

CO_2^-

488-IV

Ze (NO_2^- , PO_2^- , AsO_2^- , SbO_2^- , PS_2^- ,

1953

O_3 , OS_2 , SO_2 , SeO_2 , TeO_2 , S_3 , SeS_2 , TeS_2 ,

CO_2^- ClO_2^+)

Potier A.

J. chim. phys. et phys.-chim. biol., 1953, 50, N1,
10-21 (apparus.)

Structures comparées d'isotères. II. Isotères tels
que NO_2^- , O_3 et SO_3

P. Xc. X. 1953, N1, 71.

10

11V-488a

1960

(СИЛОВЫЕ
ПОСТОЯННЫЕ)

CO_2 , CO_2^2 , CO_2^3

John G.J., Mikawa Y.

J. Mol. Spectrosc., 1960, 5, n 2, 92-100
(англ.)

Вычисление силовых постоянных потенциальной функции Гри-Бредли для ионных молекул типа AV_3 .

Радич., 1961, 56136

CO₂⁻

(ВФ-487-IV)

1961

10 В296, ЭПР и структура ион-радикала CO₂⁻.
Ovenall D. W., Whiffen D. H. Electron spin resonance and structure of the CO₂⁻ radical ion. «Molec. Phys.», 1961, 4, № 2, 135—144 (англ.)

Изучен спектр ЭПР ион-радикалов, образующихся при облучении муравьинокислого натрия γ -квантами (средняя энергия 1 Мэв). Спектр состоит из 4 линий, представляющих собой сверхтонкую структуру от взаимодействия с ядром ближайшего к CO₂⁻ иона (Na²³). Константы сверхтонкого взаимодействия составили (в Мгц для трех направлений) 26; 21; 21. Для тех же направлений g -фактор найден равным 2,0014; 2,0032; 1,9975. В тех случаях, когда ион CO₂⁻ содержит изотоп C¹³, наблюдаются две линии, расщепленные каждая на 4 компоненты под влиянием Na²³. Константы сверхтонкого взаимодействия равны (в Мгц) 546, 436, 422. Ион CO₂⁻ находится в ²A₁ — состоянии — он изогнут; угол OCO равен 134°.

К. Валиев

РЖФ 1962
10 В 296

CO₂

Spence

134-487-IV

1961

Electron spin resonance and structure of the CO_2^- radical ion. D. W. Ovenall and D. H. Whiffen (Natl. Phys. Lab., Teddington, Engl.). *Mol. Phys.* 4, 135-44(1961).—The radical ions formed by γ -irradiation of Na formate are CO_2^- radicals, since no H coupling is observed. They remain trapped at room temp. in the formation of the parent formate ion. From C^{13} splitting and the g values the half-filled $4a_1$ mol. orbital, which is mainly responsible for the magnetic resonance properties, appears to be of 14% C(2s), 66% C(2p_z), and 11% of each O(2p_z); by using Coulson's method, the O-C-O angle is found to be 134°. There is also coupling to the Na nucleus in an adjacent cation.

Walter G. Rothschild

C.A. 1962.56.4.

3041i

ВФ-2650-III

1962

22 Б62. Окислы и оксиды кислородных кислот металлоидов. Часть II. CO_2^- и NO_2 . Atkins P. W., Keen N., Symons M. C. R. Oxides and oxyions of the non-metals. Part II. CO_2^- and NO_2 . «J. Chem. Soc.», 1962, Aug., 2873—2880 (англ.)

Изучены электронные спектры и спектры ЭПР радикала-иона CO_2^- (I), образующегося при γ -облучении. Свойства I сходны со свойствами изоэлектронного NO_2 (II). Валентные углы OCO и ONO равны примерно 134° . Неспаренный электрон более делокализован в II, чем в I, в соответствии с несколько большим ядерным зарядом N. Это подтверждается и хим. поведением I и II. В электронном спектре I наблюдаются 3 полосы поглощения: при ~ 340 , 275—280 и 255—260 мк, причем первую полосу авторы считают связанной с частичным переносом заряда от кислорода к C или N. Часть I см. РЖХим, 1963, 5В36. В. Белова

CO_2^-
 NO_2

структура
Vi

(2)

084-11-168

х.1963.22

CO₂

IV-41025

1966

Infrared spectrum of carbon dioxide anion radical. K. O. Hartman and I. C. Hisatsune (Pennsylvania State Univ., University Park). *J. Chem. Phys.* 44(5), 1913-18(1966)(Eng). Pressed alkali halide disks of ir spectroscopy have been used as matrixes to trap and to stabilize the CO₂ anion free radical. The radical was generated by exposing disks contg. the formate ion in solid soln. to γ -rays from a Co source. The E.S.R., the uv, and the ir spectra of the radical have been identified. From the ¹²C and ¹³C isotopic frequencies of the antisymmetric CO bond stretching ir band, a valence angle of $127 \pm 8^\circ$ was calcd. for this radical. The radical reacted with water to produce the bicarbonate and formate ions.

