

K₂F, K₂F+

Do (Xe-F; Kr-F) XI 1704¹⁹⁶⁵
J(?)

Fung Bing-Man

J. Phys. Chem., 1965, 69, N2,
596-600

p965

40

KzF

S. L. N. G. Krishnamachari

1965

N. A. Narasimham, and Mahavir Singh

Интернациональный эмиссионный
центр фторидов хлора и криптона

Current Sci. (India), 34: 75-7
(Feb. 5, 1965)

(см. III, XeF)

Kr F₂ (T)

11

XI 473 1969

A.P. (Kr⁺, Kr F⁺)

Sessa P.A., McGee H.A.

J. Phys. Chem. 82, 73, 16, 2078-2080
(1978)Mass spectrum and molecular
energetics of krypton difluoride

Bull. Chem. Soc. Jpn. 43, 1591

W F

©

KrF, KrF⁺ (pacrim M.N., Do/ " 1971
Liu B., Schaefer H.F., III, XI 2633
J. Chem. Phys., 1971, 55, N5, 2369-3
2374 (atm.)

Krypton monofluoride
and its positive ion.

BK Puz, 1972, 2D194 10 (95)

KrF

KrF⁺

расчет,

20

11

X, 1972, 3.

(3 Б23.) Монофторид криптона и его положительный ион. Liu Bowen, Schaefer Henry F. III, Krypton monofluoride and its positive ion. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 5, 2369—2374 (англ.)

1971

Методом МО ССП произведен расчет KrF и KrF⁺ в расширенном базисе из ФСТ: 1) для Kr 8s 6p5d2f и для F 4s3p2d1f в виде двухчленных функций Клемента, передающих энергии атомов Kr с ошибкой в 0,023 ат. ед. (при оптимизации трех 3d-АО и рассмотрении остальных d-АО и f-АО, как поляризац. поправок) и F с ошибкой 0,0008 ат. ед. или 2) для Kr 10s 9p7d2f и для F 6s 4p3d2f, точно передающих хартри-фоковские энергии атомов. Для KrF расчет потенциальной кривой проводился в предположении основного состояния ²Σ⁺ (заполнены МО 10 σ, 5 π и 1 δ и наполовину заполнена 11 σ), а для KrF⁺ — состояния ¹Σ⁺. Из значений орбитальных и полной энергий следует, что для KrF оба базисных набора

SiC
одель

дают (в пределах 0,1 эв) одинаковые результаты, для KrF^+ кривые параллельны с отличием в 0,17 эв. В хартри-фоковском приближении система KrF оказывается несвязанной и диссоциирует на атомы, кривая для KrF^+ имеет минимум при 1,68А с $D_e = -0,02$ эв (диссоциация на Kr^+ и F). Роль поляризац. функций в KrF очень мала — добавление двух 4d-функций и двух 4f-функций для Kr и трех 3d-функций и двух 4f-функций для F понизило энергию ССП только на 0,0044 ат. ед.; в KrF^+ роль этих функций несколько больше (понижение на 0,0388 ат. ед.) при базисе (2), при базисе (1) понижение больше (0,0525 ат. ед.). Анализ заселенностей при базисе (2) привел к полной заселенности у Kr в KrF 35,90, у F 9,10 (на расстоянии 4,0 ат. ед.), у KrF^+ в равновесии, соотв. 34,85 и 9,15. В KrF при увеличении расстояния уменьшается перенос электронов от Kr к F. Для улучшения данных по энергии диссоциации произведен расчет с учетом конфигурац. взаимодействия с конфигурациями, возникающими при заполнении MO Π и σ и, частично, $12-31 \sigma$. При учете взаимодействия 158 конфигураций кривая для KrF остается отталкивательной, так что KrF должен существовать в газовой фазе только за счет вандер-ваальсова взаимодействия, тогда как для KrF^+ найдена энергия диссоциации 1,90 эв и спектральные константы в хорошем согласии с опытом. Вычислен ряд св-в KrF^+ (дипольный и квадрупольный моменты и т. д.).

М. Дяткина

KrF
KrF⁺

1971

2 Д194. Монофторид криптона и его положительный
ион. Liu Bowen, Schaefer Henry F., III. Krypton
monofluoride and its positive ion. «J. Chem. Phys.», 1971,
55, № 5, 2369—2374. (англ.)

Выполнены неэмпирич. квантово-механические расчеты
молекулы KrF и катиона KrF⁺. Использован большой
базис АО слэтеровского типа, так что полные энергии
метода ССП для обоих двухатомных молекул по оценке
авторов лежат не более чем на 0,005 ат. ед. выше точной
нерелятив. хартри-фоковской энергии. Потенц. кривая

расчет,

М. П.

Рб

17
(1.)
одо

Ф. 1972. 2Д

молекулы KtF в методе ССП отвечает отталкиванию с диссоциацией на атомы $\text{Kt} + \text{F}$. Потенц. кривая KtF^+ имеет минимум при межатомном расстоянии $1,68 \text{ \AA}$ со спектроскопич. константами $D_e = -0,02 \text{ эв}$ и $\omega_e = 810 \text{ см}^{-1}$. Обсуждена роль ф-ций поляризации (d - и f -орбиталей) в расчетах методом ССП в одноконфигурац. приближении. С использованием волн. ф-ции первого порядка исследована электронная корреляция в обеих молекулах. Аналогичный подход приводит к полному согласию с экспериментом для энергий диссоциации ряда небольших двухатомных молекул. Коррелированная волн. ф-ция с учетом 158 конфигураций предсказывает для молекулы KtF осциллирующую потенц. кривую, тем не менее отвечающую отталкиванию. Авторы приходят к выводу, что KtF не может существовать в газовой фазе. Рассмотрена связь полученных результатов с эксперим. доказательством существования KtF в кристаллах KtF_2 методом ЭПР. Волн. ф-ция первого порядка для KtF^+ , содержащая 210 конфигураций приводит к следующим результатам: $r_e = 1,75 \text{ \AA}$, $D_0 = 1,90 \text{ эв}$, $\omega_e = 621 \text{ см}^{-1}$. Эксперим. значение $D_0 \geq 1,58 \text{ эв}$ для KtF^+ . Предсказаны также некоторые молекулярные свойства KtF^+ .

Резюме

KrF⁺

Kb. index

papers

(Ce, W, Do)

101490 Krypton monofluoride and its positive ion. Liu, Bowen; Schaefer, Henry F., III (Res. Lab., IBM, San Jose, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(5), 2369-74 (Eng). Nonempirical quantum mech. calcs. have been carried out on KrF and KrF⁺. A large basis set of Slater functions was used, and the SCF total energies for both diatomics are estd. to lie no more than 0.005 hartree above the exact nonrelativistic Hartree-Fock energies. The KrF SCF potential curve is repulsive and dissoc. smoothly to Kr + F atoms. The KrF⁺ potential curve displays a min. at 1.68 Å and spectroscopic consts. $D_e = -0.02$ eV, and $\omega_e = 810$ cm⁻¹. The importance of polarization functions (*d* and *f* orbitals) in the single configuration wavefunctions is discussed. Electron correlation in both mols. has been investigated by using 1st-order wavefunctions, which have yielded dissocn. energies in excellent agreement with expt. for several smaller diat. mols. A 158-configuration correlated wavefunction predicts a flatter but nevertheless repulsive potential curve for KrF. Except for the van der Waals interaction, KrF is unlikely to exist in the gas phase. The relation between this work and the observation of the KrF ESR in crystals of KrF₂ is discussed. First-order wavefunctions contg. 210 configurations for KrF⁺ yield the following predictions: $r_e = 1.75$ Å, $D_0 = 1.90$ eV, $\omega_e = 621$ cm⁻¹. Chupka and Berkowitz report the exptl. value $D_0 \geq 1.58$ eV for KrF⁺. Several mol. properties are predicted for KrF⁺.

