

C-F

$AP \underline{F}^+(CF_4) 39,8 \pm 0,8$; $\underline{CF}^+(CF_4) 19,6 \pm 0,5$ 1952
 A.P. $\underline{CF_3}^+(CF_4) 15,44 \pm 0,05$ $\underline{CF_2}^+(CF_4) = 22,4 \pm 0,2$
 Warren J.W., Graggs J.D.,
 A-123

~~Mass-Sp~~ "Mass Spectrometry"

III K.

London 1952

$CF^+(CCl_3F) 19,1 \pm 0,2$
 $CF^+(CCl_2F_2) 21,7 \pm 0,2$
 $CF_3^+(CF_4) 15,44 \pm 0,05$
 $Cl_2^+(CCl_2F_2) 16,8 \pm 0,1$

$CF_2^+(CF_4) 22,4 \pm 0,2$
 $CF_2^+(CCl_3F) 21,0 \pm 0,2$
 $CF_2^+(CCl_2F_2) 19,2 \pm 0,5$

$C_3F_6^+$, $C_3F_5^+$,

$C_2F_3^+$

(A.P.)

BP-10219 - IV | 1963

Чердоб Ф.М.,
Дубов С.С., ...

Докл. АН СССР, 151(3),
631-33 (1963)

$C_2F_4^+$, $C_3F_3^+$

(A.P., E)

БФ-10219 - IV | 1963

Чернов Ф.Н.,
Дубов С.С., ...

Докл. АН ССР, 151(3),
631-33 (1963)

1963

C-F
Ch 36

Problem of the lengths and strengths of carbon-fluorine bonds. David Peters (Roy. Holloway Coll., Englefield Green, Engl.). *J. Chem. Phys.* 38, 561-3(1963). A simple explanation of the problem of the lengths and strengths of C-F bonds is proposed. Qual. mol. orbital theory is used and it is suggested that the charge transfer from C to F is the primary cause of the observed progressive shortening of all bonds from a given C atom as the number of F on this atom increases. A reasonable table of C-F bond strengths is constructed. CA

C.A. 1963. 38. 5
3895 4

CF_3CCF

Sanborn R. H.

1/1963

"Sympos. molec. struct. and
spectrosc. Columbus, 1963",
Columbus, Ohio, s.a. 59.

7-9844-11

ИК-спектры и assignments
частот колебаний для се-
рии при фторметилнае-
тиленов CF_3CCX (сл. $\text{X} = \text{H}$)

C₇F₁₄

Asundi R.K.,
Craggs J.D.

1964

Proc. Phys. Soc., 83, N4,
611

Электронный захват и
явление ионизации в
SF₆ и C₇F₁₄.

● (см. SF₆) III

1965

√6 Б142. Колебательные спектры органических соединений фтора. Brown J. K., Morgan K. J. The vibrational spectra of organic fluorine compounds. «Advances Fluorine Chem. Vol. 4». London, Butterworths, 1965, 253—313 (англ.)

Х. 1967. 6

$C_{12}F_{10}$

Cotter J. L.

1965

патент. J. Chem. Soc., 1965, Febr., 1520.
патентизации

Исследования некоторых
ароматических фторсое-
динных углеводородов мето-
дом электронного удара.

(см. C_6F_6)

C₂₄F₁₈

Cotter J. L.

1/1965

попытки
ионизации

J. Chem. Soc., 1965, Febr.,
1520.

Исследования некоторых
ароматических фторсоедине-
нных углеводородов ме-
тодами электронного удара
(см. C₆F₆)

$C_{18}F_{14}$

Cotter J. L.

11965

попытки
ионизации

J. Chem. Soc., 1965, Febr.,
1520.

Исследования некоторых
ароматических фторзаме-
щенных углеводородов мето-
дом электронного удара
(см. C_6F_6)

уго - C_3F_3

Fisher J. P.,
Homer F. B.,
Lassing F. P.

1965

J. Amer. Chem. Soc., 1965, 87,
N5, 957.

Свободные радикалы в масс-
спектрометрии. 33. Полим-
еры по  изации CF_2 ,
 CF_3CF_2 , CF_3CH_2 , и $-C_3F_7$

и изо- C_3F_3 -радикалов.

(см. CF_2)

$H-C_3F_7$

Fisher J. P.,

Homer J. B.,

Lossing F. P.

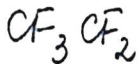
1965

J. Amer. Chem. Soc., 1965, 87,
15, 957.

Свободные радикалы в масс-
спектрометрии. 33. Катионы
и ионы CF_2 , CF_3CF_2

CF_3CH_2 , n - C_3F_7 и изо- C_3F_7 -ра
дикалов.

(см. CF_2)



Fisher J. P.,

1965

Homer F. B., Lossing F. P.

J. Amer. Chem. Soc., 1965, 87,
N5, 957.

Свободные радикалы в масс-
спектрометрии. XX XII. Поиски
и использование CF_2 , CF_3CF_2 ,
 $\text{CF}_3\text{C}_2\text{F}_5$, $\bullet$ и C_3F_7 и изо-

- $C_3 F_3$ - радиманіов.

(смм. CF_2)

C - F	Bqp - M1431 - <u>IV</u>	1965
-------	-------------------------	------

C_2F_5

Fischer I. B., Homer J. B.,
Lossing F. P.

CF_3

C_3F_3

"J. Amer. Chem. Soc.," 1965,
87, N5, 957-960

CF_2

(Y)

C_4F_8

Reicklen J

1965

Wachi F., Knight V.

спектр

J. Phys. Chem., 1965, 69, 2,
693-695.

Инфракрасные спектры пер-
фторциклопропана и пер-
фторэтиленов - 2.
(см. C_3F_6)

-C-F-

BP-M-1338-IV

1966.

cbeyb
(20)

C-F bond dissociation energies in perfluorocarbon gases using negative ion appearance potential data. M. M. Bibby and G. Carter (Univ. Liverpool, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 62(10), 2736-42(1966)(Eng). The appearance potentials of F⁻ ions formed by electron impact in 9 perfluorocarbon gases were measured. The difficulties assocd. with low-energy attachment processes are discussed, and the appearance potentials are used to suggest the positions in the parent mols. from which the F atoms are ejected in the capture processes. Dissocn. energies for the C-F bond in different groupings are discussed. 20 references.

RCTD

C.A. 1966. 65.12
17694c

C-F

1849 - M 1338 - IV

1966

7 Б89. Определение энергии диссоциации связи C—F в газообразных перфторуглеродах с использованием данных о потенциале появления отрицательных ионов. Bibby M. M., Carter G. C—F bond dissociation energies in perfluorocarbon gases using negative ion appearance potential data. «Trans. Faraday Soc.», 1966, 62, № 10, 2637—2642 (англ.).

Измерены потенциалы появления ионов F^- , образуемых при электронном ударе в 9 газообразных перфторуглеродах. Обсуждаются трудности обработки результатов, возникающие в связи с низкоэнергетической природой процесса. Определение потенциалов появления ионов дает возможность выяснить состояние исходных молекул, из которых в процессе захвата электронов испускаются эти ионы. Измерена энергия диссоциации связи C—F в различных группировках атомов.

Резюме

X. 1968. 7

1966

 C_3F_8
(Ni)

Vibrational spectra and frequency assignments for octafluoropropane(C_3F_8) and hexafluoroacetone(C_3F_6O). E. L. Pace, A. C. Plaush, and H. V. Samuelson (Western Reserve Univ., Cleveland, Ohio). *Spectrochim. Acta* 22(6), 993-1006(1966) (Eng). The ir vibrational spectra of octafluoropropane and hexafluoroacetone have been investigated, 35-4000 cm^{-1} . A supplementary study of the Raman spectrum of octafluoropropane in the gas and liquid phase, including qual. polarizations of the lines, has been carried out. Attempts to obtain a Raman spectrum of hexafluoroacetone were unsuccessful because of extreme fluorescence. No CF_3 torsional modes for either mol. were observed. By comparing the spectra of the 2 mols., it has been possible to make a reasonable assignment for the frequencies of the normal vibrational modes of both. RCSQ

C. A. 1966. 65.3

31859

C-F
связь

16 Б39. Изучение связи углерод — фтор. Rajput
Arjun Singh, Pandey Gopal Krishna,
Chandra Suresh. A study of carbon—fluorine bond.
«Bull. Chem. Soc. Japan», 1967, 40, № 10, 2424—2427
(англ.)

