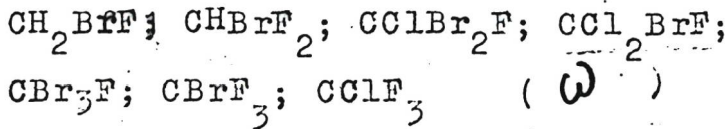


C-Bu-Cl-F

4942 - 10

1944

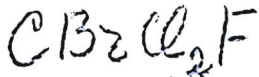


Stepanov B.I.

Compt.rend.acad.sci. URSS, ; 1944,
45, 56-7

J

Calculation of ...



1400-11

M.A. (CH_2FBr , CHFCI_2 , CHFCIBr , 1948

CHPFBr_2 , CFCl_3 , CFCl_2Br , CFClBr_2 , CFBr_3)

Delmaulle M.L., Francois F.

Contrib. étude structure mol.,

Vol. comm. Victor Henri, 1947/48,

119-124 (frans.)

Raman spectra of some ...

C.A., 1949, 2865gh

$\text{C/B}_2\text{Cl}_2\text{F}$

10

4805 -

IV

1957

$\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CF}_2\text{Cl}$ (V))

$\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CF}_2\text{Br}$ (V, ΔH)

Kagarise R.E.

J.Chem.Phys., 1957, 26, N2,
380-383

Spectroscopic...

J.M.

$\text{C}_2\text{Br}_2\text{ClF}_4$

CBr_2ClF

R. L. Gilbert et al. BOP-1422-IV 1959

$\text{CBr}_2\text{Cl}_2\text{F}$

J. Chem. Phys. 1959, 31, № 6, 1633-36

Замещенные метаны XIX Колебательно

спектр, потенциальные функции и

вычисленные термодинамические свойства

CBr_2ClF и CBrCl_2F

(см. CBr_2ClF) II



Каждено 12 осн. загов.

a' 1731 м⁻¹ (с) a'' 566 м⁻¹ wagging
1314 CF баг.
1022 CF баг. 324 " — "

945 cclvax.

613 cclvax. ca 155 м⁻¹ twisting.

455 rocking

358 CF₂ deg.

219 cclvax deg.

166 rocking

Расщепление периодич. з-ми для уг. газа при 1 атм.
для 6 камер при 320°K; 400°K, 500, 600, 700, 800°K.

Замеч.
зака
И.К.

В9-И-8139

1961

14Б97. Инфракрасные спектры и спектры комбинационного рассеяния фторированных этанов. Часть XVI. $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CCl}_2\text{Br}$. Klaboe Peter, Nielsen J. Rud. Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes. Part XVI. $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CCl}_2\text{Br}$. «J. Molec. Spectrosc.», 1961, 6, № 6, 520—527 (англ.).—Исследован в области $300-3500 \text{ см}^{-1}$ ИК-спектр поглощения $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CCl}_2\text{Br}$ (I) при комнатной т-ре в газообразном и твердом состояниях и при т-ре -170° , а также в р-рах CS_2 , CCl_4 и CH_3NO_2 . Получен спектр комб. расс. I в жидком состоянии при т-ре 55° . На основании полученных данных и по аналогии с другими замещенными этана (часть XV, РЖХим; 1962, 10Б128) предполагается, что I во всех трех состояниях существует как смесь вращательных *транс*- и *ганш*-изомеров. Выполнено предварительное отнесение наблюдавшихся частот к различным нормальным колебаниям I, однако отнесение основных частот каждого изомера в отдельности сделать не удалось из-за недостаточной полноты данных.

В. Юнгман

х. 1962. 14

$\text{CF}_2\text{Br}-\text{CCl}_2\text{Br}$ (3 isomers. Japan) B9-11-8139

U.K.
" "
Japan

Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes.
XVI. $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CCl}_2\text{Br}$. Peter Klaboe and J. Rud Nielsen (Univ. of Oklahoma, Norman). *J. Mol. Spectroscopy* 6, 520-7(1961); cf. *CA* 55, 23049d; Nair and Roberts, *CA* 51, 17430b.—Infrared and Raman spectral data for $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CCl}_2\text{Br}$ are reported. The infrared spectra were obtained in the region $300-3500 \text{ cm}^{-1}$ on a Perkin-Elmer Model 112 spectrometer equipped with LiF, NaCl, and CsBr prisms for the gaseous material at room temp., for the solid material at 30 and -170° , and for the liquid in CS_2 , CCl_4 , and CH_3NO_2 ; the Raman spectrum of the liquid at 55° was obtained with a 3-prism glass spectrograph. Data indicated that the compd. exists as a mixt. of rotational isomers in all 3 states. Tentative fundamental vibrational frequencies are assigned, but the fundamentals of the 2 rotational isomers could not be differentiated. Robert A. Bleidt

C.A. 1962. 56.2
10726

~~CF₂Br~~ CCl₂Br (этан)

ВФ-IV-8139

1961

и.к.

