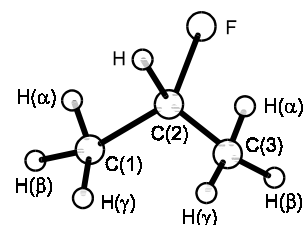


1306  
MW**C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>F****2-Fluoropropane****C<sub>s</sub>**  
H<sub>3</sub>C–CHF–CH<sub>3</sub>

$r_s$ [1]	Å <sup>a)</sup>	$\theta_s$ [1]	deg <sup>a)</sup>
C–C	1.5153 <sup>a)</sup>	C–C–C	113.6(12)
C–F	1.403(20)	C–C–F	108.1(18)
C–H	1.095(6)	C–C–H	110.12(67)
C–H( $\alpha$ ) <sup>d)</sup>	1.093 <sup>a)</sup>	H–C–F	106.6(19)
C–H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	1.090(7)	C–C–H( $\alpha$ ) <sup>d)</sup>	110.1(23)
C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	1.093(5)	C–C–H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	109.80(83)
		C–C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	109.9(10)
		H( $\alpha$ )–C–H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	109.7(10)
		H( $\alpha$ )–C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	109.5(20)
		H( $\beta$ )–C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	108.8(10)
		F–C–C–H( $\beta$ ) <sup>b) d)</sup>	63.3(12)
		F–C–C–H( $\alpha$ ) <sup>b) d)</sup>	–57.6(25)
		F–C–C–H( $\gamma$ ) <sup>b) d)</sup>	–177.1(13)

Atom [1]	$a_s$ [Å]	$b_s$ [Å]	$c_s$ [Å]
H( $\alpha$ ) <sup>d)</sup>	±2.14349	–0.17982	0.23253
C(CH <sub>3</sub> )	±1.26771	–0.73633	–0.11008
H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	±1.32377	–0.75236	0.28820
H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	±1.26736	–0.78536	–0.19883
C(CHF)	0.0	–0.06198	0.37398
H(CHF)	0.0	0.0	1.46763
F	0.0	1.25765	–0.10307



$r_0$ [2]	Å	$\theta_0$ [2]	deg
C–C	1.522(7)	C–C–H( $\alpha$ ) <sup>d)</sup>	109.92(72)
C–F	1.398(13)	C–C–H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	109.47(41)
C–H( <i>sec</i> )	1.092 <sup>a)</sup>	C–C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	110.42(65)
C–H( $\alpha$ ) <sup>d)</sup>	1.093(6)	C–C–F	108.19(41)
C–H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	1.093(5)	C–C–F–C <sup>c)</sup>	123.20(48)
C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	1.088(6)	C–C–C–H( $\alpha$ ) <sup>c) d)</sup>	176.79(66)
		H( $\alpha$ )–C–C–H( $\beta$ ) <sup>c) d)</sup>	119.6(11)
		H( $\alpha$ )–C–C–H( $\gamma$ ) <sup>c) d)</sup>	121.57(96)
		C–C–C–H( $\beta$ ) <sup>c) d)</sup>	57.22(92)
		C–C–C–H( $\gamma$ ) <sup>c) d)</sup>	61.9(11)
		C–C–C	113.37(79)
		C–C–H( <i>sec</i> )	110.20(8)
		H( $\alpha$ )–C–H( $\beta$ ) <sup>d)</sup>	109.84(51)
		H( $\alpha$ )–C–H( $\gamma$ ) <sup>d)</sup>	109.89(77)

<sup>a)</sup> Assumed.<sup>b)</sup> The dihedral angles of the H atoms in the methyl group relative to the CCF plane.<sup>c)</sup> Dihedral angles.<sup>d)</sup> The symbol  $\alpha$  is for the methyl H in CCC plane; the symbol  $\beta$  is for the methyl H *trans* to secondary hydrogen; and the symbol  $\gamma$  is for the methyl H *trans* to the fluorine atom.[1] Hayashi, M., Ikeda, C.: J. Mol. Struct. **223** (1990) 207.[2] Guirgis, G.A., Nanaie, H., Durig, J.R.: J. Chem. Phys. **93** (1990) 3837.

ED, MW

$r_g$	Å <sup>a)</sup>	$\theta_\alpha^0$	deg <sup>a)</sup>
C–C	1.514(4)	C–C–C	114.6(15)
C–F	1.405(5)	C–C(2)–H	109.0 <sup>b)</sup>
C–H	1.13(3)	H–C(1,3)–H	110(3)
		C–C–F	108.5(5)

One C–H bond of each methyl group lies on the CCC plane in the *anti* position to the C–C(2) bond.

The measurements were made at room temperature.

<sup>a)</sup> Estimated limits of error.

<sup>b)</sup> Assumed.

Kakubari, H., Iijima, T., Kimura, M.: Bull. Chem. Soc. Jpn. **48** (1975) 1984.