RCIO

C.A. 1966. 64.8

10585 Rc

CO_2^-

IV-M-1025

1966

ИК -
спектр

10 Д231. ИК-спектр анион-радикала двуокиси углерода. Hartman K. O., Hisatsune I. C. Infrared spectrum of carbon dioxide anion radical. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 5, 1913—1918 (англ.)

Получен ИК-спектр радикала $\text{C}\cdot\text{O}_2^-$ в области вал. кол. ($1600\text{—}1700\text{ см}^{-1}$) при т-рах от 25° до -190°C . Радикал получался путем γ -облучения (кобальтовой пушкой) спрессованных таблеток из KBr, KCl, KJ и NaBr, содержащих ионы муравьиной кислоты. Прослежена зависимость интенсивности полос поглощения от времени облучения; их формы от т-ры. Проведенное сопоставление со спектрами ЭПР и в УФ-области позволило выполнить их интерпретацию. С помощью изотопич. замещения

р. 1966. 102

(C^{12} и C^{13}) определен валентный угол радикала $127 \pm 8^\circ$.
Время жизни радикала CO_2^- в матрице КВг при комнатной т-ре составляет более 17 месяцев и ~15 минут при $180^\circ C$. Исчезновение радикалов сопровождается по крайней мере двумя реакциями: 1) с водой, ведущей к образованию ионов муравьиной кислоты и бикарбоната; 2) ионизацией, приводящей к появлению электрона в ловушке и молекулы двуокиси углерода. В. Дианов-Клоков

CD₂⁻

(cell. 4)
Ев. мех.
расчет

Pople J. A., Segal G. A.

1966

J. Chem. Phys., 1966, 44,
N 9, 3289-3296.

См. ВМЗ; III

1969

CO_2^-

Bardsley J. W.

J. Chem. Phys., 1969,

51, ~ 8, 3384.

р-ил
потенс.

жестк.

(Cell. N_2O^-) III

1972

CO₂⁻

40742q Energy curves of CO₂⁻. Krauss, M.; Neumann, D. (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *Chem. Phys. Lett.* 1972, 14(1), 26-8 (Eng). Ab initio energy curves of the ²A₁ and ²B₁ states of CO₂⁻ were reported as a function of the bending angle. The ²A₁ curve was bound relative to the neutral curve at angles >130° from the linear geometry. Both the ²A₁ and ²B₁ states are valence in character for the geometries considered and the excitation energy for ²A₁ → ²B₁ is calcd. to be 3.2 eV in the neighborhood of the CO₂⁻ equil. geometry while the exptl. value for the max. in the lowest absorption curve is ~3.5 eV. From the bending energy curve it is deduced that gaseous CO₂⁻ in its ground vibrational level can have a relatively long life

since the ion energy in the neighborhood of the ion equil. geometry is ~1 eV below the neutral mol. energy for that geometry.

Raylene Adams Coad

go. yul
~~W. Neumann~~
 M. Krauss

C.A. 1972.77.6

CO_2^-

1972

9 Д157. Энергетические кривые CO_2^- . Krauss M., Neumann D. Energy curves of CO_2^- . «Chem. Phys. Lett.», 1972, 14, № 1, 26—28 (англ.)

(ϵ_i)
Неэмпирическим методом Хартри—Фока с использованием базиса гауссовых орбиталей без учета электронной корреляции вычислены энергии состояний 1A_1 , 2A_1 и 2B_1 иона CO_2^- в зависимости от валентного угла OCO ($=110^\circ \div 180^\circ$) (длина связи CO равна 2,196 Å). Показано, что потенц. кривая состояния 2A_1 имеет минимум при угле $\text{OCO}=132^\circ$, а потенц. кривые состояний 1A_1 и 2B_1 минимума не имеют. Потенц. кривые состояний 1A_1 и 2A_1 при угле $\text{OCO}=140^\circ$ пересекаются. Полученная разность энергий состояний 2A_1 и 2B_1 согласуется с экспериментальной.