1941

C.A. 1941. 15-16

Kr F

X-8402

($x^2 \Sigma$; u.n.) bonding.

mun. ocr.
coem.

E S R spectra of matrice
isolated cesium monoxide
and rubidium monoxide molecules.
 $^2\Sigma$ Ground states and inner shell

Lindsay D.M.

"J. Chem Phys." 1974. 60(1) 315-17.

(Eng)

(all Cs O; III)

C.A. 1974. 80. N1B.

XeBr, XeCl, XeF, KrF 1975
(u.n.) XI-4725

Brau C.A., Ewing J.J.,
J. Chem. Phys., 1975, 63 (11)
4640-7.

Emission spectra of

C.A. 1976. 84 N6. 370122. 10  6

1975

KrF

XeCl

генерация
излучения

2 Д1147. Генерация излучения в полосе $^2\Sigma_{1/2}^+ - ^2\Sigma_{1/2}^+$ KrF и XeCl. Ewing J. J., Brau C. A. Laser action on the $^2\Sigma_{1/2}^+ \rightarrow ^2\Sigma_{1/2}^+$ bands of KrF and XeCl. «Appl. Phys. Lett.», 1975, 27, № 6, 350—352 (англ.)

Получена генерация в молекулярной полосе $^2\Sigma_{1/2}^+ - ^2\Sigma_{1/2}^+$ KrF (249 нм) и XeCl (308 нм) при возбуждении смесей Ar+Kr+F₂ и Ar+Xe+Cl₂ (соотношение компонент 100:10:0,1) интенсивным электронным пучком ($E=600$ кв, $J=150$ а/см², $\Delta t=100$ нсек). Предполагается, что возбужденные молекулы KrF и XeCl образуются в результате процесса $Kr^* + F_2 \rightarrow K_2F^* + F$. Энергия генерируемого излучения составила 50 мкдж для XeCl и 6—8 мдж для KrF, что соответствует к. п. д. $\sim 0,4\%$. Измерены временные и спектральные характеристики излучения. Обсуждаются пути повышения эффективности генерации подобных лазеров. Библ. 9. X. В.

Ф1976 N2

(41) 8

60301.4352

TC, Ch, Ph

41125

K_uF

1975

X 4-11794

Golde M.F.__ Interpretation of
the oscillatory spectra of the inert-gas
halides. "J.Mol.Spectrosc.", 1975, 58, N 2,
261-273 (англ.)

0567 пик

543 545

560

ВИНИТИ

KrF

* 8-16663

1976

XeF

XeCl

u. n.

creutz
b. marfay

86: 24093j Absorption and emission spectra of matrix-isolated xenon monofluoride, krypton monofluoride, xenon monochloride, and xenon monobromide. Ault, Bruce S.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). J. Chem. Phys. 1976, 65(10), 4192-201 (Eng). Argon matrix samples of Kr/F₂, Xe/F₂, Xe/Cl₂, and Xe/Br₂ were photolyzed at 20 K. Emission spectra using UV excitation and UV absorption spectra following photolysis are assigned to the KrF, XeF, XeCl, and XeBr mols. Vibrational spacings on 2 KrF and 2 XeF absorption bands are near RbF and CsF values, which supports the ionic model for the excited states. The vibronic KrF and XeF absorptions, and 2 very sharp XeCl bands, indicate ground state potential function minima near the ionic excited state values. This suggests that chem. bonding effects are significant in ground state KrF, XeF, and XeCl.

(+2)

IX



C.A. 1977 86 N4

60503.7247
Ex-AR/KP-z,
Ch, Ph, TC

40892

КчФ (сметр
в замр)

1976

XU-2618

B9-XI-4794

Ault Bruce S., Andrews Lester.

Absorption and emission spectra of
argon matrix-isolated XeF and KrF.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 7, 3075-3076
(англ.)

0805 ~~мкм~~ (см XeF; 10)

591 592

597

ВИНИТИ

70114.4208

Ex-AR/KP-z, Pl,

Ch. TC. MGU

38100

1976

KKF

X 4-16260

Burnham R. Djeu N. Ultraviolet-
preionized discharge-pumped lasers in
XeF, KrF, and ArF.

"Appl. Phys. Lett.", 1976, 29, N 11,

707-709 (англ.)

0788 711X

771 773 7.8 0

ВИНИТИ

KrF

1976

11 Д119. Электронные состояния KrF. Dunning Thom. H., Jr, Hay P. Jeffrey. Electronic states of KrF. «Appl. Phys. Lett.», 1976, 28, № 11, 649—651 (англ.)

Выполнен неэмпирич. расчет электронных состояний молекулы KrF с взаимодействием $Kr+F$, $Kr^{++}+F^{-}$ и $Kr^{*}+F$. Основной терм молекулы — отталкивательный и дает продукты $Kr+F$. В остальных случаях получаются устойчивые состояния со значениями электронных энергий $\sim 5,24 \div 2,95$ эв, энергиями диссоциации $5,24—5,3$ эв и частотами колебаний $\omega_e \approx 341 \div 356$ см⁻¹. Найдено, что вероятности радиационных переходов из этих состояний на основной отталкивательный терм лежат в пределах $(1,3 \div 15) \cdot 10^7$ сек⁻¹, а сами переходы хорошо соответствуют наблюдаемым лазерным переходам в этой молекуле.

Б. Ф. Гордиец

Е.И. М.П.; Д.

ф. 1976 № 11

Kr F

#4-13541

1976

Зієкрф.
снєкрф

85:39128c Electronic states of krypton monofluoride. Dunning, Thomas H., Jr.; Hay, P. Jeffrey (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N. Mex.). *Appl. Phys. Lett.* 1976, 28(11), 649-51 (Eng). Ab initio calcns. are reported for the electronic states of KrF arising from the Kr + F, Kr⁺ + F⁻, and Kr^{*} + F sepd. atom limits. It was concluded, in agreement with earlier assignments, that the obsd. laser transition is C(1/2)-X(1/2)(5.15 eV calcd., 5.00 eV obsd.). The calcd. lifetime of the C(1/2) state is 6.5 nsec. The ionic ²I state lies close to the ionic ²Σ⁺ state.

C.A. 1976 85 n 6

KZF

1976

Eden J. Gory

(unrep
y.g. chief)

From
Index
90

Gov. Rep. Announce
(U.S.) 1976, 76(24),

(all Net, III)

Kr F

Joel Hays A. K.

1976

J. Chem. Phys 1976,

65(11) 4473-82 (eng)

(cm Xe Br; III)



70217.20

KrF

1976

Ch, Ph, DB, TC, MG U

40892

A 5-16875

Tellinghuisen Joel, Hays A.K.,
Hoffman J.M., Tisone G.C. Spectroscopic
studies of diatomic noble gas halides.
II. Analysis of bound-free emission from
XeBr, XeI, and KrF. "J. Chem. Phys.",
1976, 65, N 11, 4473-4482 (англ.)

(см. XeBr; IV)

771 773 807 0815 лнк · ВМННТИ

70124.11
Ch, Ex-C, Ph,
TC, MGU

Kr F

40892

1976

* 18-16329

Velazco J.E., Kolts J.H., Setser D.W.
Quenching rate constants for metastable
argon, krypton, and xenon atoms by fluo-
rine containing molecules and branching
ratios for XeF^+ and KrF^+ formation. "J.
Chem. Phys.", 1976, 65, N9, 3468-3480
(англ.)

0795 ПИХ

743 757 787 (сш. XeF; и) ВИННИТИ

Kr F

Brus L. E.

1977

M.
L^xar.

"J. Mol. Spectrosc." 1977,
64, n 3, 376-381 (a.u.u.)

(au Kr F, III)

70401.4835

■ Ch, Ph, MGU, TC

KvF⁴⁰⁸⁹²
(м.и.)

1977

#4-17792

Clugston Michael J., Gordon Roy G.
Electron-gas model for open shell-closed
shell interactions. I. Application to the
emission spectra of the diatomic noble-gas
halides.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 1, 239-243

(англ.)

