

CFH₃

CH_3F

Moles E., Batuecas T.

 T_b I. chim. phys. et phys.-
chim. biol 1919, 14, 534-88 ΔH_b

CH_3F (P, ΔH_v) IV-1043

1932

Batuecas T.

J. chim. phys. 1932, 29, 269-72

"Methyl fluoride."

5

✓ (9) ✓

C.A., 1932, 5460

CH_3F ($T_{\text{kp.}}$; $P_{\text{kp.}}$; $V_{\text{kp.}}$) 1044-¹⁹³²IV

Cawood W., Patterson H. S.

J. Chem. Soc. 1932, 2180-8

"Some physical constants of
methyl fluoride, and the atomic
weight of fluorine."

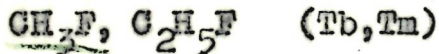
McC

2

✓ (91) C.A., 1932, 5799

7869 - 1V

1940



Grosse A.V., Wackher R.C., Linn C.B.
J. Phys. Chem., 1940, 44, 275-96

Physical propcities of the ...

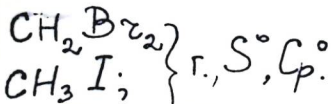
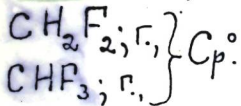
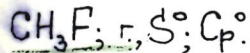
Be

7633 - IV

I94I

Edgell and Glockler

1. J. Chem. Phys. 9, 484 (I94I)



Circ. 500



8897 - IV

1942

Seger

1. Angew. Chem. 55, 58 (1942)

CH_2Cl_2 , CHCl_3 , CFCl_3 , CH_2FCl , CH_4 ,

CH_3F , CH_2F_2 , CHF_3 , CF_4 , CH_3Cl ,

CHClF_2 , CHCl_2F , CCl_4 , CCl_3F , CCl_2F_2 ,

(Tb, Mb, Tkp, Vkp)

Circ. 500 Mx, Be

CH_3F (P) BP-1050-IV . 1948

Michels A., Wassenaar T.

Physica 1948, 14, 104-10

Vapor pressure of methyl fluoride.

2

Б

φ

C.A., 1948, 8051 i.

CH₃F.6H₂O (ΔH_f) 8962 - IV - BPP 1949

v. Stackelberg M.

Naturwissenschaften, 1949, 36,
359-362

Feste Gashydrate

C.A., 1950, 44,
7107h

u

всг гр. к. $\checkmark \phi$

CH₃F 9269 Chloroform. 200 g/l

1950

Do (CH₃F, CH₃Cl, CH₃Br, CH₃I, C₂H₆, C₂,
C₂H₄, C₂H₂)

Wicke E.

Z. Elektrochem., 1950, 54, 27-33

Theoretical and Mech. Aspects. D. Wicke

J, M

Bob-1049-IV

1952

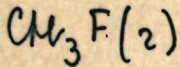
CH_3F

(E, C_p, S)

Michels A., Visser A, ugp.

Physica 1952, 18, 114-20

Isotermes and thermodynamic functions...



Luft N. W.

1955

J. Chem. Phys., 23, 973

$\Delta H_{298,16^\circ} \sim -60$

оценено по термическим
связям

11-3241-1V
BQ-1323-1V



CH_3F (ΔH_f)

IV-1048

1956

$\text{F}_2(\text{D}_0)$

CFH_3

Margrave J.L.

J.Chem.Phys., 1956, 24, N 2, 475-476,
476-477 (англ)

Применение масс-спектрометрических потенциалов появления для термохимических расчетов. I. Соотношения соответствия для метана и его замещенных и теплота образования CH_3F . П. Хлорфторметаны и энергия диссоциации F_2 .

РЖХ, 1957, № I, 78

М

"0"

Весь ср. к. с. 475-76

CH_3F (D , ΔH_f), $\text{C}_2\text{H}_5\text{F}$ 57-11 / 1958
(ΔH_f)

Веденеев В.И., Журмаль А.П., //

Ж. физ. химии, 1958, 32, 57, 1472-1475

CFH_3

Эксперимент разрыва C-F связей. в.с.с.
ест.

РЖХ, 1959, 53, 4181.



(11)

2

✓

Р

CH₃F

Farhat - Aziz, 1961

T_m,

Moelwyn-Hughes E.A.

