

K-F

Lit

Lit

mol.

descr.

Gloer G., Evans G. E.

1942

J. Chem. Phys 1942, 10, 606

The Double Minimum Problem Applied
to Potassium Hydrogen Fluoride.

Дубль характер и-к линии поглощ при 9.67 м Терцов
KHF₂ обусловлен двумя минимумами...

Никаких колебаний XV нет

1951

1170

KHF_2 (ν_2, ν_3)

Ketelaar J.A., Vedder W.

J.Chem.Phys., 1951, 19, 654

Infrared spectra of ...

J



KHF₂ R. Newman, R. Badger
cusp.

J. Ch. Ph. 19, 1207.

1951

u.k. cusp KHF₂.

$$\nu_1 + \nu_2 = 1870 \text{ cm}^{-1}$$

$$\nu_1 + \nu_3 = 2060$$

$$\nu_2 = 1240$$

$$\nu_3 = 1425$$

881

1953

KH_2PO_4 , NaHCO_3 , KHF_2 (mol.const)

Lord R.C., Merrifield R.F.

J.Chem.Phys., 1953, 21, N 1,
166-167

Strong hydrogen bonds ...

J

KHF₂

Bcp-1156-X

1954.

Barrow R.F.; Ceeent A.D.

(u.n)

Proc. Phys. Soc.,

1954,

A-67, N1, 68-73

1168

1954

KHF_2 , KDF_2 (ν_i)

Jones L.H., Penneman R.A.

J. Chem. Phys., 1954, 22, 781-2
Infrared absorption spectra ...

J



1171

- HF_2 (ΔH), KHF_2 , RbHF_2 , CsHF_2 (ΔH) I958

Waddington T.C.

Trans. Faraday Soc., I958, 54, N I, 25-33
()

The lattice energies of potassium, rubidium, caesium bifluorides and the strength of the bonds in the bifluoride, HF_2^- , ion.

PX, I958, N 24, 80474

10, u, w

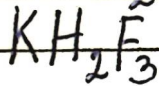


cc70 p.k. q



Bp - 10024-X

1963



Bp - 23-X

Bartlett H; Safford G J;

(ii) J. Chem. Phys., 1963, 39

N 11, 3135-40.

KMF_2

KDF_2

13
(vi, uncorr. used)

X406 1964

Ibers J. A.

J. Chem. Phys., 1964, 41, 21, 25-28 [accus]

Potential function for the stretching region in potassium acid fluoride.

Proc Roy. Soc., 1965, 4076

(W)

Вср-7024-К

1967

КН₂F₃

Вср-7024-К

4 Б167. Инфракрасные спектры КН₂F₃ и структура иона H₂F₃²⁻. Ažman A., Ocvirk A., Hadži D., Giguère Paul A., Schneider Michel. Infrared spectra of KН₂F₃ and the structure of the H₂F₃-ion. «Canad. J. Chem.», 1967, 45, № 12, 1347—1350 (англ.)

С целью установления структуры иона H₂F₃⁻ исследованы ИК-спектры твердых КН₂F₃ и КD₂F₃ в области 4000—200 см⁻¹. Спектры обоих образцов показывают плохо разрешимые полосы с большим фоном поглощения в области выше 2000 см⁻¹. Наблюдаемые в спектрах полосы отнесены по типам колебаний в предположении симметрии C_{2v} иона H₂F₃⁻. Проведен анализ нормальных колебаний модели иона H₂F₃⁻ и определены силовые постоянные в системе Юри — Бредли. Большое различие в силовых постоянных связей (K=0,80, K'=1,50) указыва-

2.1968. 4

8

ет на нарушение симметрии водородной связи в ионе H_2F_3^- в противоположность иону HF_2^- . Полученные спектральные данные не позволяют определить положение протона между атомами фтора. Однако данные спектров ЯМР и химические указывают на то, что протон ближе расположен к концевым атомам фтора. По-видимому, потенциальная функция имеет два минимума, разделенных относительно невысоким потенциальным барьером. Предлагают, что в ряду полимерных ионов H_3F_4^- , H_4F_5^- и т. д. следует ожидать ослабления водородных связей по мере увеличения длины цепи.

