

Na-C-O

375

1954

$\text{Na}_2(\text{COO})_2$ (mol.str.)

Jeffrey G.A., Parry G.S.

J.Amer.Chem.Soc., 1954, 76, N 21,
5283-5286

The crystal structure of ...

HL



1961



Buijs K., Schutte C. J. H.

Spectrochim. Acta, 1961, 17,
927-932, w 9-10

И.К. спектры и структуры
 Li_2CO_3 и гидрата Na_2CO_3

1964

9 Д204. Колебательные спектры некоторых замещенных ацетатных ионов. S p i n n e r E. The vibration spectra of some substituted acetate ions. «J. Chem. Soc.», 1964, Nov., 4217—4226 (англ.)

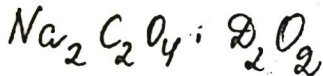
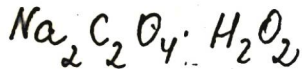
RCOONa

колебат.

спектры

Получены ИК-спектры ($4000-650\text{ см}^{-1}$) и спектры комб. рас. ($2600-200\text{ см}^{-1}$) солей RCOONa, где $R = \text{CH}_3$, C_2H_5 , C_4H_9 , CF_3 , CCl_3 , CBr_3 , CHCl_2 , CHBr_2 , CH_2CN , CH_2F , CH_2Cl , CH_2Br и CH_2J . Частота очень интенсивной ИК-полосы около 1600 см^{-1} , приписываемая антисимметричным вал. кол. OCO -группы, заметно возрастает с усилением электронно-акцепторных свойств R и не зависит от массы R . Интенсивная полоса около 1400 см^{-1} , приписываемая симметричным вал. кол. OCO -группы, уменьшается с ростом массы R и не зависит от электронно-акцепторных свойств R . Для объяснения этого предложена несимметричная нерезонансная структура карбоксилатной группы $R\cdot\text{C}:\text{O}\cdot\text{O}^-$. Ниже 1200 см^{-1} спектр ацетатного иона сходен со спектром соответствующей уксусной кислоты.

ф. 1965. 98



J_i
сироемие

Pedersen B.F. 1967

Bp-4503-X

Acta chem. scand.,

21, n3, 801-811.

Литература ИК-
спектров твердых
оксидов и много-
атомных металлов,

или издрасов и пер-
издрасов

(сое. $\text{Li}_2\text{C}_2\text{O}_4$)

ВФ 6398-Х

1964

1) (Na_2CO_3 , K_2CO_3 , Rb_2CO_3 ,
 Cs_2CO_3) (прис) - X-6398

Щоканов Р. К., Бакеев М. И.

Тр. Хим.-металлург. ин-та АН Каз ССР,
1964, 3, 102-106.

Качественный спектральный анализ
щелочных металлов.

Рис. 100, 1000, 21624

10

Li_2CO_3 , Na_2CO_3 , K_2CO_3 (21) 1972
(расплавы) $\bar{x}$ 7126

Bates J. B., Brooker M. H., Quist A. S.,
Boyd G. E.,
J. Phys. Chem., 1972, 76(11), 1565-71 (Eng)

Raman spectra of molten alkali
metal carbonates

10

7

CA, 1972, 72, 4, 26827 y

50324.7311
Ph, Ch, TC

96200
 $\text{Na}^+ - \text{CO}$

1975
* 4-8397

Kita S., Noda K., Inouye H.
Experimental determination of repulsive
potentials between alkali ions
(Li+, Na+, and K+) and N₂ and CO molecules
"Chem. Phys.", 1975, 7, N 1, 156-160

(англ.)

0329 гиз

304 305

0321

ВИНИТИ

$\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4 (\text{Kp})$

1980

Vi

/ 95: 123260d Laser Raman and infrared spectra of ionic and covalent oxalates. Kartha, V. B.; Venkateswaran, S.; Patel, N. D. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *Indian J. Phys., [Part] B* 1980, 54B(1-2), 36-43 (Eng). The laser Raman and far IR spectra of ionic $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$ and various covalent rare earth oxalates were studied in detail. The spectra of $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$ were interpreted fully in terms of the crystal structure for the 1st time. The out-of-plane bending and torsional modes of the oxalate ion were obsd. and assigned unequivocally. The rare earth oxalate spectra were interpreted by comparison with $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$ spectra. The strength of coordination increases from La to Ho as indicated by the increase in the metal-O stretching vibration frequency and changes in the ligand vibrational frequencies.

