

$C_2F_4H_2$

1959

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

спектр

и.к.

11-9644-IV
ВФ-4496-IV

Danti A., Wood J. L.,

J. Chem. Phys., 1959, 30, 582.

Данский ик-спектр и анализ
внутренних вращений в
температуре
1,1,1,2-тетрафторэтане

1B167. Инфракрасные спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния фторированных этанов. XII. 1,1,2,2-четырефтористый этан. Klaboe Peter, Nielsen J. Rnd. Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes. XII. 1,1,2,2-tetrafluoroethane, «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 3, 899—907 (англ.).—С целью исследования изомеризма в $\text{CHF}_2\text{—CHF}_2$ (I) исследованы спектры ИК-поглощения газообразного I в области t -р 30—170° С, кристаллич. I при t -ре —170° С и спектры комб. рас. в поляризованном свете жидкого I при t -рах +20, —25 и —80° С. Установлено, что в газообразном и жидком состояниях существуют два вращательных изомера с симметрией C_{2h} и C_2 , причем *транс*-форма (C_2) более стабильна. В кристаллич. состоянии существует только *транс*-форма. Вычислена энтальпия для газа $\Delta h^\circ = 1160 \pm 100$ кал/моль. В жидкости Δh° много меньше. Дано приближенное отнесение основных линий для каждого изомера. Библ. 18 назв. Ч. XI см. РЖФиз, 1960, 4, 9937. В. Пивоваров

 $\text{CHF}_2\text{—}$
 $\text{CHF}_2\text{(I)}$
 $11-4445-1$

Замечу.
Тама

И.К. Мизур.

№ 15 Б107. Инфракрасные спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{J}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$ и $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$. Edgell Walter F., Riethof Thomas R., Ward Charlotte. The infrared and Raman spectra of $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{J}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, and $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$. «J. Molec. Spectrosc.», 1963, 11, № 2, 92—107 (англ.).

Исследованы ИК-спектры поглощения и спектры комб. расс. $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{J}$ (I), $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$ (II) и $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$ (III) в газообразном и жидком состояниях. Полученные данные сопоставлены со спектрами ряда родственных соединений, в том числе с $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Cl}$ (IV), и предложены отнесения для всех основных частот I — III. Частоты колебаний групп CF_3 и CH_2 лежат в одних и тех же областях спектров I — IV; влияние атома X проявляется в общей тенденции смещений частот по мере увеличения массы X. Отмечаются нерегулярности в изменении частот при переходе от F к Cl.

В. Алексанян

1963

П-1597-IV
B99-7651-IV

ж. 1964. 15

10015 - IV

CF_3CH_2F , CF_3CH_2Cl , CF_3CH_2Br , CF_3CH_2I 1964
(C_p , S° , $(F^\circ - H^\circ)/T$, $(H^\circ - H^\circ)/T$, ΔG° в к. кал.)

Ward C. R., Ward C. H.

J. Molec. Spectrosc., 1964, 12, N3, 289-298 (англ.)

Rotational barriers and thermodynamic functions
for CF_3CH_2X molecules.

Есть ф. н.

PH Xum., 1965

76458

10 (9)

4

IV-М-1574

1965

$\text{CF}_3 - \text{CFH}_2$

5 Д333. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния фторированных этанов. Ч. XVIII. 1,1,1,2-тетрафторэтан. Nielsen J. Rud, Halley C. J. Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes. Part XVIII. 1,1,1,2-tetrafluoroethane. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 17, № 2, 341—347 (англ.)

спектр

Получены ИК-спектры поглощения $\text{CF}_3 - \text{CFH}_2$ в газообразном состоянии в области $300 - 6000 \text{ см}^{-1}$ (спектрометр Перкин-Эльмера, модель 112, призмы CsBr, NaCl и LiJ). Также получены спектры комб. рас. жидкого состояния при -70° при помощи спектрометра со стеклянной оптикой (линейная дисперсия 15 Å/мм при 4358 Å). Дано отнесение частот: α' — 2984, 1464, 1427, 1298, 1103, 972, 843, 665, 549, 408, 225 см^{-1} ; α'' — 3013, 1182, 665, 539, 352, 225, 120 см^{-1} .

