

C3 FH7

1962

 C_3H_3F Nitrota E.МВ спектры J. Chem. Phys., 1962, 37, 283Спектры вращательного момента и МВ
погр. спектроскопии. I. МВ спектры изо-
меризма метилового гидридного промиса

A B C

trans C_3H_3F 26986,73 3747,32 3509,88gauche C_3H_3F 14503,69 5085,71 4295,28

(Mc/sec)

1969

 C_3H_7F V_0

(6388r) Barriers to internal rotation in asymmetric molecules: 3-fluoropropene. Meakin, Paul; Harris, David Owen; Hirota, Eizi (Univ. of California, Santa Barbara, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(9), 3775-88 (Eng). The potential function hindering internal rotation in 3-fluoropropene has been detd. by using microwave and far-ir spectroscopic data. It is given by the 6 potential consts. in cm^{-1} (cal/mole): $V_1 = -247 \pm 30$ (-707), $V_2 = 185 \pm 25$ (530), $V_3 = 857 \pm 15$ (2449), $V_4 = 188 \pm 25$ (538), $V_5 = 7 \pm 5$ (20), $V_6 = -93 \pm 10$ (-265). From these the cis-gauche and gauche-trans-gauche barrier heights were detd. to be $1090 \pm 75 - 25 \text{ cm}^{-1}$ and $520 \pm 40 \text{ cm}^{-1}$, resp. The spectra were interpreted by using a 1-dimensional model in which the only internal motion is the rotation about the bond connecting the top ($-\text{CH}_2\text{F}$) to the frame ($\text{H}_2\text{C}:\text{CH}-$); the various parameters in the Hamiltonian which was derived by using the theory of internal rotation in asymmetric mols. developed

C.A. 1970, 72.2

by Quade and Lin were detd. numerically and expressed as Fourier expansions in the internal coordinate α . In addn., the general theory was rederived and extended to include the case where neither the top nor the frame has a plane of symmetry. The large torsion-rotation interaction terms were reduced numerically by means of a Van Vleck transformation. The angle dependence of the reduced moment of inertia for the torsion was removed by a nonlinear coordinate transformation which yields a new Hamiltonian giving the same energy spectrum as the old but having a const. kinetic energy and a modified potential function. Finally, the potential is compared with that which was calcd. from the electrostatic model of Lowe and Parr. RCJQ

40108.7309
Ph, Ch, TE

C_3H_7F

96201

1973

1569

Tuazon E.C., Manocha A.S., Fateley W.G.

On the evaluation of threefold
potential functions from far-infrared
data.

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 23, N 1, 63-68

(англ.) 0018 смк

1019 1020 - 0 1 1

ВИНИТИ

41115.7834
Ex-C, Ch, Ph

96615

(C₃H₇F)⁰²

1974

2759

Crowder G.A., Koger T.

Vibrational assignment for 2-fluoropropane

"J. Mol. Struct.", 1974, 23, N 2,
311-313

(англ.) 234 ДИК

212 2140 226

ВИНИТИ

40801.4524

29864

02

1974

Ph, Ch, TC

 C_3H_7F (сметр)
4.4

2290

Griffiths John H., Owen Noel L.,

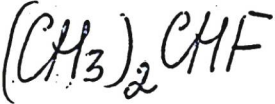
Sheridan John. Rotational and vibrational spectra of 2-fluoropropane. "J. Chem. Soc. Faraday. Trans.", 1973, 69, N 9, Part 2, 1359-1369 (англ.)

0165 см⁻¹

133 139

1-5-74 68

ВИНИТИ



1982

16 Б194. Связь внутренних вращений в молекулах типа пропана. Wesenberg G., Weinhold F. Coupling of internal rotations in propanelike molecules. «Int. J. Quantum Chem.», 1982, 21, № 2, 487—509 (англ.)

Модифицированный метод ССП—МО в приближении ЧПДП применен для исследования природы взаимодействия ротаторов в молекулах типа пропана. Выявлены три доминирующих вклада в связь ротаторов в пропане: (i) вицинальные связь—антисвязь взаимодействия между метиленовой и метильными группами; (ii) невицинальные связь—антисвязь взаимодействия между метильными ротаторами, (iii) геминальные взаимодействия между орбиталями связи и антисвязи. Найдено, что все три типа взаимодействий дают вклад в барьер связи внутренних вращений в пропане, однако главным является второй вклад. Исследованы также др. молекулы, содержащие связанные метильные ротаторы, включая $(CH_3)_2CHF$, $(CH_3)_2NH$, $(CH_3)_2O$,

расчет ψ_0 X
(+5)

X. 1982, 19, N 16.

$(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{CH}_3$, $(\text{CH}_3)_2\text{C}=\text{O}$, $\text{C}(\text{CH}_3)_4$. Во всех слу-
чаях выводы, полученные для пропана, подтверждены.
В. М. Михайлов

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHF}$ | Om. 24827 |

1986

Kasten W., Dreizler H.,

не снесены
остатки
состоят, A41, N 7, 944-954.
встреч.
фрагмент.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$

1986

2) 1 J175. Определение высокого потенциального барьера, затормаживающего внутреннее вращение, по микроволновому спектру основного состояния. Барьер метильной группы антипериплоской и синклинической форм нормального пропилфторида. Determination of a high potential barrier hindering internal rotation from the microwave ground state spectrum. The methylbarrier of antiperiplanar and synclinal normal propyl fluoride. Kasten W., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1986, A41, № 7, 944—954 (англ.)

Vsp.

