

C2.F4

1945

C₂F₄

Torkinson P.

Thompson H.

Trans. Farad. Soc. 41, 236.

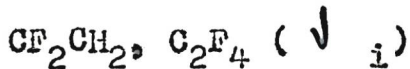
И. К. смелов зафиксирован
универсальный

I Формирование звука

Beins V, 57.

1949

4472

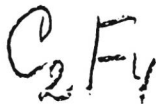


Matutano J.R.B.

Anales soc.espan.fis.y quim.,
1949, 45A, 449-456

Infrared spectra of two ...

J



м. дзедер.
уцелених
српских

J. Ch. Ph. 18, 963

11950

Этилового. спирта, C_2H_5

$$Z_{ac} = Z_{cf} = 1.313A \pm 0.010$$

$$\text{FCF} = 114^\circ \pm 2^\circ$$

BQ-4270-IV

C_2F_4 .

A. Moufils, J. Duchesne

11950

J. Chem. Phys. 18, 1415,

Раман' спектр C_2F_4 в
конденсированной фазе
и возбуждение основных
колебаний

92711-11-451

Вейс V, 29.

C₂F₄

J. Nielsen, H. Claasson,
D. Smith

1950

Ref. - IV
J4430

J. Chem. Phys. 18, 812 : 1950 812.

И.К. и раман спектр

C₂F₄ газодр.

Вейс V, 39

C₂F₄

T.T. Brown

1952

R.L. Livingston

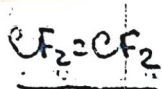
JACS 74, 6084

64-1V-4155

Нефроканцероген. Изучение
структуры C₂F₄ и др.

Вейс V, 37.

C_2F_4 : $C-F = 1.30 \pm 0.02$
 $C=C = 1.33 \pm 0.06$
 $\angle FCF = 114 \pm 3^\circ$



Моргано

БФ-IV-4423

1952

К. Кучибу

J. Chem. Phys. 20, 1809.

+

Замечания о классифи-
кации норм. колебаний
молекулы.



Синтез
исследования
1952

Вейс IV, 47.

C₂F₄ / Morino, Kuchitsu, Shimanouchi, 1952
J. Ch. Ph, 20, 726
Использование модели полей
Юри-Брэдли для расчета спектров
колебательных C₂F₄ и др. газовой
молекулы.

C₂F₄

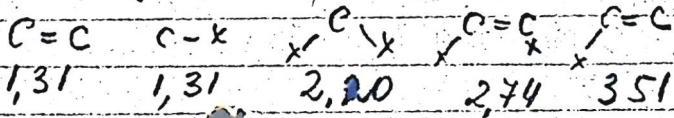
Morino Y., Kuchitsu K., Shimanouchi 1952
J. Chem. Phys. 20, 1646

C₂F₄

S. M. Bauer, P. Andersen
Am. Rev. Phys. Chem. VI

1953

Экспериментальное
исследование структуры
молекулы (обзор)



см C₆H₆

C_2F_4

БФ-IV-4428

A. Maufile, J. Duchesne 1953
Compt. rend. 236, 685-7

Результаты измерения колебаний
(s) молекулы C_2F_4

Используя 1,31 Å и 1,32 Å
для C-C и C-F расстояний
и угла  110° для $\angle FCF$

CA. 1953: 7322

и полярный. зимы, холодные. Вулкан-гел
мелкий и 6 класс вершин none и
3-е C_2Cl_4 (Duchene J. Мém. Soc. Roy. Sci
Lige 1, 102, 429, 1943) и слез, жар.
для работы Hg (397, 779, 1872)
 B_4 (1340, 551) B_{34} (1186, 558)
 B_{24} (1337, 258) абсолютная масса
чистые металлы. $F(C-C) = 12.3 \text{ грам/ат}$
CA.44, 9255: Nelson $F(C-F) = 7.10.10 \text{ грам/ат}$

C_2F_4
 C_2Cl_4

D.E. Mann

BCP-4424-IV

1954

N. Acquista

E.K. Plyler

J. Res. NBS., 52, No. 2., 67-72

Колесательный спектр
 C_2F_4 и C_2Cl_4

Всему I, 71.

CA.48,6256e.

1118

1956

CCl_4 , $\text{C}_2\text{H}_2\text{F}_2$, C_2F_4 (структурные параметры)

Brú L., Garcia Garcia J.M., Pérez R.M.,

An. Real. soc. española fis. y quim.,

1955, A51, N 7-8, 163-172 (исп.)

Применение машины Эллера для изучения
структур молекул ...

РХ., 1957, N 11,
36895

 C_2F_4

C₂F₄

James A. Young

1195

Diss. Abst. ; 1956, 16, 153, 460

Молекулярная структура неводорода
опр. спектроскопическими методами
и рентгеновскими лучами.

$C=C = 1.27 \pm 0.04$; $C-F = 1.33 \pm 0.02$ Å
 $\angle F-C-F = 110^\circ \pm 2$

C₂F₄

1956
Mann D.E., Mcal J.H., Plyler E.K.

C₂B₂H₄

J. Chem. Phys., 1956, 24, 1018.

→
cm

Колесательный спектр метри-
формилена.

1957

C_2F_4

C_2Cl_4

J. Gatto

Сопров. зенд., 245, 54-6

Дек. газогор. коаб. C_2F_4 и C_2Cl_4 .

различия с коаб. и фтор. коаб. фтор.
используя фтор. тафлонит. осциллограф.
Сил. коаб. А, а и в газе C_2F_4 и C_2Cl_4 пол
0,117; 0,064; 0,022 диний 100

0,167; 0,000; 0,023.

CA 52

W14, 11495g.

C_2F_4

C_2Cl_4

C_2Br_4

Kura Shimanouchi T. 1954
сб. у. Ypburg.

Mann D E, Fano L, Mead J. R,
Shimanouchi T.

суд. пос.

и. н.

J. Chem. Phys, 1954, 27

(1) 51-59

Normal coordinate Analysis...

(2) 18

C_2F_4 (γ) 4425

1859

C_2F_4 (D₀, I), C_2F_3Cl (I), $C_2F_2Cl_2$ (I),
 $C_2F_4^+$ (A.P.), CF_2^+ (A.P.), $C_2F_3Cl^+$ (A.P.),
 $C_2F_2Cl_2^+$ (A.P.), CF_2^+ (I)

Margrave J.L.

J. Chem. Phys., 1959, 31, N 5,

1432
Потенциалы

ионизации...

M, J

$C_2F_4^+$

C₂F₄

495

J(CF₃F, CH₃Br, CF₃Br, CH₃Cl,

1960

CF₃Cl, HFCO, H₂CCHBr, ииc -HBrCCHBr,

траме -HBrCCHBr, Br₂CCHBr, H₂CClCl, Cl₂CClCl,

Cl₂CCCl₂, H₂CClF, F₂CCl₂, F₂CCF₂)

Bralsford R., Harris P.V., Price W.C.

Proc. Roy. Soc., 1960, A258, N 1295. 459-469 (англ.)

Влияние фтора на электронные спектры

РХ., 1961, 1167

М.Ю

C₂F₄

C_2F_4 (мв спектр) 4471

1961

CH_2CH_2 , CH_2CHF , CH_2CF_2 , CF_2CF_2 (2, 2)

Laurie V.W.

