

C-Bx-F-H

HCFB₂₂ (v)

1402-IV

1938

Glockler G., Bachmann J. H.

Phys. Rev. 1938, 54, 970-1

" Raman effect of dibromofluoromethane "

10

2

C.A., 1939, 1215^y

7821 - IV

1940

(HCBBr_2Cl , HCCl_2F , HCBBrClF , HCBBrCl_2 ,
 HCClF_2 , HCBBr_2F , HCBBrF_2 , HCF_3)

Glockler G., Leader G.R.

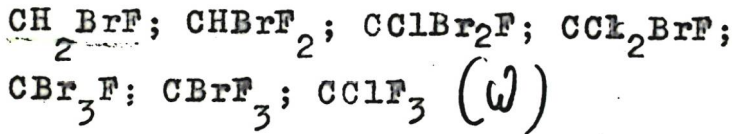
J.Chem.Phys. 1940, 8, 699-705
"The fundamental ...

J

CB_2FH

4942 - IV

1944

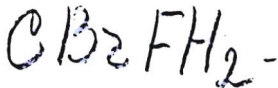


Stepanov B.I.

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

Calculation of ...

J



1400-IV

1948

M.n. (CH₂FBr, CHFC1₂, CHFC1Br,
CHFCBr₂, CFC1₃, CFC1₂Br, CFC1Br₂, CFCBr₃)

Delwaulle M.L., François F.

Contrib.étude structure mol.,
Vol.commem.Victor Henri, 1947/48,
119-124 (*opaus.*)

Raman spectra of some ...

C.A., 1949, 2865gh

CB₂FH₂

12-1394
 CF_2Br_2 , CHF_2Br , CF_3Br (We) 1951

Davidson N.

J. An. Chem. Soc. 1951, 73,
467-468

The ultraviolet absorption
spectra and ...

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

Chem. Abstr. 1952,
46, N 10, 4363g

4832 - *IV*

1953



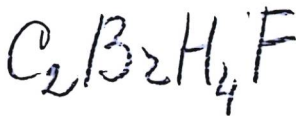
(vi)

Simpson D., Plyler E.K.

J. Res. Nat. Bur. Standards, 1953, 50,
N5, 223-227

Infrared spectra of ...

J



CHBr₂F (ν_i , φ^* , S , C_p) ^{BP}-1403-IV

1955

Murata H., Palm A., Meister A.G.

J. Chem. Phys., 1955, 23, N4, 702-703 (anm.)

Substituted methanes. XXV. Potential constants and calculated thermodynamic properties of dibromofluoromethane.

P.R.X. 1955, N20, 45289.

10

2

✓

dp

IV-1401

1955

CHBrF_2 , CDBrF_2 (vi, ϕ^* , S, Cp)

Palm A., Voelz F.L., Meister A.G.
J.Chem.Phys., 1955, 23, N 4,
726-728 (amu.)

Substituted methanes. XXII. Infrared
red spectra of CHBrF_2 , and ...

PX., 1955, N 20,
45287

$\text{CB}_2\text{F}_2\text{D}$

CHBrF_2

замещенные
метаны

Di

CHBrF_2

CDBrF_2

Воп-1401-IV

1955

Palm A., Voelz F. L., Meister A. G.,
J. Chem. Phys., 1955, 23, 726-728,
Замещенные метаны. XXII. IV

Инфракрасный спектр CHBrF_2 и
потенциальные постоянные и
вращательные углы молекулы и
свойства CHBrF_2 и CDBrF_2

$C_2H_2Br_2F_2$

1957

просба
мозлиб г.д.
Барсеров...

Kreerov M., Mason E.,
J. Am. Chem. Soc.,
1957, 79 n 18, 4851-54.

1957.

Nielsen J. R., Theimer R.,

смерт

J. Chem. Phys., 1957, 27, 891.

Измерения атом и молекулярных спектров
замещенных атомов. I. 1,1,1-трихлор-
2-пропан.

$\text{C}_3\text{H}_2\text{Br}_2$.

CF_2CHBr

Смесь

Терм. разл.