C.A. 1980, 95, N14.

$\text{Na}_2\text{CO}_3(\kappa)$

1981

Child William C. Jr.,
Begun George M., et al.

vi

J. Chem. Soc., Faraday
Trans. 2 1981, 77 (12),

2237-●-2247.

(cr. $\text{Li}_2\text{SO}_4(\kappa)$; III)

Оммуек 12619

1921

Na- CO_2
коммекс

(Na CO_2)

геометр.,
и, по-
теку.
кривые

Yoshiooka Y., Jordan K.D.
Chem. Phys. Lett. 1981,
84 (2), 370-374.

● (см Li- CO_2 ; III)

Na CO

1982

номенк.
ноперхрест
 $\tilde{X}^2A'$

C: A. 1982,
97, N 14

97: 115574k Stereochemical effects in the quenching of excited atomic sodium (3^2P) by carbon monoxide: crossed beam experiment and ab initio CI potential energy surfaces. Reiland, Werner; Tittes, Hans Ulrich; Hertel, Ingolf V.; Bonacic-Koutecky, Vlasta; Persico, Maurizio (Inst. Molekulphys., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(4), 1908-20 (Eng). Electronic to vibration-rotational-translational energy transfer in the quenching of $Na(3^2P_{3/2})$ by CO was studied with the state of the art crossed at., mol., and laser beam techniques at 0.16 eV initial kinetic energy, and by ab initio CI calcns. for the potential energy surfaces involved in the process. Double differential quenching cross sections were detd. as a function of scattering angle and energy transferred to the mol. A pronounced structure in the energy transfer spectra as well as a partial backward scattering is due to 2 different mechanisms: a direct one and one which proceeds through complex formation. The observations are explained by the calcd. potential energy surfaces (PES) for the first excited states and the ground state $\tilde{X}^2A'$ which exhibit 2 crossing seams below the 2.1-eV excitation energy.

NaCO

Om-16211 / 1983

7 Д56. Применимость метода наложения конфигураций с псевдопотенциалом для исследования основного и возбужденных состояний молекулярных систем: NaCO, Li₂H, Al₂ и AlH. Applicability of a pseudopotential CI method to the investigation of ground and excited states of molecular systems: NaCO, Li₂H, Al₂ and AlH. Paccioni Gianfranco. «Theor. chim. acta», 1983, 62, № 5, 461—475 (англ.)

расчет
потенц.
кривых,
м.п.

73

Рассчитаны кривые потенц. энергии для основного и некоторых возбужденных состояний NaCO, Li₂H, Al₂ и AlH. Использовался метод псевдопотенциала с учетом взаимодействия конфигураций, получающихся из заданного базиса с помощью одно- и двукратных возбуждений. Проводится сравнение с данными хартри-фоковских расчетов с учетом всех электронов и включением корреляций между валентными электронами. Обсуждается зависимость результатов от выбора базиса.

Л. Н. Иванов

р. 1983, 18, № 7

NaCO

DM-16211

1983

18 Б30. Применимость метода псевдопотенциала в сочетании с КВ для исследования основного и возбужденных состояний молекулярных систем: NaCO, Li₂H, Al₂ и AlH. Applicability of a pseudopotential CI method to the investigation of ground and excited states of molecular systems: NaCO, Li₂H, Al₂ and AlH. Pacchioni G. «Theor. chim. acta», 1983, 62, № 5, 461—475 (англ.)