1967

Исследуется зависимость длины связи C—F от окружения. Показано, что такая зависимость может быть интерпретирована на основе представления о предельном типе гибридизации атома C. Обнаружена приблизительно линейная зависимость длины связи C—F от числа соседних атомов или связей. Изменение длины связи C—F при последовательном введении в молекулу атомов F может быть интерпретировано с помощью представления о промежуточной степени гибридизации атомов F. Для ковалентного радиуса F предложено значение 0,61 Å, полученное с учетом отталкивания неподеленных электронных пар и изменения гибридизации атома F.

В. Л. Лебедев

2. 1968. 16

C-Р

Вейвильский А.И. 1987

Ис. орган. химии, 3, № 12,
2081.

Энергия разрыва связей угле-
вод - галоген и углевод - H
в молекулах галогенопара-
финных парафиновых углевод-

родов!

(см. С-Н)

1968

4 Б112. Электроннографическое исследование молекулярной структуры и крутильных колебаний в декафторбифениле. Almenningen A., Hartmann A. O., Seip H. M. An electron diffraction investigation of the molecular structure and the torsional oscillations in decafluorobiphenyl. «Acta chem. scand.», 1968, 22, № 3, 1013—1024 (англ.)

Проведено электроннографич. исследование газообразного декафторобифенила $(C_6F_5)_2$. Валентные углы близки к 120° . Длины связей: $C-C=1,395$ (0,004) Å, $C-F=1,325$ (0,004) Å, $C-C$ (мостиковая, связь) $=1,51$ (0,01) Å. В скобках приведены стандартные отклонения. Угол между плоскостями колец $70,0^\circ$ ($2,0^\circ$). Исследована зависимость потенциальной энергии от угла между плоскостями колец, с учетом, что энергия взаимодействия галоген—галоген наиболее важна. Разность в потенциальных энергиях для $\alpha=90^\circ$ и $\alpha=70^\circ$ лежит в интервале 0,4—2,0 ккал/моль. Величина среднеквадратичной амплитуды крутильного колебания $8-13^\circ$.

Р. Баранова

 $(C_6F_5)_2$

строение

X. 1969. 4

1968

C₆F₅CF₃

24332f Vibrational spectra of perfluorotoluene. Bailey, Raymond T.; Hasson, S. G. (Univ. Strathclyde, Glasgow, Scot.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1968, 24(12), 1891-8 (Eng). The ir (liq. and vapor) and Raman spectra (liq.) of perfluorotoluene were measured. An assignment of the vibrational modes is proposed by assuming free rotation of the —CF₃ group and C_{2v} symmetry. No evidence of an appreciable 6-fold potential barrier was obtained. The interpretation of the spectra is based on the character of the observed bands and a comparison with the related mols. C₆F₅X (where X = F, Cl, Br, and I).

RCSQ

C.A. 1969. 70.6

CF_3CCCF_3

1968

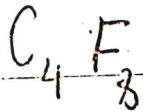
De Alti G.,
Galasso V., Bigotto A.

Corsi e semin. chime.
CNR e FG, n 14, 46-47.

ene.
noctm.

(Cu. SiM₄) III

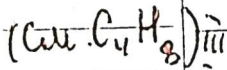
1968



Venkateswarlu K.,
Pothamambal P.

Annul.
Korad.

Indian J. Pure Appl.
Phys., 6 (10), 530.



Generalized mean square
amplitudes and Coriolis
coup-ling coefficients
of C_4H_8 , C_4D_8 and C_4F_8 .

Ge_2H_6 ; Si_2H_6 ; Si_2Cl_6 ; C_2F_6 ; C_2Cl_6 (пост. Корюшикова) 1969
XIV 2300 (взаимог.) 14

Venkateswarlu K.; Natarajan A.

J. Chem. Phys. Physicochim. Biol. 1969,
66 (7-8), 1324-6.

Molecular constants of non-bridged
 X_2Y_6 systems. II Generalized mean-
square amplitudes of vibration and
Coriolis coupling constants. 9

10

(P)



ЕСТЬ

CA 1969, II, N 26, 130409, S

C-F

1970

(фторо
метан)

фото
спектр

(93037n) Electronic energies and electronic structures of the fluoromethanes. Brundle, Christopher R.; Robin, Melvin B.; Basch, Harold (Bell Teleph. Lab., Inc., Murray Hill, N.J.). *J. Chem. Phys.* 1970, 53(6), 2196-213 (Eng). The high-resolution He I and He II photoelectron spectra of all fluoromethanes in the series CH₄ to CF₄ and their deuterated analogs have been recorded and are compared with the Koopmans' theorem results of near-Hartree-Fock calcs. performed in a Gaussian basis. The agreement is very good in general and offers an unambiguous assignment of almost all of the bands obsd. In particular, repeated correlations are demonstrated between the compns. of the orbitals from which the electrons are ejected and the characters of the resulting photoelectron bands. Identifiable trends throughout the series are stressed, and an anom-

(+1)

C.A. 1970 73 18

☒

alous feature in the CF_4 spectrum is noted. Jahn-Teller effects in CH_4 and CH_3F are clearly evident, but they are not obsd. in CHF_3 and CF_4 . Comparison of the photoelectron spectra excited with He I and He II radiation shows wide variations in the relative intensities of various bands in certain of the more symmetric mols., suggesting that relative intensities can be a poor measure of relative orbital degeneracies. Mass-spectrometric appearance-potential data are briefly discussed in the light of the photoelectron results. The C and F 1s binding energies as measured with 1254-eV x-rays are electronically adiabatic. The accurate detn. of the lower ionization potentials of these mols. leads readily to the assignment of several of their electronic transitions as lower members of ns and np Rydberg series.

RCJQ

$G_2F_3^-; \underline{\underline{G_2F_3}}$

Thynne Y.C.Y.,
Mapneil K.A.G.

1970

A.P.

A_e

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys., 1970,
5, n 3-4, 329.



(Cer G_2F_4) III

C_3F_5

1972

Harland P.W.

Thynne J.C.J.

(He^-)

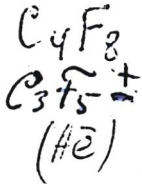
"Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys"

1972, 9 N3, 253-66.

● (cur. C_2F_5 ; III)

1399 - 4336 - XIV

1972.



(7)(20)

2 Д253. Диссоциативный электронный захват и диссоциативная ионизация в перфторциклобутане. Lifshitz C., Grajower R. Dissociative electron capture and dissociative ionization in perfluorocyclobutane. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1972, 10, № 1, 25—37 (англ.)

Методом задерживающего потенциала исследованы процессы столкновения электронов с молекулами C_4F_8 . Для энергий 12—17 эв измерены относит. сечения образования ионов CF^+ , $C_3F_5^+$, $C_2F_4^+$ и CF_3 , а для энергий 0—13 эв — сечения образования отрицат. ионов F^- , CF_3^- , $C_3F_5^-$, $C_2F_3^-$. Измерены также относит. скорости образования некоторых отрицат. ионов при диссоциативном электронном захвате в газах CF_4 , C_2F_4 , C_3F_6 . По измерению потенциалов появления различных ионов найдено, что энергия связи $C-F$ составляет $4,4 \pm 0,2$ эв, а энергия электронного сродства для C_2F_3 и C_3F_5 равна, соответственно, $2,0 \pm 0,4$ и $2,6 \pm 0,4$ эв. Б. Ф. Горднеев

Резерв-73-2

(14)



CH_2Cl ; CHCl_2 ; CH_2F , CCl_3 (I, A.P., ΔH_f)
 $\text{C}-\text{Cl}$; $\text{C}-\text{F}$ (Do) XIV 3927 1972

Lossing F. P.,
Bull. soc. chim. belg., 1972, 81,
N1-2, 125-34

10 44

C_4F_8

Mothes K. G.;
et al.

1972

(Ie)

"J. Phys. Chem."

1972, 76, N25, 3758-64

● (ca SF_6 ; III)

CF_n

Goddard W. A. 1973
et al.

papers
u.n.