J. Chem. Phys., 1961, 34, N 1,
291-294

Микроволновый спектр ...

J

C_2F_4

ВФ-8669-IV

1962

C_2F_4

C_2H_4

C_2F_6

C_2H_6

20, 7

(5)

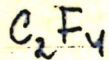
ф. 1963-7

7Д179. Вакуумные УФ-спектры и фотоионизация молекул и радикалов. Price W. C., Bralsford R., Boessler D. M. Vacuum ultra-violet spectra and photoionization of molecules and radicals. «Spectroscopy». London, Inst. Petrol., 1962, 279—287 (англ.)

На примере молекул C_2H_6 , C_2H_4 , C_2F_6 , C_2F_4 , и их ионов показана взаимосвязь между энергией поляризации, энергией деформации радикалов и энергиями ионизации и диссоциации молекул.

Ref. IV - 5561

1963



Brown R.D., Harcourt R.D.

английский
м.-л

Australian J. Chem. 16(5),
737-58.

The electronic structures of
 A_2Y_4 molecules.
(see. N_2O_4)

C.A. 1963. 59.13

14599 gh

С.Г.Ч

10219

1963

А.Р. ($C_2F_4^+$, $C_3F_6^+$, $C_3F_5^+$, $C_2F_3^+$, CF_3^+ ,

Е ($C_2F_4^+$, CF_3^+)

Челебов Ф.Н., Дубов С.С.,

Тихомиров М.В., Добровицкий М.И.

Докл. АН СССР, 151, /3/, 631-633/1963/

Ионизация и диссоциация ...

У

Е.С.Ч.Ф.Н.

C₂F₄

Shimanouchi T.

1963

curr. notat. Pure Appl. Chem. 7 (1), 131-45.

Force constants of small molecules.

(curr. CCl₄)

C. A. 1963.59.12
13447 ef

C_2F_4

Курса Shimanouchi 1963
серб. укупно

Shimanouchi T.

Сим.ност.

Pure Appl. Chem.
1963, 4 (i), 131-45

И-1148

C₂F₄, C₂Cl₄, C₂Br₄, F₂CClF, CClF.CN₂,

1964

F₂CCNCl, C₂H₂F₂, C₂H₂Br (Vi)

Болотина Е.Н., Капшталъ В.Н.,
Крайнов Е.П., Клошковский Ю.В., Кукина В.С.,
Свердлов Л.М.

Тр. Комис. по Спектроскопии, АН СССР,
1964, /I/, I20-4

Расчет и интерпретация колебательных
спектров молекул различных классов

J

СА., 1965, 63, № 13, I7325с

1964

Raman spectrum of polytetrafluoroethylene. C. E. Hathaway and J. Rud Nielsen (Univ. of Oklahoma, Norman). *J. Chem. Phys.* 41(7), 2203-4(1964). The Raman bands, in cm^{-1} , relative intensities, and assignments are: 293, moderate, e_2 fundamental; 385, moderate, a_1 fundamental; 576, very weak, e_2 fundamental; 597, very weak but sharp, a_1 fundamental (largely due to CF_2 deformation); 734, very strong, a_1 fundamental (largely due to C-C stretching); 1218, weak, e_2 fundamental, and 1299, moderate, e_2 fundamental (both assocd. with CF_2 stretching); and 1382, strong, a_1 fundamental (due to sym. CF_2 stretching). The relations between the Raman and infrared bands are discussed.

Milton Landy

C_2F_4 .
Raman
Cueesp.

BP-12-9662

C.A. 1965. 62. 1

143 cd

C_2F_4

симв.
после.

Рытнев М.

1964

Оптика и спектроск.,
1964, 16, N5, 739-43.

Символьные постоянные фтор-
замещенных молекул
этилена.

(см. $C_2H_2F_2$)

БФ-11-10/194

50609.3523

Ch

 C_2F_4 ; C_2Cl_4 ; C_2Br_4
(vi, chem. no. 7)4465
11768

11241

Alti Giancarlo de, Galasso Vinicio, Costa Giacomo. Potential energy constants, mean-square amplitudes of vibration and rotational distortion constants for C_2F_4 , C_2Cl_4 and C_2Br_4 . "Spectrochim. acta", 1965, 21, N4, 649-658.

(англ.)

Есть оригинал

10

ВИНИТИ

814

C_2F_4

Cohen N., Flecklen J. 1965

J. Chem. Phys., 43, 871

Mercury-sensitized photolysis of C_2F_4 .

$C_2Cl_2F_2$ (unc. trans.) (Vi; Rept. p. 1965)
 C_2F_4 (Vi; machine not.)

Craig N.C., Evans D.A.
J. Amer. Chem. Soc., 1965, 87, N 19, 4223-
4230

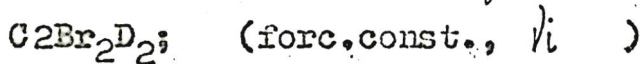
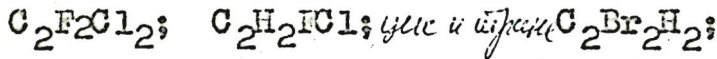
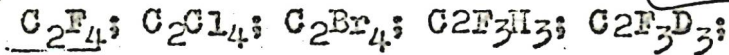
Infrared and Raman spectra of ci- and
trans. - 1,2 - dichloro- 1,2 difluoro-
ethylene

orig

PX., 1966, 135173

M-709

1965



Ключковский Ю.В., Кукина В.С., Свердлов
Л.М.

И. Физ. химии, 1965, 39, вып. 8, 1912-21
Колебательные спектры постоянные...

РХ, 1966, 15128

J

C_2F_4

Kuchitskii K. u gr.
Y. Mol. Spectrosc.,
15, 51-67

1965
516

измер.
геоэлектр

Расчет измер. геоэлектр.
IV. Маг-лов C_2H_4 -типа.

(См. C_2H_4) III

1965

Chemical behavior of difluorocarbenes, and the dissociation of the carbon-carbon bond in tetrafluoroethylene. J. P. Simons (Univ. Birmingham, Engl.). *Nature* 205(4978), 1308-9(1965) (Eng). From approx. evaluations of the heats of formation of CF_2 and of CH_2 , approx. values of $D(\text{F}_2\text{CCF}_2)$ and of $D(\text{H}_2\text{CCH}_2)$ are 70 and 150 kcal./mole, resp. Potential energy curves for C_2F_4 and C_2H_4 were plotted vs. the C-C sepn. For C_2F_4 the initial approach of 2 triplet species would be attractive, and would be represented by a descending potential curve, which would cross the repulsive curve correlating with 2 normal CF_2 (1A_1) mols. In C_2H_4 , the products of disocn. at the C-C bond would be CH_2 , which has a triplet ground state. These would approach each other along an attractive curve, but 1 which cannot cross the curve correlating with $2\text{CH}_2(^1A_1)$, since this lies at higher energies.

C. L. Deasy

C.A. 1965-63-6
6330

21

21

C₂F₄

Dorman F.H.

1966

N₂O
CH₃Cl

J. Chem. Phys., 44, N1, 35

First differential ionization.....

γ



C_2F_4

Venkateswarlu K.,
Mariam S.

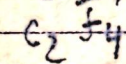
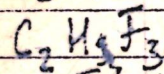
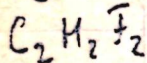
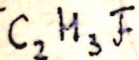
1966

Czechosl. J. Phys., 1966, B16,
N4, 290.

