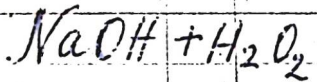


Na-O-H

1950



Simon A; et al:

"Z. Anorg. Chem"

1950, 262, 192-211

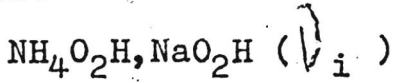
$\text{I}_2$

Bsp-5303-1

$\text{H}_2\text{O}_2$

1959

521



Knop O., Gignere P.,

Canad. J. Chem., 1959, 37, N 10,  
1794-1797

Инфракрасный спектр перекиси ...

J

есть ф.к

X-5826

1967

$\text{Cs}_2\text{O}$ ,  $\text{Cs}_2\text{O}_2$ ,  $\text{CsOH}$ ,  $\text{Cs}_2(\text{OH})_2$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ,  
 $\text{Cs}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{NaOH}$ ,  $\text{Na}_2(\text{OH})_2$  (Di, строение)

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

J. Chem. Phys., 1967, 46, 605-608

РЖХ, 1967, 21586 . . . IO есть ори.



$\Delta H_{acv}, E, z$  ( $Li^+(H_2O)_n, Na^+(H_2O)_n, NH_4^+(H_2O)_n,$   
 $CH_3NH_3^+(H_2O)_n, (CH_3)_2NH_2^+(H_2O)_n, (CH_3)_3NH^+(H_2O)_n,$   
 $ye n = 1-4$ ) 1971  
10 13 14 6581

Burton R. E., Daly J.,

Trans. Faraday Soc., 1971, 67, 15, 1219-1225  
(2217)

Molecular orbital studies in ion hydration.  
Part 3. Ion-solvent interaction.

RuXia, 1971, 24537

20

10

$\frac{[\text{Li}(\text{H}_2\text{O})]^+; [\text{F}(\text{H}_2\text{O})]^-;}{[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})]^+; [\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})]^-} - \left( \begin{array}{l} \text{кв. меа.} \\ \text{рацим} \end{array} \right) \begin{array}{r} 87264 \\ 1011 \end{array} \begin{array}{l} 1972 \\ \end{array}$

Breitschwerdt K.G., Kistenmacher H.

Chem. Phys. Lett., 1972, 14, N2, 288-  
- 92 (ans.)

Ab initio, semiempirical, and  
classical calculations of simple  
hydrated ions.

10

8

CA, 1972, 47, N8, 525116

$\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})$

14 Б26. Исследование строения молекулярных комплексов. II. Энергетические поверхности для молекулы воды в поле натриевого или калиевого катиона. Kistenmacher H., Popkie H., Clementi E. Study of the structure of molecular complexes. II. Energy surfaces for a water molecule in the field of a sodium or potassium cation. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 4, 1689—1699: (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в тех же приближениях, что и в пред. работе (см. РЖХим, 1973, 3Б52) исследовано электронное строение  $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})$  (I).

1973

Эл. спектр

(ΔH<sub>f</sub>)

Х. 1973 № 14

ени  
ыва

(+5)



и  $K^+(H_2O)$  (II) и результаты сопоставлены с данными пред. работы для  $Li^+(H_2O)$  (III). Использован базис гауссовых функций, 13 s-типа, 8 p-типа и 1 d-типа для  $Na^+$  и 17, 11 и 1 для  $K^+$ , сгруппированных в 7,4,1 и 11,7,1 соотв., а для  $H_2O$  тот же базис, что и в расчете III. Рассчитаны равновесная геометрия, энергетические характеристики, потенциальные Пв, проведен анализ полной энергии путем разбиения на компоненты. Энтальпии образования I—III найдены равными (в скобках опытные данные) 23,2 (24,0), 15,7 (17,9), 33,6 (34,0) ккал/моль, соотв., равновесные расстояния  $M^+—O$  4,25; 5,08 и 3,58 ат. ед. Обнаружено, что связь  $M^+—H_2O$  имеет электростатич. характер и в основном обусловлена переносом заряда в  $H_2O$  с атомов H на атом O (0,144; 0,114 и 0,186 для I—III соотв.). Исследование потенциальных Пв показало, что молекула  $H_2O$  представляет собой почти сферич. объект, отталкивательный по отношению к катиону при его подходе со стороны атомов H и притягивательный — со стороны атома O. Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП и показано, что плохие результаты метода ППДП связаны с пренебрежением 3- и 4-центровыми интегралами, что приводит для рассмотренных систем к недооценке отталкивающих взаимодействий.


