

K202

BQP -578-X

1964

Vibrational frequency and dissociation energy of the superoxide ion. J. A. Creighton and E. R. Lippincott (Univ. of Maryland, College Park). *J. Chem. Phys.* 40(6), 1779-80(1964). The Raman spectrum of K superoxide and impure Na₂O₂ were obtained. A Raman line at 1142-1145 cm.⁻¹ was detected. A stretching force const. of 6.17×10^5 dyne/cm. and a dissocn. energy of 2.99 e.v. were calcd. for O₂⁻. Henry Leidheiser, Jr.

K₂O₂
Na₂O₂
O₂⁻ (D₂)

Binf

C.A. 1964. Co N10 11510 a

☒

$(K_2O_2)^+$
3474

Тусаров А. В., Торохов Л. Н. 1966

I
Тусаров

Темнеофизика высоких температур, 1966, 4, с. 590.

ГА-332

I $(K_2O_2)^+$

IX-1024

1965

MgO_2 , CaO_2 , SrO_2 , BaO_2 , Li_2O_2 , Na_2O_2
 K_2O_2 , Rb_2O_2 , Cs_2O_2 (E, D)

Wood R.H., D'Orario L.A.,

J. Phys. Chem., 1965, 69, 2558-2561

M, 10

~~IX~~, 1966, 215516

chem. opin.

γ_i (H_2O_2 , Li_2O_2 , Na_2O_2 , K_2O_2 , Rb_2O_2 , MgO_2 , CaO_2 , SrO_2 , BaO_2 , KO_2 , RbO_2) IX 705-1370 9 11

Blunt F. J., Mendra P. J., Mackenzie J. R.

Chem. Commun., 1969, 278-279/acc.

The laser Raman spectra of salts containing the anions O_2^- and O_2^{2-} .

Proc. Chem., 1969, 205-207

W ECT d. R.

K_2O_2
1328

Anibrews L.

1971

u. n.
Osmar

J. Chem Phys., 1971, 54 p. 4935

[17]

K_2O_2



u. n.

K_2O_2
4366²

Spiker R.C., Andrews L.

1973

М. Н.
Осина

J. Chem. Phys., 1973, 59, 1851.

[2]

K_2O_2



М. Н.

50324.9013

Ch, TC

48536

K_2O_2

1975

*4-8326

Eysel H.H., Thym S.

Raman spectra of peroxides. "Z. anorg.
und allg. Chem.", 1975, 411, N 2, 97-102

(см. Li_2O_2) (англ., рез. нем.)

0324 пик

307 307

0316

ВИНИТИ

K_2O_2
4796

1977

Yates J. H., Pitzer R. J.

M. H.
Oswin

J. Chem. Phys., 1977, 66, 3532
P.

[4]

K_2O_2



M. H.

(К₂O₂)⁺

Кудин Л.С., Гусаров Л.В.¹⁹⁷⁷
Горохов Л.И., Краснов К.С.

I
Гусаров

Теплофизика высоких
температур, 1977, 15,
с. 505.

ГА-339

I (K₂O₂)⁺



1980

KaD₂

Gingerich K.A.,

Current Topics in Materials
Science, Volume 6, edited
by Kaldes E.

No;

North-Holland Publishing
Company, 1980.

(есть оттиск ● в коробке оттисков
Gingerich).

K_2O_2
4915

1981
Allasena M., Blaisten - Barojas E.,
Siloi B.

M. N.
Oscra

J. Chem. Phys., 1981, 75, ^{i.} 787

[3]

K_2O_2



M. N.

K_2O_2

1981

Allavena M., et al.

расчет
геометр.,
структ.,
V_i, D₀.

J. Chem. Phys., 1981,
75, N2, 787-792.

●
(сер. Li_2O_2 ; III)

K_2O_2

[Ом. 17068]

1983

Кудряк Л. С., Горюхиной
А. М., и др.

у;

2136. Вузоб. Химия и хими.
технол., 1983, 26, № 6,
685-688.

●
(сери. K_2 ; III)

Ka₂⁺

(DM. 17068)

1983

Кудряк. А. С., Торредамой А. М.,
и др.,

Кр. 3

Изв. вузов: Химия и
хим. технol., 1983,
26, № 6, ● 685-688.

KaO₂

1984

12 Д132. Электронная структура и колебательный анализ перекисей щелочных металлов K_2O_2 и Rb_2O_2 . Electronic structure and vibrational analysis of the alkali peroxides K_2O_2 and Rb_2O_2 . Bravo Graciela, Blaisten-Barojas Estela. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 3, 237—240 (англ.)

Показано, что хотя симметрия основного состояния молекул K_2O_2 и Rb_2O_2 не изменяется при переходе от атома K к атому Rb, энергии молекулярных орбиталей при этом существенно меняются. Эти изменения таковы, что молекула K_2O_2 оказывается наименее стабильной в ряду молекул M_2O_2 ($M=Li, Na, K, Rb$). Рассчитаны частоты ИК-колебаний, указанных в названии молекул. Результаты получены методом ССП МО ЛКАО с использованием точных псевдопотенциалов.