Ф. 1972.9Д.

1972

 CO_2^-

20 Б20. Кривые потенциальной CO_2^- . Krauss M., Neumann D. Energy curves of CO_2^- . «Chem. Phys. Lett.», 1972, 14, № 1, 26—28 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО рассчитана зависимость энергии иона CO_2^- от угла COC при двух значениях длины связи CO (при равновесном значении в молекуле CO_2 и при увеличении его на 10%). Использовался базис валентных орбиталей гауссова типа. Основное состояние иона отвечает терму 2A_1 с минимумом вблизи угла OSO 130° . Вблизи этой конфигурации этот терм пересекается с термом основного со-

рассчитано
по м.ср.

8;

X. 1972. 20

стояния 1A_1 молекулы CO_2 . Первое возбужденное состояние иона отвечает симметрии 2B_1 , причем этот терм отвечает минимуму в линейной конфигурации, и оба терма образуют две компоненты вырожденного терма $^2\Pi_u$. Рассчитанная энергия возбуждения $^2A_1 \rightarrow ^2B_1$ при $\angle \text{OCO } 130^\circ$ равна 3,2 эв, что близко к эксперим. величине 3,4 эв. Теория предсказывает (в качеств. согласии с экспериментом) возможность образования метастабильного иона CO_2^- при рассеянии электронов на CO_2 с энергией $\sim 3,4$ эв. Отмечается, что в равновесной конфигурации иона CO_2^- энергия отщепления электрода положительна, что согласуется с эксперим. большим временем жизни иона ($\approx 10^{-5}$ сек.). Е. И. Дашевская

CO₂⁻

1972.

145626h Formation of CO₂⁻ in the microwave discharge in carbon dioxide. Srivastava, A. N. (J. K. Inst. Appl. Phys. Technol., Univ. Allahabad, Allahabad, India). *Indian J. Phys.* 1972, 46(4), 191-2 (Eng). Available expt'l. results on the effect of CO₂ pressure on the ion current in a microwave discharge of CO₂ and on its excitation spectrum are reviewed. It was concluded that these data do not provide any evidence which would suggest the formation of CO₂⁻ under these conditions.

E. O. Forster

C.A. 1972. 77. N22

CO_2^-

1972.

1) 3 Д406. Об образовании CO_2^- в СВЧ разряде в CO_2 .
Srivastava A. N. On the formation of CO_2^- in the microwave discharge in CO_2 . «India J. Phys.», 1972, 46, № 4, 191—192 (англ.)

Возбуждение полосы I—I ($\lambda=4393 \text{ \AA}$) системы Ангстрема молекулы CO в СВЧ разряде в CO_2 обычно связывают с заселением уровня $B^1\Sigma$ CO при диссоциативной рекомбинации возбужденного иона CO_2^+ с электроном, а уменьшение интенсивности излучения этой полосы при увеличении давления от 0,040 до 0,240 мм рт. ст. — со спадом конц-ии электронов вследствие их прилипания к молекуле CO_2 . Однако конц-ия положит. ионов, как показывают измерения ионного тока, уменьшается с ростом давления от 0,070 до 0,220 мм рт. ст. Таким образом, уменьшение интенсивности полосы системы Ангстрема обусловлено не прилипанием электронов, а уменьшением их конц-ии вследствие более быстрой трехчастичной рекомбинации. Библ. 9.

В. Александров

(С.В.З.)

Ф. 1973. № 3.

CO₂⁻

1973

(2c)
F 90601j Infrared spectra of free radicals prepared in a rotating cryostat. Spectra of carbon dioxide ion, chloromethyl radical, and acetyl radical. Bennett, J. E.; Graham, S. C.; Mile, B. (Thronton Res. Cent., Shell Res. Ltd., Chester, Engl.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1973, 29(2), 375-83 (Eng). A high resolu. ir spectrometer (Perkin-Elmer model 221) was modified so that the ir absorption spectra of deposits prepd. in a rotating cryostat could be obtained in situ. The free radicals, CO₂⁻, Cl₃C[•], and MeC(O)[•], were prepd. by well-established methods and trapped in a suitable matrix at 77°K. Several bands in the ir spectra of these deposits were obsd. and assigned to these free radicals, chiefly on the basis of the corresponding changes in the ir spectra and ESR of the deposits when thermally annealed. The assignments were in reasonable agreement with the published spectra of these radicals.