Раман

6 В149. Спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния фторированных этанов. Ч. XVI. CF₂Br — CCl₂Br. K l a b o e P e t e r, N i e l s e n J. R u d. Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes. Part XVI. CF₂Br — CCl₂Br. «J. Molec. Spectrosc.», 1961, 6, № 6, 520—527 (англ.)

С целью изучения поворотной изомерии фторированных этанов исследованы спектры ИК-поглощения в области 300—3500 см⁻¹ газов CF₂Br — CCl₂Br (I) при комнатной т-ре, I в твердом состоянии при т-рах 30 и —170° С и в растворах в CS₂, CCl₄ и нитрометане. Получены также спектры комб. рас. жидкого I при т-ре 55° С. Установлено, что это в-во во всех агрегатных состояниях представляет собой равновесную смесь трех изомеров: *транс*-изомера симметрии C_s и двух энантиоморфных повернутых изомеров симметрии C₁. Библ. 13 назв. Ч. XV см. реф. 6В148. В. Пивоваров

РЖФ 1962

6В149

1962

CFClBr - CFClBr

Внутреннее

вращение

11 Б156. Измерение потенциальной энергии как функции внутреннего вращения в $\text{CFClBr} - \text{CFClBr}$ методом ядерного магнитного резонанса. Thompson Douglas S., Newmark Richard A., Sederholm Charles H. Potential energy as a function of internal rotation in $\text{CFClBr} - \text{CFClBr}$ by NMR measurements. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 2, 411—418 (англ.)

На частоте 56,4 Мгц исследован ЯМР F^{19} $\text{CFClBr} - \text{CFClBr}$ (I) в интервале т-р 177—300° К. При 300° К спектр состоит из двух узких пиков с расщеплением 48 гц. При 177° К в спектре имеется 8 линий; расстояние между крайними из них равно 368 гц. Дано объяснение наблюдаемым спектрам: при 300° К образец является смесью двух изомеров. При низких т-рах каждый из изомеров может иметь три ротамера и спектр должен состоять из четырех синглетов и двух дублетов, что и наблюдается. Удалось произвести отнесение всех пиков спектра. Вычислены барьеры внутреннего вращения в I: $10,0 \pm 0,5$ ккал/моль. В гош-конфигурации постоянная спин-спиновой взаимодействия между атомами F равна 21,5 гц. Э. Федин

1116-11

X. 1963. 11

CFCIBr

CFCIBr

chem. shift, superp

ben. dyang.

C.A. 1962. 52

-13-

16022 ghi

Potential energy as a function of internal rotation in CFCIBr—CFCIBr by nuclear magnetic resonance (N.M.R.) measurements. Douglas S. Thompson, Richard A. Newmark, and Charles H. Sederholm (Univ. of California, Berkeley). *J. Phys. Chem.* 37, 411-18(1962). The N.M.R. spectrum of CFCIBr—CFCIBr is reported as a function of temp., 177-300°K. The high-temp. spectrum is analyzed in terms of a superposition of the spectra of the meso and *dl* isomers, each in rapid rotation about the C—C bond; the low-temp. spectrum on the basis of a superposition of the spectra of the 3 rotamers of each of the 2 isomers. The gauche coupling const. between F atoms in this compd. is 21.5 ± 0.5 cycles/sec. Chem. shifts for the F atoms were different for the 3 rotamers. F atoms gauche to 1 F and 1 Cl atom are at the highest field, and F atoms gauche to 1 F and 1 Br atom are at the lowest field. By observing the relative areas of peaks at low temp., relative energies of the 3 potential min. for each isomer are calcd. High-temp. areas detd. the relative amts. of the 2 isomers. Using, in addn., chem. shift data from the low-temp. spectra, spectra of this mixt. of isomers were calcd. as a function of temp. by assigning various potential barriers to internal rotation. By comparing the calcd. spectra with those observed at various temps., several of the potential barriers