ф. 1966. 52

CF_3CFH_2

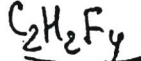
IV-M-1574

1965

✓
37824f Infrared and Raman spectra of fluorinated ethanes.
XVIII. 1,1,1,2-Tetrafluoroethane. J. Rud Nielsen and C. J.
Halley (Univ. of Oklahoma, Norman). *J. Mol. Spectry.* 17(2),
341-7(1965)(Eng); cf. *CA* 59: 2296g. The ir absorption spec-
trum of gaseous CF_3CFH_2 between 300 and 600 cm^{-1} has been
obtained with a Perkin-Elmer model 112 double-pass spectrom-
eter equipped with CsBr, NaCl, and LiF prisms. The Raman
spectrum of the liquid at -70° has been photographed with a
three-prism glass spectrograph of reciprocal linear dispersion 15
A./mm. at 4358A. The vibrational fundamentals are tenta-
tively assigned as follows: Species a' 2984, 1464, 1427, 1298,
1103, 972, 843, 665, 549, 408, and 225 cm^{-1} ; species a'' 3013
1182, 665, 539, 352, 225, and 120 cm^{-1} . RCKP

C. A. 1964. 67. 8

1966



u.k. mwp

Far-infrared spectra and the rotational isomerism of symmetrical tetrachloro- and tetrabromoethane. G. W. Chantry, H. A. Gebbie, P. R. Griffiths, and R. F. Lake (Natl. Phys. Lab., Teddington, Engl.). *Spectrochim. Acta* 22(1), 125-9(1966)(Eng). Far-ir spectra have been recorded of liquid samples of sym. tetrachloro- and tetrabromoethane. These have been used in conjunction with earlier work to derive complete assignments for both rotational isomers of both mols. RCSQ

C.A. 1966. 64.6

7536 ab

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

Bp-XIV-108

1970

94808f Vibrational fundamentals of $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{X}$ molecules. Harnish, D. F.; Hirschmann, R. P. (Spec. Chem. Div., Allied Chem. Corp., Morristown, N.J.). *Appl. Spectrosc.* 1970, 24(1), 28-35 (Eng). The ir spectra of $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Cl}$, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{Br}$, and $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{I}$ in the vapor and solid phase have been obtained, and normal coordinate calcns. on the Cl and Br mols. have been carried out. It has been possible to correct the previous assignments of vibrational fundamentals for these mols.

RCCX

1:

C.A. 1970. 72.18

C₂F₄H₂

1970

ч.б-
спектр

59063d Microwave spectrum of 1,1,2,2-tetrafluoroethane. Mukhtarov, I. A.; Kuliev, V. A. (USSR). *Izv. Akad. Nauk Azerb. SSR, Ser. Fiz.-Tekh. Mat. Nauk* 1970, (1-2), 132-5 (Russ). There are 3 rotatory isomers of 1,1,2,2-tetrafluoroethane. The trans form has zero dipole moment hence only absorption lines owing to the gauche forms appear in the spectrum. Lines at 17-24 kHz are tabulated. Qual. intensities are given. Anal. commenced from an asym. rotor calcn. with parameters taken from similar mols. The Stark effect was used to identify some Q branch lines. The mol. consts. are $A = 5287.4$, $B = 2943.5$, $C = 2473.0$ MHz, $\mu = 2.9$ D.

A. J. McHugh

C.A. 1971.74.12

40410.8420

 $\text{CHF}_2 \cdot \text{CHF}_2$

1974

Ch, TE, Ex-G

Uc

29857

02-4504

Abraham Raymond J., Loftus Philip.Conformational energy differences and
barriers to rotation in fluor^oethanes."J. Chem. Soc. ^{Chem.} Commun", 1974, N 5, 180-181

(англ.)

1082 гкз

067 068 - 075

ВИНИТИ

$C_2H_2F_4$

1074

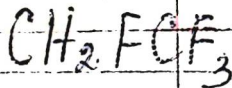
11 Б286 Деп. Колебательные спектры и поворотная изомерия 1,1,2,2-тетрафторэтана. Ключковский Ю. В., Свердлов Л. М. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1974, 37 с., ил., библиогр. 4 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 30 дек. 1974 г., № 3342—74 Деп.)

Произведен расчет частот, нормированной формы норм. кол. и распределения потенциальной энергии по колебательным координатам молекулы 1,1,2,2-тетрафторэтана (I) (транс- и гаус-изомеры). Подтверждена и уточнена существующая в лит-ре интерпретация колебательных спектров I. Показано, что наблюдаемые ИК- и КР-спектры I можно объяснить на основе предположения о существовании двух поворотных изомеров (гаус и транс). Установлены ключевые частоты, на основе к-рых можно вести анализ колебательных спектров поворотных изомеров молекулы I.

