

C8-0

CSO (2)
1663

¹⁹⁵⁵
Brewer L., Margrave J.H.

2

Тыкаров

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

ГА-309

● $D(C_2O)$

CsO₂

! Mass-spectroscopic investigation of the evaporation of cesium peroxide. Yu. A. Borisov, A. V. Gusarov, and L. N. Gorokhov (M.V. Lomonosov State Univ., Moscow). *Teplofiz. Vysokikh Temperatur, Akad. Nauk SSSR* 2(3), 487-9(1964). When CsO₂ is evapd. at 700° and the vapor allowed to effuse into the ionization chamber of a mass spectrometer, the following ions are formed: O₂⁺ (relative intensity, 1.0), Cs⁺ (6.0), Cs₂O⁺ (1.0), and Cs₂O₄⁺ (0.2). The presence of the latter proves the existence of Cs₂O₄ mols. in the vapor phase. From the temp. dependence curves of the abundances of the O₂⁺ and Cs₂O₄⁺ ions, latent heats of evapn. are calcd. as 43 ± 4 and 51 ± 3 kcal./mole, resp. This significant difference may mean that at least part of the O₂⁺ intensity stems from yet another peroxide, possibly Cs₂O₂.

R. Belz

C.A. 1965.62.1
46g

Cs_2O_4

1964

2 Б453. Масс-спектрометрическое изучение испарения перекиси цезия. Борисов Ю. А., Гусаров А. В., Горохов Л. Н. «Теплофиз. высоких температур», 1964, 2, № 3, 487—489

На масс-спектрометре с источником ионов, снабженном платиновой эффузионной камерой и заслонкой для перекрытия мол. пучка, проведено изучение продуктов испарения перекиси цезия. При t -рах $\sim 700^\circ$ в масс-спектре обнаружены отзывающиеся на положение заслонки ионы O_2^+ , Cs^+ , Cs_2O^+ и $Cs_2O_4^+$. На основании полученных данных авторы делают вывод, что одной из компонент пара является молекула Cs_2O_4 . Реферат авторов

ж. 1965. 2

Cs_2O_2
1707

1966
Büchler A., Stauffer J. L.,
Klemperer W.

д. н.
Рейне

J. Chem. Phys., 1966, 46, 605
P.

[1]

Cs_2O_2



д. н.

1966

Газообразн. окислы

Щел. метал

K^+O^-
 ΔH_f°

свободные
энергии
образов.

1 Г48. Масс-спектрометрическое исследование газообразных соединений щелочных металлов. Гусаров А. В., Горохов Л. Н. «Electricity MHD. Vol. 3». Vienna, 1966, 89—95. Discuss., 12—14 (русск.; рез. англ.)

Предпринято масс-спектрометрич. исследование продуктов испарения окислов и карбонатов калия и цезия. В продуктах испарения окислов калия и цезия обнаружено наличие, наряду с атомами металла и молекулами кислорода, молекул окисей и перекисей. При испарении карбонатов калия и цезия обнаружено присутствие в паре газообразных молекул карбонатов. Измерены теплоты и свободные энергии образования газообразных окислов и карбонатов калия и цезия.

Резюме

K_2O , Cs_2O ,
 K_2CO_3 , Cs_2CO_3

09.1968.1

+3

Cs_2O^+
3680

1966
Norman J.M., Staley H.G.

I
Участвов

U.S. General Atomic Division
General Dynamics Corporation,
1966. GA-7247.

GA-328

● I (Cs_2O^+)

Cs_2O_2^+
3680

1966
Norman J. H., Staley H. G.

I
укапов

U.S. General Atomic Division
General Dynamics
Corporation, 1966.
GA-7244.

GA-328

● $\text{I}(\text{Cs}_2\text{O}_2^+)$

Os_2O ВР 5826-X Büchler A.,
Stauffer F. Z.,
Klemperec W.

1917
53

Os_2O_2

Ж. Chem. Phys., 46, №2, 605-8.

(коштырыне)

Изучение коалитрических
мелких осков. молекулы, со-
держащих Os; методом
откло- ● нения в электри-
ческом поле. (см. H_2SO_4)

Cs_2O

X-6238
Средство к
кромону,
теплота
атакующим

Шмелев А. М.
и др.

1967

~~Вст. № 94~~

теор. и эксперим. химия,
3, N 2, 226

Исследование паров гид.
роксен и оксен цезия
методом электронного
удара.

(см. СЭОН) III

$CSO(2)$
 $3CSO^+(2)$
 $CS_2O(2)$

Тусаров А. В.

1968

D
Тусаров
I

Автоматический реферат диссертации
на соискание степени
канд. хим. наук. Москва,
1968.

ГА-333

D(CSO)
T

80

1969

1969
20

10-17
Spencer
used.
4/11/1969

Leo Brewer, Gerd Rosenblatt.

"Adv. in High Temp. Chem.

1969, 2, 1-83.

October 1969

Cs_2O

$\sqrt{2}$

1969

Тимошин В.С.
Краснов К.С.

№ стирки. №№№,
10 (1), 161

(ал. LiOH) III

G_2O

Датумъ.

Воронов Л.Н. и гр.

1970

№. орус. земли,
44/1, 289.

(см. КОМ) III

CsO
2616

Merum R. R., Merschbach D.R. ¹⁹⁷⁰

u.n.
Уорны

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

1

CsO ●

u.n.

СЗО отпущен 7406 1971

Тусарев А. В., Зорохов Л. А.