(сщ. Хе I, III)

0851 мкк

803 809 8 4 2

ВИНИТИ

KrF

ЖЗ-17650

1977

14 Б27. Электронные состояния KrF. Hay P. Jeffrey, Dunning Thom H., Jr. The electronic states of KrF. «J. Chem. Phys.» 1977, 66, № 3, 1306—1316 (англ.)

В области межъядерных расстояний R от 2,75 до 10 ат. ед. рассчитаны потенциальные кривые тех состояний молекулы KrF, к-рые отвечают след. комбинациям состояний изолированных атомов: $Kr(^1S) + F(^2P)$, $Kr + (^2P) + F - (^1S)$ и $Kr^*(^3P) + F(^2P)$. Вычисления проведены методом поляризац. конфигурац. взаимодействия с базисным набором сгруппированных гауссовых функций s -, p - и d -типа с добавлением поляризац. и диффузных орбиталей. Результаты приведены для состояний симметрии $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$. Потенциальные кривые, относящиеся к низшему диссоциац. пределу $Kr(^1S) + F(^2P)$, описывают отталкивательные состояния системы. Связанные ионные состояния симметрии $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ оказываются почти вырожденными в рассматриваемой области значений R . Энергия связи по отношению к изолированным ионам составляет 5,2—5,3 эв при $R_e = 2,4—2,5$ А. Низшее рид-

Ес; м.ч.

X.1977. N14

бергово состояние симметрии $^2\Sigma^+$, относящееся к диссоциац. пределу $\text{K}\Gamma(^3P) + \text{F}(^2P)$, также является связанным. Для всех состояний проведены вычисления дипольного момента как функции R . Рассчитаны также потенциальные кривые электронных состояний с учетом спин-орбитального взаимодействия (СОВ). Для этого проведена диагонализация матрицы, полученной сложением матрицы молек. энергий, рассчитанных без учета СОВ, и диагональной матрицы СОВ, составленной на основании эксперим. данных для изолированных атомов. С учетом и без учета СОВ рассчитаны моменты электронных переходов в зависимости от R . На основании результатов вычислений основная полоса в спектре испускания $\text{K}\Gamma\text{F}$ при 248 нм, ранее отнесенная к переходу $^2\Sigma_{1/2}^+ - ^2\Sigma_{1/2}^+$ интерпретирована как полоса перехода между низшими ионным и ковалентным состояниями $\text{III } 1/2 - \text{I } 1/2$, где I и III — обозначения состояний с $\Omega = 1/2$, волновые функции к-рых в основном включают функции типа $^2\Sigma^+$.

А. В. Немухин

КчФ

4-17650

1977

7 Д163. Электронные состояния KrF , Hay P. Jeffrey, Dunning Thom. H., Jr. The electronic states of KrF . «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 3, 1306—1316. (англ.)

Выполнен неэмпирич. расчет электронных состояний KrF , наиболее интересных для получения лазерной генерации и дающих в диссоциационном пределе пары $\text{Kr} + \text{F}(^2P)$, $\text{Kr} + (^2P) + \text{F}^-$ и $\text{Kr}^*(^3P) + \text{F}(^2P)$. Полуэмпирич. способом в расчетах учтено спин-орбитальное взаимодействие. Рассчитанные потенциальные кривые $X^2\Sigma^+$ и $1^2\Pi$ для ковалентной связи являются отталкивательными. Ионные же потенциальные кривые $2^2\Pi$ и $2^2\Sigma^+$ имеют глубину потенц. ямы $\sim 5,2$ эв с равновесным межъядерным расстоянием $r_e \approx 2,4 \div 2,5$ Å. Ридберговское состояние $3^2\Sigma^+$ (дающее в пределе пару $\text{Kr}^*(^3P) + \text{F}(^2P)$) также связанное, с глубиной ямы 1,33 эв и $r_e = 1,83$ Å. Вычислены также дипольные моменты состояний и их радиационные времена жизни. Дана идентификация лазерных переходов. Б. Ф. Горднец

Эмпирич.
структ.

ор. 1977. № 7

KrF

XU-17650

1977

86: 130169y The electronic states of krypton monofluoride.
† Hay, P. Jeffrey; Dunning, Thom H., Jr. (Los Alamos Sci. Lab.,
Univ. California, Los Alamos, N. Mex.), *J. Chem. Phys.* 1977,
66(3), 1306-16 (Eng). Ab initio configuration interaction calcs.
for the electronic states of KrF are presented. States dissociating to
Kr + F(2P), Kr(2P) + F $^-$ and Kr(3P) were investigated. Spin
orbit coupling was included in a semiempirical manner for the
covalent and ionic states. The covalent curves are essentially
repulsive in character, while the attractive ionic curves have
wells 2.2-5.3 eV deep with calcd. R_e 's of 2.4-2.5 Å. The lowest
 $^2\Omega^+$ Rydberg state also forms a bound state with calcd. values of
 $R_e = 1.83$ and $D_e = 1.33$ eV. The intense laser emission at 248
nm arises from the transition between the lowest ionic $\Omega = 1/2$
to covalent $\Omega = 1/2$ states calcd. to occur at 241 nm with a
spontaneous lifetime of 7 nsec. The obsd. emissions at 220 nm
and 275 nm are assigned.

C.A. 1977. 86 N 18

KrF

1974

clazep

88:128785u Large scale discharge pumped molecular halogen lasers. Hunter, R. O.; Howton, C.; Oldenettel, J. (Maxwell Lab., Inc., San Diego, Calif.). AIAA Pap. 1977, 77-26, 15 pp. (Eng): The phenomena that control the volumetric scaling of electron beam sustained discharges in attaching media characteristic of that assocd. with rare gas-halogen mixts. is presented in terms of the performance of a large KrF laser. A delicate balance between the desire for high input powers and large ratios of gain to background absorption and the constraints imposed by discharge stability is involved for a device in which a large fraction of the energy input is through the discharge. In particular, the ratio of gain to absorption at the lasing wavelength is the primary figure of merit in that halogen systems have both transient and ground state absorptions which will restrict the optical extn. efficiencies. Data is reported on a large KrF laser operating in both a direct pumped and discharge enhanced mode. Record single pulse energies were obtained for the KrF laser single pulse energies for both the discharge mode (~50 J) and direct pumped (~350 J) mode of operation.

C.A. 1978, 88, N18

Образование KrF и ArF

1977

80: 67855p Light emission produced by reactions between rare gas ions and fluorine-containing gases. Jones, E. Grant; Sides, Gary D. (Brehm Lab., Wright State Univ., Dayton, Ohio). U. S. NTIS, AD Rep. 1977, AD-A050334, 53 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announc. Index (U. S.) 1978, 78(10), 116. An effort is reported to det. whether excited rare gas halides, specifically, KrF and ArF, could be produced by ion-mol. reactions between the rare gas at. ions and fluorine-contg. gases such as F₂, NF₃, and SF₆. No excited rare gas halide emissions were obsd. for any of the systems studied. Emissions resulting from the ion-mol. reactions investigated were all at. and could be assigned to He, F, F⁺, Ar, Ar⁺, Kr, Kr⁺, N or N⁺ transitions.

список
неуказан.

(41) ☒

C.A. 1978, 89, N8

1977

KrF
XeF

Образован.
масску.
при фотолизе
(+1) 

: 10 B163. Исследование МКД и МКПИ неустойчивых и стабильных соединений при матричной изоляции. Krausz E. R., Mowery R. L., Schatz P. N. MCD and MCPE studies of transient and stable matrix isolated species. «Int. Conf. Matrix Isol. Spectroscopy. Diskussionstag. Dtsch Bunsen-Ges. Phys. Chem. West—Berlin, 1977. Extended abstr.» Berlin, s. a., 260—265 (англ.)

