

NaO

NaO Bawn, Evans 1937

Trans for Doc, 1937, 33, 1571

D. $D_0(\text{NaO}) = 72000 \text{ km/mole}$

NaO
1663

Brewer L., Margrave J.L. ¹⁹⁵⁵

2
Дукаров

J. Phys. Chem., 1955,
59, p. 421.

ГА-309

● D (NaO)
2

Пламя,
NaO
Bo

1962
7 Б439. Реакции натрия с активным кислородом.
Sadowski C. M. Reactions of sodium with active
oxygen. «Nature» (Engl.), 1962, 194, № 4833, 1076
(англ.)

Методом разреженных пламен (Hartel H. V., Polanyi
M. «Z. phys. Chem.», 1930, B11, 97) исследована р-ция
паров Na, вводимых в потоке Ar при давл. 0,1 мм
рт. ст., и кислорода, пропущенного через зону элект-
трич. разряда, при давл. 0,3 мм рт. ст. Т-ра в зоне
р-ции 300°. Для произведения k_p (k — константа ско-
рости р-ции расщепления Na, p — парц. давление реа-
гирующей компоненты активного кислорода (AK)) по-
лучено значение $3,0 \cdot 10^3$ сек⁻¹. Показано, что р-цией
атомов Na не является тримолекулярная р-ция $\text{Na} +$
 $+ \text{AK} + \text{M} \rightarrow \text{продукты} + \text{M}$. Поэтому предполагается,
что атомы Na расщепляются по бимолекулярной р-ции
с участием возбужденных молекул кислорода: $\text{Na} +$
 $+ \text{O}_2^* \rightarrow \text{NaO} + \text{O}$ (1), где O_2^* должна находиться на
9-м колебательном уровне для основного электронного
состояния, 5-м для $^1\Delta_g$ или 2-м для $^1\Sigma_g^+$, чтобы р-ция
(1) была термонеutralной. Если принять $k_1 = 10^{12} -$
 10^{14} см³/моль сек, то p может быть равным $1 \cdot 10^{-1} -$
 $1 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст.

В. Скурат

X-1963-7

Секр
ref

NaO₂ (Do.)

X 3936
1966

McEwan M.J., Phillips L.F.,
Trans Faraday Soc., 1966, 62, N7,
1717-20

Dissociation energy of NaO₂

ccr p. 5

PX 1967
145742

ll (P)

NaO
343

Тусаров А.В.

1968

Д
Тусаров

Автореферат диссертации
на соискание степени
канд. хим. наук. Москва,
1968.

ГА-333

Д(NaO)
T

Composme, vi (NaO₂, NaO₂Na) 1969

Andrews L. 10 X 4595

J. Phys. Chem, 1969, 73, 111, 3922-3928 (awm)

Infrared spectra and bonding in the
sodium superoxide and sodium
peroxide molecules.

Puchan, 1970, 115369.

W



NaO

1969

298, 29
Spring of
Kouet,
no other

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.

"Adv. in High Temp. Chem.

1969, 2, I-83.

reviewed 1969

106. 1969
Изотопы
чистых металлов (структура)
~~Окислы чистых металлов~~
Рамбиди Н.Г. А-1358
Ж. Журна. Струк. Химии, 1969, 10(1), 131

Молекулярная структура чистых
металлов чистых-земельных металлов
и окислов чистых металлов.
10 10 9 СД 100, 70, 522, 99777

NaO

D. L. Hildenbrand, E. Murod

1970

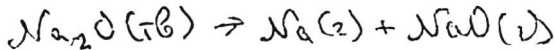
NaO⁺

J. Ch. Ph. 1970, 53, 3403

Na₂O,

Na₂O⁺

$$D_0 = 60,3 \pm 4 \quad \Rightarrow \quad \text{alg}(\text{NaO}, 2, 298) = 24,3 \pm 4$$



$$\text{IP}(\text{NaO}) = 6,5 \pm 0,7$$

$$D_0(\text{NaO}^+) = 1,25 \pm 0,7$$



NaO
2616

Herm R.R., 1970
Herschbach D.P.

Копиер
м.п.

J. Chem. Phys., 1970, 52,
p. 5783

1

NaO



м.п.

$\text{NaO}_{2\text{as}}$ (ΔH°_{298} , D_0°)

$\text{N}_2\text{O}_{2\text{as}}$ (ΔH°_{298} , D_0°)

NaO^+ , Na_2O^+ (A.P., J)

1970
 $\bar{\Delta} 5039$

Hildenbrand D.L., Murad E.,
J. Chem. Phys., 1970, 53, No 9, 3403-8 (amu.)

Dissociation energy of sodium oxide
(g) and the heat of atomization
of sodium monoxide (g).

10, 11 (P)

CA, 1970, 73, N24, 124236h

№ 0 Оммуна 74061 1971

(до) Тусаров А. В., Горохов А. Н.

Менюгиз. висок. меню.

1971, ~~2~~ (3), 505-511.

NaO.
309

Торхов Л. Н.

1972

2
Бусаров

Автореферат диссертации
на соискание степе-
ни докт. хим. наук.
Москва, 1972.

ГА-334

Д (NaO)
5

SO_2 , опущен в раствор мет. (в, см. р. р. м.) 1972
Gaughan R. A. R. A-2042
Diss. Abstr. Int., 1972, B32, N12,
(Pt. 1), 6948 (англ.)