В. Л. Лавров

$\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})$ ;  $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})$ ;  $\text{Li}^+(\text{H}_2\text{O})$  (  $\Delta H_f$ , м.н.,  
теор. эмпирич.,  
расчет ) 1973

Kistenmacher H., Popkie

H., Clementi E.,

J. Chem. Phys., 1973, 58, N4, 1689-1699  
(англ.)

• Study of the structure of molecular complexes. II. Energy surfaces for a water molecule in the field of a sodium  or potassium cation

ВХХХХ, 1973, 14526

10, 11

1973

 $\text{Na}^+$ 
 $\text{H}_2\text{O}$ 

(контр.) Kistenmacher H, et. al.

 "J Chem. Phys" 1973, 59, №11,  
 5842-5848 (англ)

 $\text{Li}; \text{H}_2\text{O}$ 

 "Исследование строения  
 комплексов ...

 (см  $\text{Li}^+ \dots \text{H}_2\text{O}; \text{III}$ )

41014.8707  
Ch, Ph, TC

40892 02  
 $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})$

1974  
2615

Kistenmacher H., Popkie H., Clementi E.  
Study of the structure of molecular complexes. VIII. Small clusters of water molecules surrounding  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{F}^-$ , and  $\text{Cl}^-$  ions.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 3, 799-815

(англ.) 0211 пик

181 181 - 203 214 - ВИНТИ

$\text{Na}(\text{H}_2\text{O})^+$

(empyrum, chess)

1974

Schuster P.

обзор

Struct Water Aqueous  
Solutions Proc Int Symp.  
1973(1974) 141-67 (eng)

(cell  $(\text{H}_2\text{O})_2$ ; III)



H<sub>2</sub>O-NaOH

Franck & U.

1975

"Rev. Phys Chem Jap"

di

1975, Spec. Issue, 600-1

(amu)

(cu H<sub>2</sub>O; III)

$(\text{Ca OH})_2$

Катин Е. А.

1975

Отчет ВУТХ за

1971-1975г.

$D_i$   
спектр в  
матрице  
геом. парам.

"Спектроскопические исследования атомов и молекул методом матричной изоляции"

70420.54

Me1, Ch, TC

29148

1976

Na<sup>+</sup>/M<sub>2</sub>O

12011.09-1500

кв. 100X пр. 17 \* 15-18250

к р. N 70420.50

Abraham Farid F., Mruzik Michael R., Pound G. Marshall. Thermodynamics and structure of hydrated halide and alkali ions. "Faraday Discuss. Chem. Soc.", 1976, N 61, 34-47. Discuss., 63-76

(англ.)

817

826

848

0857

ЛНН

ВИНИТИ

Кв. мет. факт

60510.1223

Ch. TC

№<sup>41197</sup><sub>n</sub>(H<sub>2</sub>O)

1976  
\*У-12810

Spears Kenneth G., Kim Sang Hyung.

Hydration structures for alkali (+) ions.

"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N7, 673-679 (англ.)

06 15 ЛМК

$(\text{NaOH})_2$

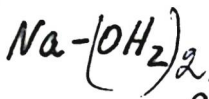
1948

Гризева А.А.

Диссерт. на соискан. ученой  
степени кандидата физ.-мат.  
наук. Л., ГИИХ, 1948

спектр в  
матрице,  
номер

4076



Третьяк В.М. и др.

1978

Ис. структур. химии,  
1978, 19, №, 594-599.

Ис. структур.;  
геометрия.



(ис.  $\text{H}_2\text{O}$ ) III

1979

$\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$

$\text{K}^+ - \text{H}_2\text{O}$

$\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$

kb. scilicet  
paucis

(+2)  $\boxtimes$



92: 116908f Intermolecular interactions: reproduction of the results of ab initio supermolecule computations by an additive procedure. Gresh, N.; Claverie, P.; Pullman, A. (Lab. Biochim. Theor., Inst. Biol. Phys. Chim., 75005 Paris, Fr.).

*Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1979, 13, 243-53 (Eng). Additive systematics for the rapid computation of intermol. interactions are developed. The interaction energy is computed as a sum of 4 components. The electrostatic component is obtained by using the overlap multipole expansion of the SCF d. distribution of the isolated ligands, and the other components (polarization, dispersion, and repulsive) are calibrated in order to reproduce the results of *ab initio* SCF computations on the systems  $\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{K}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$ , and  $\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$ . A series of cation-ligand interactions is then investigated, and the results reproduce satisfactorily both the values of the interaction energies and the essential features of the binding.