Средние амплитуды колеба-
ний по оси x_2 и y_4 на x_2 и y_4 .
(см. C_2H_4)

ф. 1966.108

1967



расчет

5 Б25. Расчет молекул фторэтиленов простым методом молекулярных орбит и некоторые химические свойства этих соединений. Ландау М. А., Дубов С. С. «Ж. Всес. хим. о-ва им. Д. И. Менделеева», 1967, 12, № 5, 588—589

Простым методом Хюккеля, при использовании параметров, предложенных Стрейтвизером, рассчитаны энергии высших занятых орбит, электронные плотности, резонансные энергии, энергии связей и адиабатические потенциалы ионизации этилена и его всех возможных фторпроизводных. Обнаруженная близость рассчитанных и экспериментальных значений потенциалов ионизации, по мнению авторов, свидетельствует о надежности выбранных значений параметров. На основе полученных данных обсуждена р-ционная способность исследуемых соединений.

В. Л. Лебедев

ж. 1968. 5

C₂F₄

u.-c.

(sp)

u(J)

1967

77279p Dependence of mass spectra on temperature. II. Mass spectra of tetrafluoroethylene, hexafluoropropylene, and trifluoroethylene. M. V. Tikhomirov and V. N. Komarov. Zh. Fiz. Khim. 41(5), 1065-71(1967)(Russ); cf. CA 66: 60019k. Effects of the temp. of the ionization chamber on non-dissociative processes of C₂F₄ (I), C₂F₃H (II), and C₃F₆ (III) mols. during electron bombardment were studied. The MI-1303 mass spectrometer with modified ion source was used (*loc. cit.*). The temp. of the source was 159-900°, electron energy 10-100 ev., accelerating voltage 3.8 kv., and electron emission 0.5 ma. The temp.-dependent mass spectra of hydrocarbons and the perfluoro-olefins varied considerably. The increase of source temp. from 150° to 925° for I changes the concn. of fragment ions C₂F₃⁺ and CF⁺ only, but their relative concn. remains const. The ionization potential of C₂F₄ and appearance potentials of some fragment ions at various temps. were calcd. with 0.3-0.5 ev. accuracy. Ionization curves of all fragment ions have the usual

+ 2

C. A. 1967. 67.16

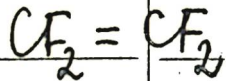
⊠

ion	Ionization and appearance potentials in ev.		
	150°	645°	925°
$C_2F_4^+$	10.0	10.2	10.2
$C_2F_3^+$	16.4	15.8	16.3
CF_3^+	14.6	13.8	12.8
CF_2^+	15.4	15.4	14.8
CF^+	15.1	14.6	14.0

smooth form, apart from the $C_2F_2^+$, whose curve shows a sharp step at 20 ev. This phenomenon and the metastable transition $C_3F_5^+ \rightarrow CF_3^+ + C_2F_2$ are discussed in the light of quasiequil. theory. The biggest changes with temp. were noticed in the behavior of CF_2H^+ from II. The $C_2F_3H^+$ and $C_2F_2H^+$ have roughly equal thermal coeffs. The appearance potentials of fragment ions $C_2F_4^+$, and CF^+ from III were lowered by 1.2 ev. when the temp. of the source was increased from 150° to 700°. This agrees with the theoretical predictions. The ionization potential of $C_3F_6^+$ and the appearance potential of $C_3F_5^+$ are temp. independent.

Z. M. Zochowski

1969

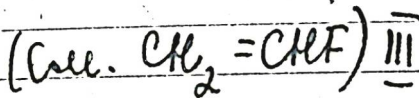


Belanger G.,
Sandorfy C.,

Chem. Mys. Letters,
3(9), 661.

бак.

УФ-спектр



1969

 C_2F_4

Fogacasi Géza

Tém. Közl., 1969,

32, n 2, 233

ампл.

колеб.

частоты
колеб.

сим. пост.

(см. C_2H_4) III

C_2F_4

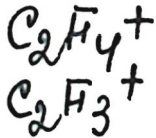
1969

Ландау М. А., и др.

$D(C=C$
евен)
хим св-ва

Ж. Физ. Химии,
1969, 43, 21, 9

$(\text{Сил. } C_2FH_3)_{III}$



Walter T.A., et al. 1969

J. Chem. Phys.,
1969, 51, ~8, 3531.



(C₂F₃)III

A.P.

1970

C₂F₄

8975z Mean amplitudes of vibration of perhalogenated ethylenes. Cyvin, Sven J. (Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *Czech. J. Phys.* 1970, 20(4), 464-9 (Eng). Mean amplitudes of vibration have been recalcd. from spectroscopic data for C₂F₄, C₂Cl₄, and C₂Br₄. For C₂I₄ the calcd. mean amplitudes are reported for the first time. The results for C₂Cl₄, C₂Br₄, and C₂I₄ agree perfectly satisfactorily with obsd. values from recent electron diffraction investigations of these mols. Calcd. values of generalized mean-square amplitudes for all the 4 mols. are also given. RCFP

средне-кв.

амплит.

колебаний

C.F. 1970. 73.2

+3

[X]

C_2F_4

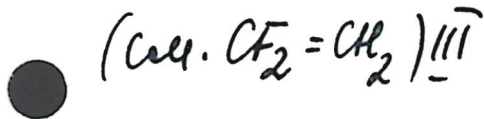
Fountain K.R.A.

1970

масет

Tetrahedron Lett.,
N 31, 2655.

реак. стр-па
 $2;$



C₂F₄

XIV-2498

1970

chem. no. 1.

u

sp. - kb.

Acetylene

no. 1.

92846j Extreme values of force constants and mean vibrational amplitudes of ethylene-type molecules. II. Tetrafluoroethylene, tetrachloroethylene, and tetrabromoethylene. Fogarasi, Geza (Dep. Gen. Inorg. Chem., Eotvos Lorand Univ. Sci., Budapest, Hung.). *Acta Chim. (Budapest)* 1970, 66(1), 87-98 (Eng). The method proposed by Torok and Pulay has been applied on C₂F₄, C₂Cl₄, and C₂Br₄ mols. A large no. of mean vibrational amplitudes and force consts., which reproduce normal frequencies, are calcd. and their extreme values are investigated. The detn. of extreme values can give some information on bonding relations even in the case when unambiguous detn. of force consts. is impossible. The calcd. and measured vibrational amplitudes differ considerably very probably due to inaccuracies in measurements. S. P. Singh

+2

C. D. 1971. 14. 18



1970

 C_2F_4

(A)

(69076z) Ionization of tetrafluoroethylene by electron impact. Thynne, John C. J.; MacNeil, K. A. G. (Chem. Dep., Edinburgh Univ., Edinburgh, Scot.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1970, 5(3-4), 329-35 (Eng). Neg. ion formation by $F_2C:CF_2$ as a result of electron bombardment was studied. A value of $\leq 5.2 \pm 0.1$ eV has been deduced for the $F-C_2F_3$ bond dissocn. energy. The electron affinities of CF , CF_2 , CF_3 , and C_2F_3 were estd. to be at least 3.3, 0.2, 2.1 and 2.0 eV, resp.