R. Theimer, J. R. Nielsen

1590-4943-IV

1957

J. Ch. Ph, 27, 11, 264-268

C_2HBrF_2

И.к. и Раман смесью сформированный
элемент ~~для~~ VIII ($\text{CF}_2\text{:CHBr}$)

Найденные след. основные частоты
колебаний $\text{CF}_2\text{:CHBr}$: 3135, 1732, 1317,
1172, 957, 768, 741, 583, 568, 366 и 227 cm^{-1}

Растворенный

для жидк.

жидк. ф-ция

288,16 - 800°K

1961

IV - 4855

$\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CHF}_2$; $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CHF}_2$ (ω , ν)

Knaboe P., Nielsen J.R.
J.Chem.Phys., 1961, 34, N5,
1819-1826

Infrared and Raman...

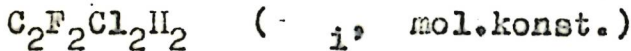
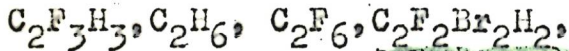
J



$\text{C}_2\text{Br}_2\text{F}_4\text{H}$

1962

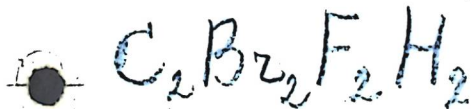
IV-7415



Bucker H.P.

Dissertation Abstr., 1962, 23, 264-5
Normal coordinate ...

J



1962

 $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CH}_2\text{Br}$

H. P. Bucker, Jr.

pres
 clu.
 ues.

Univ. Microfilms, Order N62-3341,
 90pp.

1-
 N-
 S-
 7415-
 Bop-7415-
 chg

Normal coordinate analysis
 of CF_3-CH_3 , C_2F_6 and C_2H_6 .
 Vibrational spectra of $\text{CF}_2\text{Br}-$
 CH_2Br and $\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CH}_2\text{Cl}$.
 (see C_2F_6)

$\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CH}_2\text{Cl}$
 $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CH}_2\text{Br}$ ($\gamma_i, \Delta H^\circ$) 7416-IV | 1963

Buckner H.P., Nielsen J.R. $\text{C}_2\text{Br}_2\text{F}_2\text{H}_2$

J. Mol. Spectry, 1963, 11, (1), 47-66

Infrared and Raman spectra of fluoro-
haloethanes. XIII $\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CH}_2\text{Cl}$, $\text{CF}_2\text{Br}-\text{CH}_2\text{Br}$

Есть оригинал.

CA, 1963, 59, 2296h

станд. разность значений между
двумя видами. Измеряли.

IV - 7651

1963

$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{J}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$ (V_i)

Edgell W.F., Rierhof T.R., Ward C.

J. Molec. Spectrosc., 1963, 11, N 2,
92-107

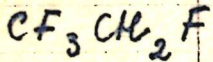
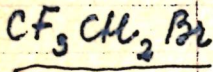
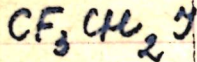
The infrared and Raman ...

J

$\text{C}_2\text{Br}_2\text{F}_3\text{H}_2$

Bp - 7651 - IV

1963



) The infrared and Raman spectra of $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{I}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, and $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$. Walter F. Edgell, Thomas R. Riethof, and Charlotte Ward (Purdue Univ., Lafayette, Indiana). *J. Mol. Spectry.* 11(2), 92-107(1963). The infrared spectra, 2-24 μ , and the Raman spectra of $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, and $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{I}$ are reported. Complete fundamental frequency assignments are given. This series of compds. illustrates the theory of group vibrations. The group vibrations of CF_3 and CH_2 show a regular shift toward lower frequencies as the halogen substituent becomes heavier. From the spectroscopic data presented the rotational barriers of the mols. can be calcd.

R. Holroyd

u. K. спектры

Vi

C. A. 1963. 50. 12

13474d

1964

 $\text{CH}_2\text{F}^{79}\text{Br}$

микроволн.

спектр

14-9584-11

4 Б181. Микроволновой спектр фторбромметана.
 Curnuck P. A., Sheridan J. Microwave spectrum
 of fluoro-bromomethane. «Nature» (Engl.), 1964, 202,
 № 4932, 591—592 (англ.)

