

$C_2Cl_3F_3$

1953

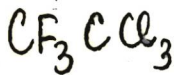
C₂F₃Cl₃

Nielsen G. R. Liang C. Y.,
Smith R. M.

Smith D. C. J. Ch. Phys.

21, 383

Снекмп и.к. и цемент
C₂F₃Cl₃.



Catalano R.,
Pitzer K.S.

1958

J. Phys. Chem., 62, 838.

Данные ИК - спектра

(см. CF_3CH_3)

$CF_2Cl-CFCl_2$

смел.

1961

6 B148. Спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния фторированных этанов. Ч. XV. 1,1,2-трифтор-1,2,2-трихлорэтан. K l a b o e P e t e r, N i e l s e n J. R u d. Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes. Part XV. 1,1,2-trifluoro-1,2,2-trichloroethane. «J. Molec. Spectrosc.», 1961, 6, № 4, 379—393 (англ.)

С целью изучения вращательной изомерии фторированных этанов исследованы спектры ИК-поглощения в области $300-4000\text{ см}^{-1}$ паров $CF_2Cl-CFCl_2$ (I) в интервале т-р $30-110^\circ\text{C}$, твердого I при т-ре -170°C и растворов I в CCl_4 и CS_2 . Исследованы также спектры комб. рас. жидкого I при т-рах 30 и -40°C . Установлено, что во всех агрегатных состояниях в-во представляет собой равновесную смесь трех изомеров: *транс*-форма (симметрия C_s) и две энантоморфные изогнутые формы; последние образуются из *транс*-формы поворотом одной из конечных групп на угол $\sim 120^\circ$. Эти формы не обладают симметрией. Определена стандартная разность энтальпии ΔH° для изомеров в газообразном состоянии: $350 \pm 150\text{ кал/моль}$. Библ. 22 назв. Ч. XIV см. РЖФиз, 1962, 5B161. В. Пивоваров

РЖФиз 1962

6B148

В90-4813-IV

1961

Prepared
Jan

Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes.
XV. 1,1,2-Trifluoro-1,2,2-trichloroethane. Peter Klaboc
and J. Rud Nielsen (Univ. of Oklahoma, Norman). *J.*
Mol. Spectroscopy 6, 379-93(1961); cf. *CA* 54, 16146f.—
New infrared and Raman spectral data are given for the
compd. $\text{CF}_2\text{Cl}-\text{CFCl}_2$. Infrared spectra were obtained with
a Perkin-Elmer double-pass spectrometer equipped with
LiF, NaCl, and CsBr prisms at 3 different temps. between
30 and 110°, and are illustrated in the regions between 300
and 4000 cm^{-1} . Tentative fundamental vibrational fre-
quency assignments are given, and the spectra are inter-
preted in detail. It appeared that the compd. existed as a
mixt. of rotational isomers in all stages of aggregation.
The enthalpy difference was detd. as 350 ± 150 cal./mole.

Robert A. Bleidt

Prep-4813-1V

C.A. 1961. 55:20
19479 cd

$\text{CF}_2\text{ClCFCl}_2$

Higgins E.R.,

1965

Lielmeys J.

To 1st

J. Chem. and Engng

Data, 1965, 10, ~2, 178.

Bp - M 326 - IV

$(\text{C}_2\text{F}_3\text{Cl}_3)_{\text{II}}$

CF_3CCl_3

XIV-9298

1968

2 Д479. Микроволновый спектр, структура и внутреннее вращение 2,2,2-трифтор-1,1,1-трихлорэтан: Hofm R., Mitzlaff M., Hartmann H. Mikrowellenspektrum, Struktur und interne Rotation von 2,2,2-Trifluor-1,1,1-trichloräthan. «Z. Naturforsch.», 1968, 23 а, № 7, 1040—1042 (нем.; рез. англ.)

