

HOF

Нол; LiOH ; AlOH , HOF , Cl_2O , Li_2O , 1971
 Al_2O , LiOCl , AlOCl , LiOF , AlOF ,
 SOCl , LiOD ; AlOD ; HOD , TOCl , LiOT ;
 DOF , AlOF , TOF и др (ср, ΔH , 3°, 56°)

Гулягин В.И., № 6761

Борисов М.И., Антонов А.А.,
Маслов П.Г., Степанов А.С.,
Ил. физ. химии, 1971, 45, № 6,
1569 - 70

в (9) (ср $\text{CuCl}_2\text{O I}$) Cu 71

HOOF

1971

хим. и
физ. св-ва

19 Б93. Фторноватистая кислота. Studier Mar-
tin H., Appelman Evan H. Hypofluorous acid. «J.
Amer. Chem. Soc.», 1971, 93, № 9, 2349—2351 (англ.)

Описан способ получения, хим. и физ. св-ва фторно-
ватистой к-ты HOOF. Приводится ее масс-спектр.

Б. В. Розынов

Х. 1971. 19

HOF

1973

ΔH_f (HOF),
 ΔH_f° (HOF),
 ΔH_f° (OH⁺)

J. Berkowitz,
E.H. Appelman,
W.A. Chupko

J. Chem. Phys., 1973, 58(5),
1950-4

"Photoionization of HOF
with mass analysis"

(ced; HOF; III)

F-O-H

XI-4680
(фаз. диаграмма)

1973

✓ 103844a Gas equilibrium of the system fluorine-oxygen-hydrogen. Gruenberg, H.; Mueller, E. (Zentralinst. Kernforsch., Rossendorf Dresden, E. Ger.). Report 1973, ZfK-253, 102 pp. (Ger). Avail. Dep. NTIS (U. S. Sales Only). 8.25 dollars. From Nucl. Sci. Abstr. 1974, 30(8), 20689. Using a computer, tables of data for the gas equil. of the systems F-O-H, F-O, F-H and O-H were calcd. These tables can be used for the construction of phase diagrams of the Bauer-Glassner type. The examples of heterogeneous systems U-O-H, U-F-H and U-F-H are used to illustrate the use of the tables.

C.A. 1975 82 N16

(42)



U-O-H (фаз.
U-F-H (фаз.)

NOF

М,
Эл. стр.

Х. 1974
№ 12

12 Б356. Молекулярный вращательный эффект Зеемана в NOF, сравнение с H₂O, F₂O и другими фторсодержащими молекулами. Дипольные моменты NOF и DOF Rock S. L., Pearson E. F., Appleman E. H., Norris C. L., Flygare W. H. Molecular rotational Zeeman effect in NOF, a comparison with H₂O, F₂O, and other fluorine containing molecules; and dipole moments of NOF and DOF. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 8, 3940—3945 (англ.)

Изучен вращательный эффект Зеемана в NOF в сильном магнитном поле. Анизотропия магнитной восприимчивости составляет $2\chi_{aa} - \chi_{bb} - \chi_{cc} = -1,96 \cdot 10^{-6}$ $2\chi_{bb} - \chi_{aa} - \chi_{cc} = 12,8 \cdot 10^{-6}$ эрг/г·моль (ось *a* направлена приблизительно по OF-связи, ось *c* перпендикулярна плоскости молекулы); величины *g*-факторов составляют $g_{aa} = 0,642$; $g_{bb} = -0,119$; $g_{cc} = -0,061$; величины молек. квадрупольных моментов составляют $Q_{aa} = 0,2 \cdot 10^{-26}$; $Q_{bb} = 1,9 \cdot 10^{-26}$; $Q_{cc} = 2,1 \cdot 10^{-26}$ эл. ст. ед.·см². Проведено сравнение полученных результатов с аналогичными данными для H₂O и F₂O. С помощью эффекта Штарка определены дипольные моменты NOF $\mu_a = |0,37|$ и $\mu_b = |2,20|$. Общий дипольный момент NOF составляет $|2,23|$ D. В свете полученных результатов обсуждается электронная структура молекулы NOF. Резюме

1973

F...HO

1981

20 Б1516. Образование сильных водородных связей в растворах фторидов щелочных металлов в алифатических диолах. Clark James H., Канипрауог Raveendran K., Miller Jack M. Strong hydrogen bonding in aliphatic diol solutions of alkali-metal fluorides. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1981, № 5, 1152—1156 (англ.)