Разработана методика исследования МКД и МКПИ (изучения с круговой поляризацией в магнитном поле) в видимой и УФ-области неустойчивых соединений в матрицах благородных газов при низких т-рах. Изучены спектры МКД и МКПИ соединений, образующихся при фотолизе F_2 или Cl_2 в аргоновой, криптоновой или ксеноновой матрице. Показано, что при фотолизе в матрицах образуются радикалы KrF , XeF и т. п. Обсуждается природа спектров МКДИ и МКПИ этих соединений.

А. В. Бобров

ж. 1978, N10

КчФ *

оттиск 5687

1977

1 Д360. Электронная структура эксимеров инертный газ — галогид. Krauss M. The electronic structure of rare gas halide excimers. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 4, 1712—1719 (англ.)

Состояния эксимеров инертный газ — галогид проанализированы в рамках электростатич. модели с учетом смешивания ионных и нейтральных конфигураций. Показано, что энергетич. расстояние между состояниями $^2\Sigma$ и $^2\Pi$ сильно зависит от этого смешивания. Для энергии состояний получено выражение риттнеровского типа. Последнее параметризовано для потенц. кривых эксимера KrF^* . Результаты для KrF^* хорошо согласуются с результатами ab initio расчета потенц. кривых этого эксимера. Получено выражение для моментов перехода и выполнен качеств. анализ этих моментов для KrF^* . В соответствии с предсказаниями теории ab initio доминирующими являются переходы $^2\Sigma^+ \rightarrow ^2\Sigma^+$. Показано, что моменты перехода сильно зависят от межъядерного расстояния, а следовательно, и от колебательного квантового числа. Библ. 40.

В. С. Иванов

Электронная
структура.

Ф. 1978
N 1

KrF

mmmcu 5687

1977

nb. exc.
factor

87: 159252b The electronic structure of rare gas halide excimers. Krauss, M. (Phys. Chem. Div., Natl. Bur. Stand., Washington, D. C.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(4), 1712-19 (Eng). The rare gas halide excimer states were analyzed in terms of an electrostatic model that includes mixing between the ionic excimer and neutral ground configurations. The energy splitting between the 2Σ and 2Π excimer states is strongly affected by this configuration mixing. A Rittner type energy expression is derived and parametrized for the KrF^* excimer energy curves, which are in good agreement with the ab initio curves of T. H. Dunning and P. J. Hay (1976). Perturbation expressions are also derived for the dipole and transition moments of this system. The long-range formulas are compared with the available ab initio literature. These expressions are then applied to a qual. anal. of the transition moments of KrF^* . The $2\Sigma^+ \rightarrow 2\Sigma^+$ transition is dominant, in agreement with the ab initio results. The transition moment can actually be viewed as a small admixt. of the large ionic dipole moment. Since the dipole moment varies as R and the mixing coeff. as $\exp(-\alpha R)$, it is apparent that the transition moment will vary rapidly as a function of R and also of the vibrational quantum no.

C. A. 1977, 87 N20

№ F *

1977

Manill A. et al.

установка
д/оптм.
возмущения

Rev. Sci. Instrum. 1977,
48(11), 1434-5 (Eng.)

см. № F

KrF

1977

enerp
gryofey

87: 31483k Theoretical modeling of the krypton fluoride fluorescence spectrum. Rescigno, T. N.; Winter, N. W. (Lawrence Livermore Lab., Univ. California, Livermore, Calif.). Report 1976, UCRL-78410, 5 pp. (Eng). Avail. NTIS. From ERDA Energy Res. Abstr. 1977, 2(8), Abstr. No. 20640. Dunning's and Hay's electronic potential curves were used to compute transition moments and to predict emission profiles for comparison with the obsd. fluorescence spectra. By adjusting the ionic and valence states by 8 nm, many of the obsd. spectral features can be quant. accounted for. The synthetic spectrum of KrF includes the 220-nm $D_{1/2} \rightarrow X$ transition, the 249-nm composite feature, and the 276-nm feature which is a superposition of the nearly coincident $C_{3/2} \rightarrow A_{3/2}$ and $B_{1/2} \rightarrow 1/2$ transitions. The feature obsd. at 300 nm by Powell and Murray is likely due to a transition from the $2u_{1/2}$ Rydberg state to the repulsive $A_{1/2}$ state. The 400-nm feature may be due to a triat. complex.

C. A. 1977, 87 n 4

KrF

1977

character
vibrations

88: 29937p Theoretical modeling of the krypton monofluoride fluorescence spectrum. Rescigno, Thomas N.; Winter, N. W. (Lawrence Livermore Lab., Univ. California, Livermore, Calif.). *Electron. Transition Lasers 2, [Proc. Summer Colloq.], 3rd* 1976 (Pub. 1977), 56-62 (Eng). Edited by Wilson, Leroy E.; Suchard, Steven N.; Steinfeld, Jeffrey I. MIT Press: Cambridge, Mass. The electronic potential curves and computed transition moments given by T. H. Dunning and P. J. Hay (1976) were used as a basis for solving the nuclear motion problem to predict detailed emission profiles that can be compared with the obsd. fluorescence spectra. By adjusting the ionic and valence states by 8 nm many of the obsd. spectral features can be quant. accounted for. The entire synthesized spectra for KrF is shown, including the 220-nm $D_{1/2} \rightarrow X$ transition, the 249-nm composite feature and the 276-nm feature which is a superposition of the nearly coincident $C_{3/2} \rightarrow A_{3/2}$ and $B_{1/2} \rightarrow A_{1/2}$ transitions.

C. H.; 1978, 88, N4

KrF

расчет
спектров
свечения

7 Д1022. Спектр излучения для связанно-свободных переходов молекулы KrF^* в реакциях тушения атомов $\text{Kr}(5s[3/2]_2)$ и $\text{Kr}(5s[3/2]_1)$. Tamagake K., Setser D. W. Simulation of the bound-free KrF^* emission spectra from reactive quenching of $\text{Kr}(5s[3/2]_2)$ and $\text{Kr}(5s[3/2]_1)$ atoms. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 10, 4370—4383 (англ.)

Выполнен численный расчет спектра свечения молекул KrF^* (переходы $\text{III}_{1/2} \rightarrow \text{I}_{1/2}$ и $\text{II}_{3/2} \rightarrow \text{I}_{3/2}$), образующихся в результате реакции метастабильных атомов Kr^* с F_2 , NF_3 и CF_3OF . Исследована зависимость формы спектра от ряда параметров верхнего и нижнего состояний и распределения заселенностей по колебательным и вращательным подуровням. Сравнение рассчитанных спектров с полученными экспериментально позволило уточнить форму потенц. кривых и определить распределение молекул по колебательным состояниям. Проанализированы изменения в распределении (и спектре) при увеличении давления реакционной смеси. Обсуждены возможности использования разработанного метода при исследовании других типов реакций. Библи. 31.

X. B.

Ф, 1978, № 7

K₂F

Velasco J. E. 1977

u.n.

"Chem Phys Lett" 1977,
46, n1, 99-106 (anon)
(on Xe F, IV)

K₂F ommea 6674 1978

noemosa. Adrian F. J.; et al

cheyroa.

emfyat.

J. Chem. Phys.

75, 1978, 68 (10), 4696 -

- 4706

KrF

ссылка 6521

1948

Dunning T. H., Hay P. J.

кв. смех.
расчет.

J. Chem. Phys., 1948, 69(1),
134-49.



см. Ref; III

KrF

11 Б1324. Тушение $KrF(B)$ соударениями с He, Ne, Xe и NF_3 . Eden J. G., Waynant R. W., Searles S. K., Burnham R. $KrF(B)$ quenching by He, Ne, Xe, and NF_3 . «J. Appl. Phys.», 1978, 49, № 11, 5368—5372 (англ.)