Исследован микроволновый спектр $\text{CH}_2\text{F}^{79}\text{Br}$ (I) и $\text{CH}_2\text{F}^{81}\text{Br}$ (II). Идентифицированы переходы $J_{0,J} \rightarrow J_{1,J-1}$; $J_{1,J} \rightarrow (J-1)_{2,J-3}$; $J_{1,J-1} \rightarrow (J-1)_{2,J-2}$ и $J_{1,J} \rightarrow (J+1)_{0,J+1}$. Вращательные постоянные равны (в Мгц): I 39852,5; 3523,9; 3772,9 и II 39841,5; 3501,2; 3747,0, откуда при CH 1,09 Å; $\angle \text{HCH}$ 112° и $\angle \text{HCBBr}$ $108,5^\circ$ получается CF 1,375 Å; 1,915 Å; $\angle \text{FCBr}$ 111° . Предварительные данные для постоянных ядерного квадрупольного взаимодействия χ (в Мгц): I 443,5; -145,0; -298,5; II 371,9; -121,7; -250,2. Величина χ в направлении CBr близка к найденной для метилбромидом, однако асимметрия в CH_2FBr больше, что может объясняться вкладом структуры $\text{F}-\text{CH}_2=\text{Br}^+$.

Т. Бирштейн

х. 1965.4

CH_2FBr
(M. S. Curnuck)

11-9587

1964

Microwave spectrum of fluorobromomethane. P. A. Curnuck and J. Sheridan (Univ. Birmingham, Engl.). *Nature* 202(4932), 591-2(1964). By using 25 transitions where 1st-order quadrupole coupling is nearly free from 2nd-order effects for the species $\text{CH}_2\text{F}^{79}\text{Br}$ (I) and $\text{CH}_2\text{F}^{81}\text{Br}$ (II), the following rotational consts. (Mc.) are obtained: for I, $A:B:C = 39,852.5:3523.9:3772.9$; for II, $39,841.5:3501.2:3747.0$. For the bond length and angles $\text{CH} = 1.09 \text{ \AA}$, $\text{HCH} = 112^\circ$, $\text{HBr} = 108.5^\circ$, CF is calcd. as $1.375 \text{ \AA}$, $\text{CBr} = 1.915 \text{ \AA}$, and $\text{FCBr} = 111^\circ$. Nuclear quadrupole coupling consts. for Br in Mc. for the a , b , and c components are: $^{79}\text{Br} = 443.5, -145.0, -298.5$; $^{81}\text{Br} = 371.9, -121.7, -250.2$. S. Goldwasser

C. A. 1964 at N 4 382 h.

IV-10015

1964

$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$; $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Cl}$; $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$;

$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{J}$; (Vo, t.d.f.)

Ward.Ch.R., Ward C.H.

J.Mol.Spectry, 1964, 12(3), 289-98

Rotational barriers and ...

J

D

E.O.T.S. Q. H.

CA, 1964, 60, N9, 10059d

$\text{CH}_2\text{CF}_3\text{Br}$

[Bp - M1519-IV] 1966

Lave J.P.; Parr R.G.

"J. Chem. Phys."

1966, 44 (8), 3001-9.

(v₀)

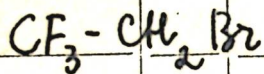
$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$

1967.

Alfred Derek Hunter Clague
Univ. Microfilms .Diss.Abstr.
B 27(7),23IO(1967) .

V_o

• (see B-C; III)



Brown F.B., et al.

1947

4.4.

$\nu_{\text{C-Br}}$

J. Mol. Spectrosc., 24 (2),
163-173.

Far infrared spectra
and barriers to inter-
nal rotation of five ha-
logena- ted ethanes:

III (corr. $\text{CF}_3 - \text{CF}_2\text{Cl}$)

$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$

1964

A. Derek, H. Clarke

V_0 Diss. Abstr. 24, 2310, 1964.

• Cat $\text{BF}_3\text{NH}_2\text{CH}_3$; III

C_2H_4FBr

Bermani M.F. El., и др. 1968
Spectrochim. acta,
A 24, N 8, 1251

ИК-спектр

Чистейшее конформационное
1,2-хлорэтанона и
1,2-бромэтанона в
жидкой и паровой
фазах.

(см. C_2ClFHy) III

$\text{BrCH}_2\text{CH}_2\text{F}$

(т. н.,
набор)

спектр,
колеб.

атомы,
 ν_2 ,

$\Delta H_{\text{н.н.}}$

IX-X-1984-8-8-89

Elbermani M.F.,

Jonathan N.