Е. Матросов

KN_2F_3

ВФ-4024-X

1914

ВФ-4024-X

1 Д286. ИК-спектры KN_2F_3 и структура иона H_2F_3^- . Ažman A., Ocvirk A., Hadži D., Giguère Paul A., Schneider Michel. Infrared spectra of KN_2F_3 and the structure of the H_2F_3^- -ion. «Canad. J. Chem.», 1967, 45, № 12, 1347—1350 (англ.)

Получены спектры поглощения ($4000-200 \text{ см}^{-1}$) KN_2F_3 и KD_2F_3 в твердом состоянии. Наблюдаемые полосы поглощения приписаны валентным и деформационным колебаниям иона H_2F_3^- . Проведен анализ методом нормальных координат для определения силовых констант Юри — Бредли. Полученные результаты позволяют предположить, что в отличие от иона HF_2^- в ионе H_2F_3^- водородные атомы расположены не точно посредине между двумя атомами фтора.

Резюме

09.1968. 12

KHF_2

1207

/ 14 Б169. Инфракрасные спектры кристаллических NaHF_2 и NaDF_2 . Ažman A., Osvirk A. Note on the infrared spectra of crystalline NaHF_2 and NaDF_2 . «Spectrochim. acta», 1967, 23 A, № 5, 1597—1598 (англ.)

Исследованы ИК-спектры кристаллич. KHF_2 , NaHF_2 и NaDF_2 в диапазоне 4000—250 см^{-1} . Кристалл KHF_2 принадлежит к пространственной группе симметрии D_{4h}^{18} с двумя молекулами в элементарной ячейке, и в соответствии с правилами отбора в его ИК-спектре активны только трансляционные колебания решетки. Обнаруженные в ИК-спектре KHF_2 интенсивные полосы 460, 482 и 505 см^{-1} отнесены к колебаниям типа $T(E_u)$, $T(E_u)$ и

1967

X. 1968. 14

19

$T(A_{2u})$ соответственно, а слабая полоса 620 см^{-1} — к запрещенным сим. вал. кол. иона FHF^- . В спектрах NaHF_2 и NaDF_2 присутствуют полосы 508, 439, 471 и 340 см^{-1} , которые также отнесены к колебаниям решетки. Приведено следующее отнесение полос в спектрах этих двух соединений: ν_1 — 675 см^{-1} (присутствует только в спектре NaHF_2), ν_2 — 1200 и 860 см^{-1} , ν_2' — 1210 и 875 см^{-1} , ν_3 — 1550 и 1440 см^{-1} . Остальные полосы в спектрах отнесены к обертонам и комбинационным колебаниям.

Ю. В. Киссин

1970

KHF₂v_i

8 Д620. Колебательные спектры водородных связей в нейтронной спектроскопии. Collins M. F., Haywood B. C., Stirling G. C. Vibration spectra of hydrogen bonds by neutron energy-loss spectrometry. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 4, 1828—1831 (англ.)
Исследованы колебательные спектры KHF₂, CsHCl₂, CsDCl₂, NaHCO₃, KH(CF₃COO)₂ и KH(CCl₃COO)₂ (твердые фазы) при помощи нейтронного спектрометра (см. РЖФиз, 1962, 6Б434). Измеренные значения частот использованы для уточнения отнесения полос колебаний с участием атомов Н в ИК-спектрах и спектрах комб. рас. указанных соединений. Библ. 12.
Л. В. Коновалов

+3

ф. 1970. 87



KF·H₂O
22

11 Б225. Спектроскопическое изучение производных перекиси водорода. III. Пероксигидрат KF·H₂O₂. Giguere Paul A., Roy Hélène. Etude spectroscopique des dérivés du peroxyde d'hydrogène. III. Le peroxyhydrate KF·H₂O₂. «Rev. chim. minér.», 1970, 7, № 6, 1053—1058 (франц.; рез. англ., исп., нем.)