расчет М.П.,
Li;

Исследована применимость в молек. расчетах приближения псевдопотенциала (ПП) для учета остовных электронов с использованием параметризации, предложенной ранее (Barthelat J. C., Durand P., Serafini A. «Mol. Phys.», 1977, 33, 159), в сочетании с учетом конфигурац. взаимодействия (КВ) по методу нескольких исходных конфигураций (НИК) с включением одно- и двукратно возбужденных конфигураций (ОД КВ), с отбором конфигураций, к-рые вносят вклад в энер-

X. 1983, 19, n 18

гию не меньше данного порога, и с последующей экстраполяцией к полному КВ. В кач-ве пробных задач рассмотрены расчеты потенциальных кривых линейной системы NaCO (I) в основном $^2\Sigma^+$ и возбужденных $^2\Pi$ - и $^2\Sigma^+$ -состояниях, адсорбционного комплекса Li_2H (II) в основном и низшем возбужденном состояниях, двухатомных молекул Al_2 и AlH (III, IV) в основном, а III также и в возбужденных состояниях. Результаты сопоставлены с аналогичными расчетами НИК ОД КВ с учетом всех электронов (ВЭ, с включением только валентного КВ). Проанализировано влияние выбора базиса на результаты расчета. Использовали базисы двух- и трехэкспонентного типа с включением и без поляризац. и диффузных функций. Результаты расчетов в приближении ПП превосходно согласуются с результатами полных расчетов. Показано, что приближение ПП позволяет удовлетворительно описывать величины, к-рые очень чувствительны к выбору базиса и учету корреляционных эффектов. А. Багатурьянц

NaCO

Om. 16211

1983

' 98: 185786a Applicability of a pseudopotential CI method to the investigation of ground and excited states of molecular

systems: sodium carbonyl (NaCO), lithium hydride (Li₂H), diatomic aluminum and aluminum hydride (AlH). Pacchioni, Gianfranco (Inst. Phys. Chem., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1983, 62(5), 461-75 (Eng). The potential energy curves for the ground and first excited states of some mols. involved in very different problems of theor. chem. were detd. employing the pseudopotential (PP) SCF procedure followed by multireference double-excitation CI treatment. The influence of the choice of the basic set is widely discussed. The PP results are overall in excellent agreement with the results obtained from the analogous all electron calcns. when sufficiently flexible basis sets are adopted. Some small discrepancies encountered are due to the use of minimal basis sets.

meopem.
pacem

Li₂H, Al₂, AlH

C.A. 1983, 98, N 22

$\text{Na}^+ \cdots \text{CO}$

DM. 16524

1983

15 B82.

Неэмпирические расчеты равновесной геометрии и тензоров ядерного магнитного экранирования ядер ^{13}C , ^{17}O , ^{23}Na и ^7Li для систем Na^+/CO и Li^+/CO . Ab initio calculation of the equilibrium geometry and the ^{13}C , ^{17}O , ^{23}Na and ^7Li NMR shielding tensors of the systems Na^+/CO and Li^+/CO . Weller Th., Meiler W., Pfeifer H., Lischka H., Holler R. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 95, № 6, 599—603 (англ.)

расчет геометрии,
структуры

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП проведена оптимизация линейной геометрии систем Na^+/CO и Li^+/CO . Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций 8s4p1d/5s3p1d для атомов C и O, 10s6p/7s5p для Na и 9s/5s для Li. Для обеих систем найдены две стабильные структуры $\text{CO} \cdots \text{M}^+$ (А) и $\text{M}^+ \cdots \text{CO}$ (Б). Длина связи C—O увеличена и уменьшена (по сравнению с изолированной молекулой CO) на $\sim 0,01$ Å в структурах А и Б соотв. Расстояние O— M^+ в структурах А на $\sim 0,3$ Å больше расстояния $\text{M}^+=\text{C}$ в структурах Б, причем эти расстояния для $\text{M}=\text{Na}$ больше, чем для $\text{M}=\text{Li}$. Для обеих систем структура А немного стабильнее структуры Б. При найденных равно-

$\text{Li}^+ \cdots \text{CO}$

X. 1983, 19, N 15

весных геометриях проведены расчеты тензоров ядерного магнитного экранирования ^{13}C , ^{17}O , ^{23}Na и ^7Li в рамках связанной самосогласованной теории возмущений. При этом использовался большой базис $10s6p2d$ для C, O и Na и $9s2p$ для Li. Изменения экранирования ядер ^{13}C и ^{17}O при комплексообразовании затрагивают в основном компоненту, перпендикулярную к связи CO. Для ядер ^{13}C эта компонента уменьшается (сдвиг в слабое поле) на 20—25 млн. д. в структурах А и увеличивается на 35—40 млн. д. в структурах Б. Соотв.щие изменения для ядер ^{17}O имеют обратный знак: увеличение на 75—90 млн. д. в структурах А и уменьшение на 10—15 млн. д. в структурах Б. Вычисленные изменения экранирования малы по сравнению с изученной ранее системой Al^{3+}/CO («Chem. Phys.», 1982, 72, 155). Проведено сопоставление с эксперим. данными ЯМР для CO, адсорбированных на цеолитах, содержащих катионы щел. металлов. Обсуждена корреляция между изменениями ядерного магнитного экранирования и перераспределением электронной плотности при приближении катиона.