Accounts chem. Res.
1973, 6 (11), 368-76.

(cm. CH; III)

C_3F_3

#973

Harland, P.W., et al.

Int. J. Mass Spektrom. Ion Phys.
1973, II, N5, 445-54.

Ac^-

($cu. C_2F_5; III$)

1973

C_4F_9

$C_4F_9^-$ (A.P.)

Ar^-

Harland D.W., Hayano J.C.J.

"Int. J. Mass. Spectrom. and Ion Phys.",

1973, 11, 45, 445-454.

(see C_2H_5 , III)

CF₆³⁻

1973

12 Б33. Распределение зарядов в гексафторидах трехвалентного хрома и трехвалентного железа. H a g - r i s L. E., B o u d r e a u x E. A. The charge distribution in chromium(III) and iron(III) hexafluoride. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 23, № 3, 434—436 (англ.)

Полуэмпирическим методом МО ЛКАО, представляющим собой модификацию РМХ, предложенную Фенске и др. (РЖХим, 1967, 11Б40), проведен расчет электронного строения галогенидов переходных металлов CF₆³⁻ и FeF₆³⁻. В кач-ве базисных использовались 4s-, 4p- и 3d-АО M⁺ с функциями Ричардсона, а также 2s- и 2p-АО F с двухэкспонентными функциями Клементи.

Электр.

Строение

Х. 1974 № 12

⊕

⊗

Атомные орбитальные энергии определяли из ПИ валентных орбиталей по Башу. Анализ заселенностей проводился в базисе симметрично-ортогонализованных орбиталей. Приведены вычисленные заселенности АО и заряды на атомах металла: $g_{Cr}=1,47$ (по опытным данным рентгеноэлектронной спектроскопии 1,53), $g_{Fe}=1,24$ (опыт 1,33). Проведено также сравнение с результатами других полуэмпирич. расчетов. М. Гофман

4 0506.8763
TE, Ch

Зл. упр 40892 02 1974
изкво - C₄F₈ 2069

Christophorou L.G., McCorkle D.L.,
Pittman D.

Electron attachment of CCl₂F₂ and c-C₄F₈
below $\sim$ 2 eV.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 3, 1183-1184

(англ.) 0103 БМН

034 036 095

ВИНИТИ

50704.8470

31603

1975

Ch, Ex-C, Ph, TC

$C(CF_3)_4$

*4-9383

Bürger H., Eujen R., Lagow R.J.

Schwingungsspektren und Normalkoordinate-
nanalyse von CF_3 -verbindungen. VIII. Per-
fluorneopentan $C(CF_3)_4$.

"Spectrochim. acta", 1975, A 31, N 5-6, 777-
787

(нем., рез.англ.)

0404

ВИНИТИ

$C_3F_5^+$

1975

Dunbar R.C.

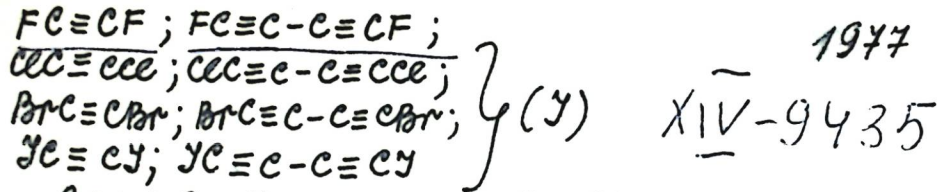
„Interact. between
homologues. Ions and Mol.“

New-York-London, 1975,

579-98



(see H_2^+ , III)



1977

Bieri G., Heilbronner E., Stadelmann J.-P.,
Vogt J., von Niessen W.

J. Amer. Chem. Soc., 1977, 99, N 21, 6832-
-6838 (Amer.)
Electronic states of Difluoroacetylene,
Difluorodiacetylene, and Perfluoropentadiyne.
1,3 Radical Cations. A Photoelectron Spectroscopic
Investigation.

PNC 94, 1978, 4 2314

10

(9)

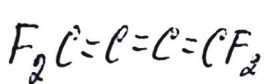
F₂ ccc F₂

(и. к. спектр.
Раман спектр)

Column 5385 / 1944

Dwight J. R. et al.

Spectrochim. Acta, 1948,
33A, 529-44.



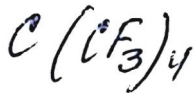
Оommen 8416 / 1978

обзор, J.

Рамаан
спект

Asundi R.K., et al.

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1978, 16, p.142-150.



геометрия
молекулы

ф. 1949, №3

1978
3 Д124. Изучение перфторнеопентана, $C(CF_3)_4$, методом электронной дифракции. Oberhammer Heinz. An electron diffraction study of perfluoroneopentane, $C(CF_3)_4$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 468—472 (англ.)

Методом электронографии определено геометрич. строение молекулы $C(CF_3)_4$ в газовой фазе. Приведены следующие значения геометрич. параметров: $r_a^0(C-C) = 1,562(3) \text{ \AA}$, $r_a^0(C-F) = 1,325(2) \text{ \AA}$, $\angle FCF = 108,1^\circ(0,2)$, $\tau = 18,3^\circ(0,5)$, τ — угол кручения CF_3 -группы, отсчитываемый от шахматной конформации. При анализе эксперим. данных принята жесткая модель молекулы (без внутренних вращений) с тетраэдрич. симметрией (группа T). Поправки $r_a - r_a^0$ вычисляются по ф-лам, несколько отличающимся от приведенных в монографич. литературе. Произведены также расчеты указанной молекулы методом ППДП/2, которые дают потенц. ф-цию вращения CF_3 -группы с минимумом при угле $\tau = 18^\circ$ и барьером в шахматной конформации. Обсуждаются динамич. свойства молекулы и изменение ее геометрии при замещении CF_3 -групп на метильные группы. Библ. 28.

Е. П. Смирнов:

$C(CF_3)_4$

1978

24 Б115. Электронографическое исследование перфторнеопентана $C(CF_3)_4$. Oberhammer Heinz. An electron diffraction study of perfluoroneopentane, $C(CF_3)_4$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 468—472 (англ.)

геометри-
ческая

При 15° определена структура свободной молекулы $C(CF_3)_4$ (I). Установлено, что I имеют жесткую конфигурацию симметрии T с группами CF_3 , повернутыми относительно заторможенного (шахматного) положения на угол $18,3^\circ$ (5). Найдены след. значения параметров (межъядерные расстояния r_a° даны в Å): C—F 1,325 (2), C—C 1,562 (3), $\angle FCF$ $108,1^\circ$ (2), амплитуда крут. кол. 5° . Путем сравнения эксперим. среднеквадратичных амплитуд с вычисленными по спектроскопич. данным оценена крутильная силовая постоянная 0,55 мдин. · Å. Отмечено хорошее согласие полученных сведений о геометрии молекулы с результатами расчетов методом ППДП/2, приведена зависимость общей энергии от величины угла поворота групп CF_3 (высота барьера для заторможенной конфигурации 3,2, для затенной 54,0 кдж/моль).

Г. В. Гиричев

2.1978, N24

XIV-9001 1979

AB_4 (кв. мех. расчет, X_d -метод)
 $A = C, Si, Ge; B = F, Br.$

Омолко Д.Е., Титов С.А.,

Теор. экстр. хим. 1979, 15(5), 559-

Расчет электрон. структуры
молекулы...

Ж. 1980, 92, №1, 11562 К

Ю

$C_4F_3^-$

Common 8829

1979

$C_4F_7^-$

Sauers, J. et al.

$C_4F_6^-$

$C_3F_5^-$

J. Chem. Phys., 1979,

$C_3F_3^-$

71(7), 3016-24.

$C_2F_3^-$

Electron attachment of ...

CF_3^-

(Ae^-)

gaseous, n-pen. fluorinated

C₃F₅

Lammer 88291

1979

Saunders J. et al.

(Ae)

J. Chem. Phys., 1979, 71(7),
3016-24.

Electron attachment of ...

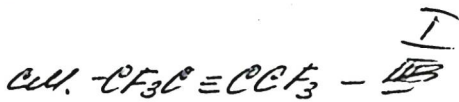
$-CF_3C \equiv CCF_3$ (submitted 8829) 1979



Sauers J, et al.