J. Chem. Phys.

49, N1, 346

1968

Вращательное излучение
1-фтор-2-галогензамещенных

(с. C_2ClFH_4) III

CHF_2Br

спектр

Holzer W.

1968

J. Mol. Spectrosc., 25, n1,
123.

Интенсивность в
спектрах КР. II. Абсо-
лютная интенсив-
ность и степень
деполяризации

линий в спектрах
расположенных
линий в
карт. состоянии.

(см. CH_2F_2) III

1969

DC Br F_2

Carver T. G.,
Andrews L.

ν_i

J. Chem. Phys., 50, n 12, 5100

ИК спектры дифторметил-
ного радикала
в твердом аргоне.

(см. $MSBr_2$) III

$C_2H_2Br_2F_2$

XIV-1704

1969

84480d Infrared studies of 1,2-dibromo-2,2-difluoroethane.
Klaeboe, Peter (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway).
Acta Chem. Scand. 1969, 23(10), 3473-8 (Eng). The ir spectra
of 1,2-dibromo-2,2-difluoroethane as a vapor, as a liq., and as a
solid were recorded at 4000-250 cm^{-1} . The compd. was crys-
tallized at room temp. under high pressure, and the ir spectra of
a polycryst. sample and of a single crystal were obtained. The
dichroic ratio of the stronger bands were registered. From the
spectra it is clear that the same conformer is present in the low
temp. and in the high pressure solids. RCMW

UK - chem

C.A. 1970.72.16

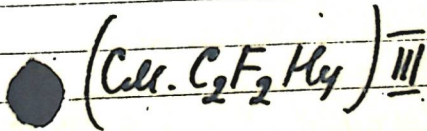
1969

C_2H_4FBr

Zielmeyer S.,
Hagan B.L.

Theoret. chim. acta,
1969, 15, n 1, 89

Дом У
(для атома
галогена)



$C_2F_5H_2$

CF_3CH_2Br

UK-checkup

24, ~1, 28

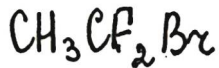
[BQ - XV - 108]

1970

Harnish D.F.,
Hirschmann R.P.

Appl. Spectrosc., 1970,

$C_2F_4H_2$
(Cell. CF_3CH_2F) III



1972

Durig J. R;
et al.

(Vi; Vo)

"J. Chem. Phys.",
1972, 57, N1, 131-43.

● (cm. $\text{CH}_3\text{CBr}_2\text{Cl}$; III)

CH₃CF₂Br

1974

Durig J. R.

Bucy W. E.

J. Chem. Phys 1974, 60 (8)
3293-8 (ENG)

U₀

(all CH₃CHCl₂; MI)



1973

Crowder G. A.

"J. Fluor. Chem"

1973, 3 N2, 125-31

Di; cur.
nocu

(see. $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Cl}$; III)

00115.257

Ex-C TC, Ph, Ch

29864
CF₂BrCH₂Br

* 45-11236

Ng Spoon. Hindered internal rotation and
the nuclear magnetic resonance parameters
in 1,2-dibromo-1,1,2-trifluoroethane.
"J. Chem. Soc. Faraday Trans. ", 1975,
Part 2, 71, N 11, 1839-1843
(англ.)

516 519

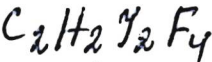
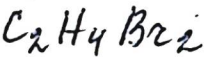
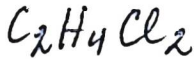
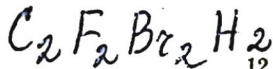
5

0545 МК

ВИНИТИ

оттиски 4994

1976

фотоэлектр.
спектр

12 Б112. Фотоэлектронные спектры 1,2-дибром-1,1-дифторэтана, 1,2-бромхлорэтана, 1,2-дихлор-, 1,2-дибром- и 1,2-диодтетрафторэтана. Chau F. T., McDowell C. A. Photoelectron spectra of 1,2-dibromo-1,1-difluoroethane, 1,2-bromochloroethane, and 1,2-dichloro-, 1,2-dibromo-, and 1,2-diiodotetrafluoroethane. «J. Phys. Chem.», 1976, 80, № 26, 2923—2928 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры (ФС) 1,2-дибром-1,1-дифторэтана, 1,2-бромхлорэтана, 1,2-дихлор-, 1,2-дибром- и 1,2-диодтетрафторэтана (I). Положение в спектре и отсутствие колебательной структуры четырех первых полос ФС рассмотренных соединений позволило отнести их к ионизации с орбиталей, являющихся линейными комбинациями неподеленных пар (НП) атомов галогенов (Cl, Br, I), причем в расчетах этих соединений методом ССП МО ЛКАО в прибли-