М. Гофман

Na⁺...CO

[On. 16524] 1983

/ 98: 204737d Ab initio calculation of the equilibrium geometry and the carbon-13, oxygen-17, sodium-23, and lithium-7 NMR shielding tensors of the sodium(+) ion/carbon monoxide and lithium(+) ion/carbon monoxide systems. Weller, T.; Meiler, W.; Pfeifer, H.; Lischka, H.; Hoeller, R. (Sekt. Phys., Karl-Marx-Univ. Leipzig, DDR-7010 Leipzig, Ger. Dem. Rep.). *Chem. Phys. Lett.* 1983, 95(6), 599-603 (Eng). In ab-initio SCF calcns., 2 min. in the stabilization energies were found for the Na⁺-CO and Li⁺-CO complexes. The min. corresponding to CO...Na⁺ is slightly deeper than in Na⁺...CO. The min. corresponding to CO...Li⁺ is deeper than in Li⁺...CO. The ¹³C, ¹⁷O, ²³Na, and ⁷Li NMR shielding tensors were computed with the coupled-Hatree-Fock method with large Gaussian basis sets.

meopem.
pacem
cmprks.

(7) ☒

C.A. 1983, 98, N24

$\text{Na}^+ - \text{CD}$.

Dom: 19854

1984

Ikuta S.,

структур,
энергия
связи,
ab initio
расчет.

Chem. Phys. Lett, -
1984, 109, N 6, 550 -
● - 553.

NaCO_2

1984

Jordan Kenneth D.

сирект.,
Di, теор.
распредел.

J. Phys. Chem. 1984,
88 (12), 2459-65.

(сир. LiCO_2 ; II)

Na_2CO_3

1984

Jordan Kenneth D.

свѣтл., γ . Phys. Chem. 1984,
 ν , теор. 88 (12), 2459-65.
расчѣт.

(свѣт. LiCO_2 ; III)

$\text{Na}^+ - \text{CO}$

1984

Ikuta Shifera.

растр E,
релаксация,
спектр.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 109, n 6, 550 -
-553.

(ср. $\text{Li} - \text{CO}$; III)

Na-CO₂

1984

Jordan Kenneth D.

расчёт
номер,
структ.

J. Phys. Chem., 1984,
88, N 12, 2459-2465.



(see Li-CO₂; III)

NaCO_2

от. 19089 1984

17 Б1221. Активация диоксида углерода щелочными металлами. 2. Инфракрасные спектры $\text{M}+\text{CO}_2^-$ и $\text{M}_2^{2+}+\text{CO}_2^{2-}$ в аргоновых и азотных матрицах. Carbon dioxide activation by alkali metals. 2. Infrared spectra of $\text{M}+\text{CO}_2^-$ and $\text{M}_2^{2+}+\text{CO}_2^{2-}$ in argon and nitrogen matrices. Kafafi Zaky H., Hauge Robert H., Billups W. Edward, Margrave John L. «Inorg. Chem.», 1984, 23, № 2, 177—183 (англ.)

Измерены ИК-спектры продуктов реакции атомов Na, K и Cs с молекулами CO_2 в матрицах из аргона и азота. Пары металлов сосаждали с CO_2 , смешанным с избытком инертного газа, на медную подложку при 15 К. Для отнесения полос в спектрах использовалось изотопозамещение по ^{13}C и ^{18}O и фотолиз в матрице. Показано, что во всех р-циях образуются молекулы типа $\text{M}+\text{CO}_2^-$, для к-рых установлено симметрия C_{2v} с эквивалентными атомами кислорода. Соотв. частоты антисим. вал. кол. равны (см^{-2}): NaCO_2 1601,6 (Ar), KCO_2 1609,9 (N_2), CsCO_2 1595,3 (Ar). Для CsCO_2 получено также значение $\nu_1(\text{A}_1)$, равное 1352,8 см^{-1} (Ar).