J. Chem. Phys. 1979, 71,
N7, 3016-24.

(A $\bar{e}$)



C₃F₄

Lorrmann 12252, 1981.

Fleming G.D., et al.

Kb. mex.

paeres,
cusi. noct.

Z. Naturforsch., 1981
A36, 459-62.

C₄F₄

Ummuck 12252 1981.

Fleming G. D., et al.

Кв. сек.
факт,
суд. нем.

Z. Naturforsch., 1981,

A 36, 759-762



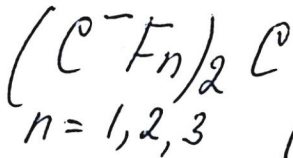
CF₂CFCF₂

1981

✓ 94: 20000-4g Infrared observation of perfluoropropene cation in solid argon. Kelsall, Benue J.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Phys. Chem.* 1981, 85(10), 1288-91 (Eng). Matrix-photoionization studies of CF₂CFCF₃ produced new photosensitive absorptions at 1543, 1414, and 1062 cm⁻¹ which are assigned to the perfluoropropene radical cation. Excellent agreement with 1550 ± 50 cm⁻¹ spacing in the first photoelectron band indicates assignment of the 1543-cm⁻¹ band to the C-C stretching mode of the radical cation π bond. Near agreement of the 1062-cm⁻¹ band and the 1044 ± 2 cm⁻¹ peak from the IR multiphoton dissociation spectrum supports assignment of these bands to the same vibration, suggested to involve sym. -CF₂ stretching character. The 1414-cm⁻¹ band is attributed to the antisym. -CF₂ mode. The C-F vibrations in the mol. cation absorb slightly higher frequency radiation than the neutral mol.

U. R. Chelish
S. Mairfuz

C.A. 1981, 94, N24

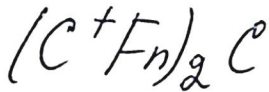


1982

Cuthbertson A.F.,
et al.

расчёт,
номер,
структ.,
ссыл. номер,
 ΔH_f .

J. Mol. Struct., 1982,
84, N1, (Theorchem, 1982,
4, N1) ● 71-79.
(ссыл. $[\text{Be}^{2-}\text{H}_2]_2 \text{C}$; III)



$n = 1, 2, 3.$

1982

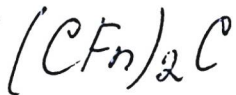
Cuthbertson A. F.
et al.

J. Mol. Struct., 1982,
87, 41, (Theochem., 1982,
4, 41) 41-49.

расчёт,
геометр.,
структ.,
ссыл. по сс.

ΔH_f .

(ссыл. $[Be^{2-}H_n]_2C$; III)



$n=1, 2, 3$

расшир.
номинал.
св. рунт.
св. н. н. н.
 ΔH_f .

1982

Cuthbertson A. F.,
et al.

J. Mol. Struct., 1982,
87, N 1, (Theor. Chem.,
1982, 4, N 1), 71-79.

(св. $[Be^{2-}H_n]_2C; III$)

C₄F₄

[Ommuck 15680]

1982

Diaz B.

гармон.
сильв.
поле
и

Z. Naturforsch., 1982,
37A, 1292-1294

средние
анализ.
констант.

C₅F₃⁺

1985

103: 129481g Anomalous temperature dependence of the coefficient of electron attachment to hexafluorobenzene. Adams, N. G.; Smith, D.; Alge, E.; Burdon, J. (Dep. Space Res., Univ. Birmingham, Birmingham, UK B15 2TT). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 116(6), 460-4 (Eng). Electron attachment to C₆F₆ was studied at 200-450 K. The attachment coeff., β is $1.4 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ at 200 K and $1.1 \times 10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ at 300 K. However a dramatic redn. of β occurs as the temp. is increased above 300 K; $\sim 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ at 450 K. A β which reduces with increasing temp. is rare and the rate of redn. obsd. for C₆F₆ is unprecedented. During this study, the appearance potential of C₅F₃⁺ ions from C₆F₆ was detd. (much more accurately than previously) to be $15.85 \pm 0.01 \text{ eV}$.

A.P.

C. A. 1985, 103, N 16.

$C_3F_3^+$

Am. 23439

1985

Craig N.C., Fleming G.F.,
et al.,

колебам.
спектр,
слесов.
постоем.

J. Amer. Chem. Soc., 1985,
107, N25, 7324-7329.

$M_p C_n^q$

$$q = \pm 1, p = 1 \div 4$$

$$n \leq 10$$

$$\underline{M = F}$$

(См таблицу
Классификации)

(49)

C.A. 1985, 103, N14

$M_p C_n^q$

1985

103: 112762b SIMS study of normal and transition element carbides. Leleyter, Mireille; Joyes, Pierre (Groupe Phys. Theor., Fac. Sci., F-80039 Amiens, Fr.). *Surf. Sci.* 1985, 156(2), 800-13 (Eng). Results are given for SIMS expts. on $M_p C_n^q$ clusters with $q = +1$ or -1 , $p = 1$ to 4 , $n \leq 10$, and numerous M elements: M = F, Cl, Al, Zr, W, Ti, V, Cr, Fe, Ni. Such clusters in their neutral state have been obsd. in astrophysics. All these exptl. results can be easily classified on the following manner. (1) Neg. ions: whatever M is in MC_n^- , the relative intensities of the secondary ions are always strongest if n is even, i.e., $I(MC_{2k}^-) > I(MC_{2k+1}^-)$. (2) In the case of pos. ions with only 1 impurity atom M, elements such as F or Cl (with a strong electronegativity), Fe or Ni (3d transition elements with a relatively high electronegativity), lead to alternations with enhancements for n odd, i.e. $I(MC_{2k+1}^+) \gtrsim I(MC_{2k}^+)$. Elements such as Ti, V, Cr, Zr or W (transition elements with relatively low electronegativities) give alternations with enhancements of emission for n even, i.e. $I(MC_{2k}^+) \gtrsim I(MC_{2k+1}^+)$. Finally, $M_p C_n^+$ ions with $p > 1$ lead to a periodic behavior of the emission intensities only for values of p which are specific to each element. A rule of correspondence between intensities and stabilities can be formulated in the following way: large (low) stabilities are responsible for large (low) intensities. The rule begins to be math. proved for SIMS expts. The problem is, therefore, to understand why for given M, p and q , the $M_p C_n^q$ clusters with a given purity of n are systematically more stable. The question is discussed and a phys. model which applies well to almost every case is proposed.

C₆ F₁₄

1985

Пирожная Л. Н.,
Зубкова О. В.

расчёт
N;

ЖС. сейсмостр. келлер,
1985, 26, N 6, 89-94.

(смет. ● C₄ F₁₀; III)

$C_6F_5-C_6F_5$ (M. 24216)

1986

$C_6F_5-CF_3$

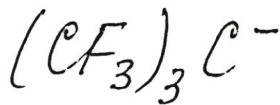
Chowdhury S., Grimsrud

E. P., Meiris Th., et al.

He;

J. Amer. Chem. Soc.,

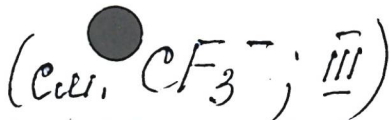
1986, 108, N13, 3630-3635.



1986

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

и. п. J. Amer. Chem. Soc., 1986,
108, N 14, 4027-4031.



C₄F₈

1987

106: 202098f. Electron diffraction studies of supersonic jets. 9. Clusters of cyclopropane, n-butane, perfluorocyclobutane, neopentane, and perfluorobenzene. Bartell, Lawrence S.; Barshad, Yael Z. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA). *J. Phys. Chem.* 1987, 91(11), 2890-4 (Eng). Clusters of the title compds. were produced by homogeneous nucleation in flow of the carrier gas Ne through a miniature Laval nozzle. All of the clusters gave liquidlike electron diffraction patterns except for C₄F₈, which yielded Debye-Scherrer rings corresponding to microcrystals 90 Å in diam. In all cases but n-butane the clusters were inferred to be far below the bulk m.m.s.

Микрокри-
сталлы

⊗ (7) C₆F₆

с. А. 1987, 106, N 24

$F(C_6F_6)$

1987

Hiraoaka Kenzo,
Mizuse S., et al.