1962

11/11

11/1

ccc

4/00

to internal rotation were assigned. In each isomer, the 3 potential min. vary by at most 450 cal./mole. The potential max. which can be measured are all approx. 10.0 ± 0.5 kcal./mole above the potential min. CA

stat

1965

CF₂Br-CClBr

2

V
10

4 Д571. Определение барьеров внутреннего вращения в галоид-замещенных этанах методом ЯМР. Newmark Richard A., Sederholm C. H. NMR determinations of barriers to internal rotation in halogen-substituted ethanes. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 2, 602—623 (англ.)

Теория обмена в спектрах ЯМР развита применительно к случаю трех центров с любым числом ядер со спином 1/2. Составлена программа решения точных уравнений для матричных элементов в случае одного и двух ядер. Проведен анализ спектров ЯМР шести галоид-замещенных этанов с сильным обменом; использование теории абс. скоростей для реакций обмена между различными ротамерами позволило вычислить энергию активации внутренних вращений при двух предельных значениях трансмиссионного коэф. $x \ll 1$ и $x = 1$. Для CF₂Br—

⊗

Ф. 1966. 4 Ⓜ

CCl_2Br и $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CFBr}_2$ определены значения свободной энергии активации E_i всех ротамеров, для более сложных молекул — только некоторые из E_i . Значения E_i (4—12 ккал/моль) обсуждаются с точки зрения сдвигов, необходимых для образования соответствующего активированного комплекса. С этой точки зрения произведена также идентификация констант спин-спинового Н—F-взаимодействия в низкотемпературном спектре $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CHBrCl}$. Библ. 30 назв. Я. Лебедев

CF_2ClBr

фундамент.
частоты;
силовые
посл.

10 Д159. Интерпретация фундаментальных частот и молекулярные свойства CF_2ClBr . El-Sabban M. Zaki, Zwolinski Bruno J. Fundamental assignments and molecular properties of CF_2ClBr . «J. Molec. Spectrosc.», 1967, 22, № 1, 23—33 (англ.)

С помощью правила Рэлея найдены нижние и верхние границы значений фундаментальных частот CF_2ClBr и предложена новая интерпретация колебательного спектра. Для расчета силовых постоянных в качестве нулевого приближения были взяты постоянные из сходных галонд-замещенных молекул. Окончательный набор силовых постоянных хорошо совпадает с исходным набором, за исключением одного коэф. Рассчитанные частоты проверены по правилу сумм для изотопич. замещения. Вычислены среднеквадратичные амплитуды колебаний и корiolисовы постоянные, а также термодинамич. ф-ции $(H^0 - H_0^0)/T$, $-(F^0 - H_0^0)/T$, S^0 и C_p^0 для семи значений t -ры в интервале 100—1000° K. Г. Н. Жижин

1967

11-1863-17
вер - 11/1863-17



09.1967.10

CF₂ClBr

20 Б258. Интерпретация фундаментальных частот и молекулярные свойства CF₂ClBr. El-Sabbah M. Zaki, Zwolinski Bruno J. Fundamental assignments and molecular properties of CF₂ClBr. «J. Molec. Spectrosc.», 1967, 22, № 1, 23—33 (англ.)

С помощью правила Рэлея найдены нижние и верхние границы значений фундаментальных частот CF₂ClBr и предложена новая интерпретация колебательного спектра. Для расчета силовых постоянных в качестве нулевого приближения были взяты постоянные из сходных галоидзамещенных молекул. Окончательный набор силовых постоянных хорошо совпадает с исходным набором, за исключением одного коэффициента. Рассчитанные частоты проверены по правилу сумм для изотопич. замещения. Вычислены средние — квадратичные амплитуды колебаний и корнолисовы постоянные, а также термодинамич. функции $(H - H_0^0)/T$; $-(F^0 - H_0^0)/T$; S^0 и C_p^0 для семи значений T -ры в интервале 100—1000° К.

Г. Н. Жижин

пермод.
ф. ун-та

м.и.

впр. 11-1863-1-с 981-м дв

х. 1967. 20

CF₂CClBr

Bp - 111863-IV

1967

ν_1

un. no. 5.