13, 1

⊗ (44)

И, геометр.,
структ

X. 1984, 19, N17

В спектрах продуктов реакции $K, Cs + CO_2$ обнаружены также полосы молекул типа $M_2^{2+}CO_2^{2-}$, к-рые существуют в виде двух изомеров: симметрии C_{2v} с эквивалентными и C_s с неэквивалентными атомами кислорода. Предположено, что молекулы M_2CO_2 образуются в результате втор. р-ции между димером металла и CO_2 . Определены след. значения частот колебаний ν_5 , ν_1 и ν_2 для M_2CO_2 симметрии C_{2v} в матрице из N_2 : Cs_2CO_2 1328,7, 1186,7 и 745,2, K_2CO_2 1342,3, 1184,0 и 738,8 cm^{-1} , и частот колебаний ν_1 и ν_2 для симметрии C_s : Cs_2CO_2 1320,0 и 1050,0, K_2CO_2 1328,6 и 1052,1 cm^{-1} . Отмечено, что при ИК-фотолизе излучением источника Нернста в спектрофотометре C_{2v} -форма переходит в C_s . Р-ция $Na + CO_2$ идет с небольшим выходом в Аг-матрице, но активизируется посредством УФ-фотолиза Hg-лампой (100 вт) во время или после конденсации. В приближении трехатомной молекулы рассчитаны валентные углы для CO_2^- в KCO_2 ($131,1^\circ$) и $CsCO_2$ ($126,9^\circ$) и для CO_2^{2-} в K_2CO_2 ($125,9^\circ$) и Cs_2CO_2 ($123,1^\circ$). Получены также частоты колебаний молекул K_nCO_2 , K_2CO_3 , $KCsCO_3$ и Cs_2CO_3 в матрице из N_2 . Предложена схема последовательности р-ций для исследуемых систем в матрицах. С. Б. Осин

NaCl₂

[CM. 22346]

1985

Bentley J., Carmichael J.

meop.
parēm

J. Phys. Chem., 1985,
89, N 19, 4040 - 4042.

$\text{Na}^+ \cdot \text{CO}$

(ом. 20986)

1985

Чаркин О. П., Мусеев

геометр.

Д. Р., Клеменко Н. М.

и энергетик.

параметры
различных

Координат. ж. м. н. н.,

конфигурац.

1985, 11, N 4, 445-456.

Na^+, CO (Dm. 20 986) 1985

Charkin O.P., Musaev

uzoqrepuzer, D.G., et al.

meop. Koord. Khim. 1985,

paerem. 11 (4), 445-56.

(Ces. LiCN; III)

Kamenec

[DM. 24647]

1985

Na CO

Fantucci, P., Bonočić-
Koutecký V., et al.,

neopen.
paenem

J. Comput. Chem., 1985,
6, n. 5, 462-468.

Na^+-CD

(om. 21399)

1985

Ikuta S.,

Энергия
связи,
ab initio
расчет.

Chem. Phys., 1985, 95,
N 2, 235-242.

Na CO₂
Na₂(CO₂)

и.п.

Х. 1987, 19, № 11

1986

№ 11 Б1221. Колебательные спектры и структура молекул $M(\text{CO}_2)$ и $M_2(\text{CO}_2)$. Vibrational spectra and structure of $M(\text{CO}_2)$ and $M_2(\text{CO}_2)$ molecules. Benicivenni L., D'Alessio L., Ramondo F., Pelino M. «Inorg. chim. acta», 1986, 121, № 2, 161—166 (англ.)