C.A. 1973.78 N14

Cl₃C[•]
CH₃C(O)[•]

(42)



CO₂⁻

1973

6 Д338. ИК-спектры свободных радикалов, полученных во вращающемся криостате: CO₂⁻, CCl₃ и CH₃CO. Bennett J. E., Graham S. C., Mile B. Infrared spectra of free radicals prepared in a rotating cryostat: the spectra of CO₂⁻, CCl₃ and CH₃CO. «Spectrochim. acta», 1973, A29, № 2, 375—383 (англ.)

(v_i)
Получены ИК-спектры поглощения и спектры ЭПР CO₂ и CCl₄, осажденных на поверхность при 77° К совместно с К и Na и смеси CH₃COCl + CO₂ с калием. Полосы, наблюдаемые при 1604 и 1628 см⁻¹ в спектре CO₂/К и 1601 см⁻¹ в спектре CO₂/Na отнесены к асимметричному колебанию ν₃ иона CO₂⁻, что подтверждается изменениями интенсивности полос при отжиге и данными электронного спинового резонанса. В спектрах других смесей наблюдаются полосы, отнесенные к колебанию СО в радикале CH₃CO и CCl в радикале CCl₃. Ряд полос поглощения связан с изолированными в матрице мономерами и комплексами Н₂О. Приведены полученные ИК-спектры. Библ. 12. М. В. Тонков

Ф. 1973, № 6

(+2) X

CO_2^-

1973

Chuvylkin N. S.

Zhidomirov G. M.

кв. мех.
перевод

"Mol. Phys"

1973, 25 (5), 1233-5

(ссыл. CH_3 ; III)

31113.4509

TE, Ch

CO₂-

41072

1973

1352

Chuvylkin N.D., Zhidomirov G.M.

Calculations of the anisotropic hyperfine
coupling constants in free radicals.

"J. Magn. Reson.", 1973, 11, N 3,

367-372

(англ.)

1003 мик

978

980

996

ВИНИТИ

1973

 CO_2^-

геометр.

(15 Б41.) Об определении валентных углов в трехатомных радикалах из данных ЭПР. Owens F. J. On the determination of bond angles of triatomic radicals from electron spin resonance. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 18, № 2, 158—160 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ЧПДП рассчитаны s - и p -спиновые параметры гибридизации (sp)-АО неспаренного электрона на центральном атоме в радикалах CO_2^- и BF_2 в зависимости от величины валентного угла. Обнаружено значит. расхождение рассчитанных зависимостей с вычисленными в приближении ортогональности гибридных АО. Отмечено, что рассчитанная теоретически методом ЧПДП равновесная геометрия радикалов, вычисленные значения s - и p -спиновой плотности хорошо согласуются со значениями, полученными из данных ЭПР для CO_2^- и BF_2 .

Р. А. Ливин

X. 1973 № 15



(+1) III

CO_2^-

BF_2

Confyus.

1973

115414r Determination of bond angles of triatomic radicals from electron spin resonance. Owens, F. J. (Feltman Res. Lab., Picatinny Arsenal, Dover, N.J.). *Chem. Phys. Lett.* 1973, 18(2), 158-60 (Eng). The s and the p density of the sp hybrid orbital of the unpaired electron on the central nucleus of CO_2^- and BF_2 are calcd. as a function of the bond angle by the INDO (intermediate neglect of differential overlap) MO method. The theory yields a dependence of the ratio of the p d. to the s d. on bond angle markedly different from a dependence derived from the orthogonality of sp hybrid orbitals and commonly used to det. the bond angle from ESR data.

C. A. 1973. 79 v 18

(+1) ☒

CO_2^-

1973

Chair.
Jace-
Jace-

Owens F.J., Adams G.F.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, 112, 981-982.

E;
/

(cm HCO; III)

41113.3707

Ph, Ch, TC

96201

CO₂⁻

02

1974

4-7251

Almlöf Jan, Lund Anders, Thuomas Karl-Åke.

Ab initio MO LCAO UHF calculations of magnetic hyperfine interactions in radicals. Isotropic couplings of NO₂ and CO₂.

(*Chem. NO₂, III*)
"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 2,
179-181 (англ.)

216 216 - 2 22

0220

ВИНИТИ

CO_2^-

1974

Harcourt R. D.

Sillitoe J. E.

