

Ag - 0

O-Ag

crim 4824

1975

Kerr J. A., et al

(Do)

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

AgO₂

1981

Tang Kai A., et al.

Chem. Phys. Lett., 1981,
84, N2, 348-351.

precursor

(cur. Ag₄O₂ ; III)

Ag_4O_2

1981

6 Б36. Исследование методом ССП— $X\alpha$ —РВ хемосорбции кислорода на серебре. Tang Kai A., Jiang F. A MS $X\alpha$ SCF investigation of oxygen chemisorption on silver. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 84, № 2, 348—351. (англ.)

расчет

Методом ССП— $X\alpha$ рассеянных волн рассчитано электронное строение кластеров Ag_4O_2 и AgO_2 , моделирующих хемосорбцию кислорода на Пв Ag. В расчетах кластера Ag_4O_2 варьировали расстояние между молекулой O_2 и плоскостью, образованной 3 атомами Ag (4-й атом Ag находился под плоскостью на оси C_3), а также расстояние между атомами Ag и ближайшим к Пв атомом O (2-й атом O при этом располагался на одном и том же расстоянии от Пв). Показано, что при хемосорбции O_2 на междоузлии Пв Ag (111) молекула O_2 диссоциирует на 2 атома O, при этом кислород адсорбируется на Пв в атомной форме. Если молекула O_2 приближается к одиночному атому Ag (кластер AgO_2), то она сохраняется в виде двухатомной молекулы с длиной связи O—O, превышающей эксперим. длину связи в свободной молекуле O_2 , однако при этом хемосорбция молекулы O_2 на одиночном атоме Ag не происходит. И. А. Тополь



AgO_2

X. 1982, 19, № 6

AgO_3

1981

Teraulst D. E., et al.

J. Chem. Phys. 1981,
75(8), 4168-4169.

УК енергія
в матеріалі

(сер. AgO ; III).

AgO_2

Отпуск 15036

1982

24 Б1379. Промежуточные [состояния] в $\text{Ag}-\text{O}_2$ каталитической системе. Свидетельство [существования] несимметричной молекулы AgO_2 . Tevauli D. E., Smardzewski R. R., Urban M. W., Nakamoto K. Catalytic intermediates in the $\text{Ag}-\text{O}_2$ system. Evidence for a nonsymmetric AgO_2 molecule. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 577—578 (англ.)

ИК спектр

Для выяснения природы активности Ag Кт в р-ции окисления олефинов с помощью метода ИК-спектроскопии изучено взаимодействие O_2 с Ag . Для улучшения разрешения ИК-спектра и определения величин силовых констант для образующихся состояний при Ад O_2 на Ag использовался эффект стабилизации молекул AgO_2 в матрице Ag при $t \approx 10$ К, изотопный обмен и анализ нормальных координат молекулы. Анализ полученных ИК-спектров позволил сделать вывод о существовании на Pv несимм. молекул AgO_2 , а анализ

X. 1982, 19, N24

нормальных координат с использованием длин связей $O-O$ и $Ag-O$ равных 1,33 и 2,0 А, соотв., и угла $O-Ag-O$, равного 120° , позволил получить след. величины силовых констант: $F_{Ag-O}=1,8$; $F_{O-O}=5,34$ и $F_{AgO.O-O}=0,03$ мдин/А со средн. погрешностью в определении волнового числа равной $0,8 \text{ см}^{-1}$.

С. Б. Нижищенко

AgO_2

Оттиск 15036

1982

12 Д72. Каталитические промежуточные компоненты в $\text{Ag}-\text{O}_2$ -системе. Доказательство несимметричности молекулы AgO_2 . Catalytic intermediates in the $\text{Ag}-\text{O}_2$ system. Evidence for a nonsymmetric AgO_2 molecule. Tevault D. E., Smardzewski R. R., Urban M. W., Nakamoto K. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 577—578 (англ.)