Infrared spectra and geometry
of matrix isolated sulfur
dioxide and several alkali
metal oxides. 7

10
© (coll. опущен) CH, 1972, 77, N20, 132820S

Bsp 7096-X

1982

NaO

NaO⁺NaO⁻

1. n.

no. eq.

y.

D₂U. Mex.
papersNaO₂

144931w Thermochemical and theoretical investigations of the sodium-oxygen system. II. Properties of NaO and its ions from Hartree-Fock molecular orbital studies. O'Hare, P. A. G.; Wahl, Arnold C. (Chem. Eng. Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(9), 4516-25 (Eng). Accurate Hartree-Fock wavefunctions, computed by the method of Roothaan, are reported for the $^2\Pi$ and $^3\Sigma$ states of NaO, for the $^3\Sigma$ states of NaO⁺ and for the $^3\Pi$, $^3\Sigma$, and $^1\Sigma$ states of NaO⁻. Spectroscopic consts. and dipole and quadrupole moments were also calcd. for each of the mols. and ions. Several properties of the Na-O species were deduced. These properties include the vertical and adiabatic ionization potentials (7.7 and 7.4 eV), electron affinity (1.1 eV), dissocn. enthalpy (2.7 eV), several thermodynamic functions for NaO, and the $^3\Pi \rightarrow ^1\Sigma$ (1.7 eV) and $^3\Pi \rightarrow ^3\Sigma$ (0.2 eV) excitation energies for the NaO⁻ system. Thermodynamic data for selected reactions involving NaO and NaO⁺ are given, together with brief discussion of the bond enthalpies in NaO₂ and NaO₂⁺.

; NaO₂⁺ (ΔH)

C. A. 1982.76.24

NaO

(м.п. Яе)

Т.г.р.

ВФ 7096-

X

Ф.1972.10

10 Д111. Термохимические и теоретические исследования системы натрия — кислород. II. Свойства NaO и его ионов, рассчитанные методом молекулярных орбиталей в хартри-фоковском приближении. O'Hare P. A. G. Wahl Arnold C. Thermochemical and theoretical investigations of the sodium-oxygen system. II. Properties of NaO and its ions from Hartree-Fock molecular orbital studies. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 9, 4516—4525 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в оптимизированном базисе АО слэтеровского типа, обеспечивающим почти хартри-фоковскую точность, рассчитаны $^2\Pi$ - и $^2\Sigma$ -состояния NaO, $^3\Sigma$ -состояние NaO^+ , $^3\Pi$ -, $^3\Sigma$ - и $^1\Sigma$ -состояния NaO^- . Рассчитаны соответствующие спектроскопич. константы, а также дипольные и квадрупольные моменты. Кроме того, рассчитаны следующие свойства системы Na—O: вертикальный и адиабатич. потенциалы ионизации (7,7 и 7,4 эв), сродство к электрону (11,1 эв), энтальпия диссоциации (2,7 эв), некоторые термодинамич. ф-ции NaO, энергии возбуждения аниона NaO^- $^3\Pi-^1\Sigma$ (11,7 эв), $^3\Pi-^3\Sigma$ (0,2 эв). Приведены также рассчитанные термодинамич. величины для некоторых реакций, включающих NaO и NaO^+ , и краткое обсуждение энтальпий образования NaO_2 и NaO_2^+ . Ч. I. O'Hare P. A. G., «J. Chem. Phys.», 1972, 57, 4513.

1972

И

(+1)

Т.г.р.

~~NaO_2 , KO_2 (vi, reou. cуpуcm.)~~ Σ 7312 ¹⁹⁷²
 ~~Na , K~~
Smardzewski R.R., Andrews L.,
J. Chem. Phys., 1972, 57, N3, 1327-1333
3 (arw).

Raman spectra of the products
of Na and K atom argon mat-
rix reactions with O_2 molecu-
les.



Ржсху, 1973, 25211

10

(9)

NaO
4803

Yoshimine M.

1972

М. П.
Копия

J. Chem. Phys., 1972, ~~57~~,
p. 1108.

5

NaO



М. П.

NaSO_2 ; NaO_2 (реал. структура, Vi) 1973

Adrian F. J., Cochran E. L.,

Bowers V. A., 17940

J. Chem. Phys., 1973, 59, N1, 56-
-60 (англ.)

ESR spectra and structures
of NaSO_2 and NaO_2 .

ЕСТЬ ОРИГИН.

Рже Химе, 1973, 245351

10

(9)

Li_2O ; ~~Li_2O~~ ; Li_2O_2 ; Li_2O ; $\text{Li}_2^{+}\text{O}_3^{-}$

$\text{Li}^{+}\text{O}_3^{-}$; NaO_2 ; ~~NaO_2~~ ; $\text{Na}^{+}\text{O}_3^{-}$

~~NaO_2~~ ; KO_2 ; $\text{K}^{+}\text{O}_3^{-}$; ~~KO_2~~

$\text{Rb}^{+}\text{O}_3^{-}$; $\text{Rb}^{+}\text{O}_3^{-}$; ~~RbO_2~~ ; $\text{Cs}^{+}\text{O}_3^{-}$

~~CsO_2~~ ; CsO ; Cs_2O ; $\text{Cs}^{+}\text{O}_3^{-}$; ~~CsO_2~~

Spiker R. C., Jr, Andrews L.