C.A. 1980. 92 v 14

$H_2O-Na^+$

Lipinski J.

1979

кв. учр .

факульт

химии

Adv. Mol. Relaxation  
Interact. Processes

1979, 14 (4), 297 - 302

(см.  $C_2H_4-Cl_2$ ; III)



Na...H<sub>2</sub>O

Lommuu 9438 | 1980

Berthod H, et al.

жүзүсү

сезу

кб. ссх.

факт

Chem. Phys. Lett;  
1980, 70 (3), 434-37



NaOH

1980

ab initio расчёт,  
у, Vi, расчёт.  
анализом.

Solomonik V. G.,  
Pogrebnya T. P.

Deposited Dec. 1980,  
SPSTL 857 klp-D80,  
7pp.

● (сер. Li OH; III)

H<sub>2</sub>O-Na

1982

Bentley John.

расшии  
основного  
и некоторых  
возбуждеи.  
соединеи.

J. Amer. Chem. Soc.,  
1982, 104, N10, 2754'-  
-2759.

● (См. H<sub>2</sub>O-Li; III)

Na-OH<sub>2</sub>

1982

Bentley John.

теоретич.  
практич.

J. Am. Chem. Soc. 1982,  
104 (10), 2754-2759.



(сер. A-OH<sub>2</sub>; III)

$\text{Na}_x \dots \text{OH}_2$   
 $\text{HNaOH}$

1982

Hauge R. H., Kauf-  
fman J. W., et al.

ИК спектр  
в  
матрице

ACS Symp. Ser. 1982,  
179, 363 - 376.

● (сер.  $\text{Li}_x \dots \text{OH}_2$ , III)

1982

Na...OH<sub>2</sub>

Jordan K.D., Kurtz M.A.

Metal Bond and Interact.

High Temp. Syst. Emphasis

Alkali Metals. Symp. 181 Meet.

Amer. Chem. Soc., Atlanta,

Ga, March 31-Apr. 3, 1981.

Washington, D.C., 1982, 377-

-393.

(see Li...OH<sub>2</sub>; III)

теорет.  
расчет  
структур,  
энергии  
связи,  
темпер.  
реакций

$\text{Na}(\text{OH})_2$

1982

Lutz H.D., Eckers W.,  
et al.

vi

*J. mol. Struct.*, 1982,  
80, 221-224.

(see  $\text{Li OH}$ ; iii)

NaOH

1982

Lutz H.D., Eckers W.,  
et al.

vi  
Z. Mol. Spectr., 1982,  
80, 221-224.

●  
(cor. LiOH; III)



$\text{Na}^+ \text{OH}_2$

1982

197: 169275g Analysis of the structure of ion-molecule interactions in sodium, magnesium, and aluminum mono-hydrates. Tret'yak, V. M.; Tulub, A. V.; Baranovskii, V. I. (Leningr. Univ., Leningrad, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1982, 23(4); 148-50 (Russ). The various components of potential energy of  $\text{Na}^+ \text{OH}_2$ ,  $\text{Mg}^{2+} \text{OH}_2$ , and  $\text{Al}^{3+} \text{OH}_2$  were calcd. within the Hartree-Fock-Roothaan method by using contracted GTO basis sets. The bonding energy in  $\text{Na}^+ \text{OH}_2$  is detd. mainly by electrostatic and exchange interactions, whereas in  $\text{Mg}^{2+} \text{OH}_2$  and  $\text{Al}^{3+} \text{OH}_2$  there is an appreciable increase in the role of delocalization interactions. The electron d. distribution along  $\text{M}^{m+} \text{OH}_2$  bond was also calcd. A charge transfer ( $\leq 0.08$  at. units) toward the cations is indicated.

сometus.

q-uel,

неоп. pac-

rem

(+2)

$\text{Mg}^{2+} \text{OH}_2$ ,  $\text{Al}^{3+} \text{OH}_2$

C. A. 1982, 97, N 20

1983

~~от 17452~~  
от 17752

$Na^+(H_2D)_n$

$\Delta i, \Delta j$

Бекмуратова Ф.М.,

Узб. Акад. Узд. ССР, сер. физ.-  
мат., 1983, №6, 59.