Значительная доля молекул AgO_2 (I), образующихся при окислении атомов серебра, стабилизировалась в Ag -матрице при 10 К. ИК-спектр, снятый с помощью спектрофотометра в интервале длин волн 420—1100 cm^{-1} для разных изотопов $^{16,18}\text{O}$, позволил провести анализ в норм. координатах с использованием длин $\text{O}-\text{O}$ - и $\text{Ag}-\text{O}$ -связей 1,33 и 2,0 Å соответственно. Наилучшее согласие получено для угла между связями 120° , а изотопич. эффекты свидетельствуют о несимметрии I.

А. П. Зуев

спектр,
геометрия,
структура

Ф. 1982, 18, N 12

AgO_4^- [Om. 19355] 1984

Gutsev G. L., Boldyrev A. I.,

электро-
структура,
теорет.
расчет.

Chem. Phys. Lett., 1984,
108, N 3, 255-258.



AgD_2

(om. 20680)

1984.

Howard J. A., Sutcliffe R.,

Crekmp

J. Phys. Chem., 1984,
88, n 19, 4351-4354.

AgO_4^-

(om. 20924)

1985

AgO_4

Тучев Г. Л., Богданов А. Ч.,

Расчет
теплоты,
структур,
Ав

Журн. структур. хим.,
1985, 26, N 1, 22-26.

AgO_2

1986

10 Б1043. Теоретическое доказательство существования двух геометрических изомеров AgO_2 . Theoretical evidence for two geometrical isomers of AgO_2 . Illas F., Rubio J., Ricart J. M., Cabot P. L. «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, № 25, 7893—7897 (англ.)

М.П.

Методами ССП МО ЛКАО и конфигурац. взаимодействия (КВ) с использованием приближения неэмпирич. псевдопотенциала в расширенном валентном базисе гауссовых ф-ций рассчитана потенциальная Пв AgO_2

х. 1987, 19, ~ 10

(I) в основном состоянии. Показано, что молекула I имеет 2, геометрич. изомера симметрии C_{2v} и C_s . Разность их энергий всего 0,4 ккал/моль, C_s -изомер имеет меньшую энергию. Учет корреляц. эффектов сильно влияет на рассчитанные структурные параметры обоих изомеров, хотя результаты расчетов методами ССП и КВ приводят к одним и тем же качеств. выводам. На основе сопоставления эксперим. и теорет. данных сделан вывод, что в эксперименте наблюдается смесь 2 различных форм I, и, в зависимости от техники матричной изоляции, может быть обнаружена либо одна, либо др. форма I. И. А. Тополь

AgO_2

1986

5 Д27. Теоретическое обоснование существования двух геометрических изомеров AgO_2 . Theoretical evidence for two geometrical isomers of AgO_2 . Illas F., Rubio J., Ricart J. M., Cabot P. L. «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, № 25, 7893—7897 (англ.)

Впервые проведены неэмпирич. расчеты методом ССП молекулы AgO_2 . Для сокращения времени счета применены неэмпирич. псевдопотенциалы для описания остовных электронов Ag и O, причем для Ag использован релятив. псевдопотенциал. Валентные электроны описывались с помощью двойного экспоненц. дополненного поляризац. ф-циями базиса. Рассмотрены конфигурации $\text{OAgO}(\text{C}_{2v})$ и $\text{AgOO}(\text{C}_s)$. Выявлено сильное влияние электронных корреляций на получаемые геометрич. параметры. Найдено, что обе рассмотренные конфигурации отвечают минимумам на поверхности потенц. энер-

(м.п.)

сб. 1987, 18, 45

гин, причем разность энергий между ними $\sim 0,4$ ккал/
/моль (C_s более стабильна). Для $AgO_2(C_{2v})$:
 $r(Ag-O)=2,271$ Å, $r(O-O)=1,370$ Å, $LOAgO=35,1^\circ$,
для $AgO_2(C_s)$: $r(Ag-O)=2,111$ Å, $r(O-O)=1,312$ Å,
 $LOAgO=104,5^\circ$. Проведен расчет колебательных частот,
из которого следует, что $\nu_3 < 100$ см $^{-1}$, и в зависимости
от техники матричной изоляции в матрице могут при-
сутствовать разные изомеры AgO_2 , что приводит к неод-
нозначности интерпретации имеющихся экспериментов.