(до) Мемориз. всеобщих
температур, 1971, 11 (3)

505 - 511

СЗО(2)
309

Торачов Л. П. 1972

Д
Торачов

Автоперерам глицерта-
зем на солскавине сме-
ним гект. смм. Найд.
Москва, ГСР. 1972

ТА-334



Д(СЗО)
Т

Cs₂O

1972

Liebman Joel F.

(A, 7)

"J Chem. Educ.", 1972,
49(6), 415-417 (eng)

(with H₂O III)

31031.4539
Ph, TE, Ch, MGU

Bp-8160-X
Es O₃ 40892

1973
1271

Andrews Lester, Spiker Robert C., Jr.
Resonance Raman spectrum and vibrational analysis of the ozonide ion in the argon matrix-isolated $M^+O_3^-$ species.
"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 4,
1863-1871 (англ.)

см. O₃, III

0593

973 975 986

ВИНИТИ

Cs^+O_2^- ; $\text{Cs}^+\text{O}_2^{2-}$ Cs^+ ; Cs^+O_4^- (Vi) X-7635 1973

Andrews L., Hwang Y.-T., Tindle G.,
J. Phys. Chem., 1973, 77, N8, 1065-73

(cont.)

⑩ Matrix reactions of cesium atoms
with oxygen molecules. Infrared
spectrum and vibrational ana-
lysis of cesium superoxide (Cs^+O_2^-).
① Infrared observation of cesium
peroxide ($\text{Cs}^+\text{O}_2^{2-}$) and cesium
oxide (Cs^+O). Theoretical structure of alkali
metal oxides (M^+O_4^-)
CA, 1973, 18, N24, 153349f

1973

CsO₄

17 Б232. Реакции в матрице атомов цезия с молекулами кислорода. Инфракрасный спектр и колебательный анализ Cs+O₂⁻. Идентификация по инфракрасным спектрам Cs+O₂²⁻-Cs⁺ и Cs+O₄⁻. Теоретическое объяснение структуры M+O₄⁻. Andrews Lester, Hwang Jenn-Tai, Trindle Carl. Matrix reactions of cesium atoms with oxygen molecules. Infrared spectrum and vibrational analysis of Cs+O₂⁻. Infrared observation of Cs+O₂²⁻-Cs⁺ and Cs+O₄⁻. Theoretical structure elucidation of M+O₄⁻. «J. Phys. Chem.», 1973, 77, № 8, 1065—1073 (англ.)

Получены ИК-спектры в области 200—2000 см⁻¹ продуктов взаимодействия атомов Cs и Rb с молекулами O₂ в аргоновой матрице при т-ре 15—36° К. Для O₂ использованы три изотопич. модификации: O₂¹⁶, O₂¹⁸ и O¹⁶O¹⁸ (последняя — в смеси с двумя первыми). На

оттиск 25-499

Vi
часть

СТНО

43



X. 1973 N 17

основании сравнения с ИК-спектрами $M^+O_2^-$, где $M = Li, Na, K$, и спектра КР продуктов р-ции Cs с O_2 в аргоновой матрице проведено отнесение полос спектра $Cs^+O_2^-$ (ν_1, ν_2 и ν_3 при 1115, 268 и 236 cm^{-1} , соотв.) и его димера. Установлено, что атомы O в $Cs^+O_2^-$ эквивалентны (симметрия C_{2v}). Приведена сводная таблица основных частот колебаний всех молекул надперекисей щел. металлов. Выполнено отнесение полос колебаний $Cs^+O_2^2-Cs^+$ (симметрия D_{2h}) и $Cs^+O_4^-$. Наиболее интенсивная полоса первого из них наблюдается при 357 cm^{-1} , второго — при 1002 cm^{-1} . Данные по спектрам соединений MO_3 , где M — атом щел. металла, не позволяет детально определить их структуру. Вычислены силовые постоянные $Cs^+O_2^-$ и $Rb^+O_2^-$; расстояние $O-O$ при этом предполагалось равным 1,28 А (по аналогии с KO_2), расстояние $Cs-O$ оценено равным 2,67 А и $Rb-O$ 2,49 А. В рамках приближения ЧПДП метода $MO-LCAO-CCP$ с оптимизацией по геометрии проведен расчет молекулы $Na^+O_4^-$ (без учета $d-AO$). Отмечается сложность энергетич. поверхности для этой молекулы и наличие большого числа минимумов. Проведенный анализ позволил отобрать для основного состояния две геометрич. конфигурации: квадратно-пирамидальную (C_{4v}) и несимметричную (искаженный неплоский пятичленный цикл). Образование первой из них, однако, запрещено правилами орбитальной симметрии.

Н. Ф. Степанова

CsO₂

1973

8 Д386. Реакции атомов цезия с молекулами кислорода в матрице. ИК-спектр и колебательный анализ Cs+O₂⁻. Наблюдение ИК-спектров Cs+O₂²⁻-Cs⁺ и Cs+O₄⁻. Теоретическое рассмотрение молекул M+O₄⁻. Andrews Lester, Hwang Jenn-Tai, Trindle Carl. Matrix reactions of cesium atoms with oxygen molecules. Infrared spectrum and vibrational analysis of Cs+O₂⁻. Infrared observation of Cs+O₂²⁻-Cs⁺ and Cs+O₄⁻. Theoretical structure elucidation of M+O₄⁻. «J. Phys. Chem.», 1973, 77, № 8, 1065—1073 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения продуктов реакции Cs, осажденного совместно с O₂ в матрицу Ar при 13° К. Использован кислород различного изотопного состава. Опираясь на величину изотопных эффектов и

(с.и.)