стабиль-
ность,
структ.,
теор.
расчет.

J. Chem. Phys. 1987,
86(7), 4102-5.

(ср. $F(C_6H_6)$; III)

$F^-(G_F)$

[Om. 26700]

1987

Hiraoka K., Mizuse S.,

стабильн.,
структура

J. Chem. Phys., 1987,
86, n7, 4102-4105.

c-C₄F₈

(om. 28718)

1987

Homer J. Mohammad-
di M.S.,

(J
pacrem) J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1987, Pt 2,

83, N11, ● 1975 - 1984.

Стн Fy-n

1987

)- 6 Д109. Неэмпирическое МО изучение протонированных молекул фторометанов и фторосиланов: структура и энергетика. Ab initio MO study on the protonated species of fluoro-methanes and fluoro-silanes: structures and energetics. Ikuta Shigeru. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 149, № 3—4, 279—288 (англ.)

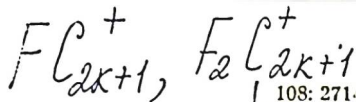
Геометрический анализ фторометанов, фторосиланов и их протонированных соединений проведен в приближении методов ХФ МО и теории возмущений 2-го порядка Меллера—Плассета (МП2) с использованием базиса 6-31 ГФ*. Найдено, что метод ХФ неточен для протонированного дифторометана (H_2FCFH^+), для которого предсказывается избыточная длина связи C—F (2,048 Å). Последовательная МП2 оптимизация укорачивает ХФ длину связи до 1,768 Å. Относит. сродство к протону, вычисленное с использованием метода МП2/6—31++ГФ** (2 d), находится в соответствии с экс-

М.П.

ар. 1987, 18, № 6

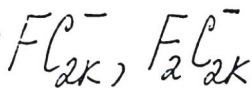
перим. данными, тогда как абс. значения сродства к протону занижаются на 5—6 ккал/моль. Добавление второго атома F к метилфториду (CR_3F) и фторосилану (SiH_3F) является причиной меньших абс. значений сродства к протону. Вычислены энергии диссоциации протонированных молекул. Для протонированного дифторометана она равна 17 ккал/моль и составляет половину от энергии диссоциации для др. протонированных молекул (H_3CFH^+ , H_3SiFH^+). Л. Д. Б.





OM-28557

1987



108: 271451a Electronic structure of small fluorocarbon clusters $F_p C_n$ ($p = 1, 2$) observed in secondary ionic mass spectrometry (SIMS). I. Stabilities. Leleyter, M. (Groupe Phys. Theor., Fac. Sci., 80039 Amiens, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1987, 48(11), 1963-73 (Eng). The intensities of emission of $F_p C_n^+$ ($p = 1-4$) and $F_p C_n^-$ ($p = 1, 2$) secondary ions given by a target made of teflon under a primary bombardment of 6.5 keV Ar^+ ions, show a very strong even-odd effect according to the parity of the no. n of C atoms. Max. occur when n is odd for $F_p C_n^+$ ($p = 1-3$) and when n is even in the other cases ($p = 4$; neg. ions). The alternations of $F_p C_n^+$ and $F_p C_n^-$ ($p = 1, 2$) are interpreted with a CNDO calcn. by means of the model of the linear C_n chain similar to the Pitzer and Clementi model. The stabilities of the linear clusters are the greatest for FC_{2k+1}^+ , $F_2 C_{2k+1}^+$ and for FC_{2k}^- and $F_2 C_{2k}^-$ ions. This agrees with the "correspondence rule" between the emissions of various ions and their stabilities and electronic properties. Besides, in the case of $F_2 C_n$ chains, the calcn. shows that the disym. isomers are in the best agreement with the exptl. data.

стабильность,
масс-спектры

C.A. 1988, 108, N 4

$F_p C_n^{\pm}$ $p=1,2$

(IM-28558)

1987

108: 27146n Electronic structure of small fluorocarbon clusters $F_p C_n$ ($p = 1,2$) observed in secondary ionic mass spectrometry (SIMS). II. Electronic populations and fluorine-carbon (F-C) bonding. Leleyter, M. (Group. Phys. Theor., Fac. Sci., 80039 Amiens, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1987, 48(11), 1975-80 (Eng). A CNDO calcn. is used to interpret from a linear chain model the alternations in the emission intensities of secondary $F_p C_n^{\pm}$ ions ($p = 1,2$) with enhancements of $F_p C_{2k+1}^+$ and $F_p C_{2k}^-$ ions. The calcn. shows that the strong even-odd effect arises from the fact that the Fermi level ("HOMO") of the clusters, assumed to be linear C_n chains with one or two F atoms related to one or both ends of the chains, falls into a band of degenerate π levels. The study of the charge oscillations throughout the chains shows that they are directly related to the C atom no. parity and therefore to the filling of the Fermi level: there are damped periodic oscillations only for the most stable clusters; in the other cases the charges do not show any periodic behavior. The distribution of the charges gives interesting information on the F-C bond too and points out that the strong F electronegativity plays an essential role.

стабильность,
масс-спектры

C.A. 1988, 108, N 4

C₄F₈

1988

24 Б1139. Электронографические исследования в сверхзвуковых потоках. II. Зародышеобразование низкотемпературных фаз перфторциклобутана. Electron diffraction studies of supersonic jets. 11. Nucleation of low-temperature phases of perfluorocyclobutane. Harsanyi L., Bartell L. S., Valente E. J. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 15, 4511—4514 (англ.)

Методом газовой электронографии показано, что при истечении из сверхзвукового сопла при гомогенном зародышеобразовании перфторциклобутан, C₄F₈, имеющий 5 низкот-рных крист. фаз, легко образует крист. кластеры. Судя по электронограммам, кластеры обладают большим разнообразием, зависящим от условий истечения в вакуум; часто присутствует несколько крист. фаз. Только в трех случаях удалось получить, по-видимому, чистые крист. фазы, условно отнесенные на осно-

X. 1988, N 24

вании низкот-рного рентгенофазового анализа к фазам III, IV и V. Эти фазы при давл. 1 атм существуют в т-рных интервалах 214,8—174,6, 174,6—141,3 и ниже 141,3 К соотв. Т-ры, при к-рых растущие кластеры принимают окончательную форму, сложным образом зависят от мольной доли в-ва и начального давл. При определенных условиях размер кластера убывает с ростом атомной массы газа-носителя (He, Ne, Ar).

В. С. Матрюков

$C_3F_3^+$

(Om. 29328)

1988

Lien M.H., Hopkinson A.C.,

meop.
pachem

J. Mol. Struct. Theochem,
1988, 165, N 1-2, 37-46.

$CF_3C \equiv CF$ (Om. 31770)

1989

Friedrich H.B., Burton D.J.,
et al.,

(Vi)

Spectrochim. acta, A 1989,
45, N2, 181-185.

Фториды
гидроксида

[От. 32465]

1989

Патер А.М.,

природа
связи C-F

Дл. связей. химии,
1989, 30, N 4, 170-172

Химические свойства ДМР¹⁹
и природа связи C-F в
фториде гидроксида.

$C_3F_3^+$

1989

18 Б1104. Теоретическое изучение ангармоничности в колебательном спектре перфторциклопропенильного катиона. Theoretical study of anharmonicity in the vibrational spectrum of the perfluorocyclopropenyl cation / Yaoming Xie, Boggs James E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 2.— С.— 1066—1071.— Англ.

Рассчитаны структура и ангармонич. колебат. частоты перфторциклопропенильного катиона $C_3F_3^+$ (I). Потенциальная ПВ I рассчитана по теории возмущений Мёллера — Плессета 4-го порядка в базисе 6-311ГФ, дополненном 2 наборами поляризац. d —АО, и вариационное решение колебат. ур-ния Шрёдингера с помощью конфигурац. разл. в большом тщательно отобранном базисе гармонич. осцилляторов. Равновесная конфигурация I — планарная (D_{3h}) с длинами связей CC 1,3796 Å и CF 1,2615 Å. Расчетные фундаментальные частоты согласуются с эксперим. данными, полученными в конденсир. фазе, со средним отклонением $\pm 11,5$ cm^{-1} . Рассчитаны частоты первых обертонов I. В. Я. Беспалов

М.А.