Автореферат

1975 №11

1974



(40)

Lombardi E., et al.
J. Chem. Phys., 1974,
61, N3, 894-901.

(cal. C_2H_6 ; III)

60225.9022

96617 (20.0007)

1976

Ex-C, Ch, TC, DE

$C_2H_2F_4$

X 9-11487

Leibovici C., Crasnier F.

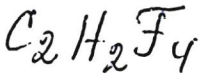
Géométrie des isomères cis et trans
du 1,2 difluoroéthylène. "J. Mol.

Struct.", 1976, 30, N 1, 192-194
(франц.)

0558

544 544

ВИНИТИ



2-фторэтан

М. И.

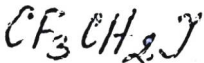
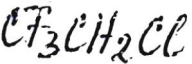
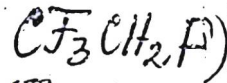
Х. 1977
N 19

1977

19 Б93. Ротамеры 1,1,2,2-тетрафторэтана в газовой фазе — силовое поле, колебательные амплитуды и геометрия — совместное электронографическое и спектроскопическое исследование. Brown D. E., Beagley B. The gas-phase rotamers of 1,1,2,2-tetrafluoroethane — force field, vibrational amplitudes and geometry — a joint electron-diffraction and spectroscopic study. «J. Mol. Struct.», 1977, 38, May, 167—176 (англ.)

Методом газовой электронографии при $t = 253^\circ K$ изучена конформац. смесь анти- и гош-ротамеров 1,1,2,2-тетрафторэтана. Определенный состав газовой фазы отвечает 84% анти- и 16% гош-ротамера, что соответствует разнице энергий в 1170 кал/моль. Используя спектроскопич. частоты колебаний было установлено силовое поле, с помощью к-рого рассчитаны колебательные ам-

плитуды. При этом несколько изменено отнесение нек-рых частот. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a А) и углов: C—C $1,518 \pm 0,005$, C—H $1,098 \pm 0,006$, C—F $1,350 \pm 0,002$, $\angle CCF$ $108,2 \pm 0,3^\circ$, $\angle FCF$ $107,3 \pm 0,3^\circ$, $\angle CCH$ $110,3 \pm 1,0^\circ$, тисси (торсионный угол гош-формы) $78 \pm 2^\circ$. В. Спиридонов.



(метр/об)
К. Р.

Ф. 1977

N 10

10 Д470. Спектры комбинационного рассеяния газов.
Ч. XIX. Низкочастотные спектры комбинационного рассеяния и величина барьеров внутреннего вращения в газообразных 1,1,1-трифторэтилгалогенидах. Lopa-ta A. D., Durig J. R. Raman spectra of gases. XIX. The low frequency gaseous phase Raman spectra and the barriers to internal rotation of the 1,1,1-trifluoroethyl halides. «J. Raman Spectrosc.», 1977, 6, № 2, 61—66 (англ.)

Изучены спектры комб. рас. ($50-3100\text{ см}^{-1}$) газооб-разных молекул типа CF_3CH_2X (I), где $X=F, Cl, Br, I$, при использовании многоходовых кювет, давлении газа 750—200 мм рт. ст. и возбуждении лазерной линией 514,5 нм мощностью 2,5 Вт. Наблюдались линии обертон-ов крутильных колебаний 160, 177, 200 и 210 см^{-1} в молекулах I, содержащих атомы J, Br, Cl и F соответ-ственно. Предположено, что крутильные колебания в I взаимодействуют с деф. кол. цепочки $C-C-X$ и кру-тильным колебанием группы CF_3 . Обнаружено, что ин-тенсивность линий крутильных колебаний основного тона в I аномально велика по сравнению с интенсивностью линий других антисимметричных колебаний. Вычислены величины барьеров внутреннего вращения функциональ-ных групп I. Библ. 18. Ч. XVIII см. РЖФиз, 1976, БП471

1977

4

43

F₂ CHCH₂

number 6992 1978.

paper

Meyer A. J.

M., Moll.
Crescent.

J. Mol. Struct.

Cent. No.

1978, 49, 383-94

CaH_4F_2

1979

Sell J. A. et al

y
mono-
nucly.