В области 15—40 Гц исследован микроволн. спектр молекулы CF_3CCl_3 . Анализ вращательных постоянных, рассчитанных методом наименьших квадратов, дал следующие структурные параметры: $d_{\text{C}-\text{C}} = (1,5394 \pm 0,001) \text{ \AA}$, $d_{\text{C}-\text{F}} = (1,330 \pm 0,001) \text{ \AA}$; $\angle \text{C}-\text{C}-\text{F} = (109,55 \pm 0,25)^\circ$, $\angle \text{C}-\text{C}-\text{Cl} = (109,55 \pm 0,25)^\circ$. Указано, что расщепление крутильных сателлитов может быть объяснено теорией Келера и Деннисона.

м.и.;
вращатель-
стр-ра;

ф. 1969. 2Д

CF₃CCl₃

XIV-9298

1968

u.b.

сиректупа

1118640 Microwave spectrum, structure, and internal rotation of 2,2,2-trifluoro-1,1,1-trichloroethane. Holm, R.; Mitzlaff, M.; Hartmann, H. (Univ. Frankfurt/Main, Frankfurt/Main, Ger.). *Z. Naturforsch.*, A 1968, 23(7), 1040-2 (Ger).

The microwave spectrum of CF₃CCl₃ was investigated in the region 15-40 GHz. A least sqs. anal. of the rotational consts. gave the following structural parameters: $d_{C-C} = (1.5394 \pm 0.001)$, $d_{C-F} = (1.330 \pm 0.001)$, $d_{C-Cl} = (1.7710 \pm 0.0009)$ Å, $\angle C-C-F = (109.55 \pm 0.25)^\circ$, $\angle C-C-Cl = (109.55 \pm 0.25)^\circ$.

The splitting of the torsional satellite may be explained by the theory of Koehler and Dennison (1940). RCTT

C.A. 1968. 69. 26

$C_2Cl_3F_3(не)$

4-8292

1974

спектр
комб. рас.

7 Д403. Спектр комбинационного рассеяния 1,1,2-трифтор-1,2,2-трихлорэтана, возбужденный лазером. Krishnaji, Rajendra Kamur Laloraya. Laser-excited Raman spectrum of 1,1,2-trifluoro 1,2,2-trichloroethane. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1974, 12, № 8, 585—588 (англ.)

Получены спектры комб. рас. жидкого 1,1,2-трифтор-1,2,2-трихлорэтана, возбужденные лазерами He—Ar и Ar⁺. Приведены частоты, факторы деполяризации и отнесение наблюдаемых полос к основным колебаниям молекулы в транс- и гаушконформации. Полоса 612 см⁻¹ связана с составным колебанием. В отличие от литературных данных полоса 1206 см⁻¹ отнесена к антисимметричному вал. кол. C—F трансформы, а полоса 1169 см⁻¹ — к вал. кол. C—F типа А гаушформы молекулы. При таком отнесении частоты полос удовлетворяют правилам сумм. Библ. 7. М. В. Тонков

ф 1975 N 7

CF_3CCl_3

спектр

XIV-6118 1974

2 Д384. Спектр комбинационного рассеяния с лазерным возбуждением 1,1,1-трифтор-2,2,2-трихлорэтана. Krishnaji, Laloraya Rajendra Kumar. Laser excited Raman spectrum of 1,1,1-trifluoro-2,2,2-trichloroethane. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 5, 1918—1922 (англ.)

Изучен спектр комб. рас. с лазерным возбуждением ($50-1500\text{ см}^{-1}$) газообразного CF_3CCl_3 . Выполнено отнесение наблюдавшихся полос, в том числе 11 известных фундаментальных колебаний; обнаружено 8 новых полос. Линия 659 см^{-1} ($\rho \approx 0$) отождествлена с фундаментальным деф. кол. A_1 группы CF_3 ; линии 61; 92; 202; 232; 287; 476 и 518 см^{-1} — с обертонами и составными колебательными частотами. По полосе $2\nu_6(A_1)$ при 61 см^{-1} ($\rho \approx 0,43$) частота крутильного колебания молекулы оценена равной $30,5\text{ см}^{-1}$; высота потенц. барьера составляет $1,26\text{ ккал/моль}$. Библ. 12. С. Ф. Б.