"Austral. J. Chem" 1974, 27,
N4, 691-711 (annu)

(all CF_2 ; III)

(perum E)

omru 2761

1974

CO₂

(Di)

9599c Vibrational spectrum of carbon dioxide(-) ion in an argon matrix. Jacox, Marilyn E.; Milligan, Dolphus E. (Inst. Mater. Res., Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 28(2), 163-8 (Eng). Absorptions which appear near 1600 cm^{-1} on codeposition at 14°K of Ar:CO₂ mixts. with an alkali metal were assigned to ν_3 of an $\text{M}^+ \dots \text{CO}_2^-$ ion pair, with an OCO valence angle near 130° . Mol. aggregates contribute significantly to the obsd. spectrum.

C.A. 1975. 82 N2

Оттиск 2761

1974

CO₂

Колебат.
Спектр.

6 Б319. Колебательные спектры CO₂⁻ в матрице аргона. Jасох Marilyn E., Milligan Dolpus E. Vibrational spectrum of CO₂⁻ in an argon matrix. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 28, № 2, 163—168 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения CO₂⁻...M⁺ в матрице аргона при t-ре 14 К. Система получена одновременным осаждением смеси Ag:CO:N₂O (отношение кон-ий 250:1:1 и 500:1:1) и паров Na и K. Из сравнения ИК-спектров полученного соединения с данными для N₂O и CO в матрице Ag без щел. металла, а также со спектрами данного соединения после облучения светом ртутной и кадмиевой ламп, сделан вывод о том, что поглощение вблизи 1600 см⁻¹ обусловлено колебанием ν₃ ионной пары M⁺...CO₂⁻. Значение угла ОСО равно ~130°.

Б. Г. Антипов

ж. 1975. N 6

41113.3704
Ch, Ph, TC

96201

CO_2^-

02

1974

2761

Jacox Marilyn E., Milligan Dolphus E.

Vibrational spectrum of CO_2^- in an argon matrix.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 2,
163-168
(англ.)

0230 пик

216 216 - 2.29

ВИНИТИ

CO₂⁻

1974

112854q Cross sections for production of molecular oxygen(-) and carbon(-) ions by dissociative electron attachment in carbon dioxide. Renner-Teller effect. Spence, D.; Schulz, G. J. (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(1), 216-20 (Eng). By using the previously described (A. Stamatovic and G.J.S., 1970) electron-impact method to study the effect of Renner-Teller splitting (e.g., C.R. Claydon, et al., 1970) on the dissociative electron attachment of CO₂, cross-section (σ) peaks were obsd. at electron energy $E = 11.3$ eV ($\sigma \sim 10^{-24}$ cm²) and 12.9 eV for the prodn of O₂⁻, and at $E = 16.0, 17.0$, and 18.7 eV ($\sigma \sim 0.3 \times 10^{-21}, 0.4 \times 10^{-21}$, and 2.0×10^{-21} cm², resp.) for the prodn. of C⁻. The double-peaked nature of the O₂⁻/CO₂ cross section is a consequence of the Renner-Teller splitting of the ² Φ_g state of CO₂⁻. The CO₂⁻ states (² Σ_u^+ and ² Π_g responsible for the prodn. of O⁻ can also have alternative decay channels leading to C⁻ + 2O.

C.A. 1974. 80. N20

1974

CO₂ -

Takata Yuzi

"Chem Phys Lett" 1974

26, N4, 557-560 (anim)

темпер.
молекулы

(см BH₂; III)



x1975 N1

41125.7818
Ph, Ch, TC

CO₂ - 40892

02

1974

4-7275

Tang S. Y., Rothe Erhard W., Reck Gene P.

Negative ion formation from energetic
collisions of cesium with CO₂, CS₂,
and COS.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 7,
2592-2595 (АНГЛ.)

0240

224 226 - 232

ВИНИТИ

51203.8847
Ch, Ph, TC, MGU

CO_2 - 40892
(м.н.)

1975
3489

Compton R.N., Reinhardt P.W., Cooper
C.D.
Collisional ionization of Na, K, and Cs
by CO_2 , COS, and CS_2 : molecular electron
affinities.

"J.Chem. Phys.", 1975, 63, N 9, 3821-3827

(англ.)

0500 м.н.

480 486

ВИНИТИ

CO₂⁻

1975

John T.L.

подробно
поиску.

"Mon. Notic. Roy Astron
Soc" 1975, 172, N2, 305-
311 (ann)

(см H₂; III)

CO₂⁻

1975

Krauss M.

новерх.

номерус.

информ.

U.S. Aerosp Res Lab

[Rep] 1975, ARL TR 75-0202

Vol 1, 206 pp (Eng)

(all NO₂; III)

CO₂ -

Bip-6373-XIV

#4-8928

1975

Pacansky J. et al.