T_b,

J. Chem. Soc., (Работа по

ΔH_v

1961, 1523

численке)

Измерено при 3^х т-рах давл. пара CH₃F

t°C

Р_{ата}
работа

[3]

[4]

-82,053

610,9

608,0

615,1

-78,321

755,2

750,8

759,4

-78,274

756,2

752,6

761,3

но Yammay и др.

$$T_m = 131,4^{\circ}\text{K}$$

$$T_b = 195,0^{\circ}\text{K}$$

$$\Delta H_v = 4,06 \text{ ккал/моль}$$

~~и др.~~

[3] Moles, Batucas

J. Chim. phys., 1919, 17, 537

[4] Michaels, Wassenaar,

Physica, 1948, 14, 104

1967

C H_2F , CH_3Cl , CH_3Br , CH_3I , C_2H_5F ,
 C_2H_5Br , C_2H_5Cl , C_2H_5I (Cp, S, HT-Mo,
FT-Mo)

XIV-9777

Kennedy H., Liebners J.
Industr. and Engng Chem. Fun-
dament., 1967, 6, n2, 310-313 (ann.)
Low temperature thermodyna-
mic functions for n-halogen-
ated hydrocarbons

Есть оригинал.

Р. И. Ким, 1969
15 Б 813

10 (ф)

1968

 CH_3F CH_3F^-

11 Б37. Полуэмпирические самосогласованные расчеты электронного строения CH_3F и CH_3F^- и их значение для адиабатических электродных процессов, включающих разрыв связей. Hush N. S., Segal G. A. Semi-empirical SCF MO calculations of the electronic structures of CH_3F and CH_3F^- and their significance for adiabatic electrode processes involving bond-breaking. «Discuss. Faraday Soc.», 1968, № 45, 23—29. Discuss., 52—66

Методом полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием исследовано электронное строение и геометрия CH_3F и CH_3F^- . При присоединении электрона к CH_3F равновесное расстояние С—F увеличивается лишь на 0,031 Å. Наполовину заполненная орбиталь в CH_3F^- является разрыхляющей между С и F и связывающей

X. 1969. 11

По
зью
на

между F и атомами H. Вследствие увеличения длины связи F—H угол H—C—H возрастает от 109,3 до 114,3°. Показано, что отрицательный заряд в анионе распределен между H и F, при этом атом C обладает небольшим положительным зарядом. На основании полученных результатов обсужден механизм электрохим. восстановления алкилгалогенидов, для к-рого постулировано, что первая стадия переноса электрона приводит к образованию молек. аниона. Интерпретировано изменение констант скорости обмена для метилгалогенидов. Аналогичное рассмотрение замещенных галогенидов приводит к предсказанию, что при полном электровосстановлении данного стереоизомера происходит тем более полная конфигурационная инверсия, чем больше атомный номер галогена. Для обмена $\text{CH}_3\text{F}/\text{CH}_3\text{F}^-$ рассчитанная энергия внутренней перегруппировки при образовании переходного состояния мала (меньше 1 ккал/моль). Обсуждена

возможность полного расчета констант скоростей различных электродных процессов, включающих разрыв связей, для к-рых первой стадией является р-ция типа $\text{XU} + e(\text{M}) \rightarrow (\text{XU})^-$. Показано, что это возможно с помощью относительно простых методов, но для точного определения окислительно-восстановительного потенциала первой стадии необходимы более точные методы расчета энергий основного состояния ионов $(\text{XU})^-$.

Резюме

CH_3F .

Источники Б.И.

Тальки В.А.

1972.

(ΔH_f)

Сб. "Реакц. способн. орг. соедин."

Т.9, вып.2, Тарту, 1972, 469-511.

(см CH_3SH , I)

CH₃F

1972

($\Delta H, D_0$)

130910x Theoretical calculations on sigma-systems. III. Alkyl halides and alkanes. Bhattacharyya, Subir Nath; Bhattacharya, Amiyansu (Dep. Chem., Univ. Coll. Sci., Calcutta, India). *Int. J. Quantum Chem.* 1972, 6(5), 935-48 (Eng). Various aspects of Del Re's method, its extension, and correlation with important properties such as nuclear quadrupole coupling consts. and spin-spin coupling consts. are discussed. The Del Re parameters for the C-I bond were evaluated, and those for the C-F bond modified. The bond energies and the heats of formation for several σ -systems were calcd.; the energies of a "bond-orbital" for several alkanes are related to their ionization potentials.