отметки 4-499

CP. 1973/8

(+5)

✗

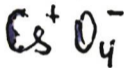
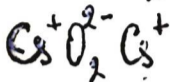
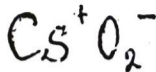
~~CsO₂~~
Cs₂O
CsO₄
RbO₂

LiO₂
NaO₂

результаты аналогичных опытов с другими щелочными металлами, авторы отнесли полосы 1116,5; 236,5 и 268,6 см^{-1} к колебаниям молекулы Cs^+O_2^- , 357 см^{-1} — к колебанию $\nu_5\text{Cs}^+\text{O}_2^{2-}\text{Cs}^+$ и полосу 1002,5 см^{-1} — к антисимметричному вал. кол. Cs^+O_4^- . Определены силовые постоянные колебаний молекул CsO_2 и RbO_2 ; показано, что обе связи $\text{Cs}-\text{O}$ эквивалентны. Проведен анализ изменения силовых постоянных $\text{O}-\text{O}$ и $\text{Me}-\text{O}$ в ряду молекул MeO_2 ($\text{Me}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$). Рассмотрены различные структуры соединений MeO_4 . Наиболее вероятной считается 5-членное кольцо. Библ. 27.

М. В. Тонков

1973



Di

53349f Matrix reactions of cesium atoms with oxygen molecules. Infrared spectrum and vibrational analysis of cesium superoxide (Cs^+O_2^-). Infrared observation of cesium peroxide ($\text{Cs}^+\text{O}_2^{2-}\text{Cs}^+$) and cesium disuperoxide (Cs^+O_4^-). Theoretical structure of alkali metal oxides (M^+O_4^-). Andrews, Lester; Hwang, Jenn-Tai; Trindle, Carl (Dep. Chem., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Phys. Chem.* 1973, 77(8), 1065-73 (Eng). The simultaneous matrix deposition of Cs atoms and O_2 at high diln. in Ar produced ir absorptions at 1115, 268, and 236 cm^{-1} which are resp. assigned to ν_1 , ν_3 , and ν_2 of the Cs^+O_2^- species. The use of isotopic mixts. confirmed these assignments and the isosceles triangular structure for Cs^+O_2^- . The most intense mode of $\text{Cs}^+\text{O}_2^{2-}\text{Cs}^+$ was obsd. at 357 cm^{-1} . A strong band at 1002 cm^{-1} showed isotopic splittings for a species contg. 2 O_2 mols. which is assigned to Cs^+O_4^- . CNINDO (J. A. Pople and P. Dobosh) calcns. were done to investigate possible O_4^- geometries and M^+ position in the M^+O_4^- mol. system.

6712-54

C. A. 1973. 48, 124

31031.4538

TE, Ch, Ph

$CsO, Cs_2O, Cs + O_3$
40892

1973

1270

Spiker Robert C., Jr. Andrews Lester.

Matrix reactions of alkali metal atoms
with ozone: infrared spectra of the alka-
li metal ozonide molecules. "J. Chem.
Phys.", 1973, 59, N 4, 1851-1862

(англ.)

0313 ДМК

с. 03, III

973

975

986

ВИНИТИ

31031.4538

TE, Ch, Ph

Cs + O₃

40892

1973

1270

Spiker Robert C., Jr., Andrews Lester.

Matrix reactions of alkali metal atoms
with ozone: infrared spectra of the alka-
li metal ozonide molecules. "J. Chem.
Phys.", 1973, 59, N 4, 1851-1862

(англ.)

0993 БМК

см. O₃ III

973

975

986

ВИНИТИ

CSO

1973

(Vi) (we)

Spiker, Robert C., Jr.; Andrews, Lester
J. Chem. Phys. 1973, 58(2), 713-21.

(ref. K₂O; III)

Cs₂O

1973

(Vi)

Spiker, Robert C., Jr.; Andrews, Lester
J. Chem. Phys. 1973, 58(2), 713-21.

(cell. K₂O; III)

CSO_2 ;
 CSO_4

1973

Smardzewski R., Andrews L.

J. Phys. Chem., 1973, 77, No. 16,
801-804.

(see RbO_2) III



1973

130978s Matrix reactions of alkali metal atoms with ozone. Infrared spectra of the alkali metal ozonide molecules. Spiker, Robert C., Jr., Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(4), 1851-62 (Eng). The 15°K deposition of alkali metal atoms and O₃ at high diln. in Ar produced very intense bands at 800 cm⁻¹ and weak bands at ~600 cm⁻¹, which showed appropriate O isotopic shifts for assignment to ν₂ and ν₂ of O₃⁻. Energetic considerations and alkali metal effects clearly indicated bonding of the metal cation to O₃⁻. The use of scrambled isotopic ozones showed that the metal cation was sym. bound to O₃⁻ in a C_{2v} structure; the symmetric interionic stretching mode was obsd. at 281 cm⁻¹ for Cs⁺O₃⁻. The Cs-O₃ reaction produced Ar matrix fundamental for CsO at 322 cm⁻¹ and Cs₂O at 457 cm⁻¹; simultaneous Hg arc photolysis was required to yield the LiO absorption at 752 cm⁻¹ from the Li-O₃ Ar matrix reaction.

Vi

CA1973

79, 22



+1



(Vi)



3ax. 247

40424.9011

CO₂ 96201

1974

TE, Ch, Ph

ЭПР - спектры CO₂

* 4 4594

* 4 - 4594

Lindsay D.M., Herschbach D.R., Kwiram Alvin L. ESR of matrix isolated alkali superoxides. "Chem. Phys. Lett.", 1974, 25, N 2, 175-181

(англ.)