*Кинетика
затухания
молекулы*

Изучали кинетику затухания свечения KrF^* в переходе $B \rightarrow X$ при 249 нм в присутствии различных тушащих газов Q в зависимости от давл. (до 1000 мм). Молекулы KrF^* получали импульсным фотолизом KrF_2 . Поток газа-носителя, содержащего KrF_2 и добавку Q, облучали импульсами света 193 нм перехода $ArF(B \rightarrow X)$, возбуждаемого при облучении импульсным пучком быстрых электронов газовой смеси 99,5% Ar и 0,5% F_2 при полном давл. ~ 2000 мм. Получены след. значения констант скорости тушения $KrF^*(B)$ различными Q ($см^3/сек$ или $см^6/сек$): He $(3,3 \pm 1,1) \cdot 10^{-13}$; $2He \leq 10^{-33}$; Ne $(1,6 \pm 0,4) \cdot 10^{-12}$; $2Ne < 10^{-32}$; Xe $> 10^{-9}$; $NF_3 (5,2 \pm 0,5) \cdot 10^{-11}$. Большое значение константы скорости для Q=Xe указывает на возможный хим. механизм переноса энергии, при к-ром в результате тушения $KrF^*(B)$ атомами Xe образуется XeF в состояниях D или B. Этот механизм доказан наблюдением излучения XeF($B \rightarrow X$) при 350 нм.

В. Е. Скурат

ж. 1979, № 11

KrF ommeu 6484 1978

Grigley R.P., Hughes W.M.

Appl. Phys. Lett., 1978, 32(10)

627-629

The radiative lifetime and
quenching ● of KrF.

1978

Кч F

Xe F

спектр
испускания.

(41) A

7 Б1503. Возбуждаемые в искровой разряде спектры испускания в вакуумной ультрафиолетовой области фтора и некоторых многоатомных фторидов в смесях с благородными газами. Scheps R., Ryan F. M. Vacuum ultraviolet spark emission spectra of fluorine and some polyatomic fluorides in noble gases. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 58, № 3, 417—420 (англ.)

В области 120—200 нм при разрешении 0,01—0,15 нм исследованы спектры испускания, возбуждаемые искровым разрядом в ряде фторсодержащих газов (F_2 , SF_6 , SO_2F_2 , NF_3 , CH_3F , N_2F_4 , BF_3) в смесях с 700 мм He и 2—20 мм Ag. Кроме того, исследовали излучение при 158 нм в смесях $F_2 + He$, $F_2 + Ne$ и в чистом F_2 . Интенсивность этого излучения измеряли в зависимости от плотностей F_2 и благородных газов с целью выяснения механизма заселения соотв-щего возбужденного уровня F_2 . Искровой разряд (длительность импульса 150 нсек, сила тока 200 а) происходил в разоре 1 мм между Ni-электродами с частотой 20 гц. Для большинства тройных смесей наблюдали эксимерное излучение

2. 1979, N 7

AgF, к-рое было наиболее интенсивным в смесях, содержащих F₂. Оно не обнаруживается в смесях с фреонами или BF₃: его интенсивность, по крайней мере, в 100 раз ниже, чем для смесей с F₂. Зависимость интенсивности эксимерной флуоресценции AgF от типа донора фтора коррелирует с известными из литературы данными по аналогичным зависимостям, полученным для эксимерных лазеров на KгF и ХеF. Это показывает, что методика возбуждения спектров испускания AgF в искровом разряде может использоваться для отбора фторсодержащих молекул, перспективных с точки зрения их использования в эксимерных лазерах. В чистом F₂ и его смесях с He и Ne (но не с Ar) наблюдали полосу испускания 158 нм, к-рая предположительно приписана переходу F₂(³P_g → ³P_u). Подобный переход ³P_{2u} → ³P_{2g} при 301,5 нм предположительно был обнаружен ранее для молекулы J₂.

В. Е. Скурат

от
тутся

KrF⁺

оттиски 7098

1978

10
част
нов.
ele
Xe
(a

четы A-F⁺, KrF⁺ и XeF⁺ мето- MO с
сплением оболочек валентных электро-
gran A. B., De B. K. Selected valence-
shell MO calculations on ArF⁺, KrF⁺, and
Quant. Chem., 1978, 14, № 3, 329-331

емпирич. методом MO Харриса и Пола («J. Chem.
Phys.», 1965, 42, 3648) рассчитаны потенциальные кри-
вые основы для соединения ионов ArF⁺, KrF⁺ и XeF⁺.
Рассчитанные значения энергий диссоциации составили
2,22; 1,85 и 1,33 эв, а равновесных межъядерных рас-
стояний — 2,84; 3,12 и 3,55 ат. ед. соотв. для ArF⁺,
KrF⁺ и XeF⁺. Для KrF⁺ результаты вычислений хоро-
шо согласуются с данными неэмпирич. расчета методом
ССП МО ЛКАО, однако, частота колебаний ω_e для
KrF⁺ в 1,4 раза превышает неэмпирич. значение. Расчет
дипольных моментов привел к значениям 0,70; 0,20 и
0,58 D соответственно.

И. А. Тополь

кв. мех.
расчет

20

6529
89-XI-6359

И

х. 1979, N 10

(см. ArF⁺; III)

1979

KrF

XeF

расчет
сечения иконст. скорости
тушения

(+1)

Ф. 1920 № 5

D 5 Д329. Теоретическое исследование тушения эксимеров KrF и XeF электронами низкой энергии. Theoretical study of the deexcitation of KrF and XeF excimers by low-energy electrons. Hazi A. U., Rescigno T. N., Orel A. E. «Appl. Phys. Lett.», 1979, 35, № 7, 477—479 (англ.)

В приближении Борна—Оппенгеймера в первом порядке нестационарной теории возмущений рассчитаны сечения и константы скорости тушения газообразных эксимеров KrF и XeF электронами, энергия которых не превышает 50 эв. В расчетах, выполненных с учетом конфигурационного взаимодействия, использованы волн. ф-ции ab initio. Величины констант для реакций $e^- + RF(B) \rightarrow e^- + RF(X)$ равны (в $\text{см}^3 \cdot \text{сек}^{-1}$) $7 \cdot 10^{-8}$ и $3 \cdot 10^{-8}$ для $R = \text{Kr}$ и Xe соответственно. Библ. 17.

He F

1979

Julienne P.S., et al.

examples
repeated

Appl. Phys. Lett. 1979,
35, no. 1, 55-7



coll. He F - III

Kr F

Tellinghuisen Joel

1979

спектр
испуск.

Top Meet Excim. Lasers.
Dig. Techn. Pap., Charleston
S.C., 1979

See cell i' III

KrF Shimaechi et al 1973

J. Chem. Phys. 1979, 71
3538

Absorption lines in the
ArF and KrF ● laser spectra

№ F

1980

Brashears H.C., et al.

J. Phys. Chem. 1980, 84(2)
224-C.

спектр
исследован.

с. № F- 111

KvF [ommu 11491] 1980.

Brasheara H.C.; et al.

peaks. J. Phys. Chem., 1980, 84(20)
образ
2495-97
di

спектр
испек.

KrF Communs 10521 1980

Berber T., et al.

Opt. Commun., 1980,

35 (2), 242-44.

High efficiency KrF excimer
flashlamp.

Ka.F

[number 9121]

1980

Magpies
Chickadees

Hitchinson M.H.R.

Appl. Phys. 1980, 21
95-114.

Excimer and Excimer Lasers

KrF

say up.

93: 228231g Discharge pumped rare gas monofluoride laser with x-ray preionization. Sumida, S.; Kaburagi, M.; Obara, M.; Fujioka, T.; Sato, K. (Dep. Electr. Eng., Keio Univ., Yokohama, Japan 223). *Proc. Int. Conf. Lasers* 1979 (Pub. 1980), 219-23 (Eng). A high-energy KrF laser excited by the fast elec. discharge with x-ray preionization is described. Excitation was made by a pulse charged water line. A KrF laser energy d. of 1.8 J/L was obtained in a 60-nsec pulse for a high-pressure mixt. of 5% Kr and 0.1% F₂ in He. Electron no. d. produced by flash x-ray photons in various rare gases was directly measured with an ionization chamber. The x-ray preionization was more effective in gas lasers using higher-mass (i.e. larger absorption cross-section of x-rays) such as KrF and XeF, because preionization electrons can be generated efficiently in such laser gases.