Измерены ИК-спектры и спектры КР крист. KF·H₂O₂ (данные для КР в скобках): 3100 с., (3020 о. сл.), (2840 сл.), (2780 о. сл.), 2750 о. с., (1515 ср.), 1515 сл., 1486/1476/1469 с., (985 о. сл.), 940 о. с., (881 о. с.), 879 ср., (865 ср.), 840 о. с., 395 с., 308 ср., 228 ср., 160 с., 98 с. (везде в см⁻¹; о. с. — очень сильная, с. — сильная, ср. — средняя, сл. — слабая, о. сл. — очень слабая интенсивность). Спектры указывают на существование сильных Н-связей, предположительно О—Н...F. Предложена предв. интерпретация нек-рых полос поглощения с использованием данных для частично дейтерированного аналога. Сообщ. II см. РЖХим, 1970, 10Б258.

Б. В. Рассадин

спектр-ИК
- КР

ВР 5264-х

х. 1971.

11

ВР 5264-х

$\text{CO}_2, \text{CS}_2, \text{CSe}_2, \text{HgCl}_2,$ 14 $\left(\begin{smallmatrix} 6 \\ \text{cen.} \\ \text{noem.} \end{smallmatrix} \right)$ 10 1970
 $\text{HgBr}_2, \text{HgI}_2, \text{K}[\text{N}_3], \text{NH}_4[\text{N}_3],$
 $\text{K}[\text{HF}_2], [\text{NO}_2]^+$

Mou Chung-Yuan, Chen T., 5284
 J. Chin. Chem. Soc. (Taipei), 1970, 17, No. 4,
 193-206 (ann.)

Force constant calculations in
 mass-weighted Cartesian coordi-
 nates. Linear X XX - and XYZ -type
 molecule
 10 20 $\oplus$ CA, 1971, 44, N14, 67914X

KHF₂

BOP 7265-X

1972

($\approx$
F-F)

66423m Interatomic distances in the bifluoride ion. Carren, H. L.; Donohue, Jerry (Dep. Chem., Univ. Pennsylvania, Philadelphia, Pa.). *Isr. J. Chem.* 1972, 10(2), 195-200 (Eng). Further refinement was carried out on the neutron diffraction data for KHF₂. Best agreement was obtained for a physically impossible model which must be rejected on other grounds. The H atom is assumed to be centrally located. Combination of spectroscopic and diffraction data from NaHF₂, KHF₂, and NH₄HF₂ allowed a detailed anal. of the thermal motions to be made. The average F...F distance, after correction, was found to be 2.292 ± 0.004 Å.

CA. 1972. 77. 10

Li_2F_2 ; Li_2Cl_2 ; Li_2Br_2 ; Li_2I_2 ;
 Na_2F_2 ; Na_2Cl_2 ; Na_2Br_2 ; Na_2I_2 ;
 K_2F_2 ; K_2Cl_2 ; K_2Br_2 ; K_2I_2 ;
 Rb_2F_2 ; Rb_2Cl_2 ; Rb_2Br_2 ; Rb_2I_2 ;
 Cs_2F_2 ; Cs_2Cl_2 ; Cs_2Br_2 ; Cs_2I_2

молек.
 парам;
 термод.
 ср-ции

1972

X-7614

Краснов К.С., Соломонович В.Т., Морозов Е.В.

Термодинам. ввс. теори., 1972, 10, №4, 760-4

Термодинамические функции ^{40 + 10 + 4} (русск) 4
 и молекулярные параметры орто-
 ромбических димерных моле-
 кул галогенидов щелочных метал-
 лов.

10 (Ф) СД, 1972, 77, №24, 1582-64р

KHF₂; RbHF₂; CsHF₂ (gray. group.) 1972

$\bar{\lambda}$ 7170

White A. J. C., Pistorius C. W. F. T.,
J. Chem. Phys., 1972, 56, N9, 4318-

24



X - 7857

1973

KF₂, NaF₂ (mol. wscr.)

Cooke R.D.,
Dissert. Abstrs Int.,

1973, B 33, N9, 4214

ЕСТЬ Ф. К.