В. А. Морозов

ν_i , м.п.

(1)

Ф. 1984, 18, № 12

K_2O_2

От. 19401

1984

21 Б1060. Электронное строение и колебательный анализ перекисей щелочных металлов K_2O_2 и Rb_2O_2 . Electronic structure and vibrational analysis of the alkali peroxides K_2O_2 and Rb_2O_2 . Bravo Graciela, Blaisten-Barojas Estela. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 3, 237—240 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП с использованием приближения псевдопотенциала для учета остовных электронов изучено электронное строение K_2O_2 и Rb_2O_2 в валентном базисе 4—31 ГФ. Молекулы найдены ромбич. симметрии D_{2h} . Рассчитаны равновесные геометрич. параметры, частоты колебаний типа B_{2u} и B_{3u} . Результаты сопоставлены с аналогичными расчетами Li_2O_2 и Na_2O_2 . Энергия связи молекулы K_2O_2 оценена в 23,9 ккал/моль. Отмечены закономерности в связях металл—кислород в перекисях. С увеличением порядкового номера щел. металла возрастает смешивание $(n-1)p$ АО металла с МО кислорода. А. Е. Смоляр

кометр,
структура,

Vi)

(4)

X. 1984, 19, № 21

Rb_2O_2

K_2O_2

(Om. 1940A)

1984

/ 101:98002d Electronic structures and vibrational analysis of the alkali peroxides potassium peroxide (K_2O_2) and rubidium peroxide (Rb_2O_2). Bravo, Graciela; Blaisten-Barojas, Estela (Inst. Fis., Univ. Nac. Auton. Mexico, Mexico City, Mex. 01000). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 108(3), 237-40 (Eng). A study was made of the role of the outermost p shell of the alkali atoms in the binding of the heavy peroxides K_2O_2 and Rb_2O_2 . Although the symmetry of the ground state is not changed as one increases the mass of the alkali atom, the MO energies are sufficiently changed as to point to K_2O_2 as being the least stable in the series M_2O_2 ($M = Li, Na, K, Rb$). Frequencies of the IR active modes were calcd. also.

неопен.
расем Vi,
смаб уаке.

⊕ ⊗ Rb_2O_2
c. A. 1984, 101, N 12

K_2O_2

1993

Brunere V., Kalina Yu.

Latv. Kim. Z. 1993, (3),

UK crump

276-80.

(сч. ● KO_2 ; III)

K_2O_2

(Om. 38049)

1995

Benoit Tremblay, Pascale Roy,

(Di, empty m.) *J. Chem. Phys.*, 1995, 103(4),
1284-1291.

K₂O₂

1995

123: 126001c Vibrational spectrum and structure of the K₂O₂ complex in solid argon: a far infrared and density functional theory study. Tremblay, Benoit; Roy, Pascale; Manceron, Laurent; Pullumbi, Pluton; Bouteiller, Yves; Roy, Denis (LURE, Univ. Paris Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(4), 1284-91 (Eng). New fundamental K-O stretching frequencies of the isolated K₂O₂ mol. are reported for different isotopic species. The B_{2u} vibration can be measured for ³⁹K₂¹⁶O₂, ³⁹K₂¹⁶O¹⁸O, ³⁹K₂¹⁷O¹⁸O, ³⁹K₂¹⁸O₂, ³⁹K⁴¹K¹⁶O₂ and ³⁹K⁴¹K¹⁸O₂. The B_{3u} vibration can be located for K₂¹⁶O₂, K₂¹⁶O¹⁸O and K₂¹⁸O products, and the formerly B_{3g} symmetry motion, IR-activated by symmetry breaking in ³⁹K₂¹⁶O¹⁸O, ³⁹K⁴¹K¹⁶O¹⁸O, ³⁹K⁴¹K¹⁶O₂, and ³⁹K⁴¹K¹⁸O₂, is equally obsd. The self-consistency of the attributions is based on semiempirical quadratic force field calcns., and, more importantly, upon theor. ab initio and D. Functional Theory calcns. The ground state geometry calcd. using the all electron d. functional theory method corresponds to a slightly out of plane distorted rhombic structure (C_{2v} symmetry), in contrast to the D_{2h} symmetry structure calcd. for Li₂O₂ or at the SCF level for K₂O₂. The energy difference between rhombic D_{2h} and out-of-plane C_{2v} structure is nevertheless too small (0.08 kcal/mol) to exclude a calcn. artifact. The agreement between the positions of obsd. vibrations and the d. functional theory calcn. predictions is however remarkable.

Calend B
MAMPUSE,
M.A.

C.A. 1995, 123, N10