Ф. 1975. №2



XIV-6118

1974

(Di; llo)

140596 Laser excited Raman spectrum of 1,1,1-trifluoro-2,2,2-trichloroethane. Krishnaji; Laloraya, Rajendra K. (Phys. Dep., Allahabad Univ., Allahabad, India). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(5), 1918-22 (Eng). Laser excited Raman spectra of F_3CCCl_3 were studied in detail by using laser sources, and new data were obtained. The spectra show 8 new Raman bands. Out of these 8 bands, 1 band at 659 cm^{-1} ($\rho \simeq 0$) was assigned to the CF_3 deformation fundamental vibration of species A_1 . The other bands at 61, 92, 202, 232, 287, 476, and 518 cm^{-1} were interpreted as combinations of the assigned fundamentals. The Raman band at 61 cm^{-1} ($\rho \simeq 0.43$), being interpreted as $2 \times \nu_6 = 61\text{ cm}^{-1}$ (A_1), predicts a value of 30.5 cm^{-1} for the torsional frequency of this mol., which corresponds to a cosine potential barrier of $\sim 1260\text{ cal/mol}$.

C.A. 1974.81 w22

50313.1206

40892

1975

Ex-C, Ph, Ch, TC

$CF_2Cl - CFCl_2$

№ 8287

Doucet J., Sauvageau P., Sandorfy C.

Photoelectron and far-ultraviolet
absorption spectra of chlorofluoro
derivatives of ethane.

Сем. C_2F_5Cl ; III

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N2, 355-359

(англ.)

0317 пик.

302 302

ВИНИТИ

$C_2F_3Cl_3$ ommeu 6306 1978

Mastroianni M. J., et al.

J. Chem. and Eng. Data,

1978, 23 (2) 113-118

Physical and Thermodyn.
properties ● of "1

CCl_3CF_3
(2,2c)

(ommuch 9128) 1980

Bürger H., et al.

и.к., Раман
спектр
геометрия
и

Spectrochim. acta,
1980, A36, 7-15

C₂Cl₃F₃

1987

(lex cncmp)

106: 185228d The conformation and vibrational spectra including matrix isolation of 1,1,2-trichlorotrifluoroethane. Braathen, G. O.; Gatial, A.; Klaboe, P. (Dep. Chem., Univ. Oslo, 0315 Blindern, Norway). *J. Mol. Struct.* 1987, 157(1-3), 73-91 (Eng). The IR spectra of 1,1,2-trichlorotrifluoroethane were obsd. in the vapor phase, in the liq., in soln., at low temps. and at high pressures between 4000 and 50 cm⁻¹. Addnl. IR spectra of the compd. isolated in Ar and N matrixes at ~12 K were recorded in the 1300-200 cm⁻¹ range. Raman spectra of the vapor, neat liq. and solid at various temps. were obtained. When compressed in a diamond anvil cell at ambient temp., the compd. forms a plastic phase at ~15 kbar, contg. the same 2 conformers, C₁ and C₂, as in the vapor and the liq. At a pressure exceeding 125 kbar an anisotropic crystal is formed contg. the C₁ conformer. All the low temp. solid phases studied, appear to be plastic, and both conformers are present. No crystal contg. one conformer was ever achieved at low temp., in spite of numerous attempts with different cooling techniques down to 15 K. Variation of the nozzle temp. of the matrix isolation unit between ambient temp. and 900 K gives rise to different conformer ratios in the matrixes. By comparing band intensities at the various nozzle temps., the enthalpy difference of the two conformers is estd. to be 1.06 ± 0.11 kJ mol⁻¹ with C₁ as the more stable. A tentative assignment of IR and Raman bands to the C₁ and C₂ fundamentals is carried out, supported by a normal coordinate calcn. involving related mols.