CA, 1973, 78, N26, 166484w

NaF ; KF ; $(\text{NaF})_2$; $(\text{KF})_2$ (^{м. н.}свѣтлосп. ^{исслед.}исслед.) 1973

Ismail Z. K., Hauge R. H., $\bar{x}$ 7947
Mangrove J. Z.;

J. Inorg. and Nucl. Chem., 1973, 35,
N9, 3201-3206 (англ.)

Infrared spectra of sodium
and potassium fluorides by
matrix isolation.

Potk. Khim., 1974, 16246

10
(англ. summary)

40227.7556

SIS, TE, Ph, Ch

KHF_2

40892

1973

* 4-3809

статья 1934

Iqbal Zafar. Raman spectra of NaHF_2 and
 KHF_2 . "J. Chem. Phys.", 1973, 59, NII, 6183-6184

(англ.)

0054 инк

039 040

0046 - 59

ВИНИТИ

NaHF_2 ; KHF_2 ; CsHCl_2 ; CsHClBr ; CsHBr_2 ; CsHClI ; $(\text{CD}_3)_3\text{NC}_2\text{D}_5\text{HCl}_2$; $(\text{CD}_3)_4\text{NHCl}_2$; $\text{CsCl}_{1/3}(\text{H}_2\text{O} + \text{HCl}_2^-)$ | 1973
Vi $\bar{x}$ 8097

Smith Y. A. S., Temme F. P., Zuckman C. J.,
Waddington T. C.,
J. Chem. Soc., Faraday Trans., 2, 1973,

69, N10, 1477-85 (ann.)
Neutron inelastic scattering studies
on the hydrogen dihalides.

10 14 CA, 1974, 80, N10, 54021c

50917.3480

TC, MGU, Ch, Ph

КСФ 2316034.К и

KHF₂ раман
спектр

1975

ж-9759

Dawson P., Hargreave M.M., Wilkinson G.R.The polarized Raman and i.r.spectra of
KHF₂. "Spectrochim. Acta", 1975, A31, N 8,
1055-1063 (англ.)

0452 пик

420 424

ВИНИТИ

50428.8839
TC, Ch, Ph

+ 40534 (V)
KF₂

1975
#4-8794

Howard Wilmont F., Jr, Andrews Lester.
Infrared and Raman studies of alkali me-
tal atom matrix reactions with fluorine.
Vibrational spectrum of the M⁺F₂⁻ species.

"Inorg. Chem.", 1975, 14, N 2, 409-413

(англ.)

(см. Li⁺F₂⁻; III)

0347 0113

334 335

ВИНИТИ

F-K

OST 4824.

1975

(Do)

Korcz J. A., et al.
Handbook Chem. Phys.,
55th ed., 1974-75.

K⁺ F₂⁻

lamm 49131

1976

Andrews L.

Spectrosc. Revs. 1976, IX,
N1, 125-61.

(vi)

F_2^- , Cl_2^- , Cl_3^- (su. enicir) 1976.

MF_2^- , MCl_2^- (спектр в матриц.)

М - ислетн. меманд.

Andrews L., X-9752

J. Amer. Chem. Soc., 1976, 98 (8),
2147-52.

Optical spectra of the difluo-
ride, dichloride and trichloride ions
in the matrix - isolated...
C.A. 1976. 24 v 24. 171795b. 110 (4)

Chsh WWO

60417.1958

TC, MGU, Ch

KF + F₂ (чик ч
Рачин

1976

451 (центр) *45-12623

Ault Bruce S., Andrews Lester. Matrix
reactions of alkali metal fluoride molecu-
les with fluorine. Infrared and raman
spectra of the trifluoride ion in the $H^+F_3^-$
species.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1976, 98, N 6,

1591-1593 (англ.)