0097 0000

075 076 - 089

ВИНИТИ

CsO

RbO

Спектр

ЭПР

43-4253

1974

16 Б270. Спектры ЭПР молекул CsO и RbO в матрице. Основное состояние и связывание за счет внутренних оболочек. Lindsay D. M., Herschbach D. R., Kwiram Alvin L. ESR spectra of matrix isolated CsO and RbO molecules: 2Σ ground states and inner shell bonding. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 1, 315—317 (англ.)

Исследованы спектры ЭПР CsO и RbO в матрице N_2 при $4^\circ K$, свидетельствующие, что основное состояние этих молекул 2Σ . В случае KO спектр не обнаружен, т. к. основное состояние этой молекулы относится к типу 2Π и спектр ЭПР уширен из-за снятия орби-

Х. 1974 № 16



Есшбу

тального вырождения случайными локальными полями матрицы. Константы СТС для CsO и RbO много больше, чем для др. солей щел. металлов. Сделан вывод о том, что основное состояние этих молекул образуется в результате смешивания внутренних заполненных $(n-1)p$ -орбиталей атома щел. металла с $2p$ -орбиталями кислорода, аналогично связи за счет внутренних оболочек в изоэлектронных радикалах XeF и KrF.

С. Г. Ческис

CsO; RbO; XeF; KrF

($X^2\Sigma$, n.n.) Тун ош. сош.

1974

102030d ESR spectra of matrix isolated cesium monoxide and rubidium monoxide molecules. $^2\Sigma$ Ground states and inner shell bonding. Lindsay, D. M.; Herschbach, D. R.; Kwiram, Alvin L. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(1), 315-17 (Eng). ESR spectra of CsO and RbO in a N_2 matrix confirmed the $^2\Sigma$ ground state. This state results from mixing of the filled $(n-1)p$ alkali orbitals with the $2p$ O orbitals, analogous to the inner-shell bonding in the iso-electronic XeF and KrF radicals.

4253-4253

(+3) ☒

C.A. 1974. 80. N18

*4-4253

1974

CsO

(7 Д694) Э.ПР изолированных в матрицах молекул CsO и RbO: $^2\Sigma$ основное состояние и связь внутренних оболочек. Lindsay D. M., Herschbach D. R., Kwiram Alvin L. ESR spectra of matrix isolated CsO and RbO molecules: $^2\Sigma$ ground states and inner shell bonding. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 1, 315—317 (англ.)

Л.И.
Вен.Тин.
С.С.Стайн

Методом ЭПР в диапазоне 9 Гц были исследованы $^2\Sigma$ основные состояния молекул CsO и RbO, стабилизированных в матрицах N_2 , KI и Ag при 4°К. Показано, что $^2\Sigma$ -состояние является результатом смешивания $(n-1)$ p -орбиталей щелочного металла и $2p$ -кислородных орбиталей, что аналогично существованию связи внутренних оболочек. Проводится сравнение образования $^2\Pi$ -состояния в NaO в случае валентной схемы и $^2\Sigma$ -состояний в CsO и XeF для «внутриоболочечных» связей. Параметры спектров в ЭПР для $^{133}Cs^{16}O$ ($^{87}Rb^{16}O$) $g_{\parallel}=2,001$ (2,001); $d_{\perp}=1,982$ (2,081); $a=139$ гс (166); $T_{\parallel}=28$ гс (34); $T_{\perp}=-14$ гс (-17), a и T — изотропная и анизотропная сверхтонкие константы.

К. К. Ермакович

Ф 1974 № 7

$\text{Cs}^+ \text{O}_3^-$

BP-9627-X

1975

Andrews, L.

X-10898

(u.n)

J. Chem. Phys., 1975

63, N10, 4465-69.

(all O_3^- ; IV)

Co

Dmmuck 15904

1975

Cradock S, Minckeliffe A. J.
Matrix isolation.

пример
в
мануск, of reactive inorganic
vi, species.

Cambridge University Press, 1975

O-C₅

OLM. 4824

1975

Kerr J. A., et al.,

Handbook Chem. Phys.,
55th, Ed., 1974-75.

(P₀)

Q 0

1975

Lindsay, Derek M.

examples
в справке.

From. Diss. Abstr. Int.
B. 1975, 36(2) 743-4

(see Q 0; III)

61118.3467

38107GR

1976

Ph, Ch, TC, MGU

CO₂ (Vi)

017 49/3

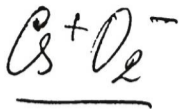
Andrews Lester. Laser excitation
matrix-isolation spectroscopy. "Appl.
Spectrosc. Revs", 1976, 11, N 1, 125-161
(англ.)

0749 лнк

689 700

741

ВИНИТИ



1976

Andrews L.

(Vi)

J. Mol. Spectrosc. 1976,
61, N3, 337-45(cf. $\text{Li}^+ \text{O}_2^-$, III)

61105.3614

Cs, TC

Cs_11O_3 , Cs_10
[Cs_11O_3] Cs_10

оттиск
4766

фотоэлектрох. спектр.)

Ebbinghaus G., Braun W., Simon A.
Photoelektronenspektroskopie an den
Alkalimetallen Rb und Cs und deren metall-
reichen Oxiden. "Z. Naturforsch.", 1976,
31b, N 9, 1219-1223 (нем, рез.англ.)

0740 лиз

724 725

739

ВИНИТИ

60407.7205
Ch, Ph, TC

40892
СЗД (ив. мех.
част.)