(+4)



X.1977. N12

жениях ППДП/БУ и ППДП/2 эти орбитали являются вырожденными, что противоречит эксперименту. Вырождение орбиталей НП снимается при расчете одноэлектронным методом МО, типа Хюккеля, параметрически учитывающим спин-орбитальное взаимодействие, а также взаимодействие через пространство и через связь. Параметры всех трех видов взаимодействий определены для данных соединений т. обр., чтобы воспроизвести эксперим. потенциалы ионизации НП, а затем на их основе проанализирована природа орбитальных взаимодействий НП и сделана попытка определить предпочтительные конформации изучаемых соединений. Сделан вывод, что во всех рассмотренных соединениях взаимодействия НП через связь более существенны, чем взаимодействия через пространство. В газовой фазе I существует преимущественно в виде гош-конформера.

В. Фаустов

60916.3746
Ex-C, Ch, Ph, TC

HC Br Cl F
40892

1976

Ч.к, Ра-маш сменит * 13-14749

Diem M. Burow D.F.

Vibrational spectra and normal coordinate
analysis of bromochlorofluoromethane.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 12, 5179-5185
(англ.)

0704 лнк

662 663 664

ВИНИТИ

$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$

1977

(снхтр)
к. р.

Lopata A. D. et al
"J. Raman Spectrosc.",
1977, 6, N2, 61-66 (rus.)

coll. $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{P-III}$

CHF_2Br

номер 8336

1979

Andrews L, et al.

и.к.

сери

J. Phys. Chem., 1979,

83 (7), 824-31

CHFBr_2 (submitted 8736) 1979

Keelan B.W., Andrews L.

U.K. group J. Phys. Chem., 1979,
83 (19), 2488-96

Matrix Photoionization of
dihalo fluoromethane.

CHFB_r

CHFJ

М.К. Сивков.

1979

4 Б214. Инфракрасные спектры свободных радикалов CHFCI, CHFB_r и CHFJ в твердом аргоне. Prochaska Frank T., Keelan Brian W., Andrews Lester. Infrared spectra of the CHFCI, CHFB_r, and CHFJ free radicals in solid argon. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 76, № 1—3, 142—152 (англ.)

Методом матричной ИК-спектроскопии изучены продукты р-ций CHFX₂ (X=Cl, Br и J) с атомами Li и Na. Сделан вывод об образовании MX и свободных радикалов CHFX. Идентификация полос поглощения этих радикалов подтверждена экспериментами с ¹³C- и D-замещенными. Показано, что в результате фотолиза Ag-матриц CH₂FB_r и CH₂FJ также образуются радикалы CHFX. Проведено отнесение частот колебаний. Сопоставлена реакц. способность атомов Li и Na и полученных свободных радикалов. О. Г. Гаркуша

(+1) ☒



д. 1980. № 4

CH_2FBr

ommuch 10783 | 1980

Prochaska F.T.

Andrews L.

и.к. смкр

помощник

J. Chem. Phys., 1980,
73 (6), 2651-64

C_6H_4FBr

1980

11 Д270. Электронный спектр парафторбромбензола.
Electronic spectra of parafluorobromobenzene. Singh
Shashi K., Upadhyaya K. N. «Pramana. J. Phys.»,
1980, 14, № 5, 389—393 (англ.)

В области 2900—2400 Å исследован электронный спектр поглощения парафторбромбензола и дан анализ его колебательной структуры. Наиболее интенсивные полосы, включая полосу 0—0, являются полосами В-типа. Отмечено, что колебательные полосы А-типа также наблюдаются, хотя они и меньше по интенсивности, чем полосы В-типа. Проведена идентификация наблюдаемых колебательных частот. Приведены значения фундаментальных колебательных частот основного и возбужденного электронных состояний. Обсуждены возможные изменения в молекулярной геометрии исследуемых молекул при возбуждении из состояния 1A_1 в состояние 1B_2 .