X. 1990, N 18

$C_3F_3^+$

1989

111: 104603a Theoretical study of anharmonicity in the vibrational spectrum of the perfluorocyclopropenyl cation. Xie, Yaoming; Boggs, James E. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 73712 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(2), 1066-71 (Eng). Complete theor. calcs. for the structure, anharmonic force field up to partial 6th order, and anharmonic vibrational frequencies of $C_3F_3^+$ were carried out. The procedure included ab initio calcn. of the vibrational potential-energy surface at the 6-311G plus double polarization plus local MP4-(SDQ) level, followed by a complete, 12-mode variational soln. of the vibrational Schrodinger equation using a configuration-interaction (CI) expansion from a large, well-selected harmonic oscillator basis. The geometric parameters of $C_3F_3^+$ (D_{3h}) were optimized as 1.379 Å for the CC bond lengths and 1.261 Å for the CF distances. Localized orbitals show strong π -bond character for the CF linkages, conjugated with the ring π orbital. The fundamental vibrational frequencies of $C_3F_3^+$ are (in cm⁻¹): 1999.5, 742.8 (a₁); 767.3 (a₂); 1596.9, 998.9, 271.3 (e'); 250.0 (a₂); and 664.1 (e''). These frequencies agree with condensed phase measurements of Raman and IR spectra with a ± 11.5 cm⁻¹ av. deviation, the largest difference appearing for the CF bending and wagging frequencies. The 1st vibrational overtone frequencies of $C_3F_3^+$ are also predicted. This completely ab initio calcn. of anharmonic frequencies also leads to detailed bond characterization and full information on all intermode interactions.

импульса,
сум. роет, Vi,
теор. расет

C.A. 1989, 111, N12

CF_6^{2-}

(OM. 33528)

1990

молекула.
структ.,
спектр.,
ab initio
расчет

Ewig C. S., Van Wazer
J. R.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1990, 112, N1, 109-
-114.

$C_{60}F$
 $C_{60}F^+$

Chang Agnes H.-H., 1991
Emler W. C. et al.,

расчёт
спектров.

J. Chem. Phys. 1991,
94 (7), 5004-10



(all. $C_{60}O$; III)

C₇F₁₄

1991

Mock R.S., Grimsrud

E.P.

Chem. Phys. Lett.

1991, 184 (1-3),

99-101.

Ac, снелмр
фотоселърв.

( SF₆ ; III)

1991

$C_{60}F_{60}$ Scuseria, Gustavo E.,

емрык-
мүра,
мүср.
релерем.

Chem. Phys. Lett. 1991,
176 (5), 423-7.

(C₆₀ ● C_{60} ; III)

$C_{60} F_n$

$n = 2, 36, 60$

теор. расчёт
свойств,
свойств.

1992

Bakowies Dirk,

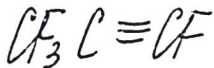
Thiel Piter.

Chem. Phys. Lett.

1992; 192(2-3), 236-

242.

(сер. $C_{60} H_n$; III)



1992

117: 16244c Microwave spectrum, structure, dipole moment and excited vibrational states of 1,3,3,3-tetrafluoropropyne, $\text{CF}_3\text{C} \equiv \text{CF}$. Cox, A. Peter; Ellis, Mark C.; Summers, Terence D.; Sheridan, John (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1992, 88(S), 1079-85 (Eng). The microwave spectra of 4 isotopic species of $\text{CF}_3\text{C} \equiv \text{CF}$ were investigated in the frequency range 9-41 GHz. The zero-point av. structure of the carbon skeleton was unambiguously detd., and with one assumption the av. parameters of the fluorine atoms calcd. as: $r(\text{C} \equiv \text{C}) = 1.202(2)$ Å, $r(\text{C}-\text{C}) = 1.457(3)$ Å, $r(\text{C}-\text{F}) = 1.339(2)$ Å, $\angle \text{FCF} = 108.02(20)^\circ$, and $r(\text{C}-\text{F})_{\text{sym}} = 1.274(4)$ Å. From Stark-effect measurements the ground-state dipole moment was detd. to be 1.699(4) D (1 D = 3.33564×10^{-30} C m). Two vibrational satellite series arising from the degenerate bending motions ν_{10} , is detd. to have a wavenumber of 111(8) cm^{-1} from the l -type doubling const. $q_{10} = 1.215(2)$ MHz, in good agreement with relative intensity measurements. The l -type resonance in the $\nu_{10} = 1$ state was analyzed. For $\nu_9 = 1$ l -type doubling was measured giving $q_9 = 0.550(8)$ MHz.

уб creep,
спукепн-
параметр

C.A. 1992, 117, N 2

CF_n

n=1-5

1992

11Д173. Исследование структуры соединений CF_n, n=1—5 и их однозарядных анионов в приближении функционала плотности. A density functional investigation on the structure of the CF_n compounds, n=1—5, and their singly charged anions / Gutsev G. L. // Chem. Phys.. — 1992. — 163, № 1. — С. 59—67. — Англ.

The geometrical and electronic structure of the neutral carbon fluorides CF_n, n=1—5, and their singly charged anions are calculated within the framework of a density functional approach. The results of calculations for compounds with n=1—3 are in a good agreement both with the experimental data and results of calculations by the post-HF methods. For the anion CF₄⁻ the stable configurations of the C_{3v} and C_{2v} symmetry are obtained. It is shown that the geometry of the anion ground state differs from that of its neutral precursor CF₄. According to the results of the calculations this anion is quite stable towards dissociation (by ≈30

11.11.

1993, N 11-12

kcal/mol) and is unstable to the loss of an extra electron (by ≈ 0.5 eV). The stationary states of the CF_5 radical (C_{3v} , of the adduct F:CF_4 type) and the anion CF_5^- (D_{3h}) are found. Although the CF_5 radical belongs formally to the superhalogens its adiabatic electron affinity (EA) is relatively small (≈ 3.2 eV) because of the low dissociation limit of the CF_5^- anion.

CF_n

(n = 1-5)

структура

(42) ⊗

X. 1993, N 19

1992

19 Б1102. Исследование структуры соединений CF_n, n=1—5, и соответствующих однозарядных анионов методом функционала плотности. A density functional investigation on the structure of the CF_n compounds, n=1—5, and their singly charged anions /Gutsev G. L. //Chem. Phys. —1992. —163, № 1. —С. 59—67. —Англ.

Методами функционала электронной плотности рассчитаны равновесные геометрич. параметры и энергии соедин. CF_n (n=1—5) и соотв-щих анионов. Рассмотрены варианты метода функционала плотности, учитывающие поправки на нелокальные вклады плотности, а также уточненные обменно-корреляц. вклады. Оптимизация геометрии выполнена в приближении Хартри—Фока—Слейтера. Результаты для систем с n=1—3 хорошо согласуются с известными данными неэмпирич. расчетов и эксперим. данными. Анион CF₄⁻ устойчив по отношению к диссоциации на фрагменты, однако характеризуется отриц. энергией ионизации (соотв. сродство к электрону CF₄ равно -0,49 эВ). Радикал CF₅ и анион CF₅⁻ характеризуются энергиями связи по отношению к диссоциации C—F, близкими к нулю. Сродство к электрону CF₅ оценено в 3,24 эВ. Библ. 52. А. В. Немухин

CF_n

n=1-5

1992

суперхлор,
суперфторист,
непр. анион

117: 56328q A density functional investigation on the structure of the carbon fluoride CF_n compounds, n = 1-5, and their singly charged anions. Gutsev, G. L. (Inst. Chem. Phys., Chernogolovka, Russia 142432). *Chem. Phys.* 1992, 163(1), 59-67 (Eng). The geometrical and electronic structure of CF_n, n = 1-5, and their singly charged anions are calcd. within the framework of a density functional approach. The results for n = 1-3 are in a good agreement both with the exptl. data and results of calcns. by post-HF methods. For the anion CF₄⁻ stable configurations of C_{3v} and C_{2v} symmetry are obtained. The geometry of the anion in its ground state differs from that of CF₄. This anion is quite stable towards disocn. (by ≈ 30 kcal/mol) and is unstable in respect to the loss of an extra electron (by ≈ 0.5 eV). The stationary states of the CF₅ radical (C_{3v}, of the adduct of F:CF₄ type) and the anion CF₅⁻ (D_{3h}) are found. Although the CF₅ radical belongs formally to the superhalogens its adiabatic electron affinity (EA) is relatively small (≈ 3.2 eV) because of the low disocn. limit of the CF₅⁻ anion.