1976

УЗД

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 ЛМК

571 574 5 2 7

ВИНИТИ

Cs_2O
2507

Grow D.T., - Pitzer R.W.

1977

M.N.
Osmia

J. Chem. Phys., 1977, 67, 4019

52

Cs_2O



M. U.

Cs_2O^+
~~592~~
592

Кудин Л.С., Цсаров А.В.,
Горохов Л.Н., Краснов К.С.

(776)

I
Цсаров

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

ГА-339

$\text{I}(\text{Cs}_2\text{O}_2^+)$

Cs_2O_2
4796

1977

Yates J. H., Pitzer R. M.

M. H.
Oscilla

J. Chem. Phys., 1977, 66, 3592
p.

[4]

Cs_2O_2



M. H.

GO

Дм. 17521

1977

Зусаров А.В., Зорохов Л.Н.
и др.,

Ао

Температура, Физика
температур, 1977,

5, N 4,

584 - 590.

CsO

1978

Баграмян Н. В. и др.

(7)

Вестн. АН У. Казань,

1978, №3, 253-54

$Cs^+ - O$

(20)

•
(см. $LiNO_3$; I)

1978

Са О Жагаратъем Н. В. и др

А. Р. Т;

Вестн. МГУ, химия,
1978, n 4, 421-5

(Сел LiNO_3 III)

$C_3 + O_2$

номер 4034 1978.

Kleyн A. W., et al.

неперен.

сечение

Chem. Phys., 1978,

для O_2^- .

39, 55-63

Ion-pair



formation in ..

$\text{Cs}^+ \text{O}_3^-$

Lawrence 8378 | 1979

Andrews L.

Рамак спектр

в матрице

Appl. Spectrosc.

1979, 33 (3), 199-205

$C_{57}O$

1979

$C_{51}O_3$

Ebbinghaus G; et al.

Chem. Phys. 1979, 43, N 1,
117-33.

электр.
компют.



евн. $C_3 - III$

C₅O₂

(Madsusa y Lyphura) 1979

de Marsa B. Spoliti M.

M.N.

Centro di Studio per
la termodinamica chi-
mica alle alte tempera-
ture (CSTIC)-CNR. #

Italy, Univ. ● Rome, 1979

Tables: Spectrosc. properties

CS_2O (Madecusa g. Gypsera) 1979

De Maria G., Spolite M.

Centro di studio per

(M.N.)

la thermodynamic
Chemica alle alte
temperature (CSTCT) - CNR

Italy, Univ. Rome, 1979.

$C_{37}O_8$, $C_{32}O_3$

$C_{31}O_3$

$(C_{31}O_3)_{310}$

гормональ.
сакрир

Дисперсия

Lammien 8474 | 1979

Ebbinghaus R., Simon A

Chem. Phys., 1979, 43

117 - 133

C81103

C870

И.
компьют.
кислотероб,
расширен
счёт

сумма 4900

1979.

Martin T.P., et al.

J. Chem. Phys., 1979,
70 (3), 1096-1100

(см. Кб902; III)

БДх обзор

номер 8161

1979

Simon, Arndt.

Struct Bonding (Berlin)

1979, 36, 81-127.

структура
и связь

см. РБ Дх - III

C_{30}^+

1979

C_{320}^+

Верхогуров Е. И
и др.

(80; 7.)

Вестн. МГУ. Химии-
1979, 20(5), 423-25

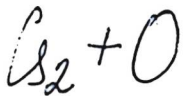
(см. Li_2NO_2^+ ; III)

Os2D Gingerich K. A., 1980

Os2D₂ Current Topics in Materials
Science, Volume 6, edited
by Kaldes E.

Do; North-Holland Publishing
Company, 1980.

(естб оmmuck ● в коробке оmmuc-
ков Gingerich).



[Оммуек 12906] 1981

Хемилно-
мичесезецише,
поперечн.
сезецише
реакции

Figger H., et al.,
J. Chem. Phys., 1981,
75 (1), 179-185.

CSO_2

1981

Серебрянников. Л. В.

Vi

Вестн. ИЛТУ Кемлева,
1981, 22, N 5, 507 - 508.

(\bullet сел. SO_2 ; III)

Cs₂O

1981

5 Б461 Деп. Ионная модель молекул оксидов щелочных металлов типа M₂O. Соломоник В. Г., Тогребная Т. П. Иванов. хим.-технол. ин-т. Иваново, 1981. 10 с., ил., библиогр. 19 назв. (Рук. деп. в ЭНИИТЭХИМ г. Черкассы 9 нояб. 1981 г., № 962хп—Д81)

Показано, что в терминах модели поляризующихся ионов наблюдаемая на опыте тенденция в изменении равновесной геометрии молекул в ряду Li₂O → Cs₂O (от линейной до изогнутой) объясняется ростом эффективной дипольной поляризуемости иона O²⁻ в этом ряду молекул. В результате модельных расчетов найден дипольный момент молекулы Cs₂O: $\mu_e = 4,2 \pm \pm 0,5D$. Показано, что молекула Na₂O должна быть линейной. Выполнена оценка интервалов наиболее вероятных значений равновесных углов между связями M—O в молекулах K₂O ($\varphi_e = 162-180^\circ$), Rb₂O ($\varphi_e = 140-180^\circ$) и дипольных моментов: $\mu_e(K_2O) \leq 2,6D$, $\mu_e(Rb_2O) = 2,3 \pm 2,3D$. Модель предсказывает очень низ-

геометрия,
структура

43

X. 1982, 19, 15.

кие величины энергетич. барьеров h между линейной ($D_{\infty h}$) и изогнутой (C_{2v}) структурами рассмотренных молекул: $h(K_2O) \leq 6,5$ см⁻¹, $h(Rb_2O) \leq 113$ см⁻¹, $h(Cs_2O) = 73-350$ см⁻¹. Автореферат

Li₂O, Rb₂O, Na₂O

Лак
Савр

GO

DMMLCK 15464, 811

1982

Allison F. M., Goodland
W.A.,

25⁺,
железные
связи,
копиям.
ласточки,
пометки.
книжки

J. Chem. Phys., 1982,
77, N 8, 4259-4261.

CsO_4^+

1982

Spitsyn V. I., Ionova G. V.,
et al.