Суд. поств. J. Chem. Phys., 1975

номер. нов-ст. 62 N 7, 2740-44.

(суд. CO₂; III)

51212.8813
Ch, Ph, TC, MGU

96201

CO₂⁻

1975
* 3-10580

Vercauteren D.P., André J.-M., Derouane
E.G.

Electron spin density distribution in the
CO⁺, CO₂⁻ and O₂⁻ radicals as a function
of geometry.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 36, N 3, 322-327

(англ.)

0500

487 489

501

ВИНИТИ

60414.9324

Ph, Ch, TC

30063

CO₂

(колерат-
сифуат)

1976

#3-12610

Abouaf R., Paineau R., Fiquet-
Fayard F. Dissociative attachment in
NO₂ and CO₂. "J. Phys. B: Atom. ^{and} Mol.
Phys.", 1976, 9, N 2, 303-314 (англ.)

0602 ВМК

569 575

ВИНИТИ

60604.3685

96201

1976

Ph, Ch, TC, MGU

 CO_2^-

* 4-13893

Bruna Pablo J., Peyerimhoff Sig-
rid D., Buenker Robert J. Calculation
of the vertical electron attachment
energy of carbon dioxide: continuum
states for negative ions. "Chem. Phys.
Lett.", 1976, 39, N 2, 211-216
(англ.)

0629 см

614 615 (сер. CO_2 ; III)

ВИНИТИ

70221.2471

Ch, Ph, ITC

29848

 CO_2^-

1976

*45-16821

Burton Brian, Claxton Thomas A.,
Hamshire Stephen J., Marshall Howard E.,
Overill Richard H.E., Symons Martyn C.R.
On the determination of bond angles of
triatomic radicals from electron spin
resonance data. "J. Chem. Soc. Dalton
Trans.", 1976, N23, 2446-2449 (англ.)

см. В42, III

787 790806

0814 нмк

ВИНИТИ

CO_2^-

кв. см.
раств

England W.B.

1976

J. Chem Phys 1976,
65(2) 684-91 (Eng)

(all CO_2 ; III)

CO_2^-

Lund Anders, et al ¹⁹⁷⁶

"Chem. Phys. Lett" 1976, 44,

N^o 3, 569-573 (ann)

(en NO_3 ; III)

Kb. max.
µcc/cm.

70511.7262
Ch,TC,MDU

изд. 23964, 1977
CO₂ accord MgO * 13-18270

Merlaudeau Paul, Ben Taarit Younès,
Vedrine Jacques C., Naccache Claude.
E.P.R. studies of the structure,
mobility and reactivity of CO₂ and
CO₃⁻ species adsorbed on MgO.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1977, Part 2,
73, N 1, 76-83 (англ.) 0875 БМК

827 833 02

ВИНИТИ

CO_2^-

1978

Lin, M.J., et al.

J. Magn. Reson. 1978, 29(I),
151-7.

структ.
парам;
кв. мик.
расчет.

см. SO_2^- - II

CO_2^-

1978

Стариков И. В. и др.

У, сис. пост.

Изв. сифрукт. химии,
1978, 19(5), 908-33.



(сис. CO_2 ; $\overline{m}$)

CO₂⁻

1980

Detrick J., et al.

Int. J. Quantum Chem;
(7) 1980, Quantum, Chem,
Symp. N 14, 262.

расч.

поверх.

сущ. по с.

(сущ. NaO^+ ; III).

CO_2^-

$A, ({}^{12}\text{H}_4 - {}^{14}\text{A})$

потенс.
энерг
поверхн.

(оттиски 10799) 1980

Норпер Д. С.

Chem. Phys., 1980,
53, 85-94.

CO_2^-

1981

England Watted B.

homemys.

Кривов

Chem. Phys. Lett., 1981,
78, N3, 607-613.

(see CO_2 ; III).

CO₂⁻

AMMUCK 11500 1981

94: 163976c Accurate ab initio SCF energy curves for the lowest electronic states of carbon dioxide/carbon dioxide(1-) ion. England, Walter B. (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Milwaukee, WI 53201 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 78(3), 607-13 (Eng). Accurate ab initio SCF calens. show that CO₂⁻ is metastable, with an electron affinity that is significantly larger in magnitude than previously calcd. C_{2v} Group vibrational frequencies and a barrier height for autodetachment were detd. for CO₂⁻. Agreement with expt. is good.

kb. rex,
Races



C.A. 1981. GYARD

CO_2^-

1980

(резонансы
ионов, E_i)

King G.C., et al.