C.A. 1972. 77. N20

(+9) m.m. (+14) ΔH_f
X

CH_3F 1
 CH_2F_2
 CHF_3
 CF_3Cl
 CF_3I
 CF_2Cl_2
 CH_3CF_3 (m.n)
 CFCl_3
 $\text{CH}_3\text{CF}_2\text{Cl}$

ΔH_f
 CCl_3
 CH_3Cl
 $\text{CH}_2\text{ClCH}_2\text{Cl}$
 CH_2Cl_2
 CHCl_3
 $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$
 CH_3Br
 CH_2Br_2
 CHBr_3
 $\text{C}_2\text{H}_3\text{Br}$
 CH_3I
 CH_2I_2
 CHI_3
 $\text{C}_2\text{H}_5\text{I}$

CH₃F
CD₃T

A.S. Rodgers, R.C. Wilhoit
B.J. Zwolinski

1972

100

(T.G.P.)
(2H₄)

"Nat. Bureau Standards -
- office of Standards reference
data

1972; 41-46

(over)

30726.8839
TE, Ch, Ph, Ex-
C

CH₃F

31603

1973
15-1167

McKean D.C., Duncan J.L., Batt L.

CH stretching frequencies, bond lengths
and dissociation energies.

"Spectrochim. acta", 1973, A 29, N 6,
1037-1049.

(англ.)

0923

906 906 09 10

ВИНИТИ

CH₃F

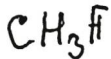
Kushawana V.S

1973
X 1973

"Ind. J. Pure and App. Phys"

(70)

1973, 11, N 1, 63-66



1974

Rodgers A.S et. al.

J. Phys and Chem. Ref. Data.,
1974, 3, N1, 117-140.

$\Delta H_v; \Delta H_f$



(cor CH_3Cl ; I)

F-CH₃

QVT. 4624

1975

~~E~~

(D₂)

Kerr J. A., et al.

Handbook Chem. Phys.,

55th Ed., 1974-75.

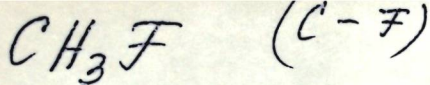
CH₃F

1977

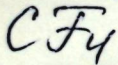
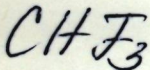
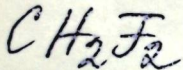
Inel Yüksel

(ΔH_f ; ΔS) Boğaziçi Univ. Derg.,
[Seri] Temel Bilimler,
Kim., 1976-1977, 4-5, 9-18.

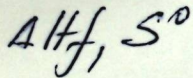
(see CH₃NF₂, ~~4~~) I



1944



87: 207569j Comparative calculation of thermodynamic constants of organic halogen-containing substances. Nikolaev, N. I. (Vses. Nauchno-Issled. Inst. Pererab. Nefti, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1977, 51(8), 2135 (Russ). Std. entropies and heats of formation of halogen- and D-contg. methane derivs. were calcd. V. Vesely



C.A. 1944, 84 N26

1977
 CH_3F^+
 CD_3F^+ Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. N1, p 1-360

T.G. CB-BA

CH_3F

Lomnick 12765 | 1981.

Leroy R.; Peeters &.

ΔH_f° ;

J. Mol. Struct., 1981,
85, 133 - 152.

$[CH_2FH]^+$

от. 18084

1983

5 Б1099. Новые газофазные ионы. Радикал-катионы $[CH_2XH]^+$. ($X=F, Cl, Br, I, OH, NH_2, SH$) и $[CH_2CH_2NH_3]^+$. Novel gas-phase ions. The radical cations $[CH_2XH]^+$. ($X=F, Cl, Br, I, OH, NH_2, SH$) and $[CH_2CH_2NH_3]^+$. Holmes John L., Lossing F. P., Terlouw Johan K., Burgers Peter C. «Can. J. Chem.», 1983, 61, № 10, 2305—2309 (англ.; рез. фр.)

При ионизации молекул $HOCH_2CH_2X$, $HOOCCH_2X$ и $OHCCCH_2X$ ($X=F, Cl, Br, I, OH, NH_2, SH$) получены ионы $[CH_2XH]^+$. (А), отличающиеся от изомерных ионов $[CH_2X]^+$ (Б) поведением при соударительной активации. Определены теплоты образования (ТО) радикал-катионов А; они близки ТО ионов Б за исключением $[CH_2NH_2]^+$, ТО к-рого на 30 ккал/моль выше, чем у соотв-щего иона типа Б. Определены формы и энергии появления метастабильных пиков, отвечающих распаду А. Высказано предположение, что при внутренних