RCBBQ

(+2) ☒

C-A. 1971. 14. 14

1970

C₂F₄

11 Б92. Ионизация тетрафторэтилена электронным ударом. Thynne J. C. J., Magneil K. A. G. Ionisation of tetrafluoroethylene by electron impact. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1970, 5, № 3—4, 329—335 (англ.)

D₀

На время-пролетном масс-спектрометре изучены отрицат. ионы, образующиеся при бомбардировке молекул C₂F₄ электронами с энергией $E=1-15$ эв (при $E < 1$ эв ионы не обнаружены) и 70 эв. При $E=1-10$ эв наблюдались ионы F⁻, CF₂⁻, CF₃⁻ и C₂F₃⁻, максимумы резонансных пиков к-рых относятся как 1000:68:14:4. При $E=70$ эв относит. содержания ионов таковы: C⁻ 4,5; F⁻ 1000; C₂⁻ 1,4; CF⁻ 2,2; F₂⁻ <1; CF₂⁻ <1; CF₃⁻ <1; C₂F₃⁻ <1. Приведены кривые эффективности ионизации C₂F₄ с образованием различных ионов. Приведены потенциалы появления (эв), положения максимумов резонансных пиков (эв) и их ширины на полу-

+8

X. 1971. 11



высоте (эв) соотв. для различных процессов образо-
 вания ионов: $F^- + C_2F_3$ $1,8 \pm 0,1$; $3,6 \pm 0,1$; $1,3 \pm 0,1$; $F^- +$
 $+ CF + CF_2$ $5,6 \pm 0,2$; $5,4 \pm 0,2$; —; $F^- + C + CF_3$ $6,3 \pm 0,2$;
 $7,0 \pm 0,2$; —; $F^- + C + F + CF_2$ $10,3 \pm 0,3$; $11,5 \pm 0,3$; $1,4 \pm 0,2$;
 $CF^- + CF_2 + CF?$ $10,0 \pm 0,3$; $11,9 \pm 0,3$; $1,3 \pm 0,2$; $CF_2^- + CF_2$
 $2,9 \pm 0,1$; $3,7 \pm 0,1$; $0,9 \pm 0,1$; $CF_3^- + CF$ $3,0 \pm 0,1$; $4,3 \pm 0,1$;
 $1,1 \pm 0,1$; $C_2F_3^- + F$ $3,2 \pm 0,1$; $4,9 \pm 0,1$; $1,2 \pm 0,1$; $[C_2F_4^-]^* \rightarrow$
 $\rightarrow C_2F_3^- + F$ $6,4 \pm 0,1$; $6,9 \pm 0,1$. Для энергии диссоциации
 связи $F-C_2F_3$ получена оценка: $\leq 5,2 \pm 0,1$ эв. Найдены
 миним. оценки сродства к электрону (эв): CF 3,3;
 CF_2 0,2; CF_3 2,1; C_2F_3 2,0. В. Е. Екурат

C₂F₄

Д.А. Череп

103333p) Far-ultraviolet spectra of fluoroethylenes. Belanger, G.; Sandorfy, C. (Dep. Chim., Univ. Montreal, Montreal, Que.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(5), 2055-60 (Eng). The vacuum uv spectra of the complete series of fluoroethylenes were measured at 2000-1150 Å under moderate resoln. The $\pi^* \leftarrow \pi$ transitions are easily identified in all the spectra. In most cases, their max. are only slightly displaced from their position in ethylene, but a very large hypsochromic shift is found in going from the tri- to the tetrasubstituted deriv. Three Rydberg series are obsd. in all the spectra, converging to the π ionization potential. They all exhibit vibrational fine structure dominated by C=C stretching and twisting vibrations. In the highly F-substituted ethylenes, the first Rydberg band is well sepd. from the $\pi^* \leftarrow \pi$ band (at ~ 1900 Å) as in the high alkyl-substituted derivs. There is no evidence for transitions of σ electrons in this part of the spectrum except perhaps at the high-frequency end of the range (1200 Å).

1944

C.A. 1944. 45. 16

C₂H₄

u.h.

Jeyapandian S.
Bavari R. G. A.

1941

J. Mol. Struct. 1941
8, 1-2, 104-14

(C₂H₄)_{III}

C_2F_4

XIV-923

1971

12 Д190. Эмпирическое силовое поле для этиленов: применение к молекулам типа C_2X_4 и CH_2CX_2 (X = галоген). Ramaswamy K., Devarajan V. An empirical force field for ethylenes: application to C_2X_4 and CH_2CX_2 (X = halogen) type molecules. «J. Mol. Struct.», 1971, 8, № 3, 325—332 (англ.)

см. п.

Для молекул C_2X_4 , CH_2CX_2 ($X = F, Cl, Br$) и C_2J_4 выбрано модельное силовое поле, в котором кроме валентных и деформационных силовых постоянных используются параметры, описывающие изменение гибридизации орбиталей связей и взаимодействие несвязанных атомов. Вычислены силовые постоянные этого поля и рассмотрена корреляция между производной длины CX -связи по параметру гибридизации ($\partial R / \partial \lambda$) и разностью электроотрицательностей атомов C и X .

М. Р. Алнев

 (см. также C_2Cl_4) III

Зб. 1971. 127



C_2F_4

Verbovskaya, G.V.;
et al.

1971

ионизация "Khim. Vys. Energ"
1971, 5 (6), 533-4.

Mass. spectr. study of the reactions of
excited atoms and molecules. Ionizat.

● (см CF_4 ; III)

C_2F_4

BP-433E-XIV

1972

Lifshitz C.,
Grayson R.

$\bar{A}e, D_0$

"J. Mass. Spectrom and
Ion Phys.", 1972, 10,
N1, 25-37.

■ (cm C_2F_4 , III)

40923.9061

Ex-C, Ph, Ch,
TC, MGU

96201

0.2

1974

 C_2F_4

* 4-6326

Coggiola M.J., Mosher Oren A., Flicker
Wayne M., Kuppermann Aron. Electronic
spectroscopy of the fluorethylenes
by electron impact. "Chem. Phys. Lett.",
1974, 27, N 1, 14-16

(англ.)

0135

160 160

ВИНИТИ

40313.1983

Ch, TE, Ex-C

 C_2F_4

29864

1974

x.4-4056

Carlos Jose L. Jr., Karl Robert R., Jr.,
Bauer Simon H. Gas phase electron diffraction
study of six fluoroethylenes.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,
Part 2, 70, N 1, 177-187

(англ.)

(см. C_2HF_3 ; III) и C_2H_3F

0062 mm

047 049

055

ВИНИТИ

C_2F_4

summer 3005

1974

McCreery J.H., Hall G.G.

"J. Amer. Chem Soc."

1974, 96, (26), 7875-7878.

pacem meum

40919.6666

TC, Ch, Ph

C_2F_4 96615

1974
024-6271

Pappas Jan A. A study of the
structure of fluoroethylenes ab-initio
calculations on C_2F_4 . "J. Mol. Struct.",
1974, 22, N 1, 69-75

(англ.)

0193

155 160 185

ВИНИТИ

C_2F_4

* 4-6271

1974

№ 1 Д149. Исследование строения фторэтиленов: Неэмпирические расчеты C_2F_4 . Pappas Jan A. A study of the structure of fluoroethylenes ab-initio calculations on C_2F_4 . «J. Mol. Struct.», 1974, 22, № 1, 69—75 (англ.)