J. Phys B: Atom. and
Mol. Phys., 1980, 13, N21,
4315-4323.



(сер. N_2^- ; III)

CO_2^-

1981

Yoshioka Y., et al.

J. Chem. Phys. 1981,
75(2), 1040-1041.

He
(кв. мех.
растр.)

● (сеч. CO_2 ; III)

CO_2^-

1982

структур-
ра

Gomes M. A. F., Caruto S.

J. Phys. B. 1982, 15(9),
1307-1317.

(ср. NH_3^+ ; I)

CO₂⁻

1983

6 ЛЗ00. Ионы CO₂⁻ при тлеющем разряде в дву-
окиси углерода при низком давлении. CO₂⁻ ions in a
low pressure glow discharge of carbon dioxide. Krish-
на Kumar S. V., Venkatasubramanian V. S.
«J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 12, 6423—6425 (англ.)

С помощью времяпролетного масс-спектрометра ис-
следован состав отрицат. ионов, образующихся при тле-
ющем разряде в CO₂ при давл. 0,04—0,3 млн. рт. ст. и
токе 2—15 мА. Наряду с хорошо известными ионами
C⁻, O⁻, O₂⁻, O₃⁻ и CO₄⁻ в спектре зарегистрированы
ионы с массовым числом 44 и 28 которые интерпрети-
рованы как CO₂⁻ и CO⁻. Для времени жизни CO₂⁻
получена оценка $\tau > 30$ мкс. Рассмотрены возможные
каналы образования CO₂⁻ в тлеющем разряде. Приве-
дены литературные данные о времени жизни, энергии
сродства к электрону, длине связи и других характе-
ристиках CO₂⁻. Библ. 28. А. В. Н.

Э, Ас,
длина связи

ф. 1984, 18, № 6

CO_2^-

1985

Braga M., Barros B., et al.

геоцентр,
структ.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1985, 18, N 12,
2319 - 2325.

($\text{C}^\bullet\text{u} \cdot \text{BeF}_2^+; \text{III}$)

CO₂

Om. 22 249

1985

103: 29396q Comparison of the magnetic properties and harmonic force fields of nitrogen dioxide and carbon dioxide(1-) (CO₂) by ab initio calculation. Carmichael, Ian; Bentley, J. (Radiat. Lab., Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN 46556 USA). *J. Phys. Chem.* 1985, 89(13), 2951-4 (Eng). Ab initio calens. using a moderately large [10,6/5,4] Gaussian s,p basis set are performed on both NO₂ and CO₂ at the UHF level to investigate the spin distribution in these radicals. The effect of spin projection on both isotropic and dipolar coupling interactions is considered. Changes due to the addn. of diffuse and polarization functions to the basis set are included in the comparison with expt. A previous UHF calcn. by J. Almlof et al. (1974) is limited by basis set inadequacy. From conventional symmetry coordinates, a harmonic force field is derived by using the UHF procedure with the s,p basis for the sym. stretch and bend in both species. A small CI calcn. proved necessary to locate the asym. stretch in NO₂. A comparison of the derived frequencies with expt. casts doubt on the assignment of the CO₂ spectrum obsd. in a matrix.

(anal. no cm)

(41) ☒

C. A. 1985, 103, N 4

NO₂

COO⁻(K⁺) [Om. 25236]

1986

Guillermo Contreras J.,

U.N.

J. Mol. Struct., 1986, 147,
N3-4, 301-306.

CO₂⁻

1986

Kikuchi Osamu,
Ishii Misako, et al.

FCP-
сепрук-
тура

Nippon Kagaku Kaishi
1986, (11), 1587 - 93.

(ср. HCO; III)

Al_2^-

[om. 25262]

1986

Kikuchi O., Ishii M., Mo-
rikashi K., et al.,

Результаты
молекуляр.
спектр.

Kleinon Karyu Kaisei,
J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1986, 11,

● 1587-1593.

CO_2^-

1987

Iffert R., Zug K.

u.n., Theor. Chim. acta, 1987,
 $\Delta_f H$; 72, N 5-6, 373-378.

($\text{C}_{\text{ref.}} \bullet \text{CH}_2^-$; III)

CO₂⁻

от 35804

1989

Ж 4 Б1232. Получение и спектроскопия малых полиатомных ионов, изолированных в твердом неоне. The production and spectroscopy of small polyatomic molecular ions isolated in solid neon / Jacox M. E., Thompson W. E. // High Temp. Sci.— 1988—1989.— 28, spec. vol.— С. 225—234.— Англ.