D_fH ;

⊗ (46)

х. 1984; 19, № 5

энергиях ниже порога фрагментации (отщепления Н.) ионы А и Б не обладают способностью к взаимопревращению. В то же время отщеплению Н. от А предшествует определяющая скорость всего процесса изомеризация А в Б. Ион $[\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_3]^+$ получен диссоциативной ионизацией $\text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$. А. Кирюшкин

CH₃F

отм. 17436

1983

2 БЗ089. Изотопный эффект [из-за различия в] давлении паров жидкого метилфторида. Vapor pressure isotope effects in liquid methyl fluoride. Ol Takao, Shuiman Jan, Porowicz Anthony, Ishida Takao bu. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 16, 3153—3160 (англ.)

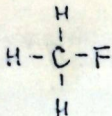
С помощью дифференциального манометра в прецизионном криостате измерено давл. паров ¹²CH₃F (I), ¹²CD₃F (II) и ¹³CH₃F (III) в т-рном интервале 132,48—213,12 К. Изотопный состав образцов I—III определен с помощью масс-спектрометрии. Результаты приведены в виде табл. давл. пара I—III при соотв-щих т-рах и хорошо описываются соотношениями $T \ln(f_c/f_g) = (2225,2 \pm 7,4)/T - (4,444 \pm 0,046)$ для эффекта D/H и $T \ln(f_c/f_g) = (56,8 \pm 2,09)/T - (0,6383 \pm 0,0133)$ для эффекта ¹³C/¹²C (f_c и f_g — приведенные изотопные коэф. разделения в жидк. и газ. фазах соотв.). Установлено, что для любых т-р давл. I > давл. II и давл. I < давл. III. Результаты рассмотрены с точки зрения внутренних и внешних взаимодействий в жидк. фазе. Л. Г. Титов

p,

X. 1984, 19, №2

CFH₃

1983



23 B1159. Кинетика газофазной реакции $\text{CH}_3\text{F} + \text{J}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{FJ} + \text{HJ}$; Энергия диссоциации связи C—H в метил- и метиленфторидах. Kinetics of the gas-phase reaction $\text{CH}_3\text{F} + \text{I}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{FI} + \text{HI}$: The C—H bond dissociation energy in methyl and methylene fluorides. Piccard J. M., Rodgers R. S. «Int. J. Chem. Kinet.», 1983, 15, № 6, 569—577 (англ.)

Кинетические исследования р-ции CH_3F с J_2 при 710°C , выполненные спектрофотометрич. методом, согласуются с механизмом процесса включающем стадии $\text{M} + \text{J}_2 \rightleftharpoons 2\text{J} + \text{M}$; $\text{CH}_3\text{F} + \text{J} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{F} + \text{HJ}$ (р-ции 1 и -1); $\text{CH}_2\text{F} + \text{J}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{FJ} + \text{J}$. Получены колич. параметры этих р-ций: $\lg k_1$ (л/моль·с) = $(11,3 \pm 0,1) - (30,8 \pm 0,2)/\theta$, где $\theta = 4,575 T/1000$ ккал/моль. Из эксперим. значения энергии активации $E_1 = 30,8 \pm 0,2$ ккал/моль в предположении, что $E_{-1} = 1 \pm 1$ ккал/моль и при использовании термодинамич. данных получена величина энергии дис-

D
Энергии связи

X. 1983, 19, № 23

социации связи $DH^0(\text{CH}_3\text{F}-\text{H}) = 101,2 \pm 1$ ккал/моль. Из кинетич. данных величина энергии связи $DH^0(\text{CHF}_2-\text{H}) = 103,2 \pm 1$ ккал/моль. Используя лит. данные авторы вычисляют энергии диссоциации связей $\text{C}-\text{H}$, $\text{C}-\text{F}$ и $\text{C}-\text{Cl}$ в различных фторметанах и влияние на эти величины замещения фтором в α -положении. Резюме

CH_3F (21)

1984

(пермодул. и
гр. сб-ба)

101: 235883h Molecular dynamics simulation of liquid fluoromethane, trifluoromethane, chloromethane, cyanomethane, carbon dioxide, and carbon disulfide with new pair potentials. Boehm, H. J.; Meissner, C.; Ahlrichs, R. (Inst. Phys. Chem. Elektrochem., Univ. Karlsruhe, 7500 Karlsruhe, Fed. Rep. Ger.). *Mol. Phys.* 1984, 53(3), 651-72 (Eng). Results of mol. dynamics simulations are reported for CH_3F , CHF_3 , CH_3Cl , CH_3CN , CO_2 and CS_2 . The intermol. pair potentials used in these calcns. were derived with a new model which was introduced recently. The calcd. data on thermodyn., static structure, self-diffusion coeff. and reorientational correlation times are compared with exptl. and other mol. dynamics results.