J. Chem. Phys., 1973, 59, N4, 1851-

- 1869 (anu.)

Matrix reactions of alkali metal atoms

with ozone: infra red spectra of the

alkali metal ozonide molecules.

PreKum, 1974, 55242

Vi

X 8019

1973

10

10

10

NaO₂, KO₂, RbO₂, CsO₂ $\bar{x}$ 8557 ¹⁹⁷⁴ 1974

(номер. M⁺O₂⁻ эмпыкм.)

Lindsay D.M., Herschbach D.R.,
Kwiram R.L.,

Chem. Phys. Lett., 1974, 25(2),
175-81.

ESR of matrix isolated alkali
(metal) superoxides.

HO, Mr 8

C.A. 1974.80.N26.150763s.

NaO⁺, KO⁺, NaC⁺(D₀) 8833 1974

Roel P.K., Entemann E.R., Wendell K.L.,
J. Chem. Phys., 1974, 61, NS, 2050-2058 (aun),
Merging beams studies of Na, K and
Mg collisions with atmospheric ions.

PHXum, 1975
651121

HO (9)

6

paper un, vi, ^{BX-507} 50 (LiO, NaO, KO, RbO) 1975
Clugston M. J.; Gordon R. G.,
J. Chem. Phys, 1974, 66, vi, 244-247
(a.u.)

Electron-gas model for open
shell-closed shell interactions. II.
Application to the alkali monoxides

Phys Rev, 1974, 90, 158

in (92)

Li-O, Na-O, K-O, Rb-O, Cs-O 1975
(ЗСР череп в кампусе). X-9290

Lindsay D. M.,
Diss. Abstr. Int. B 1975, 36 (2),
743-4.

Electron spin resonance
studies of matrix isolated alkali
oxide molecules
C. A. 1975. 83 v20. 170529k. 10 (4)

44-8997

1975

NaO

KO

RbO

расчет
основн.
состоян.

10 Д156. Основные электронные состояния окисей щелочных металлов. So S. P., Richards W. G. The electronic ground states of alkali monoxides. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 227—230 (англ.)

Выполнены хартри-фоковские расчеты основного и первого состояний молекул NaO, KO и RbO. Использовался удвоенный миним. базис слэтеровских ф-ций с добавлением поляризационных p -, d - и f -ф-ций. Волн. ф-ция, энергия и спектроскопич. постоянные каждой молекулы рассчитывались для ... $\sigma_m \pi^3 {}^2\Pi$ - и ... $\sigma_m \pi^4 {}^2\Sigma^+$ -состояний при пяти расстояниях вблизи равновесия. Результаты расчетов табулированы. Проведен детальный анализ заселенностей и орбитальных энергий. Найдено, что основное состояние NaO— ${}^2\Pi$, тогда как KO и RbO имеют основное состояние ${}^2\Sigma^+$. В случаях NaO и RbO это подтверждено ранее экспериментально. А. Резников

X
9083-
B9 9083-19

ф. 1975 N 10

(42)

☒

*4-8997

1975

NaO

KO

RbO

Kb. mex.
pacem

BOP 9083-X

15990k Electronic ground states of alkali monoxides. So, S. P.; Richards, W. G. (Chung Chi Coll., Chin. Univ. Hong Kong, Hong Kong; Hong Kong). *Chem. Phys. Lett.* 1975. 32(2), 227-30 (1975). Ab initio Hartree-Fock calcs. were performed on the ground and on the 1st excited states of NaO, KO and RbO. The former and the latter 2 mols., though valence-isoelectronic, have their 1st 2 low-lying electronic states in reversed order. Quant. evidence for the different bonding schemes used to explain this is given.

C.A. 1975. 83 112

(72) X

№ 4 - 8997

1975

NaO

KO

RbO

19 Б35. Основные электронные состояния окислов щелочных металлов. So S. P., Richards W. G. The electronic ground states of alkali monoxides. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 227—230 (англ.)

Проведен неэмпирич. расчет $^2\Pi$ - и $^2\Sigma$ -состояний окислов щел. металлов NaO, KO, RbO. Использован двухэкспоненциальный базис функций слейтеровского типа, включающий s, p, d, f-АО. Основным состоянием NaO, KO является $^2\Pi$, а RbO— $^2\Sigma$. Распределение заряда в этих молекулах может быть представлено формулой $M^{+0,7}O^{-0,7}$. А. Зембеков



(+2)

18

201975 N 19

60407.7205
Ch, Ph, TC

40892
Над (кв. лист)
рис. 1

1976

4210

Janev R.K.

On the long-range configuration
interaction between ionic and covalent
states.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 5, 1891-1894
(англ.)

0595 пик

571 574 5 2 7

ВИНИТИ

70401.4836

Ch, Ph, MGU, TC

40892

NaO

1977

* 4-17770

K p.N 70401.4835

Clugston Michael J., Gordon Roy G.
Electron-gas model for open shell-closed
shell interactions. II. Application to the
alkali monoxides.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 1, 244-247

(АНГЛ.)