Е. Н. Викторова

Электр.
спектр
молекул.
геометрия

Ф. 1980 N 11

$\text{BrCH}_2\text{CH}_2\text{F}$ comm. 10978 1981

cas. nom. Pruettangkura, P.,
et al.
Li

J. Fluorine Chem.
1981, 17(2), 155-8.

●
(cas. $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{F}$; III).



1981

Pruettiangkura P., et al

ν_i : cal. norm.
a.n.

J. Fluor. Chem., 1981,
17 N2, 155-158.

● (cm $\text{FCH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$) III

$\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$

1985

19 Б1230. Инфракрасное многофотонное поглощение и разложение молекул $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, $\text{CH}_3\text{CHBrCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CHClCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CHClCH}_2\text{CH}_3$, CH_3CF_3 и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$. Infrared multiphoton absorption and decomposition for $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, $\text{CH}_3\text{CHBrCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CHClCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CHClCH}_2\text{CH}_3$, CH_3CF_3 , and $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$. Jang — Wren J. C., Setser D. W., Ferrero J. C. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 3, 414—426 (англ.)

ИК многофотонное поглощение и разложение

Исследованы процессы многофотонного возбуждения и диссоциации под действием ИК-излучением CO_2 -лазера молекул $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$ (I) $\text{CH}_3\text{CHBrCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CHClCH}_3$, $\text{CH}_3\text{CHClCH}_2\text{CH}_3$, CH_3CF_3 (II), $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$ (III). При интенсивностях излучения 0,05—5,0 Дж/см² измерена энергия, поглощаемая молекулами. Выход диссоциации измерен для I—III, а для остальных молекул при интенсивности излучения вплоть до 5 Дж/см² диссоциация не

74
IX

X. 1985, 19, N 19

наблюдается. Показано, что в процессах возбуждения и диссоциации II и III принимает участие лишь ограниченное число вращат. уровней основного состояния (эффект «узкого горла»), а в остальных случаях процессы возбуждения и диссоциации происходят с участием большого числа вращат. состояний. Для анализа результатов измерений использованы кинетич. ур-ния и определены сечения поглощения. Е. В. Алиева

$\text{CH}_2\text{F}-\text{CH}_2\text{Br}$

DM. 23288

1986

15 Б1242. Микроволновый спектр гош-1-бром-2-фторэтана. Microwave spectrum of gauche 1-bromo-2-fluoroethane. Niide Y., Ohkoshi I., Takano M., Hayashi M. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 115, № 2, 305—315 (англ.)

МВ спектр

На штарковском МВ-спектрометре в обл. частот 10—35 ГГц с точностью 0,05 МГц измерены спектры 2 изотопич. образцов гош-конформера 1-бром-2-фторэтана, $\text{CH}_2\text{F}-\text{CH}_2^{79}\text{Br}$ (I) и $\text{CH}_2\text{F}-\text{CH}_2^{81}\text{Br}$ (II), в основном ~~колебат~~ состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен в приближении модели асимм. волчка с учетом квартичного центробежного искажения и Br-ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I и II соотв. постоянные ядерного квадрупольного взаимодействия (МГц) $\chi_{aa} = 266,4(17)$ и $225,5(12)$, $\chi_{bb} = -11,8(9)$ и $-11,5(7)$, $\chi_{cc} = -254,6(19)$ и $-214,0(14)$, $|\chi_{ab}| = 392,7(43)$ и $336,5(31)$ согласуются с отнесением МВ-спектров к гош-конформеру. Другой возможный транс-конформер обнаружить в спектре не удалось. С. Н. Мурзин

X. 1986, 19, N 15.

CH₂FBr

[om. 30929]

1988

NOVAK I.,

(neop. pacrem) Z. Naturforsch. 1988,
43a, 851-854.

CB₂ FH (OM-33596) 1990

Griffiths W. J., Harris F. M.,
New J. Chem. 1990, 14,
261-264.

J;

Experimental Determination of
the single and Double Ionization
Energies of ● the Halomethanes

CBr_2FCl and CBr_2FH .

CHFBr_2

(om. 34579) 1990

Ibuki T., Hiraya A.,
et al.

сверх
звуковых.

J. Chem. Phys. 1990,
92, N 7, 4277-4282.

Vacuum ultraviolet photo-
chemistry of CHCl_2 and CHFBr_2

Absorption spectra and CHF.
($\tilde{A}^1 A''$) radical formation.