C. A. 1980. 93, N24

Kz F

1980

Waynant R.W., Eder J. G.

оректър Proc. Int. Conf. Lasers 79,
Orlando, Fla, 17-21 Dec.,
1979, McLean, Va, 1980,
147-153. ● (ex. Xe F; III)

KrF-lasers

1981

' 96: 113200r Electron-beam krypton fluoride (KrF*) laser with high specific energy output. Buchnev, V. M.; Klementov, A. D.; Sergeev, P. B. (P. N. Lebedev Phys. Inst., Moscow, USSR). *Proc. Int. Conf. Lasers* 1980 (Pub. 1981), 841-3 (Eng). A KrF* electron beam-pumped laser was studied with a specific pumping power of $1.6 \text{ MW/cm}^3 \text{ atm}$ with the gas mixt. at pressures of 1-5 atm. The laser operates in a single-mode regime at powerful electron beam pumping and at 10% efficiency at 3-4 atm. At this efficiency the limitations on the energy input arise from the requirement that the av. gas mixt. temp. during the pumping pulse should be within the optimum range, i.e., $\sim 400 \text{ K}$. The pumping pulse duration is 50-100 ns. If the initial gas temp. is $\sim 300 \text{ K}$, the energy input of $0.13 \text{ J/cm}^3 \text{ atm}$ is attainable for optimal gas mixts. of Ar, Kr, and F₂. Thus the energy output of 40-50 J/L at 10% efficiency may be achieved in the KrF electron beam-pumped laser at 3-4 atm.

C. A. 1982, 96, N14.

KrF⁻

1981

96: 91919c Negative ion formation of krypton and xenon fluorides. Minehara, Eisuke; Abe, Shinichi (Div. Phys., Tokai Res. Establ., Japan). *Iongen to Ion o Kiso toshita Oyo Gijutsu, Shinpojumu*, 5th 1981, 245-8 (Eng). Edited by Takagi, Toshinori. Ion Kogaku Kondankai: Kyoto, Japan. Neg.-ion formation was studied by using a Penning ion source with radical extn. The existence of KrF⁻ was confirmed by observing the mass spectrum of KrF₂ in the KrF mass region.

gok-bo

cepuscmob.

uacc cnkmp

KrF₂

©.A.1982, 96, N12

K₂F

1981

Verkhovskii V.S., Mel'-
chenko S.V., et al.

лазерное

излучен. Kvantovaya Elektron.,
(Moscow) 1981, 8 (2),
417-419.

(см. Ar F; III)

KrF

1981

сверх
мощн.
флуорес.

97:136359j A UV-preionized krypton fluoride excimer laser with an output energy of 0.42 J. Yuan, Cailai; Shangguan, Cheng; Ye, Chao; Dou, Airong; Ling, Yingyi (Shanghai Inst. Opt. Fine Mech., Acad. Sin., Shanghai, Peop. Rep. China). *Jiguang* 1981, 8(12), 4-7 (Ch). A high-power, high-efficiency, UV-preionized KrF ($\lambda = 248$ nm) excimer laser was constructed and its operating characteristics studied. The max. output energy was >420 mJ/pulse. The lasing and the fluorescence spectra of the KrF laser were studied. The effect of added Ne in the working gas mixt. on lasing energy was also investigated.

©.A.1982, 97, N16

KrF

1982

100:14785e Study of the dynamics of electronically excited states after excitation with an excimer laser. Dornhoefer, G. (Max-Planck-Inst. Stroemungsforsch., Goettingen, Fed. Rep. Ger.). Report 1982, MPIS-14/1982; Order No. N83-27209, 89 pp. (Ger). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1983, 83(22), 5321. The dynamics of electronically excited states of gaseous substances were temporally and spectrally resolved. The lines of KrF and ArF excimer lasers were used to selectively populate vibrational states in CF₂ and CS, and to subsequently study the dynamics of the relaxing mol. Its fluorescence was spectrally resolved with a monochromator and temporally with a secondary electron multiplier. The CS radical in the ground state is formed by photolysis of CS₂. Its excitation function, fluorescence and vibrational deactivation mechanism were obtained. Vibrational deactivation and rotational relaxation mechanisms of CF₂ are discussed.

спектр
исследования

(H) X

c. A. 1984, 100, 42

KzF

1982

Fisher C. H.

Gov. Rep. Announce.

Магера

Indesc (U. S.) 1982, 82(8),
1639.

•
(eu. XeF; III)

F+Kr

1 Ommeck 14516)

1982

синхротр.
роисцен-
ление

Haberland H.,

Z. Phys., 1982, A 307,
v1, 35-39.

KrF*

1982

17 Б219. Анализ спонтанного испускания KrF* при 400 нм. Analysis of KrF* spontaneous emission at 400 nm. Luches A., Perrone A. «ESCAMPIG 82: 6th Eur. Sec. Conf. Atom. and Mol. Phys.: Ionised Gases, Oxford, Sept. 1—3, 1982. Abstr. Inv. Talks and Contrib. Pap.» Geneva, 1982, 111—113 (англ.)

Измерены спектры испускания, возбуждаемые при облучении импульсным пучком быстрых электронов смеси Ar/Kr/F₂ (90%, 9,5%, 0,5% соотв.) (I), Kr/NF₃ (II), Kr/SF₆ (III) при различных конц-ях и давлениях. При давлениях $>10^5$ Па в спектрах наблюдался широкий континуум в области 380—480 нм, связанный с переходом $^2B_2-^2A_1$ Kr₂F* (излучательное время жизни 200 нсек). При понижении давления интенсивность испускания Kr₂F* падала, а при $1,2 \cdot 10^4$ Па полоса Kr₂F* вообще исчезала. При промежуточных давлениях (I— $<6 \cdot 10^4$ Па, II, III— $<9,5 \cdot 10^4$ Па) в спектрах наблюдалась полоса в области 400 нм, более интенсивная, чем полоса испускания Kr₂F*, предварительно отнесенная к переходу $3^2\Sigma^+-1^2\Pi$ молекулы KrF* (излучательное время жизни 16 нс.). В. М. Ковба.

спектр

X. 1983, 19,
N 17

KrF

1982

1 Д604. Доказательство наличия у KrF широкой непрерывной полосы излучения в области ~~400~~ нм. Evidence of KrF* broad band continuum emission at 400 nm. Luches A., Perrone A. «Opt. Commun.», 1982, 42, № 4, 251—254 (англ.)

В возбуждаемых импульсным электронным ударом спектрах испускания смесей криптона с различными фторированными соединениями зарегистрирована широкая непрерывная полоса с максимумом в области 400 нм, приписанная излучению молекул KrF*. Разделить эту полосу и более интенсивную полосу Kr₂F*, расположенную в той же области спектра, удалось вследствие различного временного поведения этих полос и различной их зависимости от давления. Определено радиационное время жизни возбужденного состояния KrF*, $\tau=16$ нс. Само излучение KrF* предположительно приписано переходу $3^2\Sigma^+ \rightarrow 1^2\Pi$. В. С. Иванов

спектр,
переход.
переход.

90.1983, 18, №1

KrF, KrF

1982

1 Б1473. Доказательство существования широкополосного континуума испускания KrF вблизи 400 нм.
Evidence of KrF* broad band continuum emission at 400 nm. Luches A., Perrone A. «Opt. Commun.», 1982, 42, № 4, 251—254 (англ.)