Методом ПМР в диапазоне t -р от 273 до 373 К исследовано образование Н-связей в р-рах KF, RbF и CsF 1,2-этан(I), 1,2-пропан-(II), 1,3-пропан-(III) и 1,4-бутандиолах (IV), а также в чистом I и в смеси I+CH₃CN. В р-рах фторидов в I—IV наблюдается сдвиг $\delta(\text{OH})$ в область слабого поля с ростом конц-ии соли. В зависимости от природы катиона $\delta(\text{OH})$ увеличивается по ряду $\text{R} < \text{Rb} < \text{Cs}$, а в зависимости от природы диола — по ряду $\text{I} < \text{II} < \text{III} < \text{IV}$. Рост t -ры приводит к уменьшению $\delta(\text{OH})$. Результаты интерпретированы с точки зрения образования сильных Н-связей между гидроксильным протоном диола и анионом F⁻. Энтальпия и энтропия образования связей F...HO составляют соотв. -50 ± 10 кДж/моль и -130 ± 25 Дж/моль·К.

Д. А. Федосеев

$\Delta H_f; \Delta S_f$

X. 20. 1981

NOF

1982

15 B205. Спектр комбинационного рассеяния твердой гипофтористой кислоты NOF. Kim Hyunyoung, Appelman Evan H. The Raman spectrum of solid hypofluorous acid NOF. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 4, 1664—1669 (англ.)

Di, сел. лос

Изучены спектры КР (λ 5145 Å) поликрист. образцов NOF (I), DOF (II) и их смеси (1:1). В ВЧ-области спектров найдены линии вал. кол. связей O—F ~ 884 и O—H ~ 3359 см $^{-1}$ (или O—D ~ 2484). Появление в спектрах шести низкочастотных линий связано с наличием в I и II плоских зигзагообразных цепочек из связанных Н-связями молекул (аналогичных цепочкам в твердом HF, в элементарной крист. ячейке содержится, по крайней мере, две молекулы I или II). По значениям частот вал. кол. оценены силовые постоянные различных внутри- и межмолек. связей в I и II. Рассчитаны дисперсионные кривые для низкочастотных колебаний.

А. В. Бобров

X. 1982, 19, N 15.

HOF

1983

Dekock Roger L.,
Jasperse Craig P., et al.

J. Fluorine Chem. 1983,
22(6), 575-84.

$\Delta_f H,$
neop.
patrim.

($\bullet$ $\text{Ce} \cdot \text{Ce} \text{CeF}^+; \bar{I}$)

HO₂F

1988

5 Б2038. Кристаллическая структура фторноватистой кислоты: образование цепочек посредством мостиков $O-H...O$. Die Kristallstruktur der unterfluorigen Säure: Kettenbildung durch $O-H...O$ -Brücken / Poll Wolfgang, Pawelke Gönfried, Mootz Dietrich, Appelman Evan H. // Angew. Chem.— 1988.— 100, № 3.— С. 425—426 — Нем.

структура

Проведен РСТА HO₂F (т-ра съемки —160° С, 329 отражений, R 0,027). Кристаллы ромбич., a 4,075, b 5,040, c 5,939 Å, Z 4, ф. гр. $P2_12_12_1$. Длины связей $O-F$ 1,442, $O-H$ 0,78 Å. Внутримолек. взаимодействие $H...F$ приводит к уменьшению угла FOH до 101°. Межмолек. H -связи $O-H...O$ ($O...O$ 2,895 Å) объединяют молекулы в зигзагообразные цепочки, вытянутые в направлении $[010]$. Связи $O-F$ расположены попеременно по разные стороны цепочки, в результате чего полярность ее альтернирует в направлении $[100]$.
И. Н. Полякова

X-1991, N 5

1995

F: FОН

P: $\dagger$

11Б129. Радикал FO[2]. овый успех теории функционала плотности. The FO[2] radical: A new success of density functional theory / Ventura Oscar N., Kieninger Martina // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 245, N 4 5. - С. 488-497. - Англ.