J. Chem. Phys., 1979, 71,
N 11, 4703-15

See CaH_5F i!!!

$C_2F_4H_2$

оттиски 9997
XIV - 9651

1980

молекулярная
структура

23 Б102. Электроннографическое исследование молекулярной структуры 1,1,1,2-тетрафторэтана в газовой фазе. Al-Ajda H. G. N. D., Beagley B., Jones M. O. A gas-phase electron diffraction study of the molecular structure of 1,1,1,2-tetrafluoroethane. «J. Mol. Struct.», 1980, 65, 271—276 (англ.)

Методом газовой электронографии найдены след. значения основных межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов в молекуле 1,1,1,2-тетрафторэтана: C—C 1,501(4), C—H 1,077(15), C—F (CH₂F) 1,389(6), C—F (CF₃) 1,334(2), $\angle$ CCH 106,1(12)°, $\angle$ CCF (CH₂F) 112,3(4)°, $\angle$ CCF(CF₃) 110,4(2)°, $\angle$ FCH 108,6(2)°, $\angle$ FCH 111,4(5)°, $\angle$ HCH 109,4 (пр.).

В. Спиридонов

X. 1980 № 23



Commerce 11479

1981

Glide well. c., et al.

monomer.
reactions

J. Mol. Struct., 1981, 72
209-216

CHF_2CHF_2

1984

10 Л202. Частоты валентных колебаний изолированных связей С—Н, длины связей и энергии диссоциации в некоторых галоалканах и алкенах. Isolated CH stretching frequencies, bond lengths and dissociation energies in some haloalkanes and alkenes. Mackenzie M. W. «Spectrochim. Acta», 1984, A40, № 3, 279—281 (англ.)

ИК-спектр

Получены ИК-спектры ($3100\text{—}2900\text{ см}^{-1}$) молекул CHF_2CHF_2 (I) и их галогензамещенных аналогов в газовой фазе со спектральным разрешением $0,12\text{ см}^{-1}$. Проведено сопоставление колебательных спектров частично-дейтерированных и частично-галогенированных молекул I. Определены значения частот вал. кол. изолированных связей С—Н в I. Выполнен теоретич. расчет равновесных длин связей, энергий диссоциации, силовых постоянных и частот норм. колебаний связей С—Н в I. Установлено, что изменения частот вал. кол. связей С—Н в I при введении атомов галогенов в положения α и β галоалканов практически аддитивны, тогда как аналогичное смещение ИК-полос вал. кол.

ф. 1984, 18, N 10

связей С—Н в спектрах алканов сложным образом
зависит от типа и места присоединения атома галогена.
И. В. А.

и
в це.
тей

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

1986

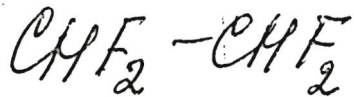
6 Л171. Микроволновый спектр, барьер внутреннего вращения, структура и дипольный момент 1,1,1,2-тетрафторэтана. Microwave spectrum, barrier to internal rotation, structure, and, dipole moment of 1,1,1,2-tetrafluoroethane. Ogata Teruhiko, Miki Yasuhiro. «J. Mol. Struct.», 1986, 140, № 1—2, 49—56 (англ.)

В диапазоне 8—26 ГГц исследован МВ-спектр молекулы $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$. Идентифицированы линии 132 вращательных переходов основного и 1-го возбужденного состояний крутильного колебания CF_3 -группы. Определены значения вращательных постоянных и постоянных квартичного центробежного искажения. По относит. интенсивности линий основного и возбужденного состояний оценены торсионная частота (108 см^{-1}) и барьер внутреннего вращения ($V_3 = 3,3 \text{ ккал/моль}$). Определен также дипольный момент ($\mu_a = 0,411$, $\mu_b = 1,75$, $\mu_{\text{общ}} = 1,80 \text{ ед. Дебая}$) и оценены некоторые из структурных параметров.

М. Р. Алиев

МВ-спектр

ф. 1986, 18, № 6



1989

Wang Shih Yung,
Borden Weston Thatcher

J. Amer. Chem. Soc. 1989.

et. n.

111, N 18, C. 7282-7283.

