

CF₂H

CHF_2 Pauling L. 1928

CF_3
 CH_2F Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.,
1928, 14, 359.

Без. презентовано и издадено.
● Среда за

CHF_2
 CH_2F
 CF_3

Pauling L.

1931

JACS, 1931, 53, 1367.

теор.

предсказано • измерено. сгр. сгр.

CH_2F

CHF_2

CF_3

Pauling L.,

JACS, 1932, 54, 3570.

1932

Соед. фторуглерода кипяти.
сложные

1965

CF_2H

Zilshitz Ch.,
Hong F.A.

JP

J. Phys. Chem., 1965,

69, n 11, 3731.

B92-29279-1V

(Cm. CF) III

M 1126 - IV

1965

CF_3 , CHF_2 (LFCH , LFCH) *unpublished*

essenden R.W., Schuler R.H.,
J.Chem.Phys., 1965, 43(8), 2704-12

E.S.P.spectra and structure of the
fluorinated methyl radicals

CA., 1965, 63, N 12,
15751g

J

C_2F_2

Schonhorn H.,

1. 12. 5.

1965

J. Phys. Chem., 1965, 69, 1085

красный
продукт при
горении KCF_3Cl



Beveridge D.L., Dobosh P.A. 1968

Pople J.A.

J. Ch. Ph., 48, 4802, 1968

$\text{CH}_3 \angle 119.7^\circ$ (ногу и носка)

$\text{CH}_2\text{F} \angle \text{HCH} = 121^\circ \angle \text{HCF} = 114$

$\text{CHF}_2 \angle \text{FCF} = 109 \angle \text{HCF} = 116$

$\text{CF}_3 \angle \text{FCF} = 111^\circ$

ЛСАО ССБ МО расчет

$\sum C_H = 1,08 \text{ А}$ } Взаимно предположим

$\sum C-F = 1,35 \text{ А}$ } сн и верх задерж

родины

В результате расчета найдены
след. уль (см/сд).

CHF₂

Gordon M.S.

1968

Pope J. A.

J. Ch. Ph. 1968, 49, 110, 464B

puerit.

(2)

НСF₂

1/2

сим. и

09.1970. 18

1 Д321. ИК-спектр радикала дифторметила в твердом аргоне. Carver T. Granville, Andrews Lester, Infrared spectrum of the difluoromethyl radical in solid argon. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 12, 5100—5107 (англ.)

Идентифицирован ИК-спектр радикалов дифторметила: (в области 1040—1070, 1150—1210 и 1300—1330 см⁻¹), полученных в результате взаимодействия HСBrF₂ или DCBrF₂ в твердых растворах в азоте с атомами Li, одновременно нанесенными на окно из CsJ при t-ре: 15° К. Новые полосы, появляющиеся в исследуемой системе наряду с полосами поглощения LiBr, отнесены к антисимметричным Н-деформационным изгибным и C—F-валентным и к симметричным C—F-колебаниям радикалов НСF₂ и DCF₂. Определены силовые постоянные связей, сопоставлены значения наблюдаемых частот с вычисленными для трех возможных структур НСF₂. Обсужден характер C—F-связи в различных соединениях фтора и в свободных радикалах HCF. Библ. 22.

А. М. М.

1969

3

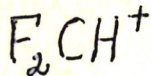
1969

HCF₂DCF₂V_i

calcd. woc.

43928s Infrared spectrum of the difluoromethyl radical in solid argon. Carver, T. Granville; Andrews, Lester (Univ. of Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 1969, 50(12), 5100-7. (Eng). When HCFBrF₂ and DCFBrF₂ at high diln. in Ar are codeposited with an at. beam of Li on a CsI window at 15°K., Li bromide absorptions appear along with several new absorptions not present when the precursor was deposited without alkali metal. These new absorptions are assigned to the antisymmetric H bending and C-F stretching modes and the symmetric C-F vibration of the HCF₂ and DCF₂ radicals. The antisymmetric vibrational assignments are supported by product rule and normal coordinate calcns. which give the potential consts. $F_{55} = 5.27 \pm 0.1$ millidynes/A., $F_{56} = 0.44 \pm 0.02$ millidynes/radian, and $F_{66} = 0.64 \pm 0.05$ millidyne-A./radian.² An approximate force const. $F_{22} = 7.19 \pm 0.7$ millidynes/A. is calcd. from the symmetric C-F vibration. The C-F valence force const. for HCF₂ is in the range of those for typical fluorocarbons. RCJQ

C.A. 1969. 71. 10



1971

Baird N.C.,
Datta R.K.