(15) ☒

C. A. 1984, 101, N 26.

CH_3X , C_2H_5X

1984

u gp.

X-2 anorek

103: 110916f Standard enthalpies of formation of some halo-substituted methanes, ethanes, and ethylenes. Papina, T. S.; Kolesov, V. P. (USSR). *Probl. Kalometrii i Khim. Termodinam. Dokl. Na 10 Vses. Konf., 12-14 Iyunya. 1984, Cherogolovka 1984, 1(Ch 2), 199-201 (Russ). From Ref. Zh., Khim. 1985, Abstr. No. 10B3047. Title only translated.*

$\Delta_f H$

C.A. 1985, 103, N 14.

CH₃F

1986

105: 102987f Equation of state of methyl fluoride in the gas-liquid critical region. Bominaar, S. A. R. C.; Trappeniers, N. J.; Biswas, S. N. (Van der Waals Lab., Univ. Amsterdam, Neth.). *Physica B+C (Amsterdam)* 1986, 139-140(1-3), 83-6 (Eng). Accurate equation-of-state for CH₃F in the gas-liq. crit. region were obtained from pressure-vol.-temp. measurements done by a combination of Burnett and isochoric methods. The measurements were done at 1-270 bar and 298.15-343.15 K; the max. d. was twice the crit. d. The accuracy of the data was estd. to be better than 0.02% in the d., 0.01% in the pressure, and 1 mK in the temp.

2p - 11
COC model used

C.A. 1986, 105, N12

CH₃F

DM 27390

1987

4 Б3171. P , V , T -свойства фтористого метила в критической области газ — жидкость. (P , V_m , T) properties of methyl fluoride in the (gas+liquid) critical region. Bominagar S. A. R. C., Biswas S. N., Trappeniens N. J., Ten Seldam C. A. «J. Chem. Thermodyn.», 1987, 19, № 9, 959—976 (англ.)

P , V_m , T -свойства CH₃F высокой чистоты определены в интервале t -р 298—343 К и давл. до 29 МПа, охватывающих крит. область. Эксперим. процедура заключалась в определении опорной изотермы при 333,158 К по методике Барнетта и измерении большого числа $P(T)$ изохор с помощью изохорного метода. Вся серия эксперим. результатов в газовой фазе выражена через двойную сумму полиномиального ур-ния, коэф. к-рого табулированы. По оценке точность измерений давл. лучше 0,01%, плотности 0,05%, t -ры 1 мК. Для крит. параметров получено: $T_c = 317,4$ К, $P_c = 5,87$ МПа, $\rho_c = 9150$ моль/м³. Р. Г. Сагитов

$T_{кр}$

Х. 1988, 19, № 4

CH₃F

OM 27 390

1987

107: 184097u Pressure-volume-temperature (p , V_m , T) properties of methyl fluoride in the (gas + liquid) critical region. Bominaar, S. A. R. C.; Biswas, S. N.; Trappeniers, N. J.; Ten Seldam, C. A. (Van der Waals Lab., Univ. Amsterdam, Neth.). *J. Chem. Thermodyn.* 1987, 19(9), 959-76 (Eng). The (p , V_m , T) properties of pure CH₃F were measured at 298 to 343 K and at pressures up to 29 MPa, covering the complete (gas + liq.) crit. region. The exptl. procedure consisted of the detn. of a ref. isotherm at 333.158 K by the Burnett method of repeated expansions and the measurement of a large no. of $p(T)$ isochores by the so-called isochoric method. The anal. of the Burnett results was based on polynomial representations of the exptl. values by a least-squares anal. and examg. the consistency of the resulting coeffs. The complete set of exptl. (p , V_m , T) results in the gas phase was fitted into a double polynomial equation, the coeffs. of which are given in tabulated form. The accuracy of the measurements is estd. to be better than 0.01% in the pressure, 0.05% in the d., and 1 mK in the temp.

(p - V - T)

C.A. 1987, 107, N 20

CH₃F(2)

[acc. 25819]

1987

Nakashima K.,

Takeyama N.,

Aag H.; "Hunnon kazaky kaisu,
J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1987,
N2, ● 131-139.

