и эксперим. значениями в ряду H_2CO , CH_3CON , $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, CH_3COF и F_2CO не превышают 0,2 эВ. Для $^3(\pi, \pi^*)$ ВЭВ вычисл. в расчетах КВ для той же серии молекул лежат между 5,73 и 7,04 эВ, а эксперим. значения — между 6,0 и 6,35 эВ. В последнем случае наибольшее расхождение ~ 1 эВ наблюдается для молекулы CH_3COF . В. Г. Закжевский



CH₃COF

1981

2 Д146. Исследование методом конфигурационного взаимодействия низколежащих возбужденных состояний фтористого ацетила. Configuration interaction studies on low-lying excited states of acetyl fluoride. Vasudevan K., Grein F. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 83, № 3, 526—528 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых ф-ций 10s5p/5s, сгруппированном в 3s1p/2s с учетом взаимодействия всех одно- и двухкратно возбужденных конфигураций, исследовано электронное строение CH₃COF (1) (симметрия C_s) в низколежащих возбужденных состояниях ³A'' (n, π*), ¹A'' (n, π*) и ³A' (π→π*). Энергии вертикальных возбуждений для этих состояний оценены в 4,81; 5,27 и 6,15 эВ (эксперим. значение 6,1). Сравнение с данными аналогичных расчетов родственных карбонильных и фторкарбонильных систем привело к выводу, что использованный метод расчета должен приводить к правильным значениям.

В. Л. Лебедев

Σi, γ

ф. 1982, 18, №2.

[Ommuck 13964]

1982

CHD₂COF

Mc Near D.C., Torto Y.,

Uk creep,
Vi, can. now.

J. Mol. Struct., 1982,

81, N1-2, ST-60.

CH_3CHO

1982

McKear D. C., et al.

Vi, сер.
носеи.,
сер. н.

J. Mol. Struct., 1982,
81, N 1-2, 57-60.

(сер. CH_3CHO ; III)

H_2CO-HF

1987

20 Б1259. Вращательный и структурный анализ миллиметрового спектра H_2CO-HF с применением неэмпирических расчетов и модели полужесткого изгиба. Rotational, structural, ab initio, and semirigid bender analysis of the millimeter wave spectrum of H_2CO-HF . Lovas F. J., Suenram R. D., Ross S., Klobukowski M. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 1, 167—186 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в области частот 80—122 ГГц измерены вращат. спектры трех изотопич. образцов димера H_2CO-HF , H_2CO-DF и D_2CO-DF в основном и возбужденных одним валентном и двух деформационных колебат. состояниях. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом центробежного искажения вплоть до операторов углового момента десятой степени. Структурный анализ МВ-данных и неэмпирич. расчет МО выполнены на основе модельного потенциала полужесткого изгиба димера, стабилизированного Н-связью. С. Н. Мурзин

М.А.

(12) X

X. 1987, 19, N 20