

GaO_2

GaO_2

1972

Tunch, Denis Aloysius, Jr

(vi)

" Diss. Abstr. Int. B "
1972, 33, (4), 1483- 84.

● (cur. AlO_2 ; III)

Ва О₂

сттиса 9492

1977

Осин С. Б. и др.

Вестн. Моск. ун-та.

Химия, М. 1977. 14с.

Рукопись деп. в ВИНТИ

19 дек. 1977г., №4505-77Деп.

см. ТКО₂ - III

Smuck 8823

1979

GaO_2

InO_2

In

супер
с окисл.

⊗

(43)

с окисл.
необяз.

С.А. 1979, 90. N18

(90) 143707e Matrix reactions of molecular oxygen with indium and gallium atoms. Zehe, Michael J.; Lynch, Denis A., Jr.; Kelsall, Benueel J.; Carlson, K. Douglas (Dep. Chem., Case Western Reserve Univ., Cleveland, Ohio). *J. Phys. Chem.* 1979, 83(6), 656-64 (Eng). Frozen inert gas matrixes of N_2 and Ar contg. O_2 and In or Ga atoms were prepd. by matrix isolation techniques and studied by IR absorption spectroscopy. Analyses of the spectra showed that these reagents react to produce metal superoxide mols., $\text{M}+\text{O}_2^-$, which are similar to those of the alkali and alk. earth metals. The stretching modes of these species absorb in the regions of $1080\text{--}1090\text{ cm}^{-1}$ for $\nu_1(\text{A}_1)$, $330\text{--}380\text{ cm}^{-1}$ for $\nu_2(\text{A}_1)$, and $270\text{--}290\text{ cm}^{-1}$ for $\nu_3(\text{B}_1)$. In addn. to the superoxides, various aggregate species are produced. One of these was identified as the superoxide dimer, which apparently has an $\text{O}_2\text{M--MO}_2$ structure of D_{2d} symmetry. Another aggregate was identified as a rhombic MO_2M species which is formed by the addn. of a metal atom to the superoxide. Small quantities of the suboxide dimer $(\text{In}_2\text{O})_2$ also were detected in these matrixes. The evidence indicates that this species was formed by the addn. of an In atom to each O of the $\text{InO}_2\text{In}(\text{D}_{2h})$ species. This dimer is of interest because it is readily formed by aggregation of the suboxide monomer in expts. involving the vaporization of the condensed oxide systems.

Ga_2O_3 Ga_2O_2
 In_2O_3 In_2O_2 } *confused*
B.

1980

6-202

Kelsall B. J. et al

J. Phys. Chem., 1980, 84,
N 9, 951-9

curr.
noct.

●
Cu $Te^{+}O_2^{-}$ i III

BaO_2

1980

Ларков А.В., Мамышев А.А.

Ц.К., Ж.И.
спектры

Всесоюз. МГУ химии, М., 1980,
Ис., библиогр. 16 нафв.
(Рук. деп. в ВИНЦИТ 26 марта
1980 г., № 1186-80 деп.)

(см. Te_2O ; III)

GaO₂

сентябрь 1980 | 1981.

Серебрянников Л. В.

расчет
1/1

Вестн. МГУ. Сер. Хим.,
1981, 22 (5), 507-508

$\text{Ga} + \text{O}_2$

Оммух 13966

1982

ИК спектр
в

мануск,
vi

Serebrennikov L. V.,
Osiz S. B., et al.

J. Mol. Struct., 1982,
81, N 1-2, 25-33.



Gal₂

1984

11 Б1175 Деп. КР-спектры продуктов реакции Ga, Jn, Tl с кислородом в аргоновых матрицах. Овчинников И. В., Серебренников Л., В., Мальцев А. А., Ред. ж. «Вестн. МГУ. Химия». М., 1984, 7 с. Библиогр. 10 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 25 янв. 1984 г. № 467—84 Деп.)

Получены спектры КР продуктов взаимодействия элементов IIIA группы с кислородом. Найдены частоты ν_1 и ν_2 молекул GaO_2 , JnO_2 , TlO_2 . Проведены поляризац. измерения и подтверждено ранее сделанное отнесение по типам колебаний. Найдена аналогия между КР-спектрами систем M^{IA} и $\text{M}^{\text{IIIA}} + \text{O}_2$. Полосы в области 300 см^{-1} отнесены к симм. кол. $\text{O}_2\text{—O}_2$ молекул $\text{M}_x(\text{O}_2)_2$. Найденная частота $\nu_3 \text{GaO}_2 = 322 \text{ см}^{-1}$, хорошо совпадает с рассчитанной по ИК-спектрам. Автореферат

(+2) ~~12~~

*спектр,
 ν_1 и ν_2 ;*

x. 1984, 19, n 11

Валд

1985

Отчет, Комплексное ис-
следов. термодинамич.

СКР
матрице,
структура,
симв.
пост.

свойств и молекулярных
постоянных", МГУ, Хими-
фак, 1985 (годовой отчет
за 1984г.)