CHFBr_2

1990

5 Д127. Электронное строение малоизвестных галогенметанов. Electronic structure of less common halomethanes / Novak Igor // Z. phys. Chem. (BRD).— 1990.— 167, № 1.— С. 123—127.— Англ.; рез. нем.

М.П.
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базе МИНИ-4 с использованием экспериментальной или полученной интерполяцией по эксперим. данным геометрии исследовано электронное строение ряда галогенметанов, содержащих 2 или 3 разных атома галогена (F, Cl, Br, J) и 0—2 атома H. Приведены полные энергии, дипольные моменты, потенциалы ионизации и проведено отнесение полос в фотоэлектронных спектрах. Отмечено, что экспериментальные дипольные моменты CHFBr_2 и CBr_2Cl_2 , вероятно, неправильны.

В. Л. Лебедев

(41) 

фр. 1991, № 5

CHFB₂

1990

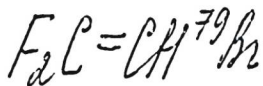
№ 10 Б1038. Электронная структура редких галогенометанов. Electronic structure of less common halomet-hanes / Novak Igor // Z. phys. Chem. (BRD).— 1990.— 167, № 1.— С. 123—127.— Англ.; рез. нем.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисного набора MINI-4 по программе MICROMOL проведены расчеты электронной структуры, равновесных геометрич. параметров, ПТ ионизации и дипольных моментов 20-ти редких галогенометанов, содержащих атомы Вг и I. Полученные данные использованы для интерпретации фотоэлектронных спектров исследованных галогенометанов. Показано, что эксперим. дипольные моменты CHFB₂ и CB₂Cl₂ существенно меньше рассчитанных. Сделан вывод, что базисный набор MINI-4 качественно правильно передает особенности фотоэлектронных спектров, хотя и переоценивает энергии ионизации. И. Н. Сенченя

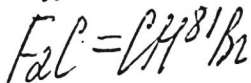
М.П.

⊗ (4)

X. 1991, № 10



1991



115: 122692r The microwave rotational spectra of 1-bromo-2,2-difluoroethene and the bromine nuclear quadrupole coupling tensor. Gldag, F.; Sutter, D. H. (Inst. Phys. Chem.,

Christian-Albrechts-Univ., W-2300 Kiel, Fed. Rep. Ger.). *Z. Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1991, 46(6), 513-26 (Eng). The first assignment of the vibronic ground state rotational spectra for $F_2C = CH^{79}Br$ and $F_2C = CH^{81}Br$ is reported. Only μ_b -type transitions could be obsd. This indicates, that the C-F and C-Br bond dipole moments are almost equal despite of the large difference in the Pauling electronegativities of the 2 halogen atoms. The complete quadrupole Br-coupling tensors including their orientation with respect to the mol. principal inertial axes could be detd. and are discussed within the Townes-Dailey model. A partial r_0 -structure is proposed.

1/8 check

M.A.

C.A. 1991, 115, ~12

C-Br-F-H complex.

1993

El-Bindary, A.A.; Horn A.,
et al.,

UK &
manuscript

J. Chem. Phys. Phys.-Chim.
Biol. 1993, 90(9), 1685-701

(all. C-Cl-F-●H complex)

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

1995

(IR camp)

123: 68851s IR spectrum of $\text{HCF}_2\text{CF}_2\text{Br}$: hindered intramolecular vibrational energy redistribution. Fuss, W.; Kompa, K. L.; Weizbauer, S. (Max-Planck-Institut fuer Quantenoptik, D-85740 Garching, Germany). *Chem. Phys.* 1995, 196(1,2), 179-92 (Eng). The CH stretch band of the anti isomer of $\text{HCF}_2\text{CF}_2\text{Br}$ shows a Q branch of only 1 cm^{-1} of width and in the first overtone, it is the syn isomer which has a very narrow Q branch. Obviously, the hot bands starting, e.g., from the thermally populated states of the torsional vibration, practically coincide with the fundamental. Hence, the torsional frequency does not depend on the degree of CH excitation, and therefore neither does the torsional potential, although already a single CH quantum has more energy than the torsional barrier, above which there could be free internal rotation. A barrier height of 1590 cm^{-1} is deduced from the obsd. torsional frequency of 76 cm^{-1} . This is too high for tunnelling. We conclude that there is no direct conversion of the energy from the CH vibration to internal rotation, although higher order coupling can probably cause a slow redistribution. Similarly, we conclude that the flow of CH vibrational energy to the CBr stretch and other low frequency modes is hindered, too. We point out the similarity to van der Waals mols., in which the low-frequency mode also has little coupling to the other vibrations. But the torsional-CH non-coupling is esp. intuitive, because it infers an unchanged barrier height and therefore an unchanged tunnelling frequency. We also propose that generally the nondiagonal anharmonicity between high- and low-frequency modes is small ($\ll 1\text{ cm}^{-1}$).