(см. LiO; III)

8351

803 809

ВИНИТИ

$\text{Li-NO}_3, \text{Na-NO}_3, \text{K-NO}_3,$
 $\text{Rb-NO}_3, \text{Cs-NO}_3,$
 $\text{Li}^+-\text{O}, \text{Na}^+-\text{O}, \text{K}^+-\text{O},$
 $\text{Rb}^+-\text{O}, \text{Cs}^+-\text{O}$

$\left. \begin{array}{l} \text{LiO}, \text{NaO}, \text{KO}, \\ \text{RbO}, \text{CsO} \end{array} \right\} (\text{до});$

$\text{LiO}^+, \text{NaO}^+, \text{KO}^+, \text{RbO}^+, \text{CsO}^+ \quad (\text{Атф,о})$

$\left. \begin{array}{l} \text{LiNO}_3, \text{NaNO}_3, \text{KNO}_3, \text{RbNO}_3, \\ \text{CsNO}_3^+ \end{array} \right\}$

ВХ-1625 1485

Багратьян Н.В., Кикитин О.Т.
 «Вестн. МГУ., химия», 1978, №3, 253-254.
 Ионизация моносферных молекул нит-
 ратов ионов металлов оксид-
 тронным ударом.

РНЕХИИ, 1978, 24 5 121 Ю, М (9)

NaD

1982

Абацкин Ю. Г.,

потенц.
кривые,
кв. мех-
расчет.

Развитие методов механи-
ческих расчетов и тео-
ретическое изучение ряда
кислородосодержащих соеди-
нений. Автореферат диссер-
тации на соискание уч.
степени к. ф-м. наук, 1982,
Москва.

NaO

[Ummuck 15464]

1982

Allison F. N. Gooddard
W. A.,

J. Chem. Phys., 1982,
77, 18, 4259-4261.

первичные
связи,
конформационные

Na_2O

[Ommet 157-70]

1982

теорет.
работы

Gutsev G.L., Boldyrev A.I.,
Chem. Phys. Lett., 1982,
92, N3, 262-266.

NaO(2)

1982

Peterson Karen Irene.

2az.
qaza

Diss. Abstr. Int. B. 1982,
43 (4), 1119.

(cuc. Na₂Cl(2) i III)

$D_0(Na-O)$ 1983

Figger H., Schrepp W.,
Zhu Xu-wei.

J. Chem. Phys., 1983, 79,
N3, 1320-1325.

(corr. $D_0(M-O_2)$; III)

NaD_4

[Om. 17 115]

1983

Lindsay D.M., Herschbach
D.R.,

ICP
чекмп,
компьютер

et al.,

J. Phys. Chem., 1983, 87,
2112, ● 2113 - 2120.

NaD

[om. 19289]

1984

Allison J.N., Cave R.Z.,
et al.,

анализ
связи
воинов.
ор-и:

J. Phys. Chem., 1984, 88,
N 6, 1262 - 1268.



MO^-

1984

$M = Na, K,$
 Rb, Cs

Гутман М.Ф., Лудик Л.С.,
Краснов К.С.

$Ac, \Delta H_f,$

$Do;$

Жур. физ., 1984, 3,
N 10, 1347-1351.

●
(см. $NaOH$; III)

NaO

1984

Бутман М. Ф.,
Кудин Л. С., и др.

Fe;

Жем. госиз., 1984, 3,
N 10, 1347-1351.

(сер. NaOH; III)

NaO

1984

/ 102: 36005u Mass-spectrometric determination of electron affinity of molecules of sodium, potassium, rubidium, and cesium oxides and hydroxides. Butman, M. F.; Kudin, L. S.; Krasnov, K. S. (Ivanov. Khim-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Khim. Fiz.* 1984, 3(10), 1347-51 (Russ). The electron affinities (EA) of MO and MOH (M = Na, K, Rb, and Cs) mols. were detd. by the method of ion-mol. equil. from mass spectrometric anal. of the thermal ionization products. For both types of compds., EA's monotonously decrease along the series owing to decreasing electrostatic attraction brought about by increasing effective size of mols. A change of the sign of EA was obsd. on the transition from NaOH to KOH. This was explained by the ground state of KOH⁻, RbOH⁻, and CsOH⁻ being localized over the ground state of the corresponding neutral mols. The enthalpies of the formation of MOH⁻ anions were also calcd.

Ae;

(41)



C. A. 1985, 102, N 4.

NaO

[DM. 18907] 1984

, 100: 76712x Observation of alkali oxide electronic emission spectra: analysis of the sodium oxide "6700 Å" band system. Pfeifer, Joerg; Gole, James L. (Sch. Phys., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(1), 565-7 (Eng). The 6700-Å band system of NaO was studied in the chemiluminescent systems: (1) Na + N₂O; (2) Na + O₃; (3) Na + N₂O + X (X = N₂O, Ar, CO, N₂); and (4) Na + O₃ + Y (Y = O₃-He mixt.). Emission was obsd. from a relatively weakly bound predominantly covalent state of NaO located ~15,000 cm⁻¹ above the ionic ground X²Π state. This state lies at considerably larger internuclear distance (~0.2 Å) than the X²Π or very low-lying A²Σ⁺ states and it is believed that the obsd. emission involves primarily transitions to the outer turning points of the vibrational quantum levels assocd. with these 2 states.

схема

6700 Å, covalent

и $r_e = 1.500 \text{ Å}$

с. А. 1984, 100, N 10

NaO

Дм. 18907 1984

9 Л377. Обнаружение электронного спектра испускания окисла щелочного металла: анализ системы полос «6700 Å» молекулы NaO. Observation of alkali oxide electronic emission spectra: Analysis of the NaO «6700 Å» band system. Pfeifer Joerg, Gole James L. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 565—567 (англ.)