Исследов.
Строения

Неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в гауссовских базисах (7s3p) и (9s5p), сгруппированных в [4s2p] и [4s3p] соответственно, проведены расчеты молекулы C_2F_4 с полной оптимизацией геометрии. В меньшем базисе проведена полная оптимизация геометрии, в большем оптимизированы только длины связей. Приведены рассчитанные геометрич. параметры, силовые постоянные, орбитальные и полные энергии, атомные заселенности. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. данными и с предыдущими расчетами других фторэтиленов.

А. Багатурьянц

ф. 1975 № 1

40724.7522

408192

1974

Ph, Ch, TC

 C_2F_4

распрем

*45700

Rytter_E. Total energy distribution
method for classification of normal mo-
des of vibration. "J. Chem. Phys.", 1974, 60,
N10, 3882-3883

(англ.)

0158 нкз

128 133

0150

ВИНИТИ

40906.1821

Ph, TC, Ch

 C_2F_4

40892 02

1974

*4-6015

Zwicker Judith O., Cole Robert H. Pressure induced spectra of axially symmetric and slightly asymmetric quadrupolar molecules. "J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 12, 4780-4789 (англ.)

0186

152 156

ВИНИТИ

C_2F_4

SeO_2

1975

(7 D200). Определение распределения полной энергии как метод отнесения нормальных колебательных мод. Alix A. J. P., Müller A. On the definition of the total energy distribution method for the assignment of normal modes of vibration. «J. Mol. Struct.», 1975, 24, № 2, 229—236 (англ.)

определение
распредел.
полной эн.
Полная колебательная энергия E молекулы представлена в виде суммы кинетич. и потенц. энергии T и V . Они имеют вид сумм энергий, приходящихся на одну норм. моду или на одну координату симметрии и выражены через элементы матриц кинетич. энергии, силовых постоянных и форм колебаний. Получены приближенные ф-лы для распределения E по норм. модам и по координатам.

Р 1975 N 7

(+) Ешнб

(X)

сш. Гаксес
 SeO_2 , III

натам симметрии, справедливые при слабых взаимодействиях между колебаниями. Распределения E могут использоваться, наряду с распределениями T и V , для установления характеристичности колебаний и для проверки отнесения частот. Численные значения распределений E , T , V по колебательным модам, координатам симметрии и по вкладам значений отдельных матричных элементов T и V получены для плоских колебаний C_2F_4 и для полносимметричных колебаний $^{80}SeO_2$. На этих примерах исследованы различные кинематич. и силовые взаимодействия и показано использование распределения E для уточнения отнесений частот. М. А. Ковнер

$(C_2F_4)_n$

1975

86: 10386v The vibrational spectrum of polytetrafluoroethylene in the sub-millimeter region. Cudby, M. E. A.; Willis, H. A.; Fleming, J. W.; Chantry, G. W.; Nicol, Elisabeth A. (Plast. Div., ICI Ltd., Welwyn Garden City/Herts., Engl.). *IEE Conf. Publ.* 1975, 129(Dielectr. Mater. Meas. Appl., Conf., 1975), 120-5 (Eng). Far-IR, sub-mm, and mm-wave spectra were obtained for $(C_2F_4)_n$ and the results show that the dielec. and mech. properties of this polymer are not necessarily related and that it may prove possible to prep. forms which will be acceptable on both counts as transmissive dielects. for the region above 10 GHz.

W.K., M.B.
Cudby

C.A. 1977 86 N2

C_2F_4

$C_2H_2F_2$

$C_2H_2F_2$

C_2H_3F

~~$C_2H_4F_2$~~

~~C_2H_5F~~

C_2ClFH_2

43-15880
(идентификация переходов)

1976

9 Б105. Спектроскопия электронного удара фторэтиленов. Coggiola M. J., Flicker W. M., Mosher O. A., Kuppermann A. Electron-impact spectroscopy of the fluoroethylenes. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 7, 2655—2667 (англ.)

Методом спектроскопии электронного удара для возбуждающих энергий 60, 40, 25 и 20 эв и углов рассеяния 0 и 80° исследованы шесть фторэтиленов и хлортрифторэтилен. На основании энергетич. и угловых ~~зависимостей~~ ~~относит.~~ дифференциальных сечений рассеяния для неупругих процессов в области 0—16 эв: проведена идентификация переходов относительно правил отбора по спину. Отмечено, что аналогичные $N \rightarrow T$ -переходу этилена наименшие переходы для всех изученных молекул (4,18—4,68 эв) запрещены по спину и могут быть использованы для интерпретации результатов фотохим. экспериментов с переносом электронной энергии. Второй слабый синглет-триплетный пере-

2. 1977 N 9

(44) $\boxtimes$

ход в случае винилфторида обнаружен при 6,4 эв. Остальные переходы, измеренные в области 6—10 эв, хорошо согласуются с данными оптич. спектров. Для всех молекул проявляются перевозбужденные состояния, расположенные выше 1-го ионизац. Пт и отнесенные к сериям Ридберга. Полученные результаты хорошо согласуются с данными для др. молекул.

О. Г. Гаркуша

и не
рых

70419.795

Ch

суд. в (C₂H₄, C₂D₄,
22240

C₂F₄ и гр

1976
XIV-8644

Merész Péter. Etilén és halogén-
helyettesítésű etilénszármazékok erőállan-
dóinak számítása. "Magy.kém.lapja", 1976,
31, N12, 634-636

(венг.; рез.англ., рус. д.с.г.)

0861 ЯИХ

834 837

реф ВИНТИ

C2F4

эксп
струк.

Duke C. B.

1977

"J. Chem. Phys." 1977, 66,
N 1, 256-268 (англ)

(see C2H4; 103)

C_2F_4 -

common 7327

1979

Bloor J. E., et al.

$Y; A\bar{e}$

packet
Inexpans.

Chem. Phys. Lett.,
1979, 60 (3), 476-82

C_2F_4

ommuca 8327

1979

Kb. mel.
pacer
E.

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,

1979, 15/ 15, 355-358.

C₂ F₄

1979

Chiu N. S., et al.

(A⁻)

Chem. Phys. Lett. 1979, 68,
N1, 121-26.

vol. C₂ H₄ - III

C_2F_4

Liegner Ch., et al. ¹⁹⁷⁹

(7)

Theor. chim. acta,
1979, 52 (2), 103-11.

(cur. F_2 ; 11)

C₂F₄

ommuch 8009

1979

Ramaswamy K.,
Ramanathan P.

curr. noem. J. Mol. Struct., 1979, 51, a 1,
127-132.

(curr. C₂H₄; III)

C₂F₄

1979

Sell Jeffrey A, et al.

J. Chem. Phys. 1979,
71, N11, 4703-15.

promod.
creep

cell. C₂H₄ - III

C₂F₄

1980

92: 186043u Compressibility of gaseous tetrafluoroethylene. Kleimenov, N. A.; Borisov, A. A.; Markevich, A. M. (Inst. Khim. Fiz., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1980, 54(2), 321-3 (Russ). The compressibility of C₂F₄ vapor was detd. at 0-32 atm. and 0-60°. The 2nd (A) and 3rd (B) virial coeffs. were calcd. for the equation of state $pV = RT(1 + (A/V) + (B/V^2))$.