$\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$

1983

| 24 Б80. Нормальные колебания гидратов щелочных и галогенных ионов. Бекмуратова Э. М., Пожаров С. Л., Хабибуллаев Н. К. «Ж. физ. химии», 1983, 57, № 7, 1798—1800

В рамках электростатич. модели ионного кластера вычислены частоты нормальных колебаний комплексов  $\text{M}^+(\text{H}_2\text{O})_n$  и  $\text{X}^-(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $\text{M}^+ \equiv \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Rb}^+, \text{Cs}^+$ ;  $\text{X}^- \equiv \text{F}^-, \text{Cl}^-, \text{Br}^-, \text{I}^-$ ) с числом молекул  $n=1+6$ , к-рые можно использовать при определении термодинамич. параметров р-ций кластеризации. Автореферат

$v_i$

(47) X

X. 1983, 19, N 24

$\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$

1983

Bounds D. G.,  
Bounds P. J.

Mol. Phys., 1983, 50,  
N1, 25-32.

по темец.  
поверхн.

(сер. ●  $\text{Li}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ; III)

Na-OH<sub>2</sub>

1984

NaOH<sub>2</sub>-OH<sub>2</sub>

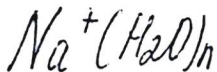
Baranovskii V.I.,  
Sizova O.V., et al.

теор.  
расчёты

Zh. Obshch. Khim.

1984, 54(3), 507-11.

(сер. Li-OH<sub>2</sub>; III)



1984

100: 182301n Force constants of hydrates of alkali and halide ions. Bekmuratova, E. M.; Pozharov, S. L.; Khabibullaev, P. K. (USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1984, 58(1), 133-8 (Russ). Force consts. of the clusters  $\text{M}^+(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $\text{M} = \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ ) and  $\text{X}^-(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) were calcd. for  $n = 1-6$  using an electrostatic model of ionic clusters (B. and P., 1973).

coll. NDCM.

(77) ~~77~~C. A. 1984, 100, N 22

$Na^+(H_2O)_n$

1984

5 Д62. Силовые постоянные гидратов щелочных и галогенных ионов. Бекмуратова Э. М., Пожаров С. Л., Хабибуллаев П. К. «Ж. физ. химии», 1984, 58, № 1, 133—138

В рамках электростатич. модели ионного кластера вычислены аналитически и численно силовые постоянные кластеров  $M^+(H_2O)_n$  и  $X^-(H_2O)_n$  ( $M^+ = Na^+, K^+, Rb^+, Cs^+$ ;  $X^- = F^-, Cl^-, Br^-, J^-$ ) с числом молекул от одного до шести. Полученные данные необходимы для расчета частот норм. колебаний.

$\nu_i$ , см<sup>-1</sup> пост.

Автореферат

(17) ☒

ср. 1984, 18, н.б.

Na<sup>+</sup>/H<sub>2</sub>O

[Om: 18986]

1984

Dacre P.D.,

ab initio  
parram  
nomeruz.  
poverxno-  
cmu

Mol. Phys., 1984,  
51, N 3, 633-659.



Na(OH)<sub>2</sub><sup>-</sup>

[Om. 18226]

1984

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

Депониров. рукопись,  
ИЗНИХП-А83, Черкассы,  
1984.



и.п.

Наз ОИТ

[ом. 18226]

1984

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

и.п. Денюшев. рукопись,  
НЗ71хП-Д83, Черкассы,  
1984. ●

$Na_2(OH)_3^-$

[om. 18226]

1984

$Na_3(OH)_2^+$

$Na_3(OH)_4^-$

$Na_4(OH)_3^+$

Кудим Л. С., Бурдуков-  
ская Г. Г. и др.,

Депониров. рукописей,  
ИЗХИЛ-ДБЗ, Черкасск,  
1984. ●

м.н.

$\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$

1984

11 Д63. Квантовохимические исследования ион-молекулярных взаимодействий. Низкочастотные колебания, геометрия и энергетика. Quantum chemical investigation on ion-molecule interactions. Low frequency vibrations, geometry & energetics. Murthy A. S. N., Ranganathan Shoba, Bhardwaj A. P. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1984, 22, № 7, 393—397 (англ.)