2
С целью возбуждения KrF смеси Ar—Kr—F₂, Kr—NF₃ и Kr—SF₆ облучали интенсивным пучком быстрых электронов с энергией 350 кэВ (ток 9 кА, плотность тока 0,5 кА/см², длительность импульса 15 нс). При давл. $>10^5$ Па во всех смесях наблюдали широкополосный континуум в диапазоне 380—480 нм — переход $^2B_2 \rightarrow ^2A_1$ Kr₂F*. При давл. ниже $1,2 \cdot 10^4$ Па молекулы-тримеры не образуются. Излучательное время жизни KrF 16 нс. До давл. смеси Ar—KrF₂ $2 \cdot 10^4$ Па интенсивность испускания пропорциональна давл., затем происходит насыщение. Результаты анализируются с помощью кривых потенциальной энергии. Л. И. Лившин

X. 1983, 19, 111

KrF

1982

| 97:117717h Evidence of krypton fluoride (KrF^*) broad band continuum emission at 400 nm. Luches, A.; Perrone, A. (Dip. Fis., Univ. Lecce, Lecce, Italy). *Opt. Commun.* 1982, 42(4), 251-4 (Eng). Broad band emission of KrF^* centered at ~400 nm was obsd. in various mixts. contg. Kr and fluorinated compds. This emission was resolved against the more intense Kr_2F^* broad band emission at the same wavelengths due to its temporal behavior and its different pressure dependence. Its radiative lifetime is 16 ns and it is tentatively ascribed to the $3^2\Sigma^+ \rightarrow 1^2\Pi$ transition.

Чекмр
успухан.

@: A. 1982, 97, v 14

KzF

1982

Radzewicz Czesław,
Kowalczyk Paweł.

список
(о́бзор)

Post. fiz., 1982, 33, N1-2,
17-27.

(с. Ар F; III)

K₂F

1983

Бибимов Н.К., Виногра-
дов И.П. и др.

спектр Успехи спектроскопии
(Ленинград), 1983, №8,
57-111.

●
(сер. XeF; III)

KzF

1983

Chen Jianwen, Fu Shuefer,
et al.,

Beijing-Shanghai Proc. Int.
Conf. Lasers, Shanghai and
Beijing, May, 1980. Ed Wang.
Daheng. e. e. New-York, e. a.,
1983, 337-340.

(see Xe F; III)

Krf*

[Ommuck 17101]

1983

Matsuzawa M., Kitaji S.,

6;
paren

J. Phys. B: At. Mol. Phys.,
1983, 16, 1931-1936.

KrF⁻

1983

XeF⁻

Minehara E., Abe S.,

(реакция)
(KrF₂ и XeF₂)

Nucl. Instrum. Me-
thods Phys. Rev.

1983, 212 (1-3), 533-7

C.A. 1983, 99, N 12, 963663

KrF

1984

Бибимов Н. К., Виено-
градов И. П. и др.

Хим. физ., 1984, 3,
N 12, 1685-1694.

( ест. ХеF;)

KZF

1984

Muxley Philip,
Knowles David B., et al.

номер-
цуклаб
основ.
состоян.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt 2, 80,
N11, 1349-1361.

(Ser. Hez; III)

K₂F

1984

K₂F

Jara M., Pummer H.,
et al.

exp. mp

Phys. Rev. B: Condens.
Matter 1984, 30(1), 1-6.

(cu[●] XeF; III)

F-Kz

1984

Mueller Klaus.

Report 1984, MPIS -

номер.

1/1984, 185pp.

Ф-из,
рассейние
мол.
пырка

From Sci. Tech. Aerosp.

Rep. 1984, 22(23), Abstr.

Nº N84●-34248.

(см. F-Az; III)

KrF*

1985

10 Л872. Закономерности флуоресценции эксимерных молекул KrF*, XeF в объемном разряде. Боров В. М., Высикайло Ф. И., Иванова Е. Г., Христофоров О. Б. «Квант. электрон.» (Москва), 1985, 12, № 6, 1196—1203 (рез. англ.)

Исследована флуоресценция эксимерных молекул KrF*, XeF* в зависимости от условий ввода энергии в самостоятельный объемный разряд с УФ-предыонизацией. Наблюдаемое ограничение интенсивности флуоресценции KrF* с ростом вкладываемой мощности объясняется (на основании результатов численного моделирования) возрастанием вероятности тушения молекул KrF*. Хорошее количественное согласие результатов расчета с экспериментом получено при выборе «аномально большой» константы скорости тушения KrF* электронами ($\sim 2 \cdot 10^{-7}$ см³/с). Обсуждаются возможные причины наблюдаемого ограничения длительности флуоресценции в самостоятельном объемном разряде.

флуоресценция

ср. 1985, 18, N 10

XeF*

KzF

1985

ДЭНСОКЭМ ИЮСУ, 1985,
N 424, 3-6.

К. н. г.
лазера

(сер. Хелл; III)

F-Kr (DM-22237)

1985

Kirkpatrick Ch. C., Vieh-
land L. A.,

котену-
амы
взаимо-
действ.

Chem. Phys., 1985, 98,
N 2, 221-231.

$Kr_2^+ F$

1987

Geohagan D. B.,
Eden J. G.

u.n.

Chem. Phys. Lett.,
1987, 139, N 6, 519-
-524.

(cur. $Xe_2^+ Cl; III$)

KrF²⁺

1987

Jonathan P., Brenton
A. G., et al.

nomens. Int. J. Mass Spectrom.
крив., Ion Processes 1987, 76(3),
X²/7 319-24.

(cur. ● NeF²⁺, III)

KrF

(OM 31922)

1988

Aquilanti V., Luzzatti E.,
Pirani F. et al.,

основн.

сост.

J. Chem. Phys., 1988, 89,
N 10, 6165-6175.

Molecular beam studies of
weak interactions for open-

shell systems: The ground and lowest excited states of ArF , KrF , and XeF .

KrF

1988

109: 29399s Quantum yield of krypton fluoride excimer under radiative collisions in the krypton-molecular fluorine mixture. Babaev, A. K.; Dubov, V. S. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). *Kvantovaya Elektron. (Moscow)* 1988, 15(4), 823-8 (Russ). At $118 < \lambda < 121.6$ nm, a radiative collision was recorded in the Kr-F₂ system. At 121.6 nm, the reduced absorption coeff. $q = (1.33 \pm 0.06) \times 10^{-38}$ cm⁵ was obtained. The quantum yield of the KrF* formation was 0.85-1.0. The measured const. of the rate of KrF* mol. quenching by F₂ was $K_{F_2} = (4.5 \pm 0.5) \times 10^{-10}$ cm³/s.

квант.
flux

C. A. 1988, 109, N 4

K₂F⁺

1989

MacDougall P. J.,
Schriobilgen C. J. et al.

u.n. Inorg. Chem. 1989. 28,
N.Y.C. 763-769.

(see. ● FXe-NEH⁺; III)

KrF

1990

113: 31756g Photodissociation of krypton fluoride (KrF) by intense ultrashort pulses. Hill, K. E.; New, G. H. C.; Burnett, K. (Dep. Phys., Imp. Coll., London, UK SW7 2BZ). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(10), 5885-91 (Eng). A theor. model is presented for studying the photodissocn. of KrF in the presence of an intense ultrashort optical pulse. The spectrum of the translational kinetic energies of the dissocd. products is calcd. and shown to be a clear probe for the coherent interaction.

chemp,
vacuum

C.A. 1990, 113, NY

KrF

1990

Do;

⑦ 12

112: 148227f Time-resolved fluorescence measurements of krypton fluoride (KrF) emission produced by vacuum ultraviolet photolysis of krypton fluoride (KrF_2) and krypton-fluorine mixtures. Tice, J. J.; Quick, C. R.; Hsu, A. H.; Hof, D. E. (Chem. Laser Sci. Div., Los Alamos Natl. Lab., Los Alamos, NM 87545 USA). *Phys. Scr.* 1990, 41(1), 71-4 (Eng). Vacuum UV (VUV) light radiation was used to produce electronically excited KrF excimers (in D-, B- and C-states) by the photolysis of KrF_2 and F_2/Kr mixts. at various excitation wavelengths. The excited KrF photoproduct quantum yield was measured over the excitation wavelength range of 120 to 200 nm, and a quantum efficiency of 0.11 was estd. at the peak absorption wavelength of 159 nm for KrF_2 . The collision-free fluorescence lifetime of the B-X transition near 248 nm was detd. to be 9.5 ± 0.6 ns when the KrF_2 was excited with the 159 nm light. Near gas kinetic rate consts. were measured for the quenching of KrF B-X emission by KrF_2 and CO_2 . Using the threshold wavelength needed for the prodn. of excited KrF photofragments, an upper bound for the bond dissocn. energy of KrF_2 was detd. to be 1.03 ± 0.05 eV.