42015b Fundamental assignments and molecular properties of CF₂CClBr. M. Zaki El-Sabban and Bruno J. Zwolinski (Texas A. & M. Univ., College Station). *J. Mol. Spectrosc.* 22(1), 23-33(1967)(Eng). The fundamental assignments suggested by Plyler and Acquista (CA 46, 5969c) for F₂CClBr were re-examined, and new assignments satisfying Rayleigh's rule were recommended. On the basis of the new assignments, the sum of the fundamentals fits in very well with the Bernstein substitution rule, and also the medium intensity band at 977 cm.⁻¹ is accounted for very satisfactorily. A normal coordinate calcn. was carried out on the basis of the new assignments, which favored this assignment of the 440-cm.⁻¹ band to the symmetric ν_4 fundamental rather than to the antisymmetric CF₂ rocking ν_8 , as previously suggested by P. and A. The calcd. values of all the potential consts. were compared with those of the correspond-

+1 (T.P.)

C.A. 1967. 66.10

2

ing ones in similar substituted halomethanes. They compared very closely, both in magnitude and sign, for all consts. but one. This lent further support to the principle of transferability of potential consts. The calcd. potential energy difference showed considerable coupling among the C-Cl stretching, the C-Br stretching, and the low-lying bending A' vibrations. The mean sq. amplitudes of vibration for the bonded and nonbonded atoms, the Coriolis coupling coeffs., and the thermodynamic properties for the ideal gas were calcd. on the basis of the new assignments. 20 references.

RCKP

$\text{CF}_2\text{BrCCl}_2\text{Br}$

1967
✓ 10 Б356. Изучение внутреннего вращения в 1,1-дифтор-1,2-дибромдихлорэтано методом ЯМР спинного эха. Vold R. L., Gutowsky H. S. Spin-echo NMR studies of internal rotation in 1,1-difluoro-1,2-dibromodichloroethane. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 7, 2495—2503 (англ.)

Для изучения внутреннего вращения в молекулах $\text{CF}_2\text{BrCCl}_2\text{Br}$ (I) использован метод спинного эха на ядрах фтора. Измерения проводили на частоте 25,27 МГц в диапазоне t -р от -115 до $+100^\circ$ в 75%-ных р-рах в CS_2 . Внутреннее вращение в I обуславливает существование двух *гаш*- и одной *транс*-конфигураций, переходы между которыми модулируют огибающую сигналов эха в последовательности Карра — Парсела (КП) в зависимости от расстояния между 180 импульсами, которое изменялось от 0,4 до 32 мсек. При использовании формализма матрицы плотности, авторы получили ана-

2. 1968. 10

литическое выражение для амплитуды n -го сигнала эха в присутствии обмена между ротамерами. Модуляция сигналов эха при T -ре ниже -60° обусловлена эффектами скалярного взаимодействия и хим. обмена. При -100° эффекты внутреннего вращения незначительны и наблюдаются различные времена релаксации ядер фтора в разных ротамерах. Выше -60° затухание сигналов эха — экспоненциальное. Зависимость скорости затухания сигналов эха от расстояния между импульсами в последовательности КП использована для получения величины энергии активации E обмена между ротамерами и значений хим. сдвигов в различных ротамерах. Величины E находятся в хорошем согласии с данными, полученными из стационарных измерений ЯМР, но хим. сдвиги получаются несколько завышенными. А. А. Вашман

1970

CF₂BrCClBr

8197t Fluorine-19 double resonance in the presence of chemical exchange. Fung, Bing Man; Olympia, Pedro L., Jr. (Dep. Chem., Tufts Univ., Medford, Mass.). *Mol. Phys.* 1970, 19(5), 685-94 (Eng). The ¹⁹F NMR spectra of CF₂BrCClBr in CS₂ from 20 to -80° are reported. Computer-fitting of the exptl. spectra using the d. matrix formalism of Alexander yields the chem. exchange correlation times and produces a computed internal rotation barrier for trans → gauche of 39.7 ± 0.5 kJ mole⁻¹ (9.5 ± 0.1 kcal/mole). Results of double resonance studies on the -80° spectrum upon irradiation of the various peaks with a strong radio-frequency field are presented. The d. matrix equations in the presence of chem. exchange and several relaxation mechanisms were solved to obtain theoretical changes in peak intensities on irradiation. The indirect spin saturation data and their relation to the rate of internal rotation and the relaxation

C.P. 1971. 74.2

mechanism are discussed. Random-field relaxation is the important relaxation mechanism in the system. The strong irradiation of one component of a strongly coupled spin multiplet with intramolecular exchange causes indirect saturation of the transitions connecting energy levels that have the same m_I values as the one being irradiated, whereas the intensities of other transitions are only slightly affected. It is an important complement to the spin-tickling technique in determining energy-level diagrams and relative signs of coupling constants.