теорет.
расчет
стабильн.

Dokl. Akad. Nauk SSSR
1982, 267 (3), 676-8.

(сер. XeO₄; III)


CsO

1983

Arratia-Perez Ra-
miro, Case David A.

pacientes

J. Chem. Phys., 1983,
79, N 10, 4939-4949.

( cur. XeF; III)

$D_0(Cs-O_2)$

1983

Figger H., Schrepp W.,
Zhee Xu-kei.

J. Chem. Phys., 1983, 79,
N37 1320-1325.

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

$\text{D}_0(\text{Cs}-\text{O})$

1983

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

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

(see \bullet $\text{D}_0(\text{M}-\text{O}_2)$; III)

Os₂O

1983

Кудин Л. С., Поторебной
А. И., и др.

У;
Изв. вузов. Химия и хими.
технол., 1983, 26, N 6,
685-688.

●
(см. К₂; III)

Сала[†]

(от. 17068)

1983

Кудим Л.С., Погребной А.И.,
и др.

Кр: 9

Изв. вузов. Земля и
зем. технол., 1983,
26, № 6, 685-688.

Шкаф.

Сад⁺

(DM: 17068)

1983

Кудум Л.С., Торредовой А.И.,
и др.

Кр, I

Изв. вузов. химия и
техн., 1983,
26, № 6, 685-688.

Иван.

630

Dm. 16519

1983

8 Д138. Теоретическое определение потенциалов в состояниях $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ молекулы CsO с использованием релятивистских эффективных потенциалов остова. Theoretical determination of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ potentials of CsO using relativistic effective core potentials. Laskowski Bernard C., Langhoff Stephen R., Siegbahn Per E. M. «Int. J. Quantum. Chem.», 1983, 23, № 2: Proc. 4 Int. Congr. Quantum. Chem., Uppsala, 13—20, 1982, 483—490 (англ.)

м.п., До, Vi;

Молекула CsO рассматривается как 17-электронная система. Переход из основного состояния $X^2\Sigma^+$ в состояние $A^2\Pi$ связан с возбуждением $2\pi \rightarrow 5\sigma$. Приводятся численные значения экспонент и коэф. сжатия в s -, p - и d -гауссовых ф-циях цезия, с которыми по методу ССП с учетом одно- и двукратно возбужденных конфигураций и их взаимодействий и с квадратурной поправкой вычислены валентные электронные энергии обоих состояний при 12 значениях межатомно-

ор. 1983, 18, № 8

го расстояния в интервале $4,00 \div 8,00$ а. е. Для атома цезия использован усредненный релятивистский эффективный остоной потенциал. Валентные электроны атома цезия описываются гауссовым базисом $[7s6p3d]$, а атом кислорода характеризуется двойным экспоненц. базисом с учетом поляризации. Построены потенциальные кривые и рассчитаны равновесные межатомные расстояния, энергии -диссоциации и колебательные энергии при $v=0 \div 6$. Рассчитанная частота колебания $\omega_e = 312 \text{ см}^{-1}$, а ее эксперим. значение равно $314 \div 322 \text{ см}^{-1}$.

М. А. Ковнер



CsO

Om. 16519

1983

17 Б28. Теоретическое определение $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ потенциалов молекулы CsO с релятивистского эффективного потенциала остова. Theoretical determination of the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ potentials of CsO using relativistic effective core potentials. Laskowski Bernard C., Langhoff Stephen R., Siegbahn Per E. M. «Int. J. Quantum. Chem.»; (1983, 23, № 2: Proc. 4th Int. Congr. Quantum. Chem., Uppsala, 13—20, 1982, 483—490 (англ.)

м.п., у;

X. 1983, 19, N 17

Рассчитаны кривые потенциальной энергии состояний $X^2\Sigma^+$ и $A^2\Pi$ молекулы CsO. Использовано приближение релятивистского эффективного потенциала остова. Расчет проведен методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом всех однократно и двукратно возбужденных конфигураций относительно хартри-фоковской ф-ции; МО получены методом ССП. Для описания валентных электронов атома Cs использован базис сгруппированных гауссовых орбиталей $[7s6p3d]$, для атома O — базис $[4s3p1d]$. Вычислены спектроскопич. постоянные R_e , ω_e , D_e и энергии шести низших колебательных уровней для каждого состояния. Для состояния $A^2\Pi$ при расчете методом ССП получено $T_e=497$ см⁻¹, методом КВ — 726 см⁻¹. Найденная частота для основного состояния $\omega_e=312$ см⁻¹ хорошо согласуется с эксперим. данными.