 KrF₂

C.A. 1990, 112, N16

KrF

DySoby!

1990

, 113: 123206f Formation of krypton fluoride excimer using a laser-induced harpooning reaction through two-photon pumping. Hakuta, Kohzo; Nakayama, Kunihiko; Fujino, Masashi; Takuma, Hiroshi (Inst. Laser Sci., Univ. Electro-Commun., Chofu, Japan 182). *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* 1990, 29(6), L1019-L1022 (Eng). A new formation process of the KrF excimer by irradiating the Kr/F₂ gas mix with KrF laser beam is reported. The formation process is assigned as a laser-induced harpooning reaction through two-photon pumping. This process has made it possible to prep. KrF excimers in highly excited vibrational states under simple and controllable conditions, and enabled the quant. investigation of the vibrational relaxation processes of the KrF excimer.

C.A. 1990, 113, N 14

KrF

1990

Hakuta K., Fujino M. et al.

7

Jpn. J. Appl. Phys., Part 1,
1990, 29(6), 1194-7.

lifetime measurements for
Krypton • monofluoride
C.A. 1990, 113, N12, 105870p

excimer using photoassociative
pumping.

KrF

1989

112: 225910c Spectroscopy and dynamics of krypton fluoride (KrF)(B-X) and sulfur oxide (SO)(A-X). Lo, Glenn Veroy (Kansas State Univ., Manhattan, KS USA). 1989. 483 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA9005068. From *Diss. Abstr. Int. B* 1990, 50(9), 4016.

B-X

⑦ ⊗ SO (A-X)

C.A. 1990, 112, N 24

KrF

1991

B-X

115: 122921q Observation of continuous krypton chloride (KrCl) excimer fluorescence in microwave discharges employing binary mixtures of krypton and chlorine. Hassal, Scott B.; Ballik, Edward A. (Dep. Eng. Phys., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *Can. J. Phys.* 1991, 69(6), 699-701 (Eng). A novel app. was designed to couple 2.45-GHz microwave radiation into a gas discharge. Using this app., continuous-wave 222-nm B $\rightarrow$ X fluorescence of the KrF excimer system was obsd. in a binary mixt. of Cl Kr. The effects of gas compn. and total pressure on the fluorescence intensity at a wavelength of 222 nm was investigated. Spectra over the wavelength region of 200-320 nm were recorded for various gas compns. near the optimum total pressures for excimer fluorescence. The 222-nm B $\rightarrow$ X KrCl excimer transition was apparent in all cases and had a full-width half-max. (FWHM) of 3 nm. In addn., the 258-nm Cl₂ excimer transition was also evident with a FWHM of 5 nm. Both the center frequencies and widths of these transitions were const. for the conditions tested.

C.A. 1991, 115, ~12

KrF Taylor R.S., Leopold R.E.,
et al., 1991

B-X Appl. Phys. Lett. 1991,
crump 59(5), 525-7.

Continues $B \rightarrow X$ excimer fluores-

C.A. 1991, 115, N12, 122893g

cence using direct current
discharge excitation.

KrF

[Am. 36232]

1991

Yang T.T., Bower R.D.,
эмис- Blamer Y.A.,
сионный
спектр

Y. Opt. Loc. Amer. B 1991,
8, N 3, 548-552

Emission spect ● 2a to KrF

in the chemical reaction
of K_2F_2 with LiH_4 .

KrF

Om 37563

1994

Л 20 Б1117. Улучшенные потенциалы состояний KrF (B) и KrF(X). Improved KrF(B) and KrF(X) state potentials /Lo G., Setser D. W. //J. Chem. Phys. — 1994 .— 100 ,№ 8 .— С. 5432—5440 .— Англ.

и.п.

Х. 1994, № 20

Krf

Om 37563

1994

120: 280791e Improved $\text{KrF}(\text{B})$ and $\text{KrF}(\text{X})$ state potentials. Lo, Glenn; Setser, D. W. (Dep. Chem., Northeast Louisiana Univ., Monroe, LA 71209 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(8), 5432-40 (Eng). The $\text{KrF}(\text{B-X})$ emission spectra were simulated to obtain improved models of the electronic state potentials and transition dipole moment functions that are also consistent with recently published photoassocn. spectra. The spectrum from a 300 K vibrational distribution of $\text{KrF}(\text{B})$ mols. was used to det the nature of the potentials near R_e ; the transition dipole function was mainly based on the emission spectra from highly excited $\text{KrF}(\text{B}, v')$ distributions. The upper state potential was represented by a truncated Rittner potential with $\omega_e' = 330 \text{ cm}^{-1}$; the lower state potential was represented by an exponential function at a short internuclear distance plus a $-c_6/R^6$ function at a large distance. The electronic transition dipole moment function $\mu_{el}(\text{R})$ was represented by a linear combination of Gaussian functions, with a max. near the classical inner turning points of the $v' = 5, 6$ levels. Comparison is made with the $\text{KrF}(\text{X})$ potential deduced from mol.-beam work. The /well depth assigned by V. Aquilanti, et al., (1988) from the scattering data is larger than the value obtained from the $-c_6/R^6$ function; addnl. exptl. work is needed to define D_e ".

(X, B. nomencl.
p-u, D_e)

C.A. 1984, 120, N 22

Krf

(OM. 38509)

1996

Bressler C., Lawrence W.B.
et al.,

N. N. J. Chem. Phys., 1996, 105
(23), 10178.

KrF₂

(om. 40370)

1998

Karl O. Christe et al.,

reakmp.
cmp-pa,
pavut

γ-Fluor. Chem. 1998,
88, 185-189.



KrF
KrF⁺

Om. 39584

1998

ab initio
pccm
cmabunet,
cmp-

130: 130201e An ab initio study of the mono- and difluorides of krypton. Hoffman, Gerald J.; Swafford, Laura A.; Cave, Robert J. (Department of Chemistry, The College of New Jersey, P.O. Box 7718, Ewing, NJ 08628-0718 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(24), 10701-10706 (Eng), American Institute of Physics. Results from ab initio calcs. at the CCSD(T) level of theory are presented for krypton monofluoride (KrF), krypton monofluoride cation (KrF⁺), linear, ground-state krypton difluoride (KrF₂), the triplet state of krypton difluoride, and the krypton-fluorine van der Waals complex (Kr-F₂). These are the first calcs. demonstrating that KrF is a bound mol., in agreement with exptl. observation. When cor. for basis-set superposition error, the calcd. potential displays quant. agreement with the attractive wall of the exptl. measured potential curve. Results are also presented for KrF⁺ and linear KrF₂ which yield accurate values for their dissocn. energies. The triplet state of KrF₂ is found to have a min. energy below that of sepd. atoms, and its structure is bent, with a small F-Kr-F bond angle (71 deg). The van der Waals complex, Kr-F₂, appears to consist of an unperturbed F₂ mol. attached to a krypton atom in the expected T-shaped structure.

C.A. 1999,

 130, N.10

KrF₂

Krf

[OM. 40874]

2001

ab initio
racem

Gerald J. Hoggsman and
Mitchell Colletto,

J. Chem. Phys., 2001,

114, N5, 2219...