RCFS

1973

BrCF₃ - Cl₂CF₂Темпер З.И. Таековский В.Ф.
Боров. И. В.

(смесь)

Термофиз и термолит. 1973,

(P; ΔH)

25, 36-8

Термодинамические св-ва
смеси BrCF₃ - Cl₂CF₂

С.А. 1974. 80. N 25. 145-177 ж.

Зах 247

50313.1208

40892

1975

Ph, Ch, Ex-C, TC

 CF_2BrCl

* 4-8285

Doucet J., Gilbert R., Sauvageau P.,
Sandorfy C. Photoelectron and far-
ultraviolet spectra of CF_3Br , CF_2BrCl ,
and CF_2Br_2 . (см. CF_3Br ; III)

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N2, 366-369

(англ.) 0317 пик .

302

302

0309

ВИНИТИ

50711.1843

Ex-C, Ch, Ph, TC

 CBrCl_2F (Di)
 CBr_2ClF 1974

1974

4158

Shimanouchi T. Tables of molecular vibrational frequencies. Part 8.

"J. Phys. and Chem. Ref. Data", 1974,

3, N 1, 269-308

0404 ПИН

(см. D3; III)

(англ.)

377 379

396

ВИНИТИ

50418.8343

Ch, Ex -C, III TC

40534 (J.) 1975
 $\text{Br}(\text{CF}_2)\text{CF}_3\text{ClO}_4$
*4-8791

Schack Carl J., Filipovich Don, Christe
Karl O.

Halogen perchlorates. Reactions with
fluorocarbon halides.

"Inorg. Chem.", 1975, 14, N 1, 145-151.

(англ.)

0351 пик

321 322 0349

ВИНИТИ

60217.4226

TC, Ph, MGU

(метро)

 CF_2ClBr 1976
3 853

оним. сб. 64

Bizette Henri, Denis Anne-Marie.Biréfringence électrique de CF_2ClBr .

"C.r.Acad.sci.", 1976, 282, N 1, B9-B12

(франц., рез.англ.)

0553 пмк

538 539

543

ВИНИТИ

CF₂ClBr

Redkoxuev V.A.,
Firsov G.Y.

1976

косибай.
ресаксаз.
(с-косед.)

" Akust. Zh." 1976, (4),
617 - 19.

●
(см. III CFCl₃)

CBr_2ClF number 5792 1974

Shimanouchi T.

madame
J

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

$CBrCl_2F$

ommuck 5792 1974

Shimanouchi T

madaya

81

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

$\text{CF}_2\text{B}_2\text{Cl}$

1980
Cvitaš^v T., et al.

протокол
сверки

Int. J. Quantum Chem.
1980, Quantum Chem.
Symp. N 14, 305-313.

(ссыл. CF_2B_2 ; III).

CF₂ClBr

1982

YPCnekmp

' 97: 191152a UV absorption spectrum and photochemistry of bromochlorodifluoromethane. Taylor, P. D.; Tuckerman, R. T.; Whittle, E. (Dep. Chem., Univ. Coll., Cardiff, UK CFI 1XL). *J. Photochem.* 1982, 19(1), 277-94 (Eng). The absorption spectrum of the vapor of CF₂ClBr (BCF) was measured over a wide range of pressures. Absorption cross sections in the range 190-340 nm are given. BCF vapor was photolyzed at 248 nm and 297, alone and with each of the radical scavengers H₂O, HBr, Cl₂ and Br₂. Quantum yields of the products were measured. Two primary modes of photodecompn. are proposed. Irradn. of BCF at 313 nm gave no detectable products with $\phi(-BCF) \leq 0.01$. However, BCF vapor was readily photodecomposed at 313 nm if liq. Hg was present. Results of the long-term exposure of BCF vapor to sunlight (up to 3 yr) under various conditions are described.