гидрофторид
тетрафтораэтилена

CA 1980 22, N 22

C₂F₄

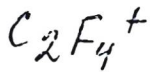
1980

Турмен В. С., ст. и др.

Руководящий ген. в ВМННПН
18 дек. 1980 г., N 5344-80 Дек.

(см. посей, д.)

см. C₂H₂F₃-10



Orion 12654 1981

Berman D. W., et al.

quadrupole
mass filter.

ΔH

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys., 1981,
39, 363-71.

C₂F₄

ommuck 12252 | 1981

Fleming B.D., et al.

kb. mex.

paacet,

cul. not.

Z. Naturforsch., 1981

A36, 759-62.



(see C₂H₄; III)

C_2F_4

1981

Fleming G.D., et al.

Z. Naturforsch., 1981,

A36, N7, 759 - 762.

эксперим.,
синтез,
анализ.

● (ср. C_2H_4 ; III)



1981

Bieri' Gerhard, et al.

У, геометр.

Chem. Phys., 1981, 60,
N1, 61-79.

(см. H_2CCHF ; III)

$C_2F_4^+$

Commuca 12483 1981

Merry S., et al.

расчет
геометрии
кв. их.
расчет

Chem. Phys. Lett.,
1981, 82 (2) 373-76.

[Ommick 12594]

1981

$C_2F_4^-$

(cмyx-
myca)

Symons M.C.R.,

J. Chem. Research (S),
1981, 286-287.

$C_2F_4^-$

1982

Paddon-Row et al.

номери, сиркули. J. Amer. Chem. Soc.,
1982, 104, N4, 1143 -
● - 1145.

(сер. $C_2H_4^-$; III)

$C_2F_4^-$

1983

23 Б326. Структура анион-радикала тетрафторэтилена и интерпретация его спектров электронного парамагнитного резонанса. Structure of the tetrafluoroethylene radical anion and interpretations of its electron spin resonance spectra. Hasegawa Akinori, Symons Martyn C. R. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1983, Pt 1, 79, № 7, 1565—1571 (англ.)

Методом ЧПДП рассчитаны равновесная геометрия и распределение спиновой плотности для анион-радикалов $C_2F_4^-$. В полном согласии с недавно выполненными неэмпирич. расчетами энергетически наиболее предпочтительной является конформация типа кресла. Кроме того, этой конформации соответствует и наилучшее согласие между теор. и эксперим. значениями констант СТС. Показано, что анизотропный спектр ЭПР $C_2F_4^-$, наблюдаемый при 100 К в псевдокрист. матрице, хорошо согласуется с теор., построенным в предполо-

констр.
структ.

Х. 1983, 19, № 23

жении, что рассматриваемый радикал имеет жесткую конформацию кресла и быстро вращается вокруг оси, перпендикулярной плоскости, проходящей через 4 атома F. Для этой конформации получено также хорошее согласие между теор. значениями параметров ЭПР и эксперим., наблюдаемыми для $C_2F_4^-$ в матрице Me-TГФ.

Ю. В. Ракитин



$C_2F_4^{2+}$

DM. 19821

1984

3 В1049. Теоретическое и экспериментальное исследование дикатиона тетрафторэтилена. Theoretical and experimental studies on the tetrafluoroethylene dication. Koch Wolfram, Frenking Gernot, Maquin Francis, Stahl Daniel, Schwarz* Helmut. «J. Chem. Soc. Chem. Commun.», 1984, № 17, 1187—1188 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 4—31 ГФ с полной оптимизацией геометрии исследования Пв потенциальной энергии (ППЭ) $C_2F_4^{2+}$. Найдены стационарные точки, отвечающие плоской [симметрия D_{2h} (Ia)] и перпендикулярной [симметрия D_{2d} (Ib)] структурам дикатиона тетрафторэтилена (I). Единственным минимумом ППЭ найдена структура Ia, тогда как Ib отвечает переходному состоянию (ПС) вращения вокруг связи C—C. Вычисленный барьер вращения — 3,5 ккал/моль. ППЭ $C_2F_4^{2+}$ принципиально отличается от исследованной ранее ППЭ $C_2H_4^{2+}$, на к-рой плоская структура D_{2h} (IIa) является ПС вращения, а перпендикулярная структура D_{2d} (IIb) — глобальным минимумом. Это различие между ППЭ

геометрии,
структура,
Ио, J, ΔH,

Х. 1985, 19, N 3

$C_2H_4^{2+}$ и ППЭ $C_2F_4^{2+}$ объяснено сверхсопряжением в IIб, приводящим к делокализации положит. заряда на атомы Н, и отсутствием сверхсопряжения в Iб. Длины связей С—С в Ia (1,581 Å) и Iб (1,575 Å) существенно больше, чем в рассчитанных тем же методом $C_2F_4^{2+}$ (III) (1,39 Å) и C_2F_4 (1,30 Å). Структура $CF_2CF_2^{2+}$ (симметрия C_{3v}), в отличие от своего аналога $CH_2CH_2^{2+}$ найдена нестабильной по отношению к распаду на CF_3^+ и CF^+ . Рассчитаны продукты р-ций распада Ia $\rightarrow C_2F_3^+ + F^+$ (1), Ia $\rightarrow C_2F_3^{2+} + F\cdot$ (2) и Ia $\rightarrow 2CF_2^+$ (3). Р-ции (1) и (2) энергетически невыгодны с тепловыми эффектами ΔH 118 и 87 ккал/моль, соответственно, тогда как р-ция (3) протекает с выделением 81,6 ккал/моль. Вычислены вертикальный и адиабатич. Пт ионизации III (19,3 и, соотв. 18,9 эВ). Образование I из III зарегистрировано методом масс-спектрометрии с обдиркой заряда ($m/e=50$). Эксперим. энергия образования I из III $Q_{min}=19,0\pm 0,1$ эВ хорошо согласуется с измеренным Пт ионизации III. Спектр кинетич. энергии показывает, что фрагментация I происходит с энергией активации ~ 80 ккал/моль.

В. Фаустов

CaF_4^-

[Om. 18580]

1984

Sh chegoleva L.N.,
Bil'kis I.I., et al.,

смыкappa

Chem. Phys. Lett.,
1984, 104, N 4,
348 - 352

C_2F_4

1984

13 Б1086. Применение квантово-химических (INDO) расчетов магнитно-резонансных параметров для изучения строения анион-радикала тетрафторэтилена. Щеголева Л. Н., Билькис И. И., Счастнев П. В. «Ж. структур. химии», 1984, 25, № 1, 19—24

В рамках метода ЧПДП проведены расчеты констант изотропного СТВа_F и а_c, тензоров анизотропного СТВТ_F и g-фактора для анион-радикала тетрафторэтилена. Рассмотрены след. структуры: плоский π -радикал симметрии D_{2h} , искаженные π -радикалы типа ванны (C_{2v}), кресла (C_{2h}) и пропеллера (D_2). Наилучшее соответствие с экспериментом получено для структуры кресла с углом искажения между C—C-связью и плоскостью SF_2 -группы $\theta \approx 15^\circ$, к-рая и рассматривается как наиболее реальная структура $C_2F_4 \cdot$. Резюме

результ.
структ.

ж. 1984, 19, N 13

:CF₃

[OM. 23346]

1986

Dixon D. A.

Электрон.

Вейрукот.

J. Phys. Chem.,

1986, 90, 54-56.