C.A-1995, 123, N6

CHBrF₂

1997

128: 8316q Microwave spectrum, nuclear quadrupole coupling constants, and structure of bromodifluoromethane. Ogata, Teruhiko; Kuwano, Susumu; Oe, Sumio (Dep. Chem., Fac. Sci., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan 422). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 185(1), 147-152 (Eng), Academic. The microwave spectrum of CHBrF₂ (Halon 1201) was studied at 7-40 GHz. A least-squares anal. of the obsd. c-type transition frequencies gave rotational and centrifugal distortion consts. and components of the Br nuclear quadrupole coupling const. tensor in the principal axes system as follows: $A = 10199.7186(62)$ MHz, $B = 2903.4150(26)$ MHz, $C = 2360.152(23)$ MHz, $\Delta_J = 0.660(14)$ kHz, $\Delta_{JK} = 2.87(11)$ kHz, $\Delta_K = 8.95$ kHz, $\delta_J = 0.1344(24)$ kHz, $\delta_K = 3.22(15)$ kHz, $\chi_{aa} = 521.281(92)$ MHz, $\chi_{bb} - \chi_{cc} = -38.32(9)$ MHz, and $|\chi_{ac}| = 187.1(26)$

48 CHBrF₂

N.A.



C.A. 1998, 128, N1

MHz for the ^{79}Br species; $A = 10199.5567(54)$ MHz, $B = 2876.5588(20)$ MHz, $C = 2342.3796(18)$ MHz, $\Delta_J = 0.652(12)$ kHz, $\Delta_{JK} = 2.77(9)$ kHz, $\Delta_K = 8.21(61)$ kHz, $\delta_J = 0.1300(19)$ kHz, $\delta_K = 2.97(913)$ kHz, $\chi_{aa} = 435.61(10)$ MHz, $\chi_{bb} - \chi_{cc} = -32.08(8)$ MHz, and $|\chi_{ac}| = 148.5(29)$ MHz for the ^{81}Br species. The structural parameters are calcd. from all these rotational consts. and the electronic properties of the C-Br bond in bromodifluoromethane are evaluated from the obsd. nuclear quadrupole coupling consts. These mol. properties are compared with those of other related mols.

Om 40 291 2000

F: CH₂BrF

P: 3

132:187013 The vibrational spectra and normal coordinates analysis of bromofluoromethane, CH₂BrF.

Baldacci, A.; Baldan, A.; Gambi, A.; Stoppa,
Dipartimento di Chimica Fisica, Università
Ca' Foscari di Venezia, DCF Venice I-30123, Italy
J. Mol. Struct., 517-518, 197-208 (English)

2000 The IR gas-phase spectra of
bromofluoromethane (CH₂BrF) were studied in the
region <6200 cm⁻¹ under conditions of medium resolu.
All fundamentals and many overtones, combination

C.A. 2000, 132

and hot bands were assigned leading to an almost complete set of anharmonicity consts. Rotational analyses were performed on the obsd. Q-branch features of over 10 bands. Enriched ^{79}Br and ^{81}Br samples were also employed to confirm vibrational assignment and supply further data. Analyses of Fermi resonance are made. The mol. structure was calcd. ab initio at the Hartree-Fock (HF), the 2nd order Moller-Plesset (MP2) and the d. functional theory (DFT) level with 6-311++G(3df, 2pd) basis set. The ab initio force consts. obtained from vibrational anal. at B3LYP/6-311++G(3df, 2pd) level of theory were employ to fit the exptl. data and an optimal harmonic force field was obtained f the CH_2BrF mol.