(геометр)

"Can. J. Chem.", 1971, 49,
N22, 3708-3713.

(см CH_3^+ , III)

CHF₂

1972

Losing F.P.

Bull. Soc. chim. belg, 1972,

81, N 1-2, 125-134.

I, 20, CHF

(Can CHF₂Cl); III

CHF₂

1973

Горюхов Ю. И.,
Пенюковский В. В.,
Украинский И. И.,

госинтер

Госинтер

ИТФ - 73 - 129Р (1973) 20с

фр 1974 N2

(см. SiH₃, III)

40910.6603

TC, Ch, Ex-C

CHF₂

49587

02

1974

2375

[правос. цен]

Gorlov_Yuri I., Ukrainsky Ivan I., Penkovsky Vladimir V. The UHF-CNDO/2 study of tetra-atomic radicals containing silicon and phosphorus. "Theor. chim. acta", 1974, 34, N 1, 31-38

(см. CH₃ / III)

(англ.)

0188 экз. 1

147 150

180

ВИНИТИ

512 11.72 16
Ch, Ex-C, TC

$\text{CHF}_2^+ + 40771$
 $(\text{Ae}^-) *$

1975

5-10632

Vogt Jürgen, Beauchamp J.L.
Reactions of CHF_2^+ with n-donor
bases by ion cyclotron resonance
spectroscopy. The proton affinity
of difluorocarbene.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 23,
6682-6685

(англ.)

0509

488 490 501

ВИНИТИ

CHF_2

45-15578

1976

Bischof P.

(J)

J. Amer Chem Soc
1976, 98, N22, 6844-49

HCF₂

[18-17642]

1946

Deb B. M., et al

Indian J. Pure Appl.
Phys., 1946, 14, No.
442-52.



(sol. H₂O₃; III)

(copy)

61119.7391

96200

1976

Ch, Ph, Ex-C,

TC, MSU

HCF₂-

X-4-15580

Jacob Marilyn E., Milligan Dolphus
E.

Matrix isolation study of the products
of the interactions of electrons and
of argon atoms in excited rydberg
states with HCClF₂.

"Chem. Phys.", 1976, 16, N 4, 381-392

714 715

7 4 3 0 7 5 1

ВНИИТИ

CHF_2

1974

Arce F., et al

"Rev. Roum. Chim" 1974, 22,
NB, 815-825 (ser.)

молекула.
реактор.

см. $\text{CH}_3 - \text{H}$

CHF₂

number 6088 1978

Bernardi F., et al

Copyright.

Library.

J. Amer. Chem. Soc.,
1978, 100 (5), 1352-56

CF_2H

1978

Prochaska Frank T.
et al
J. Am. Chem. Soc. 1978,
100(7) 2102-8

2i

coll. $CF_3 - \overline{II}$



1979

Andrews L. et al.

и.к.свкп

J. Chem. Phys., 1979,
70 (10), 4714-23

(см. CH_2F_2^+ ; 14)

HCF_2

1980

И. К. Сакс

12 Д430. Изучение реакции атомов водорода с CF_2 в аргонной и азотной матрицах методом ИК-спектроскопии. Infrared spectroscopic study of the reaction of H atoms with CF_2 in argon and nitrogen matrices. J. Aschmann, Marilyn E. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 81, № 2, 349—355 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000\text{—}400\text{ см}^{-1}$) продуктов взаимодействия атомов водорода и соединения CF_2 , образованных при облучении молекул CF_2N_2 и HJ или H_2S излучением ртутной лампы 253,7 нм в Ar- и N_2 -матрицах при $T = 14^\circ\text{K}$. Интенсивные ИК-полосы в спектрах фотолитических промеж. соединений приписаны колебаниям свободных радикалов HCF_2 (I). Предположено, что свободные радикалы I являются первичными продуктами фотореакции матрично-изолированных

Ф. 1980 № 12

CF_2N_2 и HJ или H_2S при взаимодействии групп Cf^2 и H , локализованных в соседних центрах Ag - или N_2 -матриц. Показано, что последующее взаимодействие продуктов фотореакции в матрице приводит к стабилизации соединений HCF_2 , DCF_2 , CF_2J и CF_2S . Отмечается, что часть соединений CF_2 в световом поле ртутной лампы возбуждается в состояние A^2B_1 , причем этот запас энергии может быть использован для оценки энергии активации реакции $\text{H} + \text{CF}_2$ в матрице. Библиография 14.