Измерены ИК-спектры и спектры КР продуктов конденсации паров щел. металла ($M = \text{Na}, \text{K}, \text{Cs}$) с CO_2 , изолированных в матрицах Ag и N_2 на медной подложке при $t = 12 \text{ K}$. Спектральная картина зависит от соотношения компонентов матрицы и от t -ры. При отношении $M:\text{CO}_2 = 1:1$ в спектре обнаружены полосы ионного комплекса $M(\text{CO}_2)$ с симметрией C_{2v} , имеющего плоскую циклич. конфигурацию. При отношении $M:\text{CO}_2 = 2:1$ образуются ионные комплексы $M_2(\text{CO}_2)$, имеющие W-образную структуру с симметрией C_{2v} . При ФТ матрицы комплекс $M_2(\text{CO}_2)$ изомеризуется в комплексе с неэквивалентными связями $\text{C}-\text{O}$ и с симметрией C_s . Геометрич. параметры комплексов определены с помощью расчета норм. кол., учитывая $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ и $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ — изотопич. сдвиги частот. При отжиге матрицы в спектрах появляются полосы карбонатов.

И. А. Гарбузова

1) KCO_2 , $K_2(CO_2)$

2) $LiCO_2$, $Li_2(CO_2)$



Na(CO₂)

Na₂(CO₂)

1986

106: 75241v Vibrational spectra and structure of M(CO₂) and M₂(CO₂) molecules. Bencivenni, L.; D'Alessio, L.; Ramondo, F.; Pelino, M. (Dip. Chim., Univ. Roma, I-00185 Rome, Italy). *Inorg. Chim. Acta* 1986, 121(2), 161-6 (Eng). At. Na, K, and Cs were codeposited with CO₂ in excess of matrix gas at 12 K. The IR spectra revealed the presence of ionic aggregates corresponding to M(CO₂) and M₂(CO₂) (M = Na, K, Cs). Both mol. species have C_{2v} symmetry; M(CO₂) species have a planar ring structure, while M₂(CO₂) have a W-shape structure M₂(CO₂) mols. with C_s symmetry were identified. The geometrical parameters of all the mols. were detd. by ¹²C/¹³C and ¹⁶O/¹⁸O isotopic shifts. Raman spectra were recorded, and the results are reported. The effect of photolysis on the structure of these mols. was examd. Photolysis promotes the formation of Na(CO₂) and transforms the M₂(CO₂) mols. with C_{2v} symmetry into C_s symmetry isomers.

лк кремн

(+2) $\boxtimes$

c. A. 1987, 106, ~ 10

1) K(CO₂)

K₂(CO₂)

2) Cs(CO₂)

Cs₂(CO₂)

Na^+OC
 Na^+CO

[ow. 24/95]

1986.

Чаркис О. П.,
Злобина Т. С.

расчет
Европ. и
барьер
измер.

Координат. осн. осн.,
1986, 12, N 8, 1011-1037.

$\text{Na}^+ - \text{CO}$
Коллукс

1986

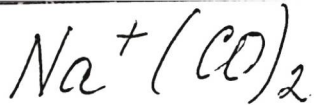
Ikuta Shigeru.

J. Mol. Struct. Theochem,

Через
связи

1986, 137, N 3-4, 329-
- 340.

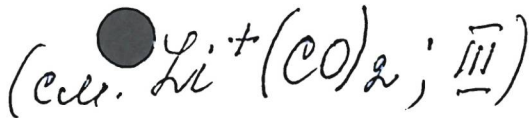
(сер. Коллуксы, $\text{Li}^+ - \text{CO}$; III)



1986

Ikuta Shigeru.

sp. n. *J. Mol. Struct. Theochem*,
1986, 137, N 3-4, 329-
- 340.



$\text{Na}^+ \dots \text{CO}_2$

1987

8 Д154. Поверхности потенциальной энергии для $\text{X}^+ \dots \text{CO}_2$ ($\text{X}=\text{Na}, \text{K}$) систем. Potential energy surfaces for the $\text{X}^+ \dots \text{CO}_2$ ($\text{X}=\text{Na}, \text{K}$) systems. Mota Fernando, Novoa Juan J., Perez Juan J. «J. Mol. Struct. Theor. chem.», 1987, 149, № 3—4, 193—200 (англ.)

Базисные наборы молекулярных орбиталей, известные в литературе под названиями MINI—1 и MIDI—1 (Sakai Y., Tatewaki H., Huzinaga S. «J. Comput. Chem.», 1982, 3, 6) использованы в расчетах поверхностей потенц. энергии для систем $\text{Na}^+ \dots \text{CO}_2$ и $\text{K}^+ \dots \text{CO}_2$. Приведены таблицы полных энергий и энергий взаимодействия для некоторых избранных состояний; при этом соответствующие вычисления проводились как в хартрифовском приближении, так и с учетом эффектов электронных корреляций во втором порядке теории возмущений. Дан сравнительный анализ достоинств и недостатков для каждого из используемых базисных наборов.