C. A. 1987, 106,
N22

CF_3CCl_3

1987

Vetter R., Zülicke L.,
et al.

V_{bp.},

Z. phys. Chem. (DDR),
1987, 268, N 4, 841-843.

cr. n.

( CH_3CF_3 ; III)

CF_3CCl_3

1992

117: 78907e The millimeter-wave spectrum of trichlorotrifluoroethane ($\text{CF}_3\text{C}^{13}\text{Cl}_3$) in its ground and excited vibrational states. Carpenter, J. H.; Fraser, K. A.; Seo, P. J.; Smith, J. G. (Dep. Chem., Univ. Newcastle upon Tyne, Newcastle upon Tyne, UK NE1 7RU). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 154(1), 207-17 (Eng). The millimeter-wave rotational spectrum of $\text{CF}_3\text{C}^{13}\text{Cl}_3$ was recorded. For the ground state, the results are in agreement with previous work; the very small value of D_{JK} results in no measurable k-splitting. The rotational spectra of the torsional states were recorded for $\nu_8 = 1$ to $\nu_8 = 5$. In addn., the rotational spectrum in the lowest doubly degenerate excited state was analyzed to yield values of the l-resonance parameters $q_{\text{t}}^+ = 0.7474(6)$ MHz and $A_{\text{t}}^{\text{t}} = 283.2(2)$ MHz.

MM CARMY,
FRANCOIS ROCH

C. A. 1992, 117, N 8

CF_3Cl_2Cl

1995

(A, B, C, D_J ,
 D_{JK})

MB CCKKMP

122: 117759h The millimeter-wave spectrum of $CF_3C^{35}Cl_2^{37}Cl$ in its ground state and the vibrational force field of trifluorotrichloroethane. Seo, Pil Ja; Carpenter, John H.; Smith, John G. (Department Chemistry, Dongeui University, Pusan, 614-714 S. Korea). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 169(1), 58-65 (Eng). The millimeter-wave rotational spectra of the ground state of the asym.-top species $CF_3C^{35}Cl_2^{37}Cl$ were recorded and assigned for $J'' = 30$ up to $J'' = 55$ and analyzed to yield the following rotational and centrifugal distortion consts.: $A = 1304.712(1.408)$ MHz, $B = 1106.599(24)$ MHz, $C = 1093.877(25)$ MHz, $D_J = 0.05530(4)$ kHz, and $D_{JK} = 0.02417(44)$ kHz. The results were used to examine the force field of trifluorotrichloroethane.

$C_2F_3Cl_3$ (cum. no cm., Vi)

(71) ☒



C.A. 1995, 122, N10

CF₃Cl₂Cl

1995

20Б1293. Микроволновый спектр $\text{CF}_3\text{C}^{35}\text{Cl}_2^{37}\text{Cl}$ в основном состоянии и колебательное силовое поле трифтортрихлорэтана. The millimeter-wave spectrum of $\text{CF}_3\text{C}^{35}\text{Cl}_2^{37}\text{Cl}$ in its ground state and the vibrational force field of trifluorotrichloroethane / Seo Pil Ja, Carpenter John H., Smith John G. // J. Mol. Spectrosc.— 1995.— 169, № 1.— С. 58-65.— Англ.

М.П.

В миллиметровой спектральной области исследован вращат. спектр изотомера трифтортрихлорэтана $\text{CF}_3\text{C}^{35}\text{Cl}_2^{37}\text{Cl}$ (I). Идентифицированы 55 переходов с $J''=30$ до $J''=55$, обработкой которых с использованием гамильтониана Уотсона получен набор молек. постоянных: $A=1304,712(1,048)$, $B=1106,599(24)$, $C=1093,877(25)$ МГц, $D_J=0,05530(4)$ кГц и $D_{JK}=0,02417(44)$ кГц. Полученные молек. постоянные использованы для уточнения эмпирич. гармонич. силового поля I и отнесения колебат. частот.

Г. М. Курамшина

X. 1997, n 230