И. В. А.

CHF₂

[Osmach 12765] 1981.

Leroy G., Pectors D.

reb. mex.
facter,
receptorus

Y. Mol. Street,
1981, 85, 133-152

F₂CH.

1980

Leroy G., et al

кб. иех
растр

Nouv. j. chim., 1980, 4,
N6, 403-409.



(con CH₃.) III

CHF_2

Commu 11597 | 1981.

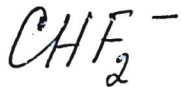
Sofue S., et al.

Bull. Chem. Soc. Jap., 1981.

M.M.

V₄.

54, 897-900.



1983

Edgcombe Kenneth E;
Boyd Russell J.

раствор
водный,
серьезный,
Е;

Can. J. Chem., 1983, 61,
N1, 45-49.

(ср. CH_2F^- ; III)

CHF_2^-

(OM. 21278)

1984

Edgcombe K. E., Boyd R. J.,

Ap; Can. J. Chem., 1984, 62,
N12, 2887-2891.

$\text{HCF}_2^\bullet$

1984

12 Б1077. Структура радикал-аниона 1,1-дифторэтилена и факторы, определяющие сверхтонкие взаимодействия с ^{19}F . The structure of the 1,1-difluoroethylene radical anion and the factors determining the hyperfine interaction with ^{19}F . Shchegoleva L. N., Bilkis I. I., Schastnev P. V. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 104, № 4, 348—352 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении ЧПДП рассчитаны радикалы $\text{HCF}_2^\bullet$ (I) и $\text{CF}_2\text{CF}_2^- \cdot$ CH_2CF_2^- (II) и определены константы изотропного сверхтонкого взаимодействия (КИСВ). Исследована зависимость вычисленных значений КИСВ от конфигурации радикального центра (угол θ между плоскостью CX_2 , $\text{X}=\text{H}$, F , и связью CC в I и II) и конформации анион радикала. Сравнение вычисленных и эксперим. КИСВ показывает, что CH_2 фрагмент I должен быть плоским ($\theta \approx 0^\circ$), а CF_2 слегка пирамидальным ($\theta \approx 7^\circ$), в отличие от II, где $\theta \approx 15^\circ$. Проанализирована связь конфигурации атома C с распределением спиновой плотности и происхождение различий между локализацией спиновой плотности в I и II.

В. Фаустов

расчет

⊗ (+2)

X. 1984, 19,
N/2

$\text{CHF}_2(2)$

(OM-26143)

1987

Luke B.T., Loew G.H., et al.,

et al., J. Amer. Chem. Soc.,
1987, 109, NS, 1307-1317.

CH_2F_2

[OM-26025]

1987

Paddon-Row et al., Wong S. S.,

колебат.
расчетн.,
теорет.
расчет.

J. Mol. Struct. Theochem.,
1987, 150, n1-2, 109-120.

CHF₂

1998

128: 276407g Microwave spectrum of the CHF₂ radical in the ²A' ground electronic state: fluorine hyperfine structure alternation in inversion levels. Inada, Naomi; Saito, Ko; Hayashi, Michiro; Ozeki, Hiroyuki; Saito, Shuji (Kagami-yama, Faculty of Science, Department of Chemistry, Hiroshima University, Higashi-hiroshima, Japan 739). *Chem. Phys. Lett.* 1998, 284(1,2), 142-146 (Eng), Elsevier Science B.V.. The rotational spectrum of the difluoromethyl radical was obsd. by microwave spectroscopy. Many b-type R and Q branch transitions accompanied with hyperfine structures due to fluorine and hydrogen nuclei were detected in the 100-400 GHz range. A preliminary anal. of the rotational transitions with I_F=0 and 1, where I_F=I(F₁)+I(F₂), resulted in finding fluorine hyperfine structure alternation for inversion levels: I_F=0 or 1 components of a particular rotational level correspond to the plus or minus inversion level, depending on the symmetry of the rotational level. The rotational consts. and centrifugal distortion consts. in both inversion levels were detd. by a least-squares anal. for the hypothetical rotational transition frequencies.

УВ спектр
дифлуоро
Х²А' соем.



C.A. 1998, 128, N22

CHF₂

1998

Nolte, Jens

(uk cnekmp) Ber. - Max - Planck - Inst.
Strömungsforsch. 1998,
(20), 1-91.

(all. CHF; ● III)