В. Г. Пальчиков

М.П.

ф. 1987, 18, № 8

$\text{K}^+ \dots \text{CO}_2$

$\text{Na}^+ \dots \text{CO}_2$

1987

У 12 Б1073. Поверхности потенциальной энергии для систем $\text{X}^+ \dots \text{CO}_2$ ($\text{X}=\text{Na}, \text{K}$). Potential energy surfaces for the $\text{X}^+ \dots \text{CO}_2$ ($\text{X}=\text{Na}, \text{K}$) systems. Mota Ferrnando, Novoa Juan J., Pérez Juan J. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 149, 193—200 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП с учетом энергии корреляции по теории возмущений Меллера — Плессета 2-го порядка при фиксированной геометрии CO_2 проведены расчеты комплексов $\text{X}^+ \dots \text{CO}_2$ ($\text{X}=\text{Na}, \text{K}$). Использованы базисы MJNJ-1 и MJDJ-1*. Учтена суперпозиц. ошибка базисного набора. Варьировали расстояние $R(\text{X} \dots \text{C})$ и угол θ между направлениями $\text{X} \dots \text{C}$ и $\text{O}-\text{C}-\text{O}$. В базисе MJNJ-1 оба потенциальных сечения вдоль R имеют абс. минимумы при $\theta=0$ ($R_m = 6.24a_0$ для Na^+ и $7.153a_0$ для K^+). Энергии комплексообразования в этих точках равны -14.3 и -8.5 ккал/моль для Na^+ и K^+ соответственно. Э. Д. Г.

Х. 1987, 19, №12

$\text{K}^+ \dots \text{CO}_2$

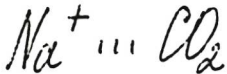
Nat. CO_2 [Om. 26059]

1987

номер
номер.
номер

Mota F., Novoa J. J.,
Pérez J. J.,

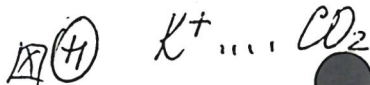
J. Mol. Struct.
(Theochem), 1987, 149,
193— 200.



1987

106:182833m Potential energy surfaces for the $\text{X}^+ \cdots \text{carbon dioxide}$ ($\text{X} = \text{sodium, potassium}$) systems. Mota, Fernando; Novoa, Juan J.; Perez, Juan J. (Fac. Quim., Univ. Barcelona, Barcelona, Spain 08028). *THEOCHEM*. 1987, 34(3-4), 193-200 (Eng). There was calcd. the potential energy surfaces for the $\text{Na}^+ \cdots \text{CO}_2$ and $\text{K}^+ \cdots \text{CO}_2$ systems, obtained at the Hartree-Fock level, using the recently proposed MINI-1 basis set. The interaction energy of both systems was computed at the same level and also, with the inclusion of the electronic correlation along with 2nd-order Moeller-Plesset, using the MIDI-1* and further extended basis sets. These results support the accuracy of those obtained with the MINI and MIDI-1* basis sets when the counterpoise correction is carried out.

no metus.
no peritocms,
no op. parum



C.A. 1987, 106, N22

NaCO

NaCaD₂

Na₂CaD₂

М.П.

Х. 1989, №1

От 29998 1988

1 Б1347. Взаимодействие Na и K с монооксидом углерода в твердом аргоне. Исследование ИК-спектров и неэмпирические расчеты. Reactivity of Na and K with carbon monoxide in solid argon: an infrared and ab initio study. Ayed O., Manceron L., Silvi B. // J. Phys. Chem.— 1988.— 92, № 1,— С. 37—45.— Англ.