C.A. 1982, 97, 122

CF₂ BrCl

1984

1 Б1164. Фотоионизация и фрагментация галогенметанов. Photoionization and fragmentation of halogenated methanes. Wang Frank Cheng-Yu, Leroi G. E. «Vac. Ul'violet Radiat. Phys., VUV VII: Proc. 7 Int. Conf., Jerusalem, Aug. 8—12, 1983. Vol. 6». Bristol; Jerusalem, 1984, 210—212 (англ.)

Изучены фотоионизац. спектры галогенсодержащих метанов. Адиабатич. энергии ионизации найдены равными для CF₂BrCl 11,21 (везде $\pm 0,02$ эВ), CF₂Cl 12,60, CF₃Br 11,76, CF₃J 10,38, CF₂Cl₂ 11,87, CFCl₂ 11,46, CCl₃Br 11,05, CF₂Br₂ 10,98, CHF₃ 14,19, CHF₂Cl 12,28, CHFC₂ 11,75 и CHCl₃ 11,41 эВ. Рассчитанные верхние пределы теплот образования ионов CF₃⁺, CFCl₂⁺ и CCl₃⁺ составляют 91,26, 168,49 и 209,23 ккал/моль. Наибольшей стабильностью среди молек. ионов обладают ионы CF₃J⁺. Менее стабильны ионы CHCl₃, CHF₃⁺, CF₃Br⁺. Молекулы CF₄ и CCl₄ не дают пиков молек. ионов. Д. В. Загоревский

у,

14

X. 1986, 19, N 1

CF_2ClBr_2

1989

Griffiths W.J., Harris F.

I, u. n.

Org. Mass Spectrom. - 1989-
24, ~5 - C. 323-6

● (Cur. CF_3Br_2 , III)

Ch₂F₂ [Am 33596]

1990

Griffiths W.J., Harris F.M.,

J. New J. Chem. 1990, 14,
261-264.

Experimental
of the single
Ionization

● Determination
and Double
Energies of the

Halomethanes ~~4Br~~ CBr_2FCl
and CBr_2FH

CBr_2FCl

1990

18 Б1141. Экспериментальное определение энергий одно- и двухкратной ионизации галогенометанов CBr_2FCl и CBr_2FH . Experimental determination of the single and double ionization energies of the halomethanes CBr_2FCl and CBr_2FH / Griffiths W. J., Harris F. M. // New J. Chem.— 1990.— 14, № 4.— С. 261—264.— Англ.

Исследованы спектры неупругого рассеяния ионов OH^- с первоначальной энергией 6 кэВ с двухзарядным переносом, при однократных столкновениях с молекулами $\text{M}=\text{CBr}_2\text{FCl}$ и CBr_2FH : $\text{OH}^+ + \text{M}^- \rightarrow \text{OH}^- + \text{M}^{2+}$ и при двух последоват. столкновениях: $\text{OH}^+ + \text{M}^- \rightarrow \text{OH} + \text{M}^+$, $\text{OH} + \text{M}^- \rightarrow \text{OH}^- + \text{M}^+$. Из анализа полученных данных определены ПТ однократной (I_1) и двухкратной (I_2) ионизации M : $I_1=11,8$ и $I_2=29,0$ эВ для CBr_2FCl и $I_1=10,8$ и $I_2=26,9$ эВ для CBr_2FH . Отмечено, что для изученных молекул также как и для др. галогенометанов отношения I_1/I_2 близки к 2,5.

О. А. Басченко

2
X. 1990, N 18

CBr_2FH

CHFCIBr/34356 (am. 33953) 1990

Novak J.,
Bull. Chem. Soc. Jpn., 1990,
63, N 4, 1278-1280.

Electronic Structure of
Chiral Halo-me-thanis.

CHFClBr (33953 (OM 34356))

1990

Novak I.,

Bull. Chem. Soc. Jap.,
1990, 63, N 4, 1278-1280.

Electronic structure
of ● Chiral Halo-
methanes.