А. А. Сафонов

CsO

Om. 16519

1983

98: 95999t Theoretical determination of the $X^2\omega^+$ and $A^2\Pi$ potentials of cesium oxide (CsO) using relativistic effective core potentials. Laskowski, Bernard C.; Langhoff, Stephen R.; Siegbahn, E. M. (Analatom, Inc., Sunnyvale, CA 94086 USA). *Int. J. Quantum Chem.* 1983, 23(2), 483-90 (Eng). Theor. potential energy curves are computed for the $X^2\Sigma^+$ and $A^2\Pi$ states of CsO using a relativistic effective core potential and a large valence Gaussian basis set. Seventeen electrons are correlated by a CI(SD) calcn. from each HF ref. The $X^2\Sigma^+$ state is lower by 497 and 726 cm^{-1} at the HF and CI(SD) levels. The calcd. ω_e of 312 cm^{-1} for the $X^2\Sigma^+$ state agrees well with exptl. values deduced from studies in matrices.

номен.

критич

$X^2\Sigma$ и $A^2\Pi$

состоянии

C. A. 1983, 98, N 12

CO₄

(Om. 17115), 18104. 1983

Lindsay D. M., Merschbach
D. R.,
et al.,

J. Phys. Chem., 1983, 87,
N 12, 2113-2120.

ЖСР
електр,
енергет-
ика.



60

[OM 20297]

1984

Adrian F.J., Jette A.N.

Сверхтон-
кая струк-
тура

J. Chem. Phys., 1984,
81, N 5, 2411-2414.

60

(OM. 19289)

1984

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

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



анализ
связи,
возмож.
ор-ш

80

1984

Asano Mitsuru, Yasue
Yoshitiko, et al.

J Reimo gaurakya zamen zho-
ryu kankoei uko, Bull.
Inst. Atom. Energy Kyoto
Univ., 1984, 66, Sept., 38.

(see CsBO₂; I)

СЗО

1984

Гутман М.Ф., Кудин
Л.С., Краснов К.С.

Ас, Δ Нф, хим. ср-ва, 1984, 3,
До; N10, 1347-1351.

(сер. NaOH; III)

Cs_2O

1984

Butman M.F., Kudin
L. S., et al.

Ар, арае-
сиректрон

Zh. Neorg. Khim.
1984, 29 (8), 2150-2.

(сир. Na_2O ; III)

СЗО

1984

Трунман Л. Ф.,
Кудум Л. С., и др.

Ае; жем. првз., 1984, 3,
N 10, 1347-1351.

(сер. NaOH; III)

GO-

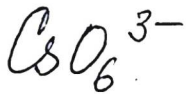
OM · 18226

1984

Кудим Л. С., Бурдуковская
Т. Т. и др.,

и.п.

Депониров. рукописей,
№ 371XII-283, Черкассы,
1984.



1984

Спицын В.И., Цонова
Т.В., и др.

расчёт
электр.
структуры.

Докол. АН СССР, 1984,
278, N 2, 405-407.

(сери. XeO_6^{4-} ; III)

CsO

Langhoff S.R., 1985
Bauschlicher Ch.W., et al.

Comp. Ab Initio Quant.
Chem. Exp. Small Mol. State
Art. Proc. Symp., Philadelphia,
Pa, 27-29 Aug., 1984. Dordrecht
e.a., 1985, 357-
-407. (Cur. LIF; III)

u. n.

80

DM-23729

1986

meopem.

paarem

n.n.

Do, Ce, Te.

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

J. Chem. Phys., 1986,

84, NS, 4474-4480.

(see LiO; III) ●

Cs_nO

Im. 29208

1987

109: 80106w Why are cesium clusters more difficult to ionize than their monoxides? Savin, A.; Preuss, H.; Stoll, H. (Inst. Theor. Chem., Univ. Stuttgart, D-7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *Rev. Roum. Chim.* 1987, 32(11-12), 1069-70 (Eng). The Cs_nO clusters have lower ionization energies than the Cs_n . This is explained qual. by using an exclusion effect. In order to support this statement, SCF pseudopotential calcs. were made for a typical case: Cs_4O .

(9)

(4) Cs_n

C. A. 1988, 109, n 10

LS40

(Dm. 29208)

1987

Savin A., Preuss H.,
et al.,

^g
I, 2e (ls-ls)
meop. pacrem

Rev. Roum. Chim.,
1987, 32, N 11-12,

● 1069-1070.

1989

C_n^0

$n \leq 70$

Lammers U.,

Mananes A. et al.

Solid State Com-
munications. 1989.

7, N 7, p. 591-594.

Электропроводная
структура

(see C_n^0 ; III)

$Cs_n O_m$

1989

Himberger M. G., Martin T. P.

JP

Z. Phys. D.: At., Mol.
Clusters, 1989, 12(1-4)

439-42

● (See ~~§~~ Cs_n ; III)

Cs \bar{n} 0

1989

Limberger H. G.,
Martin T. P.

(7)

J. Chem. Phys. 1989,
90(6), 2979-91.

(see \bullet Cs \bar{n} ; III)

$(\text{C}_{20})_n$

1989

111: 30717s Computer simulations of photoionization in ionically bonded clusters. Martin, T. P.; Wassermann, B. (Max-Planck-Inst. Festkoerperforsch., 7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(9), 5108-13 (Eng). Photoionization spectra of clusters record a continuous distribution of ionization energies because each cluster has a different at. arrangement at the moment of ionization. Using the technique of mol. dynamics, photoionization spectra were generated for $(\text{C}_{20})_n$ clusters.

фотомолекулы,
спектры

C.A. 1989, 111, N 4

CsO

1989

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

непрям
вещь.

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

(Cur. di O, III)

Cs_NO.