В области 600—1000 нм получены спектры хемилюминесценции молекул NaO, образующихся при столкновениях атомов Na с N₂O или O₃ в газообразном состоянии. Анализ спектров позволил авторам обнаружить полосу в области 15 000 см⁻¹ (670 нм), отнесенную ими к переходу между относит. слабо связанным ковалентным состоянием NaO и основным состоянием X²Π, имеющим ионный характер. Возбужденное состояние, в соответствии с оценками авторов, характеризуется большим на 0,02 нм, чем в основном, равновесным межъядерным расстоянием. Библ. 20. М. Т.

М.П.

ф. 1984, 18, п 9

NaO

От. 18907 1984

14 Б1152. Наблюдение электронных спектров испускания оксидов щелочных металлов. Анализ системы полос «6700 Å» NaO. Observation of alkali oxide electronic emission spectra: Analysis of the NaO «6700 Å» band system. Pfeifer Joerg, Gole James L. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 565—567 (англ.)

Измерены спектры хемилюминесценции молекулы NaO, возникающей в результате процессов: $\text{Na} + \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{NaO}^* + \text{N}_2$, $\text{Na} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NaO}^* + \text{O}_2$, $\text{Na} + \text{N}_2\text{O} + \text{X} \rightarrow \text{NaO}^* + \text{N}_2 + \text{X}$, $\text{Na} + \text{O}_3 + \text{Y} \rightarrow \text{NaO}^* + \text{O}_2 + \text{Y}$ ($\text{X} = \text{N}_2\text{O}$, Ar, CO, N_2 ; $\text{Y} = \text{O}_3 + \text{He}$). В спектрах наблюдалась широкая полоса испускания в диапазоне 6700—10 000 Å со слабо-выраженной колебательной структурой. Испускание частично связано с переходом из возбужденного электронного (ковалентного) состояния, лежащего выше основного, (ионного по характеру) на $\sim 15\,000\text{ см}^{-1}$ и характеризующегося большим (на $\sim 0,2\text{ Å}$) межъядер-

М.П.

Х. 1984, 19, № 14

ным расстоянием, чем $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+$ на уровне основного состояния $X^2\Pi$ ($\omega_e'' \approx 510 \pm 20 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e' \sim 265 \text{ см}^{-1}$). Часть полос в длинноволновой области ($\lambda > 8200 \text{ Å}$) интерпретирована как переходы на уровни низколежащего электронного состояния $A^2\Sigma^+$ ($\omega_e \sim 500 \text{ см}^{-1}$).

В. М. Ковба



NaD(2) [om. 25625] 1984

(Om. 20 188)

Галеев Н. И., Абеев Кен
Ю. Т., Деев А. В.

л. 17.

Журн. неорган. хим.,
1984, 29, N 12, 3009-3013.

NaO

1985

Langhoff, S. R.,

Bauschlicher Ch. W., et al.

Comp. Ab Initio Quant.

u. n.

Chem. Exp. Small Mol. State

Art. Proc. Symp., Philadelphia,

Pa, 27-29 Aug., 1984. Doc-

direct ● e. a., 1985, 357-

407. (Cm. LiF; III)

NaD

[OM- 23729] - 1986

meopem.

pacrem

u. n.

Do, Ce, Te

Langhoff S.R., Bauser-
licher Ch.W., Jr., et al.,

J. Chem. Phys., 1986,

84, n8, 4474-4480.

(Cu. Lio; III)

NaO

1989

Woodward J.R., Hayden J.S.,
Gole J.h.

мерные
связи

Chem. Phys. - 1989. - 134(2-3). -
с. 395-419



(ср. диО, III)

NaO

1989

6 Б1349. Обнаружение радикала NaO при помощи микроволновой спектроскопии. Detection of the NaO radical by microwave spectroscopy / Yamada C., Fujitake M., Hirota E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 6.— С. 3033—3037.— Англ.

Методом микроволновой (МВ) спектроскопии в области частот 60—400 ГГц измерен вращат. спектр радикала NaO в основном и $v=1, 2, 3$ колебат. состояниях. Образец генерировался в поглощающей ячейке в результате р-ции паров Na с N_2O при т-рах 240—429 К. Анализ МВ-спектра выполнен с учетом Λ -удвоения, спин-орбитального взаимодействия и Na-ядерного квадрупольного взаимодействия. Основное электронное состояние радикала $^2\Pi_i$ характеризуется аномально большим Λ -удвоением. Для всех состояний определено по 15 молекулярных постоянных. В основном состоянии определены вращат. постоянная $B=12\,662,6762(12)$ МГц и квадрупольная постоянная $eQq=-6,81(21)$ МГц.

С. Н. Мурзин

М. П.

Х. 1990, № 6

NaO

(OM 32512)

1989

Field R. W., Baldwin D. P.,
et al.

Spectrochimica Acta Golden
Jubilee Symposium June

27-28, 1989.

Li
spectroscopy Beyond molec-
ular constants.