0507

ВНИИТИ

582 584

$(\text{LiF})_2, (\text{NaF})_2, (\text{KF})_2, (\text{RbF})_2, (\text{LiCl})_2, (\text{NaCl})_2, (\text{KCl})_2, (\text{RbCl})_2, (\text{CsCl})_2, (\text{LiBr})_2, (\text{NaBr})_2, (\text{KBr})_2, (\text{RbBr})_2, (\text{CsBr})_2, (\text{LiI})_2, (\text{NaI})_2, (\text{KI})_2, (\text{RbI})_2, (\text{CsI})_2$ (уб. мех. парей)

Brunner P., Karplus M., X-9977
J. Chem. Phys. 1976, 64, 512, 5165

Perturbation theory and ionic models
for alkali halide systems I Dimers.
CA, 1976, 85, 118, 130812g

110 Φ

Di, non. emp, $\text{Li}_2\text{F}_2, \text{Li}_2\text{Cl}_2, \text{Li}_2\text{Br}_2, \text{Na}_2\text{F}_2, \text{Na}_2\text{Cl}_2, \text{Na}_2\text{Br}_2, \text{K}_2\text{F}_2, \text{K}_2\text{Cl}_2, \text{K}_2\text{Br}_2, \text{Rb}_2\text{F}_2, \text{Rb}_2\text{Cl}_2, \text{Rb}_2\text{Br}_2$) BX-84

Trugman S, Gordon R.C.,

J. Chem. Phys., 1976, 64, 111, 4625-4627 (ann)

Calculation of the energies, geometries, and vibration frequencies of alkali halide dimers.

PuXun, 1976, 22523

10

Page 10 of 10

KDF₂

21 Б330. Константа квадрупольного взаимодействия дейтерона в KDF₂. Blinc R., Rutar V., Seliger J., Slak J., Smolej V. Deuteron quadrupole coupling in KDF₂. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 48, № 3, 576—578 (англ.)

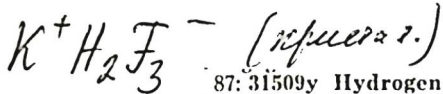
При комн. т-ре с использованием спектрометра ЯМР с фурье-преобразованием сигнала эха получен спектр D в KDF₂ (I). На основании анализа тонкой структуры ЯМР-спектра I константа квадрупольного взаимодействия D определена равной 58 ± 10 кГц, а параметр асимметрии градиента электр. поля $\eta = 0,4 \pm 0,1$. Эти данные близки к значениям для симм. O—H—O водородных связей в ряде соединений, что

рассматривается как доказательство симм. расположения атома D между двумя атомами F в I. Расстояние D—F определено равным $1,13 \pm 0,03$ А. Л. А. Корытко

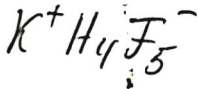
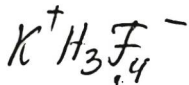
1977

4-4-77
1-4-77
1-4-77

И-1977 № 21



1977



U. K. group

87: 31509y Hydrogen bonding. VII. Low temperature infrared spectral studies of potassium dihydrogen trifluoride, trihydrogen tetrafluoride, and tetrahydrogen pentafluoride; structure of the trihydrogen tetrafluoride(1-) ion. Harmon, Kenneth M.; Gennick, Irene (Dep. Chem., Oakland Univ., Rochester, Mich.). *J. Mol. Struct.* 1977, 38, 97-107 (Eng). The IR spectra of crystalline $K^+ H_2 F_3^-$, $K^+ H_3 F_4^-$, and $K^+ H_4 F_5^-$ were recorded at room temp. and 12-18 K. The broad ($\sim 400 \text{ cm}^{-1}$) anion F-H stretching bands for these 3 salts are not resolved at low temp.; however, in each case the F-H-F bending region is resolved into the max. no. of bands predicted by theory. The complexity of the F-H-F bending mode region shows the $H_4 F_5^-$ ion to be of lower symmetry than predicted by x-ray studies. The $H_3 F_4^-$ ion has 3 HF's H-bonded to a central F^- ion, rather than a chain type structure. The F-H stretching bands for the 3 ions have very similar frequencies ($1750-1800 \text{ cm}^{-1}$), which shows the H bonds in the 3 ions to be of about the same strength, and to be significantly weaker than the H bond in the HF_2^- ion.

C. A. 1977. 87 n 4

1977

KH_2F_3
 KH_3F_4
 KH_4F_5

21 Б248. Водородная связь. VII. Низкотемпературные спектральные исследования дигидротрифторида, тригидротетрафторида и тетрагидропентафторида калия. Структура иона H_3F_4^- . Harmon Kenneth M., Genick Irene. Hydrogen bonding. VII. Low temperature infrared spectral studies of potassium dihydrogen trifluoride, trihydrogen tetrafluoride, and tetrahydrogen pentafluoride; structure of the H_3F_4^- ion. «J. Mol. Struct.», 1977, 38, May, 97—107 (англ.)