1991

115: 81188k Photoabsorption spectra of cesium oxide (Cs₂O) and cesium (Cs_n) clusters. Fellgren, H.; Brown, K. M.; Martin, T. P. (Dep. Phys., Chalmers Univ. Technol., S-41296 Goeteborg, Swed.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1991, 19(1-4), 81-4 (Eng). Photoabsorption spectra of several Cs_{N+2}O and Cs_N clusters were obtained by means of laser-induced beam-depletion techniques. The strong absorption of clusters with $N \geq 3$ in the near IR indicates that collective motion might play an important role. Dipole transitions between mol. orbitals, enhanced by plasmon oscillations, generate remarkably distinct spectra for: (a) closed-shell clusters at $N = 8$; and (b) geometrically sym. clusters like Cs₆O and Cs₁₄O.

Служба

④ ⊗ Cs_N



c.A. 1991, 115, n 8

CS₂

1992

117: 198788p Theoretical study of the 2A_2 - 2B_2 separation of the alkali superoxides. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Sodupe, Mariona; Partridge, Harry; Langhoff, Stephen R. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035-1000 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 197(3), 213-16 (Eng). The computed 2A_2 - 2B_2 sepns. of the alkali superoxides are in good agreement with those deduced from electron-spin resonance spectra. The calcs. definitively show that the ground state of CsO₂ is 2A_2 . The larger than expected sep. for CsO₂, based on the trend from LiO₂ to RbO₂, is attributed primarily to the differential effects of core relaxation. The CsO₂ dissocn. energy is computed to be 42.7 kcal/mol, with an uncertainty conservatively estd. as ± 4 kcal/mol.

(разница в
энергиях)

2A_2 - 2B_2 расщ.
энерг. разность

C.A. 1992, 117, N20

CO_2

1993

Brunere V., Kalina Yu.

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

276-80.

UK спектр

(сеп.  CO_2 ; III)

Оксиды Cs
квасцы

1994

121: 263858k Oxides and halides of alkali metals. Martin, T.P. (Max-Planck-Inst., D-70569 Stuttgart, Germany). *Springer Ser. Chem. Phys.* 1994, 52(Clusters of Atoms and Molecules), 357-73 (Eng). A review with 37 refs. on structure, total energy, and photoionization of neutral and charged alkali metal oxide and halide clusters, with special emphasis on cesium oxide and sodium chloride clusters.

обзор,
структура,
энергии
диссоц.,
фотоиониз.

(H) ☒ Хлориды Na
квасцы

(илл. 8 рис.)

С.А. 1994, 121, N 22

GO

Suppl

1994

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

120: 283598h Measurement of the $X^2\Sigma^+ - A^2\Pi$ splitting in CsO via photoelectron spectroscopy of CsO^- . Sarkas, H. W.; Hendricks, J. H.; Arnold, S. T.; Slager, V. L.; Bowen, K. H. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(4), 3358-60 (Eng). The authors present the photoelectron spectrum of CsO^- , recorded using 2.540 eV photons. This spectrum provides a direct measurement of the $X^2\Sigma^+ - A^2\Pi$ energy splitting in CsO, which is found to be 0.135 ± 0.025 eV. This work also establishes that the ground state of CsO^- is $^1\Sigma^+$. In addn., the adiabatic electron affinity of CsO is found to be 0.273 ± 0.012 eV, while the D_0 value for the $X^1\Sigma^+$ state of CsO^- (with respect to $\text{Cs} + \text{O}^-$) is found to be 1.84 ± 0.15 eV. Mol. parameter ests. for CsO^- are also extd. from the spectrum.

GO ($X^1\Sigma^+$)
(D_0 , u.n.)

C.A. 1994, 120, N 22

F: CsO

P: 3

132:42174

PM. 39937

1999

The microwave spectrum of the cesium monoxide CsO radical. Yamada, Chikashi; Hirota, Eizi
The Institute for Molecular Science Okazaki
444-8585, Japan J. Chem. Phys., 111(21),
9587-9592 (English) 1999 The microwave spectrum of
CsO was obsd. and analyzed, not only in the ground
vibrational state, but also in the $v = 1-3$ excited
vibrational sta The CsO radical was generated by the
reaction of N2O with Cs vapor, which produced by the
reaction of Li metal with CsCl at 500-530.degree..
The o spectra conform to those expected for a
2.SIGMA. diat. mol., establishing ground electronic
state of CsO to be of 2.SIGMA.. The obsd. rotational
a centrifugal distortion const. yielded the equil.
bond length and the harmonic vibrational frequency to
be 2.300,745(16) A and 356.78(11) cm-1, resp., based



C.A. 2000, 132

on the Born-Oppenheimer approxn. A careful examn. of the ob spectral pattern definitely concluded that the spin-rotation interaction const. was pos., at variance with the expectation from a simple $2.SIGMA./2.PI.$ 2-states interaction. This observation was interpreted by assuming pos. contributions from higher excited electronic states which superseded a neg. contribution from the $2.PI.$ lowest excited state; the latter state was responsible for the large dependence of the spin-rotation interaction const. on the vibrational quantum no. and was estd. from this vibrational dependence to be located at 1225 cm^{-1} above the ground electr state. In reverse to the spin-rotation splitting, the hyperfine splittin increases with the vibrational excitation; in the $v = 3$ state the hyperfi structure was found completely resolved. The hyperfine coupling consts. not vary much with the vibrational quantum no., the vibrational dependenc the hyperfine splitting was caused primarily by that of the spin-rotation splitting. The obsd. hyperfine interaction consts. indicated that CsO wa ionic mol.