М,
электрон.
связи,
термод.
св-ва

BCF

CF₂CBz

1992

Мб инкмп,
Франца. Нат,
20 см/сек

117: 99929d The microwave spectrum and the molecular structure of bromochlorodifluoromethane (BCF). Bettens, R. P. A.; Brown, R. D. (Chem. Dep., Monash Univ., 3168 Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 155(1), 55-76 (Eng). The microwave spectrum of BCF was assigned in the frequency region 48-72 GHz, and the rotational consts., some quartic distortion consts., and the bromine quadrupole coupling tensor were obtained for the 4 isotopic species. Using the obtained 12 rotational consts., an r_0 structure was fitted and compared to ab initio and semi-empirical theor. structural predictions, along with other halogenated methane-type mols. The present study opens the way for its possible spectroscopic atm. detection.

C. A. 1992, 117, N 10

CBrF₂CClO

1993

118: 89763b Raman and infrared spectra, conformational stability, barriers to internal rotation, ab initio calculations and vibrational assignment for bromodifluoroacetyl chloride. Mohamed, Tarek A.; Stidham, Howard D.; Guirgis, G. A.; Phan, H. V.; Durig, J. R. (Dep. Chem., Univ. Massachusetts, Amherst, MA 01003 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1993, 24(1), 1-10 (Eng). The Raman (1800-10 cm⁻¹) and IR (2000-30 cm⁻¹) spectra of bromodifluoroacetyl chloride, CBrF₂CClO, are reported for the gas

(uk u ckp)

C. A. 1993, 118, N10

/and polycryst. solid. Addnl., the Raman spectrum of the liq. along with qual. depolarization ratios also were obtained. These data were interpreted from an equil. between the gauche and the trans conformers (bromine atom trans to the Cl atom) in the gas and liq. phases. From a study of the Raman spectrum of the liq. at various temps., a value of $851 \pm 56 \text{ cm}^{-1}$ ($2.43 \pm 0.07 \text{ kcal mol}^{-1}$) was obtained for ΔH with the gauche conformer the more stable form. A similar study of the gas gave a value of $725 \pm 150 \text{ cm}^{-1}$ ($2.07 \pm 0.43 \text{ kcal mol}^{-1}$), again with the gauche rotamer the more stable conformer. Hence the gauche conformer is the predominate rotamer in the gas and liq. and the only conformer present in the annealed solid. Aided by ab initio and scaled computations of the vibrational spectrum with the STO-3G* basis set and, for the trans conformer at the *MIDI-4* level of the theory, complete assignments of obsd. bands to fundamental vibrations of the gauche conformer are made, whereas partial assignment is reported for the trans conformer. The fundamental torsional mode for the gauche conformer was obsd. at 46 cm^{-1} but excited-state transitions were not obsd. so the potential function governing the conformational interchange could not be detd. Optimized geometries, dipole moments, unscaled and scaled vibrational frequencies and harmonic force fields are reported for both conformers. With the STO-3G* basis set, the gauche conformer is calcd. to be more stable than the trans conformer by 17 cm^{-1} (48 cal mole^{-1}). These results are compared with the corresponding quantities for some similar mols.

1996

F: CBrClF₂

P: 3

10B1273. Миллиметровый вращательный спектр CBrClF₂ [2] (халон BCF). Наблюдение новой полосы R-типа и обобщение условий для образования полосы сплющенного типа. The mm-wave rotational spectrum of CBrClF₂ [2] (halon BCF): Observation of a new R-type band and generalization of conditions for oblate-type band formation / Kisiel Z., Bialkowska-Jaworska E., Pszczolkowski L. // J. Mol. Spectrosc. - 1996. - 177, N 2. - С. 240-250. - Англ.

На миллиметровом спектрометре в области частот 160-320 ГГц с точностью около 10 кГц измерены вращательные спектры четырех изотопомеров молекулы CBrClF₂ в основном и первом возбужденном колебательных состояниях. Определены зависимость формы полос от вращательного квантового состояния для полос R-типа и молекулярные постоянные для различных состояний. □

Рпсх 1997

1996

F: CBrClF₂

P: 3

14Б1304. Колебательная и колебательно-вращательная спектроскопия CBrClF₂ (хладона-1211). Vibrational and vibration-rotational spectroscopy of CBrClF₂ (Halon-1211) / McNaughton Don, Robertson Evan G., Shanks F. [Chemical Physics] // Chem. Phys. - 1996. - 206, N 1 - 2. - С. 161-171. - Англ.

