

K2 F2

(KF)₂

1965

Howard Wilmont F.
et. al.

(Li)

"Inorg Chem" 1965, 14,
no. 2, 409-13 (ann)

(see Li F, III)

K₂F₂ (ve, B₀₀₀)

1963

Turner J.J., Pimentel G.C.,

Science, 1963, 140, N3570, 974-975 (aur)

Krypton fluoride: preparation by the matrix
isolation technique,

RIH Xerox, 1964,

SB14



W

$K_2 F_2$

1972

Краснов К.С. Соломоник В.Г. Морозов Е.Г.
"Теплофизика. Высоких температур"
1972, 10, №4, 760-764

(м.п.)

(см. $Li_2 Cl_2$; III)

(KF)₂

1973

Chem/H
Ji
Ismail Zakya K., Hauge Robert H.,
Margrave J.L. "J. Inorg. and Nucl. Chem"
1973, 35, 49, 3201-3206.

(cont. NaF; III)

$K_2 F_2 \{^2\}$
2721

Howard W.F., Jr., Andrews L.

1975

с.п.
Оценка

Inorg. Chem., 1975, 14, 409

[54]

$K_2 F_2 (r)$



с.п.

K_2F_2 (2) Ault B.S., Andrews d.
1362

1976

и.и.

Осина

J. Amer. Chem. Soc., 1976, 98, 1591
p.

[51]

K_2F_2 (1-)



и.и.

$(\text{KF})_2$

XU-14434

1976

Bp-9977-X)

Bremer P., Karcher M.,
„J. Chem. Phys.”
1976, 64, N 12. 5165-5178

Do
равнов.
реак.
расчет.

60729 (8754
Ch, Ph, TC

(KF) 2

100284-X-B / 976
3-13940

Trugman Stuart, Gordon Roy G.

Calculation of the energies, geometries,
and vibration frequencies of alkali hal-
ide dimers.

"J. Chem. Phys.", 1976, 64, N 11, 4625-4627

(англ.)

067.3 пик

646 652 6 6 5

ВИНИТИ

$(KF)_2$
 $(KF)_3$

15441-57*

empyren

Do, Ji

xb. mex
paerut.

Welch D.

1976

J. Chem Phys 1976,
64(2) 835-9 (eng)

$(CuLiF)_2$; III

70325.I777
TC

40892
(KF)2

~~1974~~
X-5-14434

Brumer Paul, Karplus Martin.

Erratum: perturbation theory and ionic models for alkali halide systems. II. Dimers.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N3, 1388

(англ.)

0839 глн

811 822.830

ВИНИТИ

K_2-F_2

1977

(Ye)

СОЛОМОННИК В.Г.

Рукопись деп. в ИНИТИ 5 дек 1977г.
№ 4387-77 деп

см. Ki_2-Cl_2-III

K₂F₂

1974
Соловьев В.Г.

Структур., Д.
Ср. анал.

Автореферат
диссертации
на соискание
уч. степеней КХН.
и.п.

ИХТН, ИВАНОВО, 1974

$(KF)_2$

1978

Бичеве А. А.

Vi, ном. Диссерт. на соискание ученой
степени кандидата физ.-мат.
наук. Л., ГИИХ, 1978



есть!

KaF_2

Лоттук 16039

1979

колеба-
т. спектр,
геометр.
строение,
сильност.

Соломонов В.Г., Краемов
К.С.,

Исслед. физ. хим., 1979,
53, N 2, 284-289.

(KF)₂

Commun 8105 1979

Schaber H, et al.

(ii)

J. Chem. Phys., 1979,
70 (4), 2029-30.

(cur. KCl; III)

K_2F_2

Communi 12067 / 1981.

Keimar v., et al.

суд. пост.,
среди. анал.
кассан,
Di, Do

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1981,
18, ³ 540-41.



($CuLi_2F_2$), III

K_2F_2

[ser 12191]

1981

Marivannan G., et al.

потенц.
посл.,
посл.
целобене.
раскляне.,
Термоог.
ср-цм.

Z. Naturforsch., A

1981, 36A, (9), 975-979.

●
(см. Li_2F_2 ; III)

K₂F₂.

Lommich 12191 1981.

Manivannan C., et al.

Min;

reconceptus L. Naturforsch., 1981,

A36, 975-79

(KF)₂

1982

Kremers R., Jachuszliwer B.
et al.

гипотеза
на
носпу-
звеном

Metal Bond. and Interact.
High Temp. Syst. Emphasis
Alkali Metals. Symp. 181
Meet. Amer. Chem. Soc., At-
lanta, Ga, March 31-Apr. 3,
1981. Wash. ington, D.C., 1982,
301-307. (rev. (KCl)₂; III)

$(MX)_2$

$M = K, Cs, Rb$

$X = F, Cl$

Электрические
дипольные
поляризуем.

х. 1985, 19, 14

1984

4 Б1301. Измерения электрических дипольных поляризуемостей димеров галогенидов щелочных металлов. Measurements of the electric dipole polarizabilities of the alkali halide dimers. Kremens R., Bederson B., Jaduszliwer B., Stockdale J., Tino A. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 4, 1676—1681 (англ.)