колебание,  
структура,  
 $\rho_i$

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП в варианте Пулая (см. Тогок F., Pulay P., «J. Mol. Struct.», 1978, 46, 43) рассчитаны силовые постоянные низкочастотных колебаний (СП), равновесная геометрия, распределения электронной плотности и энергии стабилизации (ЭС) комплексов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Mg}^{2+}$  с  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ , формамидом,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{HCN}$  и бензолом состава 1:1. СП также рассчитаны с помощью метода коэф. влияния. Обе схемы удовлетворительно предсказывают величины СП. Полученные результаты сопо-

41

ср. 1985, 18, 11

ставлены с литературными данными для комплексов  $\text{Li}^+$ . Обнаружено, что расстояния металл — лиганд меняются в интервале 2,4—2,9 А. ЭС (видимо, завышенные), меняются в интервале 125,5—1858,0 кДж/моль. Отмечено, что хотя электростатич. взаимодействия преобладают в рассмотренных системах, эффекты переноса заряда также существенны. Высказано предположение, что в дальней УФ-области спектров поглощения этих комплексов должны наблюдаться полосы переноса заряда. ЭС и величины переноса заряда убывают в ряду  $\text{Mg}^{2+} > \text{Li}^+ > \text{Na}^+$ , что совпадает с ходом отношений заряда к ионному радиусу для этих ионов. Библиограф. 30. В. Л. Лебедев

Гидроксиды Na 1984

Рабибиди Н.Т., Абам-  
ким Ю.Т., и др.

расчёт  
и п.

Ж. Неорган. химии,  
1984, 29, N12, 3009-3013.

(см. Гидроксиды Li ; III)

$\text{HONa}_2$

1984

Wuerthwein E. U., Schleyer  
Paell V. R.

meop.  
pacrim.

J. Am. Chem. Soc. 1984,  
106(23), 6973-8.

(see  $\text{ONa}_3$ ; III)

$\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$

1985

Д175. Исследование структуры воды вокруг ионов  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{Ni}^{++}$  и  $\text{Cl}^-$  методом молекулярной динамики. A molecular dynamics study of the structure of water around ions  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{Ni}^{++}$  and  $\text{Cl}^-$ . Bounds D. G. «Mol. Phys.», 1985, 54, № 6, 1335—1355 (англ.)

В расчетах методом молекулярной динамики структуры воды вокруг ионов  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{Ni}^{++}$  и  $\text{Cl}^-$  для взаимодействия между молекулами воды применялся потенциал (Jorgensen W. L. et al. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, 926). Для взаимодействий  $\text{Ca}^{++}/\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ni}^{++}/\text{H}_2\text{O}$  потенциалы получились неэмпирич. методом с применением метода ССП и недавно разработанного градиентного метода. В случаях, когда имелись эксперим. данные, положения ионов, соответствующие координационным сферам, геометрия расположения ион—молекула воды и координационные числа находятся в удовлетворительном соответствии. Авторы полагают, что необходимы более точные измерения координационного числа  $\text{Ni}^{++}$  в разбавленном растворе нейтральным методом.

расчет  
структуры

(75)

ср. 1986, 18, 111

Резюме



$\text{Na}^+\text{OH}_2$

1985

Cachave R.E., Villar  
H.O., et al.

теор.  
расчет  
энергии  
взаимог.

Am. Assoc. Quim. Argent.  
1985, 73 (3), 261-8.

● (сер.  $\text{Li}^+\text{OH}_2$ ; III)

$\text{Na}_2\text{OH}$  Pogrebnaia T. P., 1986  
Solomonik V. G., et al.

есть.  
нось,  
Vi, меор.  
раерім

Theor. Eksp. Khim,  
1986, 22 (6), 724-8.

(ср. ●  $\text{Li}_2\text{OH}$ ; III)

$\text{NaOH}_2$

1986

105: 180975q Pre sodium-water clusters. Schulz, C. P.; Haugstaetter, R.; Tittes, H. U.; Hertel, I. V. (Inst. Molekulphys., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Phys. Rev. Lett.* 1986, 57(14), 1703-6 (Eng). Neutral Na-water clusters were formed in a pickup source, injection of a beam of Na atoms into the expansion zone of a pulsed nozzle-jet beam of water vapor seeded into an Ar carrier gas. They are detected by near-UV 1-photon ionization with a pulsed laser and time-of-flight mass spectroscopy.  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ -cluster-ion signals up to  $n = 12$  are seen,  $n = 4$  showing a very pronounced abundance. The ionization potential of  $\text{NaOH}_2$  was  $4.379 \pm 0.002$  eV.