И. К. Генник
 И

Измерены ИК-спектры KH_2F_3 (I), KH_3F_4 (II), KH_4F_5 (III) при т-рах 300 и 12—18° К. В спектрах I—III при 300° К наблюдались широкая бесструктурная полоса в области 1750—1800 см^{-1} , соотв-щая вал. кол. Н—F, полоса со сложной структурой в диапазоне 800—1200 см^{-1} , связанная с деф. кол. $\delta\text{F—H—F}$, и интенсивная полоса в области 450 см^{-1} , отнесенная к вал. кол. F—F. При понижении т-ры до 12—18° К наблюдалось расщепление полос в области деф. кол. $\delta\text{F—H—F}$ (I четыре полосы, II шесть, III девять). Во всех случаях число полос оказалось больше, чем следует из симметрии ионов $\text{H}_n\text{F}_{n+1}^-$, установленной рентгеноструктурным методом. Это объясняется понижением

№ 1977
 № 21

симметрии ионов и связанным с этим снятием вырождений соотв-щих колебаний. Сделан вывод, что в ионе H_3F_4^- имеются 3 группы Н—F, связанные с центральным ионом фтора. Частоты вал. кол. Н—F в I—III ниже, чем в HF_2^- , что объясняется ослаблением Н-связи. Сообщ. VI см. РЖХим, 1976, 20Б171. В. М. Ковба

KHF₂

osmomen 5634

1974

Ludman C. G. et al.

enerp
lip

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1974, 73

1003-1014

BX-726

1977

KHF₂(Di)

Spinner E.,

Aust. J. Chem. 1977, 30(6), 1167-85.

The infrared spectrum of isotopically
diluted potassium hydrogen biflu-
oride.

C.A. 1977, 37, N10, 75890V

10



KF. x AlF_3 [Omnuck 18163] 1981

Vrberzka J., Malinovsky
M.

ΔH

Chem. Zvesti, 1981, 35, N6,
747 - 756.

KFHF

OMMICK 13098

1982

Waddington Thomas
et al.

ν_2, ν_3 ,
обертонны

Chem. Phys. 1982,
64 (2), 193-201.

●
(сер. NaFHF; III)

K₂... HF

1984

Legon A.C., Willough-
by L.C.

m.n.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 109, N5, 592-608.

(see $\bullet$ Ar₂... HF; III)

KHF_2

1985

Emsley John.

Ресурсы.
Энергии,
и;

Polyhedron, 1985,
4, N3, 489-490.

(см. $LiHF_2$; III)

KMF₂

[Om. 23736]

1986

Matsui Y., Ezumi K.,
et al.,

(Vi) J. Chem. Phys., 1986,
84, N 9, 4774-4778.

KF_6^-

1987

2 Л138. Количественная оценка взаимодействий «гость — хозяин» для матрично-изолированных солей щелочных металлов с гексафторанионами и перхлоратами. A quantitative approach to host—guest interactions for matrix-isolated alkali metal salts of hexafluoroanions and perchlorates. Beattie Ian R., Millington Keith R. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1987, № 6, 1521—1527 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($750—500\text{ см}^{-1}$) солей MF_6^- , где $M=K, Rb$ и Cs , а также $CsNbF_6$, изолированных в твердых матрицах азота, O_2 , аргона, He , Kr , CH_4 , Ne и CO . Идентифицированы ИК-полосы вал. кол. связи $Nb—F$. Отмечено характерное дублетное расщепление ИК-полосы колебания ν_3 матрично-изолированных солей в структуре Ne и Ar со слабыми связями между матрицей и внедренными ионами. Предположено, что в матрицах Ne и Ar возможно образование тридентатных

и-п.

(+3)



RbF_6^- , CsF_6^- ,
 $CsNbF_6$

ср. 1988, 18, N2.