C_2F_4

1986

Dixon D. A.,
Fukunaga T., et al.

et al.
J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N7, 1585-
-1588.

(see C_2H_4 ; III)

C_2F_4

1987

Хавтурин В. Р.,
Султанбекова Т. Т. и др.

У Всес. конф. по хи-
мическому. мми Карбенов, Мос-
спектр ква, 15-17 сессий, 1987.
Тез. ● докл. сл., 121-
-122. (см. CF₃; III)

CF₄

1987

/ 107: 105109y Vibrational analysis of tetrahaloethylenes. Karunanidhi, N.; Nangai, R. Thamarai (Dep. Phys., Presidency Coll., Madras, 600 005 India). *Indian J. Phys., B* 1987, 61B(1), 65-7 (Eng); Independent, general valence force fields of C₂X₄ (X = F, Cl, Br, I) were evaluated on the basis of the method of kinetic consts. and provide acceptable sets of values for the force consts., mean amplitudes of vibration, Coriolis coupling consts., and centrifugal distortion consts. The C:C and C-X interaction force const. has significantly higher value than the other bond-bond interaction force consts. in all 4 mols. All the other force consts. show a uniform trend of variation, decreasing with the decreasing electronegativity of the substituent X.

Сил-посм.)
посм. время
вект. иска-
жений,
корр. поск.

(43) C₂Cl₄, C₂Br₄, C₂I₄C.A. 1987, 107, N12

C₂F₄

M. 29263

1988

108: 227137x: Correlation-consistent configuration interaction: accurate bond dissociation energies from simple wave functions. Carter, Emily A.; Goddard, William A., III (Arthur Amos Noyes Lab. Chem. Phys., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91125 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(5), 3132-40 (Eng). A general method employing relatively small but well-defined CI expansions for calcg. accurate bond energies [e.g., errors of 1.4 kcal/mol (1.3%) for the C-H bond energy in CH₄ and 4.9 kcal/mol (2.7%) for the C:C bond energy in ethylene], was developed. The approach includes in a systematic way all correlations involving orbitals that change significantly during bond breakage. The CI expansion truncates rapidly, enabling the application of this technique to polyat. mols. for which normal correlation approaches would be prohibitively expensive. Thus the bond energy for BH is calcd. to within 0.3 kcal/mol of the full CI value but incorporating less than 0.1% of the spin eigenfunctions. Smooth dissoen. to the correct adiabatic limit by the CCCI method is demonstrated for the C:C bond of ethylene. The advantage of CCCI is illustrated for C₂F₄, where a full CI would involve $\sim 7 \times 10^{22}$ spatial configurations, but only 1719 are used in CCCL. A C:C bond energy for C₂F₄ of $D_e(F_2C:CF_2) = 68.3 \pm 2.5$ ($D_{298} = 64.6 \pm 2.5$) kcal/mol. is predicted. Exptl. values range from 53 to 76 kcal/mol.

(De)

meop. pacnem

C.A. 1988, 108, N 216

C₂F₄

От 29866 1988

23 Б1056. Двойная связь C=C в тетрафторэтилене. The C=C double bond of tetrafluoroethylene. Carter E. A., Goddard W. A. III. «J. Amer. Chem. Soc.», 1988, 110, № 12, 4077—4079 (англ.)

Неэмпирическим обобщенным методом ВС с учетом корреляц. согласованного конфигурац. взаимодействия («J. Chem. Phys.», 1988, 88, 3132) вычислена энергия разрыва связи C=C в молекуле C₂F₄: $D_e = 63,4$ ккал/моль. С учетом величины расхождения (4,9 ккал/моль) между вычисл. и достаточно надежным эксперим. значениями D_e для C₂H₄, эксперим. энергии нулевых колебаний и т-рой поправки, $D_{298}(C_2F_4) = 64,5 \pm 2,5$ ккал/моль. Отмечена корректность описания связи C=C в терминах σ - и π -орбиталей и отвергнуто мнение (Messmer R. P., Schultz P. A., «Phys. Rev. Lett.», 1986, 57, 2653) о предпочтительности «банановых» связей в молекуле C₂F₄. С. Г. Семенов

М.П.

X. 1988, N 23

СФ4

ОМ. 29645

1988

Хайтурсен В. Т.,

Кеширан И. С. и др.

анализ

глюкозы

спектров

Ис. общ. химии,

1988, 58, № 6, 1357 -

1360.

$C_2F_4^+$

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Pi ; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 500.

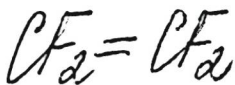
$C_2F_4^+$

1989

Golovin A. V., Akopyan
M. E. et al.

J; Khim. Vys. Energ. 1989,
23 (5), 387-91.

(see  $C_2F_5J^+$; III)



1989

7 5 Д160. Почему π -связь в тетрафторэтилене слабее, чем в этилене? Неэмпирическое исследование. Why is the π bond in tetrafluoroethylene weaker than that in ethylene? An ab initio investigation / Wang Shih Yung, Borden Weston Thatcher // J. Amer. Chem. Soc.— 1989.— 111, № 18.— С. 7282—7283.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

В рамках теории возмущений Меллера — Плессета 2-го порядка исследована энергия π -связывания в молекуле тетрафторэтилена (ТФЭ). С использованием базиса АО 6—31 ГФ* рассчитаны энергии различных геометрич. конфигураций систем $CF_2=CF_2$, CHF_2-CF_2 и CHF_2-CHF_2 , причем геометрич. параметры, отвечающие фиксированному углу поворота фрагментов, оптимизировались в рамках метода ССП. Проведено сравнение энергий конфигураций различной симметрии молекулы ТФЭ; показано, что плоская конфигурация системы $CF_2=CF_2$ является более напряженной, чем в молекуле этилена. Отмечено, что стерич. затруднения в молекуле ТФЭ обуславливают понижение прочности π -связи. Библи. 26.

А. Ю. Ермилов

М.П.

18 (13)
NS

сб. 1990,

C₂F₄

1990

№15 Б1025. Структуры X₂F₄ от углерода до свинца. Ненасыщенность за счет F-мостиков в группе IVб. Structures of X₂F₄, from carbon to lead. Unsaturation through fluorine bridges in group 14 / Trinquier Georges, Barthelat Jean-Claude // J. Amer. Chem. Soc.—1990.— 112, № 25.— С. 9121—9130.— Англ.

структура

Неэмпирическим методом ССП в двухэкспоненциальном базисе рассчитана геометрия и электронная структура изомеров X₂F₄ для X=C, Si, Ge, Sn и Pb с учетом релятивистских эффектов для Sn и Pb. Относит. энергии изомеров найдены с учетом конфигурац. взаимодействия и электронной корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка. Плоская π-связанная структура F₂X=XF₂ является основным состоянием только для C₂F₄. В остальных случаях минимуму энергии отвечают структуры, связанные двумя

(4)

12



Si₂F₄, Ge₂F₄, Sn₂F₄,
Pb₂F₄

X. 1991, N 15

мостиками $X-F-X$, причем цис- и транс-конформеры имеют примерно одинаковую энергию. Энергия мостиковой структуры Si_2F_4 близка к энергии двух мономеров SiF_2 . При переходе к Ge, Sn и Pb энергия мостиковой связи постепенно увеличивается до 6,2 ккал/моль у Pb_2F_4 . Во всех случаях бирадикальные триплетные частицы F_2X-XF_2 заметно менее стабильны по сравнению с синглетным основным состоянием.