На МВ-фурье-спектрометре в сочетании со сверхзвуковой молекулярной струей в диапазоне 8—26 ГГц исследован МВ-спектр молекулы $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 25$ син- и антиформ в основном колебательном состоянии и син-формы в 1-м возбужденном состоянии торсион-

ср. 1987, 18, N1

ного колебания метильной группы, а также туннельное А-Е-расщепление линий, обусловленное внутренним заторможенным вращением метильной группы. Определены значения вращательных постоянных, постоянных квартичного и секстетичного центробежного искажения и барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3^{(0)} = 2710$ (анти) и 2758 (син) кал/моль).

М. Р. Алиев

Om. 31735

1988

$C_3H_6 \cdot HF$

Dayton D.C., Moller R.E.,

UK examp,
Di

Chem. Phys. Lett.
1988, 153, NY, 285-290

$(\text{CH}_3)_2\text{CHF}$

1958

16 Б1240. Микроволновый спектр основного состояния 2-фторпропана. The ground state microwave spectrum of 2-fluoropropane. Meyer M., Dreizler H. «Z. Naturforsch.», 1988, A43, № 2, 138—142 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с волноводной ячейкой в обл. частот 5—36 ГГц с разрешением около 13 кГц измерен вращат. спектр 2-фторпропана, $(\text{CH}_3)_2\text{CHF}$ (I), в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектра выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения и внутреннего вращения метильной группы. Вращат. постоянные I равны в МГц $A=8693,8573(6)$, $B=8102,5969(6)$, $C=4788,8526(6)$. По эффекту Штарка определено более точное значение дипольного момента $\mu=1,958(1)D$. Из анализа МВ-данных определен барьер внутреннего вращения $V_3=3,285(27)$ ккал/моль и момент инерции метильных групп.

С. Н. Мурзин

М.П.

Х. 1988, 19, N 16.

C₃H₇F

1989

7 16 Б1023. Неэмпирическое исследование 1-фторпропана методом молекулярных орбиталей. *Ab initio molecular orbital studies on 1-fluoropropane* / Kunttu H., Raaska T., Räsänen M. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1989.— 184, № 3—4.— С. 277—288.— Англ.

Неэмпирическим методом в базисе 4-31 ГФ с оптимизацией исследовано внутр. вращение и геометрия транс- и гаш-изомеров 1-фторпропана. Энергия минимумов и седловых точек пересчитывалась в базисах 6-31 ГФ** (с оптимизацией), МП2/4-31 ГФ и МП2/6-31 ГФ**. Сравнение 6-31 ГФ** структуры изомеров с эксперим. данными (М. Hayashi, М. Fujitake // J. Mol. Struct.— 1986.— 146.— С. 9) показало совпадение длин связей с точностью не хуже 0,0018 нм для СС и СН связей (0,0029 нм для связи CF), вал. углов — не хуже 1°. В любом случае гаш-изомер более стабилен с разностью энергий 1,87 кДж/моль (МП2/6-31 ГФ** с учетом энергии нулевых колебаний) при

М-1.

Х. 1989, № 16

эксперим. величине $1,97 \pm 1,3$ кДж/моль (Е. Hirota // J. Chem. Phys.— 1962.— 37.— С. 283). Величина гош-транс барьера равна 19,2 кДж/моль при эксперим. величине 19,5 кДж/моль. Отнесение колебат. частот (М. Räsänen, V. E. Bondybey // J. Phys. Chem.— 1986.— 90.— С. 5038) указывает, что частоты, относящиеся к вращению CH_3 -группы транс-изомера, лежат выше, чем в гош-изомере. В. А. Болотин



C_3H_7F

1990

113: 220410a Microwave and far infrared spectra, r_0 structure, barriers to internal rotation, and ab initio calculations for 2-fluoropropane. Guirgis, G. A.; Nanaie, H.; Durig, J. R. (Dep. Chem., Univ. South Carolina, Columbia, SC 29208 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(6), 3837-43 (Eng). The microwave spectra of 5 isotopic species of 2-fluoropropane, $(CH_3)CH_2DCFH$, $(CH_3)_2CFD$, $(CH_3)CD_2CFH$, $(CD_3)_2CFD$, and $(CH_3)_2^{13}CFH$, were recorded from 12.4 to 39.7 GHz. The b - and c -type R -branch transitions were obsd. and assigned for the ground state. Utilizing the rotational consts. for these 5 isotopic species along with those reported earlier for the normal species the following r_0 structural parameters were detd.: $r(C-C) = 1.522 \pm 0.007$ Å, $r(C-F) = 1.393 \pm 0.013$ Å, $\angle CCC = 113.37 \pm 0.79^\circ$, and $\angle CCF = 108.19 \pm 0.41^\circ$. All of the carbon-hydrogen,

UK-chem,
chemphys

(1) $C_3H_4D_3F$

C.A. 1990, 113, N 24

parameters were also detd. from the rotational consts. except for the $r(C-H_{sec})$ which was obtained from its frequency in the IR spectrum. The far IR spectra of 2-fluoropropane- $-d_0$, $-d_3$ and $-d_7$ in the gas phase were recorded with a resolu. of 0.10 cm^{-1} . Both torsional fundamentals along with several hot transitions were assigned for the 3 isotopic species. The barrier to internal rotation of the Me rotors was detd. with the 2-coupled rotor model to be $1149 \pm 69\text{ cm}^{-1}$ ($3.29 \pm 0.12\text{ kcal/mol}$). Both potential coupling terms, V_{33} and V'_{33} , were detd. for the $-d_0$, $-d_3$ and $-d_7$ isotopic species. The complete equil. geometry was detd. from ab initio Hartree-Fock gradient calens. employing both the 3-21G and 6-31G* basis sets. These results are compared to the corresponding quantities for some similar mols.