(see. $\text{CF}_2 = \text{CF}_2$; III)

CHF_2 CHF_2

1991

' 114: 171790j Liquid densities and vapor pressures of 1,1,2,2-tetrafluoroethane (HFC 134) and 1,1-dichloro-1-fluoroethane (HCFC 141b). Maezawa, Yukishige; Sato, Haruki; Watanabe, Koichi (Fac. Sci. Technol., Keio Univ., Yokohama, Japan 223). *J. Chem. Eng. Data* 1991, 36(2), 151-5 (Eng). Satd. liq. densities and vapor pressures of HFC 134 and HCFC 141b were measured at 200 to 400 K by a magnetic densimeter coupled with a variable vol. cell. For HFC 134, 38 satd. liq. densities assocd. with the vapor pressures and 5 compressed liq. PVT properties at temps. 280-400 K and pressures up to 2 MPa were measured. For HCFC 141b, 37 satd. liq. densities assocd. with the vapor pressures and 24 compressed liq. PVT properties were measured at the same ranges. The simple correlations for satd. liq. densities and vapor pressures were developed for both substances. Compressed liq. PVT properties were compared with the Kumagai's Tait-equation, (1984).

P, PVT-gas
HFC

(H) $\text{CFCl}_2\text{CHF}_3$

c. A. 1991, 114, N18

1996

F: C2H2F4

P: 3

5B178. Неэмпирический расчет фторэтанов. Геометрия, дипольные моменты, колебательные частоты и интенсивности ИК-полос. Ab initio calculations on fluoroethanes: Geometries, dipole moments, vibrational frequencies, and infrared intensities / Papasavva Stella, Illinger Karl H., Kenny Jonathan E. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 24. - С. 10100-10110. - Англ.

РМХ 1997

Место хранения ГПНТБ В приближении МП2/6-31ГФ{*}{*}
исследован ряд фторированных этанов $C[2]H[n]F[6-n]$, $n=0-5$.
Геометрические параметры, дипольные моменты, частоты колебаний и
абс. интенсивности ИК-полос представлены для устойчивых
конформеров этого ряда, включая анти- и гауш-структуры. Проведено
сопоставление с эксперим. данными. Обсуждена точность результатов
расчета частот ИК-спектра и их интенсивностей, а также зависимость
результатов расчета от выбора базисных функций. Библ. 60.

$C_2H_2F_4$

1998

130: 73145p High-resolution microwave and infrared molecular-beam studies of the conformers of 1,1,2,2-tetrafluoroethane. Stone, Stephen C.; Philips, Laura A.; Fraser, G. T.; Lovas, F. J.; Xu, Li-Hong; Sharpe, S. W. (Dep. Chem., Cornell Univ., Ithaca, NY 14853 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 192(1), 75-85 (Eng), Academic Press.

High-resoln. microwave and IR mol.-beam spectra were measured for 1,1,2,2-tetrafluoroethane (HFC134). For the higher energy, polar, C_2 symmetry, gauche conformer, microwave spectra were recorded for the normal and mono- ^{13}C isotopomers and analyzed to det. a C-C bond length of 1.512(4) Å, in good agreement with a recent ab initio value (MP2/6-31G**) of 1.515 Å. A tunable microwave-sideband CO_2 laser and elec.-resonance optothermal spectrometer were used to measure the IR spectrum of the ν_6 , C-C stretch of the gauche conformer near 906 cm^{-1} . Microwave-IR double resonance and precise ground state combination differences provided by the microwave measurements guide the

(N6 calcump)

C.A. 1999, 130, N6

assignment of the spectrum. The observation of a c-type spectrum definitively establishes that the upper state vibration is of A symmetry in the C_2 point group. The spectrum is fit to a Watson asym.-top Hamiltonian to a std. deviation of 0.24 MHz. A weak perturbation shifts the line positions for transitions near $J = K_c = 20$ by ≤ 12 MHz. The identity of the perturber is unknown. Pulsed slit-jet diode-laser spectra were recorded for the ν_{16} vibration of the anti conformer near 1127 cm^{-1} . An a- and c-type hybrid band is obsd., consistent with a B_u symmetry mode. Previous low-resoln. studies have attributed the 1127-cm^{-1} mode to either a B_u or an A_u symmetry vibration. A total of 522 non-blended transitions were assigned and fit to det. ground and excited state consts. The ground state consts. of $A = 5134.952(65)$ MHz, $B = 3148.277(27)$ MHz, and $C = 2067.106(43)$ MHz are the 1st exptl. detns. of the rotational consts. for this conformer. Here, type A std. uncertainties are given in the parentheses. (c) 1998 Academic Press.