Измерены ИК-спектры продуктов, образующихся при соконденсации атомов Na и K с молекулами CO в матрицах из Ar при 13—14 К. В отличие от системы Li/CO, в спектрах разб. матриц отсутствуют полосы продуктов, аналогичных монокарбонилу Li. При облучении матриц в видимом и УФ-диапазоне в ИК-спектрах зарегистрирован ряд новых полос, к-рые на основании анализа изотопных сдвигов по ¹³C и ¹⁸O, а также фотолитич. чувствительности полос связываются с соединениями типа MC₂O₂, M₂C₂O₂, M₂C₃O₃ и, возможно, M₃C₄O₄. Методами ССП и КВ выполнены неэмпирич. расчеты равновесной геометр. структуры, распре-

деления электронной плотности и колебат. спектров молекул NaCO , NaC_2O_2 и $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_2$. Согласно расчету для NaC_2O_2 , спектр к-рого лучше всего описывается в предположении дисимм. группы OSSO- , связанной с металлом связью M-C , энергия низшего уровня лежит на 29 ккал выше диссоциац. предела $\text{Na}(^2\text{S}_{1/2}) + 2\text{CO}(X^1\Sigma^+)$. Для $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_2$ предложено ионное строение $\text{Na}^+-\text{O}-\text{C}=\text{C}-\text{O}-\text{Na}^+$. Предсказанный колебат. спектр хорошо согласуется с наблюдаемым. С. Б. Осин

NaCO^+

NaOC^+

Dixon David A.,
Bole James L., et al.

1988

суперкрит. J. Phys. Chem. 1988,
92 (5), 1378-82.

(Ccr. ● LiH_2^+ ; III)

$\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$ (Дм. 31243)

1989

комбам.
спектр

Кулаевский Н.А., Шаро-
лов О.У.,

М. Неотам. химии, 1989,
34, N 3, 567-571.

Комбинированные
оксалаты натрия

спектры
и массы.

NaCO_2 Ramondo F., Sanna N., ¹⁹⁹¹
et al.

смык-
тура,
расчет Chem. Phys. Lett. 1991.
180, N4. C. 369-380.

(свр. ● LiSO_3 ; III)



Ramondo F., 1992
Bencivenni L., et al.

геометр.,
структ.,
частоты
колебаний, (см.  AsO_3^- ; III)

J. Mol. Struct.
Theochem. 1992.
253. с. 121-147.

NaCO_2

1992

Ramondo F.,
Sanna N. et al.

meop.
paeerem

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

(ceep, SO_3^- ; iii)



1994

Köppe R., Kasai P. H.

J. Phys. Chem. 1994. 98,
N 44. C. 11331 - 11336.

u-n.

(see.  $\text{Li}^+ \text{CO}_2^-$; III)



(OM-38136)

1995

структура,
микрон.
состояние,
ab initio
расчет

Tachikawa H., Takatori Y.,
et al.,

J. Mol. Spect. (Theorchem)
1995, 342, 1-7.

Formation
mechanisms



and isomeriza-
tion of $\text{M}^+ \text{CO}_2^-$

($M = \text{Li}, \text{Na}$) ion-pair complexes.
An ab initio and RRKM study

NaCO_3^-

1998

Charin D.P. et al.,

ab initio

расчет,

ρ_i , см. АДЧ;

стабильн.

структур

Zh. Neorg. Khim. 1998,

43 (4), 619-630

(см. LiNO₃; III)

Na_2CO_3

1998

Charkin D.O. et al;

Zh. Neorg. Khim.
1998, 43(10), 1694—
1709

по метн.
период.
структур.
парам.
Di

(all- Li^+CO_3 ; III)

$\text{Na}^+(\text{CO})_x$

DM. 39412

1998

$x=1,2$

Derek Walter, M.R. Sievers
et al.,

So Internat. J. Mass Spectrom.
and Ion Processes 1998,
175, 93- 106.

NaClO_2

Miele, Franca, et al. 1998

мисрем-
пацен
сир-пк
и
смабуаи.

Chem. Phys. Lett.
1998, 295 (5, 6), 409-
415

($\text{Cu} \cdot \text{ZnO}$, III)



1998

$$x=1, 2$$

Walter, Derek, et al.,

Int. J. Mass Spectrom. Ion
Processes 1998, 175 (1-2), 93-
106.

(Do)



$\text{Na}^+ \cdot \text{CO}_2$

[Dm- 39985]

1999

cmp-pa,

cmalunh.

Pavel Soldán et al.,

Chem. Phys. Lett., 1999,

313 , 379-384.