CFH₃

1987

Von Bergen Rafael A.,
Cipollini Luisa.

всплесковой An. Quim., Ser. A.
коэфффициент 1987, 83 (3), 322-9.

(сер. CH₃Cl; ~~IX~~)

CH_3F

1988

6 Л262. Спектроскопия «изолированных в матрице» молекул CH_3F в газовой фазе. The gas phase «matrix isolation» spectroscopy of CH_3F / Celii F. G., Janda K. C. // Z. Phys. D.— 1988.— 10, № 2—3.— С. 347—360.— Англ.

С помощью перестраиваемого CO_2 -лазера получены в ИК-области спектры фотодиссоциативного распада вандер-ваальсовских комплексов, образующихся в сверхзвуковой струе в смеси CH_3F с Ne, Ar, Kr, Xe, N_2 и CH_4 . Комплексы возбуждались в области полосы поглощения моды ν_3 CH_3F , продукты распада ионизировались электронным ударом и детектировались квадрупольным масс-спектрометром. Установлена кластерная природа комплексов, состоящих из молекулы CH_3F в окружении n атомов или молекул буферных газов. Показано, что в зависимости от выбора газа и условий расширения струи величина n колеблется от единиц до

М.П.

фр. 1989, № 6

нескольких десятков. В случае Ag при промежуточных размерах n обнаружено резкое сужение фотодиссоциативного спектра, приписанное образованию кластеров правильной икосаэдрич. структуры с молекулой CH_3F в центре. Результаты сопоставлены со спектрами поглощения CH_3F в газовой фазе и в матрицах инертных газов при низких температурах. Библ. 59. Е. Н. Т.

CH₃F

1988

109: 117212f New electronegativity scale for the correlation of heats of formation. 1. Alkyl derivatives. Luo, Yu Ran; Benson, Sidney W. (Donald P. and Katherine B. Loker Hydrocarbon Res. Inst., Univ. South. California, Los Angeles, CA 90089-1661 USA). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(18), 5255-7 (Eng). A quant. linear relation is reported between the differences in std. heats of formation [$\Delta_f H^\circ(\text{RX}) - \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{X})$] $\equiv \Delta\Delta_f H^\circ(\text{RX}/\text{CH}_3\text{X})$ and V_x , the unshielded core potential of X: $\Delta\Delta_f H^\circ(\text{RX}/\text{CH}_3\text{X}) = I_m + S_m V_x$ (eq 4). Here R is $\text{CH}_3\text{-}_m(\text{CH}_3)_m$, which are taken to be Et, iso-Pr, and *tert*-Bu when $m = 1, 2$, and 3 , resp. X is a halogen atom, OH, SH, NH₂, H, or CH₃, and $V_x = n_x/r_x$ where n_x is the no. of valence electrons in the bonding atom in X and r_x Å is its covalent radius. V_x Was first proposed by Yuan as a measure of electronegativity of the elements. The slope S_c and intercept I_c in this relation can be related to m_c . For the 23 compds. available, av. deviations are 0.3 kcal/mol with 1 max. deviation of 1.9 kcal/mol. In all cases, the exptl. uncertainties exceed the deviations. The relation can be used to est. values of $\Delta_f H^\circ$ for other elements and groups where data on $\Delta_f H^\circ(\text{MeX})$ are known. With $\Delta_f H^\circ(\text{MeF}) = 55.9 \pm 0.5$ kcal/mol, values are estd. for $\Delta_f H^\circ$ of EtF, *i*-PrF, and *t*-BuF.

($\Delta_f H$)

(4) ~~18~~

c.A. 1988, 109, N 14

C₂H₃F

CH₃F 1990
Francisco J. S., Zhao Yao.

ΔH_f J. Chem. Phys. 1990.
93, N12. C. 9203-9205.

(cor. HCO; I)

CH₃F

1990

22 Б1345. Субмиллиметровая спектроскопия чисто вращательных переходов в колебательном состоянии $\nu_6=1^{12}$ CH₃F. Submillimetrewave spectroscopy of the pure rotational transitions in the $\nu_6=1$ vibrational state of ¹²CH₃F: [Pap.] Austr.-Hung. Conf. Recent Develop. Infrared and Raman Spectrosc., Veszprém, Apr. 18—20, 1990 / Papousek D., Pracna P., Tesar R., Belov S. P., Tretyakov M. Yu. // Vibr. Spectrosc.— 1990.— 1, № 2. — С. 167—171.— Англ.