А. Н. Исаев

C_2F_4

1990

7 Д156. Структура X_2F_4 от углерода до свинца. Ненасыщение через фторные мостики в группе 14. Structures of X_2F_4 , from carbon to lead. Unsaturation through fluorine bridges in group 14 / Trinquier Georges, Barthelat Jean-Claude // J. Amer. Chem. Soc.— 1990.— 112, № 25.— С. 9121—9130.— Англ.

С использованием ограниченного и неограниченного методов Хартри—Фока с аппроксимацией остовных оболочек эффективными остовными потенциалами и с дальнейшим учетом электронной корреляции методом КВ, в рамках которого отбор конфигураций проводился итерационным путем с помощью многочастичной теории возмущений, выполнены расчеты структурных, энергетических и электронных характеристик различных изомеров молекул X_2F_4 , где X — атом главной подгруппы четвертой группы; X = C, Si, Ge, Sn и Pb. При этом для Sn и Pb учитывались также релятив. поправки. Для изученных молекул рассчита-

структура

(74) 27

ср. 1991, № 7

$Si_2F_4, Ge_2F_4, Sn_2F_4, Pb_2F_4$

ны величины энергий изомеризации и вертикальных потенциалов ионизации, выполнен колебательный анализ и сделано отнесение частот, получено распределение зарядов на атомах. Для реакций $2\text{XF}_2 \rightarrow \text{XF}_4 + \text{X}$, $\text{XF}_4 + \text{X} \rightarrow \text{X}_2\text{F}_4$ и $\text{XF}_2 + \text{F}_2 \rightarrow \text{NF}_4$ рассчитаны величины энергетич. барьеров. Сделаны выводы от относит. стабильности рассмотренных изомеров и о природе химич. связи в них. Библ. 53. А. И. К.

CaF_4

1990

113: 238309j Structures of X_2F_4 , from carbon to lead. Unsaturation through fluorine bridges in Group 14. Trinquier, Georges; Barthelat, Jean Claude (Lab. Phys. Quantique, Univ. Paul-Sabatier, 31062 Toulouse, Fr.). *J. Am. Chem. Soc.* 1990, 112(25), 9121-30 (Eng). The various isomers of X_2F_4 with $\text{X} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{and Pb}$ are investigated through ab initio calcns. using effective core potentials and taking into account art of the relativistic effects for tin and lead atoms. Geometries are detd. at the SCF level and their relative energies are refined through CI calcns. The planar π -bonded structure $\text{F}_2\text{X}:\text{XF}_2$ is found to be a true min. on the C_2F_4 potential energy surface, a saddle point on the Si_2F_4 , Ge_2F_4 , and Sn_2F_4 surfaces, and a true min. on the first singlet excited Pb_2F_4 surface. The $\text{F}_3\text{X}-\text{XF}$ isomer is found to be a true min. in all cases but lead. Two nearly degenerate doubly bridged structures, cis and trans, are found to be true min. in all cases but carbon. The preferred isomers are tetrafluoroethylene for C_2F_4 , tetrafluorosilylsilylene for Si_2F_4 , and the trans-bridged structures for Ge_2F_4 , Sn_2F_4 , and Pb_2F_4 . The diradical triplet species $\text{F}_2\text{X}-\text{XF}_2$ are always found to be significantly higher in energy than the preferred singlet ground-state forms. With respect to tw singlet XF_2 fragments, the bridged structures have binding energies that increase regularly along the series from 3

геометрии,
структура,
параметры

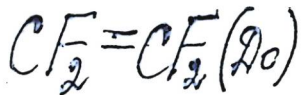
(74) 

C.A. 1990, 113, N 26

Si_2F_4 , Ge_2F_4 , Sn_2F_4 ,

kcal/mol in Si_2F_4 to 62 kcal/mol in Pb_2F_4 , whereas bridged C_2F_4 is largely unbound. The potential wells corresponding to the bridged structures are found to be rather flat, possibly inducing small distortions assocd. to very slight energy changes. The in-plane $\text{C}_{2v} \rightarrow \text{C}_i$ deformation found for the planar four-membered ring of Ge_2F_4 is in agreement with its solid-state geometry. A structural and energetic comparison is made within group 14 between the fluorine bridges in X_2F_4 and the hydrogen bridges in X_2H_4 . Some results are compared with spectroscopic data available for the monomers and dimers of SnF_2 and PbF_2 .





1991

Paulino J.A., Squires R.R.,

D₀

~~ΔH₂₉₈~~ J. Amer. Chem. Soc. 1991.

113, N 15. C. 5573-5580.



CF₃FC

1992

22 Б1026. Прямое наблюдение, реакции в условиях матричной изоляции и неэмпирические расчеты гало(трифторметил)карбенов. Доказательства прямого фотохимического присоединения карбена к молекулярному азоту. Direct observation, reactions under matrix-isolation conditions, and ab initio calculations for halo(trifluoromethyl)carbenes. Evidence for the direct photochemical addition of a carbene to dinitrogen /O'Gara J. E., Dalley W. P. //J. Amer. Chem. Soc. —1992. —114, № 10. —С. 3581—3590. —Англ.

Фотолиз 3-гало-3-(трифторметил)диазиринов (X=F, Cl, Br) в аргоновой матрице при 12 К приводит к образованию синглетных гало(трифторметил)карбенов CF₃XC: (X=F (I), Cl (II), Br (III)), зарегистрир. методом ИКС и с использованием характерных хим. р-ций (внедрение в HCl). Неэмпирич. методом ССП в двухэкспонентном базисе с поляризац. ф-циями оптимизированы структуры

(+2) 



CF₃CC

CF₃BeC

X. 1992, N 22-24

I—III, рассчитаны их колебат. спектры и, с учетом конфигурац. вз-вия, электронные УФ спектры поглощения. Вычисленные УФ спектры хорошо согласуются с эксперим. и подтверждают синглетное основное состояние I—III. Продолжит. фотолиз ($\lambda > 280$ нм) приводит к изомеризации $\text{CF}_3\text{XC:} \rightarrow \text{CF}_2=\text{CFX}$. В азотной матрице I и II изомеризуются, а III присоединяется к N_2 , давая диазин. Библ. 31.

В. И. Фаустов

C₂F₄

1994

Illenberger E.

NATO ASI Ser., Ser. B
1994, 326, 355-76.

(Ae)
bosop

(cell.  CF₃ Y; III)

C₂F₄

1995

Buckley T. J.; Johnson
R. D. III et al.

J. Phys. Chem. 1995, 99
(14), 4879 - 4885.

(corr. ● CF₂O; III)

C_2F_4

ab initio

расчет

сpectrum, v.

расчет на. рас.

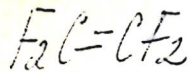
Takeshita K.,

1996

Theor. Chim. Acta, 1996, 93,
14, 243-258

A theoretical study on the
ionization of tetrafluoro-
ethylene with analysis
of  vibrational structure
of the photoelectron
spectra.

CA 1996, 125, 12, 21516



1998

Wang, Y; et al,

ab initio
pacific
cno-mc
u cma
turbo
cmu

Can. J. Chem. 1998, 76(4),
477-482.

(Cell. ● $H_2C=CH_2$; III)