NaO

1989

Not correct,
Na²O₂

110: 181937u Detection of the sodium oxide (NaO) radical by microwave spectroscopy. Yamada, Chikashi; Fujitake, Masaharu; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(6), 3033-7 (Eng). The rotational spectrum of the NaO radical in the 4 lowest vibrational states was obsd. in the millimeter- and submillimeter-wave region. The NaO radical was generated by the reaction of the Na vapor with N₂O directly in a high-temp. absorption cell. Anal. of the obsd. spectra yielded the rotational and centrifugal distortion consts., Λ -type doubling consts., spin-orbit interaction consts., and hyperfine interaction consts. in the 4 vibrational states. The NaO radical is clearly shown to have the ²II_g ground electronic state with an anomalously large Λ -type doubling const. and very small hyperfine interaction consts. The mol. consts. derived are discussed in terms of the ionic character of the bond.

C.A. 1989, 110, N20

NaO

(DM-36049)

1991

Langhoff S.R., Patridge M.,
et al.,

x.n. Chem. Phys. 1991, 153, N1-2,
1-12.

Theoretical study of the spectro-
scopy of the alkali oxides LiO,

NaO, and KO.

1991

114: 193697m A reevaluation of the vaporization behavior of sodium oxide and the bond strengths of the sodium oxides NaO and Na₂O: implications for the mass spectrometric analyses of alkali/oxygen systems. Steinberg, Martin; Schofield, Keith (Quantum Inst., Univ. California, Santa Barbara, CA 93106 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(5), 3901-7 (Eng). There has been a long standing disagreement between the flame expts., which predict a very stable NaO₂ mol., and Na₂O(c) vaporization/mass spectrometric studies of Hildenbrand et al., which imply a weak bond strength from an inability to detect such a species. The vaporization expts. were reanalyzed and a possible explanation for this controversy was identified. It appears that on becoming ionized, NaO₂⁺ fragments to Na⁺ and O₂. As a result, mass 23 reflects p(Na) + p(NaO₂). This and the changes to the thermochem. data for NaO₂ modifies the earlier ion intensity/vapor pressure calibration. As a result, the previously accepted thermochem. values for NaO and Na₂O need to be reduced by 18 and 11 kJ/mol, resp. Recommended values now become 87 ± 4 and -36.0 ± 8, resp., and the bonds D₀(NaO) 266 ± 4 and D₀(Na-ONa) 228 ± 8, resp., all in kJ/mol. It also appears that the I.P.(NaO₂) ≤ 739 kJ/mol. The reported Clausius-Clapeyron vapor pressure curves are entirely consistent with this suggestion that

NaO
Na₂O
Na₂O₂

D₀, I.P.
D₀, I.P.

C.A. 1991, 114, n20

the congruent vaporization of $\text{Na}_2\text{O(c)}$ is to Na and NaO_2 rather than to Na and O_2 . A reinterpretation utilizing the previous slopes of the $I(\text{Na}^+)$ or $I(\text{O}_2^+)$ signals leads to an independent measure of $-90 \geq \Delta H_{\text{msk}}(\text{NaO}_2) \geq -155$ and $194 \leq D_0(\text{Na-O}_2) \leq 259$ kJ/mol. These are to be compared with the higher temp. flame detd. values of -139 ± 8 and 243 ± 8 kJ/mol, resp. Earlier vaporization mass loss measurements of Brewer and Margrave were in approx. agreement with a vaporization to predominantly Na and O_2 . Analyses now show that the technique is insensitive and congruent vaporization to Na and NaO_2 also fits their data. Hildenbrand and Murad measured Na^+/O_2^+ ratios but these appeared to be a factor of 4 smaller than expected for congruency and remained unexplained. By invoking an alternate fragmentation of NaO_2^+ at higher energies to Na and O_2^+ (A.P. ≈ 14.6 eV), with a branching ratio of $\geq 10\%$, this channel becomes the dominant source of O_2^+ and the obsd. Na^+/O_2^+ signal ratios are consistent with congruency. These results have important implications for all mass spectrometric studies of alkali/oxygen mixts. including, for example, also carbonates and nitrates. A reappraisal for these is in order, particularly with ref. to derived thermochem. values.

NaO

OM 36 896

1992

117: 220493n Calculated dissociation energies of the alkali metal monoxides: sodium oxide and potassium oxide (NaO and KO). Basis-set-superposition error and symmetry lowering. Lee, Edmond P. F.; Wright, Timothy G.; Dyke, John M. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Highfield/Southampton, UK SO9 5NH). *Mol. Phys.* 1992, 77(3), 501-19 (Eng). The dissocn. energies (D_0) and the low-lying $^2\Sigma^+ - ^2\Pi$ electronic state sepns. of NaO and KO were calcd. with basis sets of approx. triple-zeta quality, at the Hartree-Fock and CI(with single and double excitations) levels, with both the Davidson and Pople size-consistency corrections and the full counterpoise correction for internal basis set superposition error (IBSSE). Particular attention was paid to the effect of IBSSE on the calcd. properties. Two methods were devised to est. the part of IBSSE due to the lowering of symmetry in a counterpoise correction with the presence of a ghost center. Calcd. results showed a large IBSSE assocd. with KO at the correlated level, which was due to such symmetry lowering in the K^+ calens. For both mols., the ground state was computed to be a $^2\Pi$ state; reasonably good agreement was obtained between the calcd. and available exptl. values for the $^2\Sigma^+ - ^2\Pi$ sepns. The computed values of $D_0(\text{NaO}, X^2\Pi)$ and $D_0(\text{KO}, X^2\Pi)$ (2.43 and 2.07 eV, resp.) at the highest level of theory used are both lower than the available exptl. values derived from electron-impact mass spectrometry; reasons for this are suggested.