На субмиллиметровом (СММ) РАД-спектрометре в области частот 200—609 ГГц с точностью около 0,1 МГц измерен вращат. спектр ¹²CH₃F в дважды вырожденном колебат. состоянии $\nu_6=1$. Идентифицировано 119 вращат. переходов $\Delta J=+1$, $\Delta K=0$, $\Delta l=0$ со значениями вращат. квантового числа вплоть до $J \leq 11$. Анализ СММ-спектра выполнен с учетом квартичного

М.П.

X. 1991, N 22

и секстичного центробежного искажения, вз-вй «2,2» l-типа и $\Delta k = \pm 4$ типа с использованием результатов ранее выполненных СММ-измерений. Полученные СММ-данные удовлетворительно согласуются со спектроскопич. данными др. авторов. Окончат. значения спектроскопич. параметров будут сообщены после одновременной обработки микроволновых, СММ- и ИК-данных с использованием усовершенствованного гамильтониана.

С. Н. Мурзин

CHF_3

1991

Rubio Ramon G.,
Zollweg John A., et al.

PVT-gasrose J. Chem. Eng. Data
1991, 36 (2), 171-84.

(see. CF_4 ; I)

CH₃F

Om. 38 186

1995

Berry R. F., Burgess D. R. F.,
Z., et al.,

(Δ H_f)

J. Phys. Chem., 1995, 99,
N47, 17145 - 17150

CH₃F (17)

1995

122: 275420v Isobaric specific heat capacity of difluoromethane at pressure up to 0.5MPa. Kubota, H.; Sotani, T.; Kunimoto, Y.

(Dep. Chem. Sci. Eng., Kobe Univ., Kobe, Japan 657). *Fluid Phase Equilib.* 1995, 104, 413-19 (Eng). A new flow calorimeter for the accurate measurement of isobaric sp. heat capacities of gases was constructed. Measurements of the sp. heat capacity of difluoromethane were carried out in the temp. range from 303-343K and pressures to 0.5MPa. To confirm the reliability of this exptl. app., measurements were also performed on carbon dioxide at 298-342 K. The heat capacity data obtained agreed with those given in the IUPAC Tables with max. deviation of 1.53%.

(Gp)

C.A. 1995, 122, N 22

CH_3F

[Dm. 38141].

1995

Liebman J.F., Martinko
Simões J.A., et al.,

$\Delta_f H$

Struct. Chem., 1995,
6, N 1, 65-69

DM 38457.

1996

F: CH₃F

P: 1

16B188. Теоретическое значение энтальпии образования метилфторида. Theoretical value of the enthalpy of formation of methyl fluoride / Espinosa-Garcia J. [Chemical Physics Letters] // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 250, N 1. - С. 71-74. - Англ.

Приближение МПЧ, квадратичный метод КВ и метод связанных кластеров использованы также как и изогирическая реакция ($\text{CH}_3\text{F} + 3\text{H} \rightarrow \text{C} + \text{F} + 3\text{H}_2$), и реакция гидрирования ($\text{CH}_3\text{F} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{FH}$), для расчета энтальпии образования CH_3F . Исходя из хорошо установленной энтальпии образования молекулы FH оценено качество использованного базиса и уровень учета корреляционной энергии. Рассчитанное значение $\Delta H_f^\circ[298\text{K}]$ равно $-57,4 \pm 1,2$ ккал/моль ($\Delta H_f^\circ[0\text{K}] = -55,5 \pm 1,2$).

РЖХ 1997

CH₃F

DT

38457

1996

($\Delta_f H_{298}$)

124: 243708v Theoretical value of the enthalpy of formation of methyl fluoride. Espinosa-Garcia, J. (Departamento de Quimica Fisica, Universidad de Extremadura, Badajoz, Spain 06071). *Chem. Phys. Lett.*, 1996, 250(1), 71-4 (Eng). The enthalpy of formation of CH₃F was theor. estd. by using data for the isogyric and hydrogenation reactions. Energy differences were computed at four levels of calcn., by using the MP4, QCI and CC methods and two extended basis sets. By using the well-established enthalpy of formation of the FH mol., the quality of the basis sets and energy correlation levels were tested. The value obtained was $\Delta H_{f,298 K} = -57.4 \pm 1.2$ kcal/mol ($\Delta H_{f,0 K} = -55.5 \pm 1.2$).