Получены ИК-спектры ионов CO_2^- , CO_2^+ , O_4^- и O_4^+ , O_3^+ и O_3^- , изолированных в неоновых матрицах. Ионы получали микроволновым разрядом смесей $\text{Ne}:\text{CO}_2$ и $\text{Ne}:\text{O}_2$. Полосы $1421,7/1420,1 \text{ см}^{-1}$ отнесены к иону CO_2^+ , $1658,3 \text{ см}^{-1}$ — к CO_2^- . Полосы $1164,4$ и $973,1 \text{ см}^{-1}$ отнесены к иону транс- O_4^+ , и транс- O_4^- . Отнесение полос выполнено на основании данных изотопозамещенных по углероду и кислороду. Полученные данные хорошо совпадают с результатами по системам MCO_2 и MO_4 , где М — щел. металл. Г. В. Чертихин

ИИ (15)

X.1992, N4

C₂⁻

(DM. 32774)

1989

Jacob M.E., Thompson W.E.,

колебат.
спектр,
частоты

J. Chem. Phys., 1989,
91, N3, 1410-1416.

The vibrational spectra of molecular ions isolated in

Solid neon, CO_2^+ and CO_2^- .



CO_2^-

1992

Ramondo F.,
Sanna N. et al.

meop.
pacrim

Chem. Phys. Lett.
1992, 193 (6), 594.

(see SO_3^- ; III)

CO_2^-

1998

Beitzel F.H. et al.,

(Ae, cmp-pa) *J. Chem. Phys.* 1998,
108 (16), 6756-62

(all CO_2 ; III)

1999

F: CO2-

P: 3

132:83982 Long-lived high-spin states of CO2-:
loosely bound complexes be C- and O2. Dreuw, A.;
Cederbaum, L. S. Theoretische Chemie,
Physikalisch-Chemisches Institut, Universität
Heidelberg Heidelberg 69120, Germany J.
Phys. B: At., Mol. Opt. Phys., 32(23), L665-L672
(English) 1999 Motivated by the exptl.
observation of a long-lived CO2- state, we have
investigated several sextet states of this species.
In analogy to recent results for long-lived sextet

C.A. 2000, 132

states of CO^- , we focus on long-range min. sextet ground state $6A_1$ of CO_2^- . We have found two min. geometries at ve internuclear distances, which can be explained as loosely bound complexes between a C^- ion and an oxygen mol. in their resp. ground states. Both 1 range isomers of the $6A_1$ state are stable with respect to single-electron emission and dissocn. Since all other decay channels are spin forbidden, species are long lived.

CO₂ -

[Om. 39979]

1999

UK sample
b Ar

Mingde Zhou
and Lester Andrews,

manuscript

J. Chem. Phys., 1999,

110, N 5,

2414 . . .

CO_2^-

1999

130: 215212j Infrared spectra of the CO_2^- and C_2O_4^- anions isolated in solid argon. Zhou, Mingfei; Andrews, Lester (Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Chem. Phys.* 1999, 110(5), 2414-2422 (Eng), American Institute of Physics. Laser ablation of transition metal targets with concurrent 11 to 12 K condensation of CO_2 -Ar mixts. produces a sharp metal independent IR absorption at 1657.0 cm^{-1} due to CO_2^- , which is formed from the capture of ablated electrons by CO_2 mols. during the condensation process. Two addnl. metal independent absorptions are produced at 1856.7 and 1184.7 cm^{-1} on matrix annealing to 25 K to allow diffu-

(UK chemist)

(+) CaO_4^- 



C.A. 1999, 130, N16

sion and reaction of CO_2 and CO_2^- . Isotopic substitution ($^{13}\text{CO}_2$, C^{18}O_2 , $\text{C}^{16,18}\text{O}_2$, and mixts.) shows that these two vibrations involve two equiv. CO_2 subunits. The excellent agreement with frequencies, intensities, and isotopic frequency ratios from d.-functional calcs. supports assignment to the sym. C_2O_4^- anion with D_{2d} symmetry. Photodissocn. (470–580 nm) and failure to observe these absorptions in identical expts. doped with the electron trapping mol. CCl_4 further support the mol. anion assignments. Although absorptions were obsd. for weak $(\text{CO}_2) \cdot (\text{CO}_2^-)$ complexes, no evidence was found for the asym. $\text{O}_2\text{C-OCO}^-$ mol.-anion complex characterized by calcs.