C. A. 1992, 117, N6

CF_6^n

$n=0, -1, -2$

М.П.

42

1992

15 Б1066. Структура и свойства октаэдров AX_6^n ($A=Si$, $X=F, Cl$; $n=0, -1$ и -2) /Гуцев Г. Л. //Ж. физ. химии. —1992. —66, № 8. —С. 2112—2117. —Рус.

Электронная и геометрич. структура октаэдрич. кластеров CF_6^n , SiF_6^n , CCl_6^n и $SiCl_6^n$ ($n=0, -1$ и -2) рассчитана методом функционала локальной плотности (ФЛП). Показано, что согласно результатам расчетов, все нейтр. и дважды заряженные кластеры нестабильны по отношению к диссоциации, так же как и однозарядные анионы CF_6^- и CCl_6^- . Установлено, что однозарядный анион SiF_6^- является достаточно стабильным образованием с энергией диссоциации в $\sim 0,9$ эВ (20 ккал/моль), энергия диссоциации аниона $SiCl_6^-$ находится вблизи порогового значения. Сделан вывод, что различия в энергиях стабилизации октаэдров CX_6 и SiX_6 могут быть связаны с отсутствием солей, содержащих двухзарядные анионы CX_6^{2-} . На основании стабильности аниона SiF_6^- предположена возможность синтеза солей, содержащих двухзарядные анионы SF_6^{2-} .

X. 1993, N 15

CF_n^-

$$n = 1 \div 5$$

DM 368701

1992

119: 103724u Theoretical study of the structures of fluorocarbon anions CF_n^- ($n = 1-5$). Gutsev, G. L. (Inst. Khim. Fiz., Chernogolovka, Russia). Zh. Fiz. Khim. 1992, 66(10), 2678-87 (Russ). The electronic structure and geometry were studied of the title mol. and anions by the local d.-functional method. The stationary states C_n and C_n^- were detd. for CF_4^- ; it is stable in respect to dissociation ($D_0 \sim 5$ kcal/mol) and unstable in respect to the outer electron removal. The stationary states were found of the radical CF_n ($F.CF_4$, adduct type) and of the ion CF_n^- (D_{2h}). The adiabatic electron affinity of CF_n is small (~ 3.2 eV) due to the small dissociation energy of CF_n^- .

спрухмпа,
жесуе
свеп, меор.
расем.

C. A. 1993, 119, 1410

CF_n
(n = 1 ÷ 5).

От 36870

1992

> 3 Д95. Теоретическое исследование структуры анионов CF_n⁻ (n = 1 ÷ 5) / Гуцев Г. Л. // Ж. физ. химии. — 1992. — 66, № 10. — С. 2678—2687. — Рус.

Электронная и геометрическая структура нейтральных фторидов углерода CF_n (n = 1 ÷ 5) и их однократно заряженных анионов рассчитана методом функционала локальной плотности. Получено хорошее согласие результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными и результатами вычислений неэмпирическими методами с учетом электронной корреляции для соединений с n = 1 ÷ 3. Для аниона CF₄⁻ определены стационарные состояния симметрии C_{2v} и C_{3v}. Показано, что этот анион стабилен по отношению к диссоциации (D₀ ~ 30 ккал/моль) и нестабилен по отношению к отрыву внешнего электрона.

структура,
теоретический
расчет

Фр. 1993, № 3

$C_3 F_2$

1992

Jonas V., Bohme M.,
et al.

ser. n.

J. Phys. Chem. 1992,
96, N 4. C. 1640-1648.

(cell.  $C_3 H_2$; III)

$(A_6)^{2-}$

[Om. 36920]

1992

Singh P., Dublish A.K.,

Indian J. Pure and Appl.

Phys. 1992, 30, N 5, 235-236.

Extended L -matrix approxi-
mation applied to octahedral

ions CF_6^{2-} , NF_6^- and SeF_6^{3-} .

Фторбензол

1993

J 121: 68314c Calculation of the vibrational frequencies for fluorobenzene using the semi-empirical MNDO/PM3 method. Cebe, Emine (Fac. Sci. and Lett., Uludag Univ., Bursa, Turk.). Doga: Turk. J. Phys. 1993, 17(11), 856-67 (Eng). The electronic ground state geometry and vibrational frequencies of PhF were calcd. by MNDO/PM3 semiempirical MO method. The PM3 frequencies were scaled by empirical factors transferred from some arom. hydrocarbons. The unscaled results were used to calc. the ideal gas state thermodyn. functions for 200-400 K. The IR band intensities were reported. Comparisons were made with available exptl. and other theor. results. The PM3 model gives results in fairly good agreement with expts.

Vi, структура,
термод. ф-цы

(all. примечан)

С. А. 1994, 121, №6.

1994

122: 115498y Determination of the electron affinities of fluorinated fullerenes ($C_{60}F_{44,46}$, $C_{70}F_{52,54}$) by Fourier transform mass spectrometry. Hettich, Robert; Jin, Changming; Compton, Robert (Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37831-6120 USA). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1994, 138, 263-74. (Eng). Neg.-ion, charge-exchange reactions in a Fourier transform mass spectrometer were used to "bracket" the electron affinities of the fluorinated fullerenes $C_{60}F_x$ ($x = 44, 46$) and $C_{70}F_y$ ($y = 52, 54$). By monitoring the occurrence of charge-exchange reactions between neg. ions and gas-phase neutrals of fluorinated fullerenes and a variety of reagents, the electron affinities were detd. to be $EA(C_{60}F_{44,46}) = 4.06 \pm 0.25$ eV and $EA(C_{70}F_{52,54}) = 4.06 \pm 0.25$ eV. These results indicate that fluorination at this level increases the electron affinities of these fullerene derivs. by almost 1.5 eV. It was also detd. that the electron affinity of $C_{70}F_y$ ($y = 52, 54$) is slightly greater than that for $C_{60}F_x$ ($x = 44, 46$), which may be related to the higher no. of substituted fluorines and/or the fact that the $EA(C_{70})$ is also known to be greater than $EA(C_{60})$.

$C_{60}F_{44}$
 $C_{60}F_{46}$
 $C_{70}F_{52}$
 $C_{70}F_{54}$

(Ac)
 Pyro2 MacC
 Czekanp.

C.A. 1995, 122, N10

C₃F₄.

1996

16 Б174. Перфторциклопропен. Экспериментальное и теоретическое исследование его структуры в газовой и кристаллической фазах и в растворе. Perfluorocyclopropane: Experimental and theoretical studies of its structure in gaseous, solution, and crystalline phases / Abdo Basil T., Alberts Ian L., Atfield Christopher J., Banks R. Eric, Blake Alexander J., Brain Paul T., Cox A. Peter, Putham Colin R., Rankin David W. H., Robertson Heather E., Murtagh Vincent, Heppeler Axel, Morrison Carole // J. Amer. Chem. Soc. — 1996. — 118, № 1. — С. 209—216. — Англ. Место хранения ГПНТБ

структура

При 156К определена с помощью рентгенографии структура C₃F₄. Полученные результаты уточнены на основании данных электронографии, микроволновой спектроскопии и ЯМР ¹⁹F. Значения длин связей C—C, C=C, C(F₂)—F и C—F равны 1,453(3), 1,296(4), 1,370(2), 1,361(4) Å, углы C=C—F, F—C—F, C=C—C, 150, 4(9), 104,1(2), 63,5°(1). Полученные результаты очень хорошо согласу-

М

Х. 1996, N. 16

ются с данными расчетов неэмпирич. методом ССП в
трехэкспонентном базисе с включением поляризац.
ф-ций и учетом электронной корреляции в рамках МП2.
По данным эффекта Штарка дипольный момент оценен
в $1,313(4)D$. Библ. 47. Н. Л.