Gal₂

DM 23365

1986

12 Б1026. Неэмпирическое исследование супероксидов металлов IIIB группы. Ab initio study of the superoxides of group 13 metals. Cabot P. Li., Illas F., Ricart J. M., Rubio J. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 1, 30—33 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны равновесные геометрич. параметры и энергии диссоциации молекул MO_2 ($M = \text{Ga, In и Tl}$) в электронных состояниях 2A_2 и 2A_1 . Для всех трех молекул основным является состояние 2A_2 . Базис включал двухэкспонентные наборы для валентных оболочек, дополненные поляризац. d-ф-циями. Для остовов использованы псевдопотенциалы Дюрана — Бартело. В ряду Ga, In, Tl расстояние $M-O$ увеличивается, а угол $O-M-O$ уменьшается. Неограниченным методом ССП вычислены частоты колебаний: ν_2 и ν_3 хорошо согласуются с эксперим. данными, а ν_1 систематически отличается от эксперим. значений. Анализ заселенностей по Малликену показал, что структура молекул может быть описана как $M^{q+}O_2^{q-}$, где заряд q меняется от 0,6 до 0,7 при переходе от Ga к Tl. А. А. Сафонов

расчет ν_1 ,
м.п., геометр.,
структур

Х. 1986, 19, № 12

(+27) ~~2~~

$\text{InO}_2, \text{TlO}_2$

GaO_2

Om - 23365 1986

104; 95914d "Ab initio study of the superoxides of Group III metals. Cabot, Pere Lluís; Illas, F.; Ricart, J. M.; Rubio, J. (Fac. Quím., Univ. Barcelona, Barcelona, Spain 08028). *J. Phys. Chem.* 1986, 90(1), 30-3 (Eng). The electronic ground-state ($2A_2$) geometries and dissocn. energies were calcd. of the Group IIIA metal superoxides (MO_2 , $M = \text{Ga, In, and Tl}$) at the SCF and CI levels by using nonempirical pseudopotentials and basis sets of double- ζ plus polarization quality. The $\nu_2(A_1)$ and $\nu_3(B_1)$ calcd. frequencies at the SCF level agree with expt. The $\nu_1(A_1)$ frequency shows a systematic deviation which is due to electron correlation effects. Doublet instability at the CI level appears in all cases making detn. of the vibrational frequencies at this level impossible.

cm⁻¹ km,
anop. p a cm,
Di

InO_2 , TlO_2

(72) 18

C. A. 1986, 104, N 12

GaO_2

(Im. 26040)

1986

/ 106: 162845p Molecular structure of gallium dioxide, indium dioxide, and thallium dioxide. An ab initio study. Cabot, P. L.; Illas, F.; Ricart, J. M.; Rubio, J. (Fac. Quim., Univ. Barcelona, Barcelona, Spain 08028). *Afinidad* 1986, 43(406), 469-70 (Eng). For GaO_2 , InO_2 , and TlO_2 in the ground state, the mol. structures and electron configurations were obtained using SCF and CI calcs., and the vibrational frequencies were obtained using SCF calcs.

компьютер,
vi, ab initio
ра

⊗ (+2) InO_2 , TlO_2

C. A. 1987, 106, N20.

БагД

[от. 28370]

1987

Альтеман А.Б., Векшишимова Т.И. и др.

Структура Пособия рекомендаций
колебл. спровочных дамных.

Чистоты. Депомирован. во ВНИИКИ

Госстандарт СССР 17.02.87г.

№ 295.

GaO_2

1988

Arnaiz F., Mota F., et al.
Quantum Chem.: Basic
Aspects, Actual Trends: Proc.
ser. n. Int. Workshop, Girona, 13-18
June, 1988. Amsterdam etc.,
1989. c. 377-383.

(cer. AlO_2 ; III)

1989
GaO₂ Arnau Ferran,
Mota Fernando et al,
Quantum chem.: Basic
Aspects, Actual Trends: Proc.
Incl. Workshop, Girona, 13-18
June, 1988. Amsterdam etc.,
1989. c. 377-383.
(cer. BO₂; II)

6a(12) -

(CM. 39099)

1997

Lester Andrews, Gary P.,
Kushto et al.,

moner
cb-la,
meop
pact

g. Phys Chem. 1997,
A101, 9077-9084.

Feb 2

OM-39345

1998

Edet F. Archibong, et al.,

M.N. Chem. Phys. Lett., 1998,
284, 331-338

GaO_2

2001

структура,
стабильн.,
теор. расчет

134: 198345t Theoretical investigation of the cyclic GaO_2 and GaS_2 molecules at DFT and correlated wave function levels. Bu, Yuxiang; Chan, Dezhan; Song, Xinyu (Institute of Theoretical Chemistry, Shandong University, Jinan, Peop. Rep. China 250100). *Int. J. Quantum Chem.* 2001, 81(3), 222-231 (Eng), John Wiley & Sons, Inc. The geometries and the bonding properties have been predicted for cyclic GaO_2 and GaS_2 species at d. functional theory (DFT), MPn ($n = 2, 3, 4$ with different substitutions), QCISD(T), and CCSD(T) all-electron correlation levels with 6-311+G* basis set. The geometrical optimizations and the harmonic vibrational frequency anal. are performed using DFT and second-order Moeller-Plesset (MP2) methods. The relevant energy quantities are also calibrated at the high-order electron correlation levels [MP3, MP4, quadratic CI (QCI), and coupled cluster (CC)]. Each species

С.А. 2001, 134, N14

possesses a 2A_2 ground state with a higher energy level 2A_1 state. The corresponding state-state sepn's. are about 32 kcal/mol for GaO_2 species and about 20 kcal/mol for GaS_2 species at the QCISD(T)/6-311+G* level. The QCISD(T) and CCSD(T) calcns. yield dissocn. energies of 42.0 and 59.0 kcal/mol for two species, resp., and other methods yield dissocn. energies within ~5 kcal/mol. Result anal. has indicated that the cyclic GaO_2 should be classified as superoxide and the GaS_2 species should be classified as supersulfide in their ground state, and those in the excited state (2A_1) should not be. However, the cyclic GaS_2 (2A_2) is less ionic than the GaO_2 (2A_2) and they are far less ionic than NaO_2 .