Методом функционала плотности (B3LVP в базисе 6-311++ГФ (3df, 3pd) рассчитаны геометрич. параметры, частоты и энергии нулевых колебаний молекул FO[2] ($\{2\}A''$), O[2], OH, FO, H[2]O, FОН, HO[2], F[2]O[2], а также теплоты большого числа р-ций, включающих гомолитич. разрыв связей FO и O, и теплота образования FO[2]. По мнению авторов, используемый подход обладает определенными преимуществами в описании энергетики связей FO по сравнению с другими современными неэмпирич. "термохимическими" процедурами..DHf(FO[2])

X. 1996, N 11.

HOF

Om 32305

1996

16 Б3131. Активности, сродство к протону и другие термохимические свойства гипогалогеновых кислот HOX ($X=F-I$). Компьютерное исследование высокого уровня. Acidities, proton affinities, and other thermochemical properties of hypohalous acids HOX ($X=F-I$): A high-level computational study / Glukhovtsev M. N., Pross A., Radom L. // J. Phys. Chem. — 1996. — 100, № 9. — С. 3498—3503. — Англ. . Место хранения ГПНТБ

Описан усовершенствованный подход к теор. компьютерному расчету молек. орбиталей. На его основе оценены кислотности гипогалогеновых к-т (HOF, HOCl, HOBr, HOI), сродство к протону (через кислород $HOX \rightarrow H_2OX^+$ или через галоген $HOX \rightarrow HOXH^+$), энергии ионизации и диссоциации, теплоты образования. Последние величины в кДж/моль: —88,3 (HOF), —76,0 (HOCl), —58,3 (HOBr) и —48,9 (HOI) хорошо согласуются с эксперим. данными. Аналогичный расчет выполнен для HF, HCl, HBr и HI.

Л. В. Арсеенков

143

X. 1996, N 16

HOF.

Om. 40193

1999

Espinosa - Garcia J.,

A&H,
neopem-
pauch

Chem. Phys. Lett.,
1999, 315, 239-247

ROX

 $R = H, CH_3$ $X = F, Cl, Br$

HOF

1999

 $\Delta_f H_{298}, I, A_f$

A (H)

C.A., 1999, 130, 121

130: 287233q A theoretical study of ROX ($R = H, CH_3$; $X = F, Cl, Br$) enthalpies of formation, ionization potentials and fluoride affinities. Messer, Benjamin M.; Elrod, Matthew J. (Department of Chemistry, Hope College, Holland, MI 49423 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1999, 301(1,2), 10-18 (Eng), Elsevier Science B.V.. We report the results of a systematic Gaussian-2 ab initio study of the ROX ($R = H, CH_3$; $X = F, Cl, Br$) series. The calcd. std. enthalpies of formation ($\Delta_f H_{298K}$) provide the following ests. for the previously undetd. $R = CH_3$ series; $\Delta_f H_r = -94.9, -74.0$, and $-57.0 \text{ kJ mol}^{-1}$ for $X = F, Cl$, and Br , resp. The calcd. ionization potentials (IP) provide an est. of 10.24 eV for the previously undetd. IP of CH_3OBr . The first detn. of fluoride affinities for ROX species are presented and are shown to depend strongly on the orientation of the $F^- + ROX$ complex and on the identity of the halogen substituent.


 $CH_3OF, HOCl, CH_3OCl,$
 $HOBr, CH_3OBr$

FOH

(CM. 39641) a" 1999

Oscar N. Ventura⁺ and
Martina Liehringer,
et al.,
(APf)

J. Phys. Chem. 1999,
A103, 147 ● — 157