C₃F₄

[Dm. 38253]

1996

Basil T. Abdo, Ian L. Al-
berts et al.,

Am. Chem. Soc., 1996, 118,
209-216

Perfluorocyclopentene: Experi-
mental and Theoretical

Studies of Its Structure in
Faseous, solution, and
Crystalline Phases.

C28 F4

спуки, до,
д-т, ви
мел.
панет

1996
Sun K.-C.; Chen, C.,
Huaxue 1996, 54(3),
1-9.

(all. C28 H4 i. III)

1997

C₆₀ F₂
C₇₀ F₂

(2) (C-F), Ae)

126: 177356s Thermochemistry of the Gas Phase Reactions of Fluorofullerene Anions. Boltalina, Olga V.; Ponomarev, Dmitry B.; Borschevskii, Andrey Ya.; Sidorov, Lev N. (Chemistry Department, Moscow State University, Moscow, Russia 119899). *J. Phys. Chem. A* 1997, 101(14), 2574-2577 (Eng), American Chemical Society. The ion-mol. equil. method has been applied to studies of the gas phase fluorine exchange reactions between fullerene anions and metal fluoride anions. This has yielded the first quant. detn. of the abs. values of Gibbs energies for addn. of fluorine to the anions of higher fullerenes C_{70+2n}^- ($n = 0, 1, \dots, 7$) and sequential fluorine addn. in the series $C_{60}F_n^-$ ($n = 0, 1, 2$). Ests. for C-F bond dissocn. energies of $C_{60}F_2$ and $C_{70}F_2$ and electron affinities of monofluorinated [60]- and [70]fullerenes in the gas phase are reported.

C. A. 1997, 126, N 13

F: C₄F₄

P: 3

21B1287. Некопланарность тетрафтороциклобутadiens. Nonplanarity of tetrafluorocyclobutadiene / Petersson E. J., Fanuele J. C., Nimlos M. R., Lemal D. M., Ellison G. B., Radziszewski J. G. // J. Amer. Chem. Soc. - 1997. - 119, 45. - С. 11122-11123. - Англ.

Место хранения ГПНТБ России C[4]F[4] образуется под влиянием облучения на длине волны 248 нм из ангидрида тетрафтороциклобутен-3,4-дикарбоновой к-ты. В области 180-1300 см⁻¹ измерены частоты и интенсивности в его ИК спектре. Интерпретация достигнута на основании расчета по методу трехпараметрич. обменно-корреляционного функционала Бекке-Ли-Янга-Парра с поляризованными дубль-зета функциями. Анализ правил отбора в спектре и данные расчета указывают на неплоское строение C[4]F[4]. —

1997

ИМХ 1998, №1

CF_n

(Om. 38976)

1997

n=1-6

Rollin A. King, et al.,

J. Chem. Phys., 1997, 107(20),

Ac;

8536 - 8544.

Гморуге С

1998

Gillespie, R. F.; et al.,

(Se, 4) Adv. Nat. Struct.
Res. 1998, 4, 1-41

(cell. Гморуге Be; III)

1998

$C_{28}H_4$

$X = F, Cl, Br, I, Li, Li-Hwa;$

Sun, Kuang-Chung;

et al.,

nucl.
param

Int. J. Quantum
Chem. 1998, 67(3)

187-197

(all $C_{28}H_4$; III)

$C_{40}X_4$

1998

$X = F, Cl, Br, I$

Lu, Li-Hwa; et al.,

суперперенос,
непрерывно.
расчет

Int. J. Quantum Chem.
1998, 68 (4), 273-284

(Calc. $C_{40}H_4$; III)

1998

128: 80159h Electronic Structures and Chemical Bonding of Fluorinated Fullerenes Studied by NEXAFS, UPS, and Vacuum-UV Absorption Spectroscopies. Mitsumoto, Ryuichi; Araki, Tohru; Ito, Eisuke; Ouchi, Yukio; Seki, Kazuhiko; Kikuchi, Koichi; Achiba, Yohji; Kurosaki, Hiroshi; Sonoda, Takaaki; Kobayashi, Hiroshi; Boltalina, Olga V.; Pavlovich, Valeria K.; Sidorov, Lev N.; Hattori, Yoshiyuki; Liu, Ning; Yajima, Sumitoshi; Kawasaki, Shinji; Okino, Fujio; Touhara, Hidekazu (Department of Chemistry Faculty of Science, Nagoya University, Nagoya, Japan 464-01). *J. Phys. Chem. A* 1998, 102(3), 552-560 (Eng), American Chemical Society. The chem. bonding and the electronic structures of $C_{60}F_x$ and $C_{70}F_x$ were investigated by near edge X-ray absorption fine structure (NEXAFS) spectroscopy and UV photoemission spectroscopy (UPS), which are useful methods for examg. the unoccupied and the occupied states, resp. With these results and XPS measurements, the authors derived the electronic energy diagram of $C_{60}F_x$ and discussed the change of the electronic structure from that of C_{60} by fluorination. The energies of the LUMO and the Fermi level of solid $C_{60}F_{48}$ were estd. to be -5.0 and -5.4 eV below the vacuum level, indicating that highly doped $C_{60}F_x$ is a strong electron acceptor. The electronic absorption spectra of $C_{60}F_x$ solns. deep into the vacuum-UV region were also measured, and the isomerism of $C_{60}F_x$ was discussed by comparing the obsd. results with theor. simulations.

C.A. 1998, 128, N7

2000

F: CnFm+

P: 3

132:339932 Heats of Formation for CnFm, CnFm+, CHFm,
and CHFm+. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Ricca,
Alessandra NASA Ames Research Center Moffett

Field, CA 94035, USA J. Phys. Chem. A, 104(19), 4581-
4585 (English) 2000 Heats of formation for CnFm,
CnFm+, CHFm, and CHFm+ compds. are computed at the G3MP2
level. Calibration calcns. are presented for C2F2, C2F,
CHF, and CHF2. The results of these calibration
calcns., in conjunc with the results of previous high-
level calcns., show that the G3MP2 appr is accurate to
.+- .2 kcal/mol for these systems. The trends in bond
ener are discussed.

C-A. 2000, 132

2000

F: CnFm

P: 3

132:339932

and CHFm+.

Alessandra

Field, CA 94035, USA

4585 (English) 2000

Heats of Formation for CnFm, CnFm+, CHFm,
Bauschlicher, Charles W., Jr.; Ricca,

NASA Ames Research Center Moffett

J. Phys. Chem. A, 104(19), 4581-

Heats of formation for CnFm, CnFm+, CHFm, and CHFm+ compds. are computed at the G3MP2 level. Calibration calcns. are presented for C2F2, C2F, CHF, and CHF2. The results of these calibration calcns., in conjunc with the results of previous high-level calcns., show that the G3MP2 appr is accurate to ± 0.2 kcal/mol for these systems. The trends in bond ener are discussed.

C.A. 2000, 132

F: C-F

P: 3

2000

132:122171 Computationally (X=) Efficient
Methodology to Calculate C-H and C-X (F, Cl, and Br)
Bond Dissociation Energies in Haloalkanes.

McGivern, W. Se Derecskei-Kovacs, Agnes;
North, Simon W.; Francisco, Joseph S. Chemistry
Department, Texas A&M University College

Station, TX 77842, USA J. Phys. Chem. A,
104(2), 436-442 (English) 2000 A

computationally efficient method for calcg. C-H and
C-X (X = F, Cl, an Br) bond dissocn. energies in
haloalkanes was developed by detg. correcti factors to
MP2/cc-pVtz energies. Corrections for basis set effects
were by the difference in bond dissocn. energies calcd.
at the MP2/cc-pVtz and MP2/cc-pV5z levels, and
correlation effects were cor. by calcg. the diffe in
energies at the MP2/cc-pVtz and CCSD(T)/cc-pVtz levels.

C.A. 2000, 132

Subsequent corrections for the spin-orbit energy of the at. fragment and zero-point were applied to give a final bond dissocn. energy. The correction factor detd. using CH_4 , MeF , MeCl , and MeBr and yield bond dissocn. energies in excellent agreement with exptl. results. This correction may also be bro applied to multihalogen compds., as shown in calcns. of the C-H and C-X b dissocn. energies of CH_2X_2 and CHX_3 ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{and Br}$) compds., which accurately reproduce exptl. values.