(Dr)

resp. param

⊗(H)

C.A. 1992, KO

117, N 22

NaO

2M 36896

1992

2 Д102. Расчет энергий диссоциации монооксидов щелочных металлов NaO и KO. Погрешность, обусловленная суперпозицией базиса, и понижение симметрии. Calculated dissociation energies of the alkali metal monoxides NaO and KO. Basis set superposition error and symmetry lowering / Lee Edmond P. F., Wright Timothy G., Dyk John M. // Mol. Phys. — 1992. — 77, № 3. — С. 501—519. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия одно- и двукратно возбужденных конфигураций и поправок на высшие конфигурации в базисе гауссовых ф-ций 12s9p1d/8s7p1d, 14s11p1d/12s9p1d и 7s4p1d/5s4p1d для атомов Na, K и O исследовано электронное строение NaO (I) и KO (II). Подчеркнута важность учета поправок на внутреннюю суперпозицию базиса (влияющих на свойства молекул, хотя и в меньшей степени, чем поправки на суперпозицию базиса при описании межмолекулярных взаимодействий), для оценки

De

(4) X

ф. 1993, № 2

которых предложены 2 схемы. Отмечена большая величина поправки для II, обусловленная понижением симметрии при расчете K^+ . Энергии диссоциации для состояний $X^2\Pi$ для I и II найдены равными 2,43 и 2,07 эВ, что ниже масс-спектрометрич. данных, в связи с чем высказаны сомнения в применимости этого метода для определения энергий диссоциаций.

NaO

Partridge Harry,
Pettersson Lars E. M.

1993

Te ($A^2\Sigma^+$)

J. Chem. Phys. 1993, 99(5),
3654-8.

● (cor. LiO; III)

Na_3O

1993

Szanişzlo J.,

Tarnassy-Lentei I.,

теор.
расчёт
структур.

Acta Phys. Chim. Deb.
resina 1993, 28, 49-54.

сентяб. 1993.

(с. 42 F; III)

NaO

1993

118: 198704d A study of the products of the gas-phase reactions alkali metal(M) + nitrous oxide and M + ozone, where M = sodium or potassium, with ultraviolet photoelectron spectroscopy. Wright, Timothy G.; Ellis, Andrew M.; Dyke, John M. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, UK SO9 5NH). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(4), 2891-907 (Eng). Products of the gas-phase reactions M + N₂O and M + O₃, where M = Na or K, were investigated with UPS and bands were assigned with the assistance of results from *ab initio* MO calcns. For the M + N₂O reactions the obsd. products were MO + N₂. Measurement of the photoelectron bands assocd. with the metal monoxide MO allowed detn. of the first adiabatic ionization energies (AIE) of NaO and KO: 7.1 ± 0.1 eV for NaO(X²Π), and 6.9 ± 0.1 eV for KO(X²Π). A similar study of the Li + N₂O reaction gave AIE[LiO(X²Π)] = (7.6 ± 0.2) eV. The reactions M + O₃ give MO + O₂ as the major reaction products. However, for each reaction, a band was obsd. which was assigned to the first ionization energy of the secondary reaction product MO₂. From the spectra obtained, the first adiabatic ionization energies of NaO₂(X²A₂) and KO₂(X²A₂) were 6.2 ± 0.2 eV and 5.7 ± 0.1 eV, resp. For both the M + N₂O and M + O₃ reactions, prodn. of MO A²Σ⁺ was favored relative to prodn. of the MO X²Π state, a result which has important implications in understanding the Na night glow in the mesosphere.

(9)

ⓧ (74)

C. A. 1993, 118, N 20

KO, LiO(9), NaO₂, KO₂(9)

NaD

(DM 37 773)

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J;

$2Ti$,
D,
железные,
теорет.
расчет

J. Phys. Chem., 1994,
98, N40, 9931-44.

NaO

От 37785

1994

1) 10 Б3004. Поправка. Вычисленные энергии диссоциации монооксидов щелочных металлов NaO и KO. Ошибочный выбор основного базиса и понижения симметрии. Erratum. Calculated dissociation energies of the alkali metal monoxides NaO and KO. Basis set superposition error and symmetry lowering /Lee Edmond P. F., Wright Timothy G., Dyke John M. //Mol. Phys. .—1994 .—82 ,№ 6 .—С. 1281 .—Англ.

Выявлена ошибка в расчетах энергии диссоциации NaO и KO, связанная с неверным определением симметрии d-орбиталей в программе Games-ИК. Л. А. Резницкий

20

(4) 

X. 1995, N 10

NaD

Pugh J.V., Shen K.L.,
et al.,

M.N.
No

Chem. Phys., 1996,
202, N 1, p. 129-138.