В. А. Куликов

AgO₂

1986

105: 232659m Theoretical evidence for two geometrical isomers of silver oxide (AgO₂). Illas, F.; Rubio, J.; Ricart, J. M.; Cabot, P. L. (Fac. Farm., Univ. Barcelona, Barcelona, Spain 08028). *J. Am. Chem. Soc.* 1986, 108(25), 7893-7 (Eng). By using nonempirical pseudopotentials and moderately large basis sets, SCF and CI calcns. show that AgO₂ presents 2 nearly degenerate structures of C_{2v} and C_s symmetry, resp. The ground state of these structures is found to be a ²A₂ and a ²A". While the SCF and the CI description are almost coincident, the effect of electron correlation on the geometrical parameters is quite important.

Дуонера,
V₀ окр. осм.,
неоп. парем

C. A. 1986, 105, N 26

AgO₂

(On. 25494)

1926

Illas F., Rubio J.,
Ricart J.M., et al.,

(meop.
pavem)

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N25,
7893 - 7897.

Ag(O₂)₂

[OM. 24619]

1986

Kasai P.H., Jones P.M.

ESR
exemp

J. Phys. Chem., 1986,
90, N 18, 4239-4245.

Ag(O₂) [Dm. 24619]

1986

Kasai P.H., Jones P.M.

ESR
chem

J. Phys. Chem., 1986,
90, N18, 4239-4245

$\text{Hg}(\text{O}_2)_2$

1986

Kasai Paul H.,
Jones Paul M.

et. al.

J. Phys. Chem., 1986,
90, N 18, 4239-4245.

(see  LiO_2 ; III)

AgO₂

1986

Kasai Paul H.,
Jones Paul M.

J. Phys. Chem., 1986, 90,
N 18, 4239-4245.

(corr.  CuO₂; III)

AgxOy

lotn. 27052/

1987

Woodward R., Le P. N.,
Temmen M., et al.,

спектр
хемиско-
мисесу.

J. Phys. Chem., 1987,
91, 2637-2645.

AgO₂

от 34359

1990

11 Д128. Описание низколежащих состояний AgO₂ методом конфигурационного взаимодействия на основе псевдопотенциала. A CI pseudopotential-based description of the low-lying states of AgO₂ / Bravo G., Flores-Riveros A., Novaro O. // Int. J. Quantum Chem.— 1990. — 37, № 6.— С. 785—796.— Англ.

М. П.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием модели псевдопотенциала и двухэкспонентного базиса гауссовых ф-ций с включением поляризационных ф-ций исследовано электронное строение AgO₂ (I) в основном и нескольких низколежащих состояниях. Приведены равновесная геометрия, дипольные моменты, распределения электронной плотности. В согласии с эксперим. данными подтверждено наличие двух стабильных изомеров с близкими энергиями. Обсуждено их взаимопревращение и реакция $\text{Ag} + \text{O}_2 \rightarrow \text{I}$. В основном состоянии I представляет собой ионную пару $\text{Ag}^+ \text{O}_2^-$, но диссоциация происходит на нейонные частицы. Обсуждены каталитич. процессы для кислорода, адсорбированного на поверхностях серебра.

В. Л. Лебедев

ф. 1990, № 11

Okunev Ag

1992

Fink Lothar,

Troemel M.

Сб 836 Ze Z. Kristallogr. 1992,
4 De 200 (3-4), 169-75.

(ver. Okunev Rep; III)

Ag + O₂

[DM. 40790]

2001

UK 6

Wang X., Andrews L.,
J. Phys. Chem. A 2001,

manuscript,

105,

5812 - 5822.

M. N.

$Ag_n O^+$, $Ag_n O_2^+$ ($n = 2 - 9$)

Ch. 41405

2003

(M.H.) Schmidt M., Cahuzac Ph., Brodignac C.,
Hai-Ping Cheng.

J. Chem. Phys., 2003, 118, N 24, p. 10956 - 10962
The stability of free and oxidized
silver clusters.