связей между катионом Cs и анионом NbF_6^- , тогда как в матрицах CO и N_2 стабилизированы бидентатные связи между ионами. Обсуждено влияние типа матрицы на устойчивость разветвленных связей между ионами в таких матрицах. Библ. 46.

И. В. А.

$KF \cdot NHF_2(K)$ [Om. 26 120]

1987

Christe K.O., Wilson R.D.,

замена Inorg. Chem., 1987,
26, № 6, 920-925.

1988

KFR
KFR+1

М.П.

№ 5 Б1045. Неэмпирические исследования структуры и стабильности фторидов MF_k и MF_{k+1} переходных 3d-элементов / Мусаев Д. Г., Чаркин О. П. // Координац. химия.— 1988.— 14, № 11.— С. 1460—1467.— Рус.

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП исследованы структуры и стабильности фторидов MF_k и MF_{k+1} переходных 3d-элементов ($M = K, Ca, Sc, Ti, V, Cr$ и Zn). Анализируется роль электронной корреляции, а также расширение базиса за счет включения поляризац. и диффузных ф-ций. Результаты сравниваются с данными предшествующих неэмпирич. расчетов фторидов непереходных элементов II и III периодов. Прослеживаются тенденции изменения св-в молекул MF_k и MF_{k+1} при изменении центрального атома М вдоль групп и периодов Периодич. таблицы. Автореферат

(46) 41

X. 1989, N 5

K⁺... FH

(DM. 30 303)

1988

Цевардзеша Л. Б.,

Писечук В. М.

журнал
всех,
жс.

Жс. Сторожкий. Жилища,
1988, ● 29, № 4, 37-42.

KHF

1989

Dueren R., Heumann B.,
et al.

pacrēm Ber.-Max-Planck-Inst.
Stroemungsforsch. 1989,
(14), 32pp.

(see.  H₂O; iii)

K... HF

1989
11 Б1067. Расчет методом КВ взаимодействия H—OH и K—HF. Cl—Calculation for the H—OH and the K—HF interaction / Düren R., Heumann B., Meier U., Peyerimhoff S. D. // 12th Int. Symp. on Mol. Beams, Perugia, May 29—June 2, 1989: Abstr. Pap.— Perugia, [1989].— С. 345—347.— Англ.

Методом КВ рассчитана Пв потенциальной энергии H₂O для основного и двух возбужденных состояний. Рассчитана также Пв потенциальной энергии основного состояния K—HF как ф-ция двух переменных — расстояния K—HF и угла Θ . Длина связи H—F принята равной равновесному значению в свободном HF. Расчет проведен при двух значениях угла $\Theta=0^\circ$ и 180° , что соответствует подходу K к HF со стороны атомов H и F. По результатам расчета сделан вывод, что при фотодиссоциации H—OH происходит увеличение угла H—O—H при увеличении расстояния H—OH. Методом наименьших квадратов определены параметры потенциала Морзе для K—HF. Н. В. Харчевникова

М.А.

(H) X

H—OH 

X. 1990, № 11.

KHF_2

1990

Epa V.C., Thorson W.R.

J. Chem. Phys. 1990,

93(6), 3773-86.

Cherny

(see NaHF_2 ; III)

$(KF)_2$

DM-36085

1991

$(KCl)_2$

$(KBr)_2$

$(KI)_2$

Guella T., Miller T. M.,
et al.,

J. Chem. Phys. 1991, 94,
N10, 6857-6861.

Polarizabilities of the alkali
halide dimers. ●

$K^+.(HF)_m$
 $m = 1 \div 3$

[DM-36833]

1992

Kaupp M., Schleyer

P. R.

сәйкестігі,

теориясы

сбд 34

J. Phys. Chem.

1992, 96, 7316-7323.



$(KF)_2$

1993

Dickey R. P., Maurice
D. et al.

сверхмощная,

$Li, D_0,$

мощность

J. Chem. Phys. 1993,
98(3), 2182-90.

(cell. $(LiF)_2$; III)

KF₂

(DM 37218)

1993

Machado F.B.C., Ju Juan-Hi,
Davidson E.R.,

Freemont.