NaO^+

1998

129: 347921d The heat of formation of $\text{NaO}^+(\text{X } ^3\Sigma^-)$ and $\text{NaO}(\text{X } ^2\Pi)$. Lee, Edmond P. F.; Soldan, Pavel; Wright, Timothy G. (Depart-

ment of Chemistry, University of Southampton, Highfield, Southampton, UK SO17 1BJ). *Chem. Phys. Lett.* 1998, 295(4), 354-358 (Eng), Elsevier Science B.V.. High-level ab initio MO calcns. are used to derive $\Delta H_f^{298}[\text{NaO}^+(\text{X } ^3\Sigma^-)]$, with the highest level of theory being RCCSD(T)/aug-cc-pV5Z//UCCSD(T)/aug-cc-pVQZ. Three routes are used to derive this quantity, yielding a final value of $\Delta H_f^{298}[\text{NaO}^+(\text{X } ^3\Sigma^-)] = 196.5 \pm 1.5 \text{ kcal mol}^{-1}$. This value is used in conjunction with the previously derived adiabatic ionization energy of $\text{NaO}(\text{X } ^2\Pi)$ to yield $\Delta H_f^{298}[\text{NaO}(\text{X } ^2\Pi)] = 22 \pm 2 \text{ kcal mol}^{-1}$. These values allow accurate enthalpy changes to be derived for important atm. reactions, such as those proposed to account for the formation of sporadic sodium layers, and the Chapman mechanism for the formation of the sodium nightglow.

$(\text{X } ^2\Sigma^-)$

$\text{NaO}(\text{X } ^2\Pi)$

$\Delta_f H$, ab initio
param

C.A. 1998, 129, N26

NaO^+

$\boxed{\text{Dm. 39863}}$

1998

Pavel Soldan,
($\text{X}^3\Sigma^-$) Edmond P. F. Lee et al.,

J. Phys. Chem. A1998,

102, 9040 - 9046

Spectroscopy and Thermo-

dynamics of $\text{NaO}^+(\chi^3\Sigma^-)$
Relevance to Atmospheric Chemistry

NaO

Om 40156

1999

($A^2\Sigma - X^2\Pi$)

130: 330193r Observation of the $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ Electronic Transition of NaO. Joo, S.; Worsnop, D. R.; Kolb, C. E.; Kim, S. K.; Herschbach, D. R. (Center for Cloud and Aerosol Chemistry, Aerodyne Research Inc., Billerica, MA 01821-3976 USA). *J. Phys. Chem. A* 1999, 103(17), 3193-3199 (Eng), American Chemical Society. The gas-phase IR spectrum of the $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ electronic transition of the NaO radical was obsd. for the 1st time using tunable diode laser differential absorption spectroscopy; 109 lines were found within the region 2015-2095 cm^{-1} and 45 lines within 2654-2696 cm^{-1} . The NaO radical was produced by reaction of Na vapor with N_2O in a fast flow tube and detected using an astigmatic Herriott multipass absorption cell combined

C.A., 1999, 130, N24

with rapid sweep integration absorption signal processing. Simple kinetic studies were performed to differentiate the NaO radical features from precursor N_2O lines. The NaO $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ vibronic band structure was modeled using ab initio calcs. by Langhoff and co-workers; the simulated NaO band profile agrees reasonably well with that obsd. A preliminary assignment of some obsd. lines and the resulting mol. consts. are presented. Quant. absorption strength measurements indicate that either absorption line strengths for this transition are significantly smaller than indicated by ab initio calcs. or the $Na + N_2O$ reaction produces a significant fraction of NaO(A) state which resists collisional quenching under exptl. conditions.



F: NaO

P: 3

1999

132:42329 Photoionization of NaO (X 2.PI.; A 2.SIGMA.+) and the absorption/emission spectra of the lowest cationic states. Soldan, Pavel; Lee, Edmond P. F.; Gamblin, Stuart D.; Wright, Timothy G.

Department of Chemistry, University of Durham

Durham DH1 3LE, UK

Phys. Chem. Chem.

Phys., 1(21), 4947-4954 (English) 1999 CASSCF+MRCI calcns. are performed on NaO (X2.PI. and A2.SIGMA.+) and NaO+ (X3.SIGMA.-; a1.DELTA., A3.PI., b1.PI., c1.SIGMA.+ and d1.SIGMA.+). Potential energy curves

C.F. 2000, 132

are generated, from these vibrational frequencies rotational consts. and dissocn. energies are derived.

Franck-Condon calc are performed to simulate the photoelectron spectra that result from photoionization of the 2 lowest-lying neutral states, and a comparison to published spectrum is made. The pertinence of the results to atm. chem. considered. The Franck-Condon factors for the absorption/emission spectr the 2 cationic transitions, A3.PI. - X3.SIGMA.- and b1.PI. - a1.DELTA. ar calcd.

F: NaO

P: 3

2000

132:242112 Electronic shell structure in
monoxides and dioxides of sodium Elliott, Simon
D.; Ahlrichs, Reinhart Lehrstuhl Theor. Chem., Inst.
Phys. Chem., Univ. Karlsruhe Karlsruhe 76128,
Germany Phys. Chem. Chem. Phys., 2(3), 313-318
(English) 2000 Metal-metal bonding interactions are
important for the structure and properties of
sodium-rich monoxide and dioxide clusters Na_nO ,
 Na_nO_2 $n \leq 10$. DFT calcns. show that such bonding
is due to occupied MOs of mostly character and
provide evidence that these orbitals resemble the
1s, 1p electronic shells of pure metal clusters.
Calcd. properties of the sodium oxides (ionization
potential and sodium abstraction energy) follow

C.A. 2000, 132

those sodium clusters in both magnitude and overall trend. Structural anomalies also be explained by the electronic shell model, as illustrated with clusters possessing four 'metallic' electrons ($1s^2 1p^2$). Singlets show Jahn-Teller distortion to prolate shapes; triplets distort to become oblate. In addition shell model rationalizes the stereoelectronic conditions for the metal-to peroxide electron transfer which leads to O-O cleavage.