Исследованы отклонения в неоднородном электрич. поле смешанных молек. пучков мономеров и димеров галогенидов щелочных металлов MX , $(MX)_2$ с $M = K, Cs, Rb$ и $X = F, Cl$. Эксперименты выполнены при T -рах 800, 1000 и 1200 К. Степень димеризации варьировалась в пределах 9—43%. Из полученных данных определены поляризуемости димеров. Отмечено, что эксперим. результаты хорошо согласуются с вычислениями в рамках комбинированной модели, основанной на использовании поляризуемостей связей и ионов. Получены след. значения поляризуемостей (в ед. 10^{-24} см^2): $25,3 \pm 3,2$;

$28,6 \pm 3,0$; $43,4 \pm 4,2$; $36,6 \pm 5,0$; $21,2 \pm 2,6$ для $(\text{KF})_2$,
 $(\text{KCl})_2$, $(\text{RbCl})_2$, $(\text{CsCl})_2$ и $(\text{CsF})_2$ соответственно.

Л. А. Коротко

$(KF)_2$

Am. 19285

1984

Krements R., Bederson B.,
et al.,

эксп.
генеральн.
поперечен;
расчет л.п.

J. Chem. Phys., 1984,
80, N 8, 3580-3585.

(KF)₂

31917

1988

Martley, J. G.,
Fink M.

Электромо-
граф.
исслед.
Xe

J. Chem. Phys. 1988,
89 (10), 6058-6063.

(coll. ● NaF; III)

F: K2F2

P: 3

21B1123. Неэмпирическое исследование строения, силовых полей и колебательных спектров димерных молекул фторидов щелочных металлов $MM'F_2$ (M,

$M'=Li, Na, K$) / Соломоник В. Г., Слизнев В. В. // Ж. структур. химии. - 1998. - 39, 2. - С. 196-209. - Рус.

Выполнены неэмпирические расчеты равновесных геометрических параметров, силовых постоянных, частот колебаний и интенсивностей в ИК спектрах молекул LiF_2 , NaF_2 , KF_2 , $LiNaF_2$, $LiKF_2$, $NaKF_2$. Использованы методы Хартри-Фока-Рутана, теории возмущений Меллера-Плессета второго порядка и конфигурационного взаимодействия с включением одно- и двукратных возбуждений и с учетом поправки на квартичные возбуждения и базисы сгруппированных гауссовых функций:

ФЖХ, 1998, №21

1998

Li (9s3p1d/4s3p1d), Na - (12s8p1d/6s4p1d), K - (14s11p3d/9s8p3d), F (9s5p1d/4s2p1d). Согласно расчетам у изученных молекул равновесными являются плоские циклические структуры симметрии $D[2h]$ (у $M[2]F[2]$) и $C[2v]$ (у $MM'F[2]$). Линейные конфигурации $M-F-M'-F$ (симметрии $C['БЕСКОНЕЧН' 'ню']$) на 70-190 кДж/моль менее стабильны, чем циклические; у всех молекул, за исключением $M-F-K-F$, они отвечают локальным минимумам на поверхности потенциальной энергии. На примере рассмотренных молекул обсуждена роль корреляционных эффектов в неэмпирических расчетах геометрии, силовых полей и характеристик ИК спектров молекул с высокой полярностью хим. связей. Теор. силовые поля молекул представлены в канонической форме в системе избыточных естественных колебательных координат. Изучены закономерности силовых полей молекул $MM'F[2]$. Результаты неэмпирических расчетов сопоставлены с имеющимися в литературе эксперим. данными о строении и колебательных спектрах рассмотренных молекул. Библ. 30.

$K_2 F_2$

1991

Chauhan R.S.,
Sharma S.C. et al.

M. n. J. Chem. Phys. 1991.
95, No. C. 4397-4406.
(cell $Li_2 F_2$; III)

K₂ F₂

1996

Смизнев В. В., Соломонович В. Г.
1 Решон. мехвуз. конф. „Актуал.
пробл. химии, хим. технол. и
хим. образ. „Химия 96“ Иванова
м. п. 22-26 апр, 1996. Тез. докл. Ивано-
во, 1996. с. 26-27.

(соединение Li₂ F₂; III)

Am 38380

1996

F: K2F2

P: 3

15B138. Структура димеров галогенидов щелочных металлов. Критический анализ ионных моделей и новых неэмпирических результатов. The structure of alkali halide dimers: A critical test of ionic models and new ab initio results / Topping T., Biermann S., Hoeft J., Mawhorter R., Cave R. J., Szemenyei C. [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 20. - С. 8032-8042. - Англ.

РМХ 1997

K_2F_2

1998

Solomonik V.G. et al.,

cul. rocm.,
cmp-pa,
Di, ab inctio
pa crem

g. struct. Chem. 1998,
39 (2), 158-168

(cul. K_2F_2 ; III)