CRAMP

J. Phys. Chem. 1993, 97,

5882 - 5885

KHF₂

1994

121: 144031z Stretching vibrations of symmetrical hydrogen bonds. Matsui, Yoshiki; Iwatani, Kouji; Ezumi, Kiyoshi (Osaka Service-Cent., JASCO Corp., Osaka, Japan 530). *Spectrochim. Acta, Part A* 1994, 50A(8-9), 1685-86 (Eng). Improved equations are presented for the hydrogen bond stretching ν , and the specific cases of KHF₂ and Bu₄NHBr₂ are discussed. The ionic force field is useful for predicting the ν , wave no. Use of the repulsive force const. between nonbonded X...X is beneficial.

(Di)

C.A. 1994, 121, N12

K_2F
 K_3F_2

теорет.
расчет

⊗ (+3)

X. 1995, N 6

1994
У 6 Б1063. Электронноизбыточные кластеры галогенидов щелочных металлов $K_{n+1}Cl_n$ и $Li_{n+1}F_n$. Теоретическое исследование. Excess-electron alkali halide clusters $K_{n+1}Cl_n$ and $Li_{n+1}F_n$: A theoretical study / Ochsenfeld Christian, Ahlrichs Reinhart // J. Chem. Phys. — 1994. — 101, № 7. — С. 5977—5985. — Англ.

Приводятся результаты неэмпирич. расчетов электронноизбыточных кластеров M_2X , M_3X_2 , $M_{14}X_{13}$ и $M_{18}X_{17}$ ($M = K, Li$; $X = Cl, F$). Расчеты выполнены методом МО ЛКАО ССП с учетом основного псевдопотенциала Хейя—Уадта на атомах К и Cl; для небольших систем учитывалась энергия электронной корреляции в приближении МП2. Кроме того, выполнены расчеты методом связанных кластеров с учетом однократно- и двукратно возбужденных конфигураций; для малых кластеров также учитывались трехкратно возбужденные конфигурации. Для малых кластеров охарактеризованы локальные минимумы на потенциальной поверхности молекул. Показано, что избыточный электрон локализован как анионный дефект и слабо связан с атомом щел. металла. Е. А. Рыкова

K_2Cl , K_3Cl_2 , Li_2F , Li_3F_2 , Li_2Cl , Li_3Cl_2

$K_2F_4^{2-}$

1994

Scheller M.K., Cederbaum L.S.,

теорет.
расчет
стабильно-
сти

J. Chem. Phys., 1994, 100
(12) . . .

(см. $Li_2F_4^{2-}$; III)

Keta

1995

Craw J. Simon; Kichliff,
Alan;

J. Theor. Chem. [Electronic
Publication] 1995, 1,
8-10.

K₂F

1996

Veljkovic M., Neskovic O., et al.

Contrib. Pap. Abstr. Invi-
ted Lect. Prog. Rep =

Зборник

доклада, Summer. Sch. Int.

магнетизма, Symp. Phys. Ioniz. Ga-

сез, 18th 1996, 120-123.

●
(cell. Li₂F; III)

KHF₂

201

135: 67914a IR spectra of potassium hydrogen difluoride at various temperatures. Wu, Ke-Zhong; Zuo, Ping; Zhang, Jian-Ling; Liu, Xiao-Di (Department of Chemistry, Hebei Normal University, Shijiazhuang, Peop. Rep. China 050016). *Wuji Huaxue Xuebao* 2001, 17(3), 435-438 (Ch), *Wuji Huaxue Xuebao* Bianjibu. The solid-solid phase transition of KHF₂ was studied by IR spectrometry at various temps. and by DSC also. There are H bonds between the mols. which play a dominant role to the structure at low temp. state. In the temp. range closely corresponding to the solid-solid phase transition, the frequency of antisym. stretching (ν_3) shifted to a higher wavenumber, and the bending (ν_2) to lower wavenumber. The enthalpy and the temp. of solid-solid phase transition for KHF₂ were measured by DSC method and the latter is consistent with the result of IR which could declare the mechanism of solid-solid phase transition of KHF₂. With the breaking of H bonds between the mols. and the introduction of vibrational and rotational disorder KHF₂ exhibited cryst. transition.

(UK, T₂)