PMX 1997

Исследованы ИК-спектры поглощения, в т. ч. с использованием техники сверхзвукового расширения паров, и спектры КР газообразного хладона-1211 CBrClF_2 (I). Выполнен квантовохим. расчет оптимизированной геометрии и гармонич. частот колебаний I на уровнях ХФ/6-311ГФ{*}{*}, и МП2/6-311ГФ{*}. Предложена интерпретация спектров I, подтвержденная квантовохим. расчетом. Для двух полос: В-типа, лежащей при 1100 см^{-1} и отнесенной к колебанию 'ню'[1], и С-типа, лежащей при 1151 см^{-1} ('ню'[7]), проведен вращат. анализ; для изотопомеров I - $\text{C}\{79\}\text{Br}\{35\}\text{ClF}_2$ и $\text{C}\{81\}\text{Br}\{35\}\text{ClF}_2$ - определены вращательные постоянные для возбужденного колебат. состояния и рассчитана вращат. т-ра, равная 'ЭКВИВ'40К.

CHBrClF

1997

UK u. NB
CHBrClF

127: 72353f Combined high resolution infrared and microwave study of bromochlorofluoromethane. Bauder, Alfred; Beil, Andreas; Luckhaus, David; Müller, Franz; Quack, Martin (Laboratorium für Physikalische Chemie, Eidgenössische Technische Hochschule, CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(18), 7558-7570 (Eng), American Institute of Physics. The authors report a detailed spectroscopic study of the chiral mol. bromochlorofluoromethane (CHBrClF) with rotational resolu. using a pulsed nozzle beam Fourier transform microwave (FTMW) and a waveguide FTMW spectrometer as well as a supersonic jet interferometric FTIR and IR diode laser spectrometer. The rotational spectrum of CHBrClF was measured between 8 and 18 GHz. The quadrupole hyperfine components were fully resolved for the assigned rotational transitions with $J \leq 18$. Three ground state rotational consts., five centrifugal distortion consts., and all five independent elements of the Br and Cl quadrupole coupling tensors were detd. for each of the four isotopomers $\text{CH}^{79}\text{Br}^{35}\text{ClF}$, $\text{CH}^{81}\text{Br}^{35}\text{ClF}$, $\text{CH}^{79}\text{Br}^{37}\text{ClF}$, and $\text{CH}^{81}\text{Br}^{37}\text{ClF}$ from ~500 measured transition frequencies of the hyperfine components. The quadrupole coupling tensor was transformed to its principal axes. The determinable sign combinations of the off-

C. A. 1997, 127, N 5

diagonal elements of the coupling tensor were evaluated. Rotational transitions involving high J were measured by FTIR spectroscopy between 15 and 40 cm^{-1} (450–1200 GHz) using a light pipe cell, providing an est. of the permanent dipole moment $\mu = (1.5 \pm 0.3)$ D from intensities. In the mid-IR, the authors have fully analyzed the rovibrational line structure of supersonic jet spectra of the CF-stretching fundamental ν_4 , giving band centers for the isotopomers $\text{CH}^{79}\text{Br}^{35}\text{ClF}$ [$\nu_4^0 = 1077.178\,43(4)\,\text{cm}^{-1}$], $\text{CH}^{81}\text{Br}^{35}\text{ClF}$ [$\nu = 1077.133\,06(4)\,\text{cm}^{-1}$], $\text{CH}^{79}\text{Br}^{37}\text{ClF}$ [$\nu_4^0 = 1076.7914(4)\,\text{cm}^{-1}$], and $\text{CH}^{81}\text{Br}^{37}\text{ClF}$ [$\nu_4^0 = 1076.730\,26(5)\,\text{cm}^{-1}$]. A combined anal. of ~ 20 microwave frequencies, > 100 IR ground state combination differences, and ~ 70 IR transition frequencies for each of the ^{35}Cl isotopomers finally provide accurate ground and excited state rotational parameters as well as structural parameters, which may be compared to ab initio calcns. The results are discussed in relation to the mol. structure as well as coincidences of ν_4 absorptions with CO_2 laser lines in view of CO_2 -laser pumping and possible spectroscopic studies of this chiral mol. at ultrahigh resolu.

CH_2ClBr

[OM 40122]

1999

DM's

Espinosa - Garcia J.,
Doel S.,

(BrCH₂-H) J. Phys. Chem. A 1999, 103,
N32, 6387-6393

Theoretical C-H Bond Dissocia
tion Enthalpies ● for CH_2Br and

CH_2ClBr .