C.A. 1996, 124, p18

CH₃F

1996

11B2276. Индуцированные светом неравновесные эффекты в газах. Light induced nonequilibrium effects in gases / Schramm B., Wörner T. // Ber. Bunsen-Ges. phys. Chem.— 1996.— 100, № 10.— С. 1684—1690.— Англ.

Отмечается, что возможно нарушить равновесное распределение скоростей молекул в газе с помощью лазерного облучения. Это приводит к явлениям переноса, индуцир. светом. Рассмотрены теор. основы эффектов вязкого течения, индуцир. светом, и дрейфа молекул и атомов, индуцир. светом. Приведены результаты измерений разности давл. в газах, вызванные вязким течением, индуцир. лазерным излучением. С помощью дрейфа, индуцир. светом, разделены две модификации CH₃F с разными ядерными спинами.

В. Ф. Байбуз

х. 1997, № 11.

1997

F: CH3F

P: 3

22Б1441. Диодно лазерные измерения коэффициентов уширения гелием полосы 'ню'[6] $\{13\}\text{CH}[3]\text{F}$. Diode-laser measurements of He-broadening coefficients in the 'ню'[6] band of $\{12\}\text{CH}[3]\text{F}$ / Grigoriev I. M., Bouanich J.-P., Blanguet G., Walrand J., Lepere M. // J. Mol. Spectrosc. - 1997. - 186, 1. - С. 48-53. - Англ.

ФЖХ, 1998, №22

135:24954 **Theoretical Calculation of Bond Dissociation Energies and Enthalpies of Formation for Halogenated Molecules.** Lazarou, Yannis G.; Prosmitis, Alexandros V.; Papadimitriou, Vassileios C.; Papagiannakopoulos, Panos. Institute of Physical Chemistry, National Center for Scientific Research Demokritos, Aghia Paraskevi, Greece. J. Phys. Chem. A (2001), 105(27), 6729-6742. in English.

The bond dissociation energies and the enthalpies of formation of halogenated mols. were theor. calcd., and the results were compared with the corresponding exptl. values in order to examine the reliability of a large no. of levels of theory in thermochem. calcs. D: functional theory using a multitude of exchange and correlation functionals, Moller-Plesset perturbation theory, and QCISD(T) and CCSD(T) methods were employed, with all-electron and effective-core potential basis sets of varying complexity. A small set of 19 mols. was selected, consisting of X_2 , HX , and CH_3X ($X = F, Cl, Br, \text{ and } I$), the mixed-halogen mols. ClF , BrF , $BrCl$, IF , and ICl , and H_2 and CH_4 . The calcd. bond dissociation energies were cor. for basis set superposition errors and the first-order spin-orbit coupling in the 2P state of halogen atoms. In addn., the enthalpies of formation of all mols. in the set as well as those of Me (CH_3) and halomethyl radicals (CH_2X) were also calcd. by using the corresponding atomization reactions, cor. for the spin-orbit coupling in the 3P state of carbon atom and the 2P state of halogen atoms. Levels of theory employing the B3P86 functional with moderately large basis sets, augmented with diffusion and polarization functions, were found to

be sufficiently reliable in the calcn. of bond dissocn. energies of closed-shell halogenated mols. In particular, the B3P86/6-311++G(2df,p) level of theory was found to be the most accurate, with an RMS deviation of 6 kJ.mol⁻¹ for 23 bond dissocn. energies, with a negligible dependence of the accuracy on the level of theory chosen for the geometry optimization. In addn., the B3P86 functional in combination with small basis sets was found to be superior to B3LYP and MP2 in the calcn. of mol. structures. Regarding the calcd. enthalpies of formation, G2 theory was the most accurate, with an RMS deviation of 9 kJ.mol⁻¹, followed by several combinations of the B3PW91 and B3LYP functionals with mostly large basis sets. However, the B3P86 functional tends to overbind open-shell species, resulting in an underestimation of the enthalpies of formation for polyat. mols. Extension of the bond dissocn. energy calcns. at levels of theory employing the B3P86 functional to a larger set of 60 bonds in 41 halogen-contg. mols. revealed systematic errors dependent on the mol. size. Therefore, the calcd. bond dissocn. energies at the B3P86/6-311++G(2df,p) level of theory were empirically improved by increasing the abs. energies of the radicals by the quantity $9 \times 10^{-5} \text{ Ne Hartrees}$ (Ne = total no. of electrons of the radical), with a subsequent lowering of the RMS deviation in the larger set to 8.0 kJ.mol⁻¹.