F: C2H2F4

P: 3

1999

131:121541 Determination of densities and heat capacities from speed of s measurements for 1,1,1,2-tetrafluoroethane. Dayton, T. C.; Beyerlein, S. Goodwin, A. R. H. (Center for Applied Thermodynamic Studies, University o Idaho, Moscow, ID 83844-0905, USA). J. Chem. Thermodyn., 31(7), 847-868 (English) 1999

The speed of sound u is both formally independent of the amt. of substan and can be measured easily with high precision (typically $\Delta u/u < 1 \cdot 10^{-5}$). Measurement of this quantity offers a favorable route fo obtaining d., molar isochoric heat capacity (C_V, m), and molar isobaric he capacity values. This transformation from u to other thermodyn. propertie involves the soln. of a second-order differential equation on either isob isochores. We compare both equation sets for 1,1,1,2-tetrafluoroethane

C. A. 1999, 131

(134a) which is a slightly polar fluid. In the absence of reliable exptl. of sound data over the whole fluid surface, an accurate Helmholtz function equation of state for HFC-134a was used to simulate property data for this study. These data were generated at reduced temps. $T_r = T/T_c$ between T_r and 1.25 and at reduced pressures $p_r = p/p_c$ up to $p_r = 6$. The isochoric equation set was found to be more stable. For data and initial condition without errors, the fractional uncertainties in d . and CV_m were 0.002 and resp. Sensitivity studies were conducted on the isochoric equation set to document effects of interpolation step size, accuracy of initial condition, presence of random errors in the data. When all sources of error are included the uncertainties in d . and isochoric heat capacity were no worse than in the individual sensitivity studies.

CF₃CFH₂

1999

131: 94069c Microwave Spectroscopy of the Ground, ν_{18} , $2\nu_{18}$, and ν_{11} Vibrational States of CF₃CFH₂. Ilyushin, V. V.; Alekseev, E. A.; Dyubko, S. F.; Baskakov, O. I. (Institute of Radio Astronomy, NASU, Kharkov, Ukraine 310002). *J. Mol. Spectrosc.* 1999, 195(2), 246-255 (Eng). Academic Press. The rotational spectra of the ground, ν_{18} , $2\nu_{18}$, and ν_{11} vibrational states of CF₃CFH₂ were studied in the frequency range 48-116 GHz with an accuracy of measurement better than 10 kHz. Rotational and centrifugal distortion parameters derived using an

(Ab crkmp)

S-reduced Watson-type Hamiltonian were improved for the ground and ν_{18} states. An interaction between $2\nu_{18}$ and ν_{11} vibrational states was detected, and rotational, centrifugal distortion, and coupling parameters of these states were detd. for the 1st time. The wavenumber difference between the $2\nu_{18}$ and ν_{11} states is 11.20996(54) cm⁻¹. (c) 1999 Academic Press.

C.A. 1999, 131, N7.

F: C2F4H2

P: 3

133:281463 Synthesis and Vibrational
Spectroscopy of 1,1,2,2- Tetrafluoroethane and Its
13C2 and d2 Isotopomers. Craig, Norman C.;

Chuang, Jessica I.; Nwofor, Christiana C.; Oertel,
Catherine M. Department of Chemistry, Oberlin
College Oberlin, OH 44074, USA J. Phys. Chem.

A, 104(45), 10092-10103 (English) 2000. The
13C2 and d2 isotopomers of 1,1,2,2-
tetrafluoroethane (TFEA) have been synthesized.
Raman spectra of these new species have been
recorded, and IR spectra of all three isotopomers,
including some regions with high-resoln. at -100
.degree.C, have also been recorded. Guided by
recently published calcns. of frequencies and IR
intensities and the new spectra, we have revised

2000

the previous assignments of fundamentals for the two rotamers of the normal species of TFEA. Assignments of the fundamentals for both rotamers of the $^{13}\text{C}_2$ and d_2 isotopomers are proposed. The anti rotamer is the more abundant species in the gas phase and, to a lesser extent, in the liq. phase and the only species in the crystal phase. Thus, the assignments of the anti rotamer of all three isotopic species are complete and supported by isotope product rules, but the assignments for the gauche rotamers are incomplete. Ests. of the missing frequencies for the gauche rotamer of the normal species are supplied.