(2)

C.A. 1986, 105, N20

Na...OH<sub>2</sub>

077, 26399

1987

73194h Theoretical investigation of sodium and magnesium  
 complexes with water. Curtiss, L. A.; Kraka, E.; Gauss, J.;  
 Werner, D. (Univ. Koeln, D-5000 Cologne, 41 Fed. Rep. Ger.). *J.*  
*Phys. Chem.* 1987, 91(5), 1080-4 (Eng). The structures, energetics,  
 and vibrational frequencies of the Na...OH<sub>2</sub> and Mg...OH<sub>2</sub> complexes  
 are examd. by ab initio MO methods, including the effects of  
 electron correlation by Moller-Plesset perturbation theory. The  
 Na...OH<sub>2</sub> complex is predicted to be nonplanar with a Na...O distance  
 of 2.343 Å and an energy of dissocn. into Na and H<sub>2</sub>O of 7.37  
 kcal/mol. The Mg...OH<sub>2</sub> complex is predicted to be nonplanar with a  
 Mg...O distance of 2.321 Å and a dissocn. energy of 3.82 kcal/mol.  
 Electron correlation effects are necessary to obtain significant binding  
 between Mg and H<sub>2</sub>O. The chem. bonding is analyzed in terms of  
 electron densities. Considerable charge polarization of the  
 electron d. on the metal atom was found.

сложная,  
 хлоридная,  
 Vi, Do,

неоп. фазем

C.A. 1987, 106, N 10



Mg...OH<sub>2</sub>

$\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$   
( $n=1-4$ )

1987

12 Д173. Теоретическое исследование кластеров  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ . Энергии ионизации и возбуждения. Theoretical studies of sodium water clusters: their ionization and excitation energies / Kestner Neil R., Dhar S. // Large Finite Syst.: Proc. 20th Symp. Quant. Chem. and Biochem., Jerusalem, May 11-14, 1987.— Dordrecht etc., 1987.— С. 209-215.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

Проведены неэмпирич. расчеты с большим базисом кластеров  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n=1-4$ ). Для потенциалов ионизации кластеров с  $n=0-4$  получены соответственно следующие величины (в эВ): 4,951; 4,099; 5,531; 3,025; 2,445. Энергии диссоциации кластеров, определяемые как разности энергии кластера  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$  и энергии кластера, состоящего из молекул воды для  $n=1-4$ , соответственно равны (в эВ); 0,164; 0,390;

теорет.  
расчет

ф. 1989, № 12

0,698; 1,331. Рассчитаны также структурные характеристики рассматриваемых кластеров. Приведены также энергии диссоциации заряженных кластеров. Получено хорошее согласие с имеющимися эксперим. данными.

Г. К.

Na · H<sub>2</sub>O

1987

теор. расчет  
I, ст. 109.

109: 61534t Theoretical studies of sodium water clusters: their ionization and excitation energies. Kestner, Neil R.; Dhar, S. (Chem. Dep., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA 70803 USA). *Jerusalem Symp. Quantum Chem. Biochem.* 1987, 20(Large Finite Syst.), 209-15 (Eng). Large basis set ab initio calcns. of Na(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> clusters with n = 1 to 4 were performed. The Na-H<sub>2</sub>O cluster yields an ionization potential of 4.10 eV (SCF) or 4.34 eV (MP2) in excellent agreement with the exptl. value of 4.379 eV. Energetic and structural details for the larger clusters are also presented.

C.A. 1988, 109, N 8

Na·H<sub>2</sub>O

On 27844 1987

107: 245479u IR spectra of complexes of sodium, potassium and cesium with water in solid argon. Suzer, Sefik; Andrea Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA) *Chem. Phys. Lett.* 1987, 140(3), 300-5 (Eng). One-to-one complexes between Na, K and Cs atoms and H<sub>2</sub>O were studied by using matrix IR spectroscopy. Perturbed water submol. vibrations were obsd. in the bending and stretching regions for each complex. The perturbed stretching vibration is assigned to the totally sym. stretching mode ( $\nu_1$ ) of the H<sub>2</sub>O submol. in the complex based on isotopic shifts. In both regions, the shift is largest for the Cs complex, and the shift decreases for the Na and K complexes, but increases again for the Cs complex. The perturbed stretching mode is substantially intensified when compared to the perturbed bending mode. Intensification of the  $\nu_1$  mode steadily increases down the alkali series and is explained by charge-transfer considerations.

UK chempr  
& manuscript

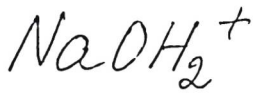
(+2)



K·H<sub>2</sub>O, Cs·H<sub>2</sub>O

c.A. 1987, 107, N 26





1987

Гретько В. М.,

Щербаев Ю. Ф. и др.

л. п.

Пробл. соврем. химии коор-  
динац. соед. (Ленинград),  
1987, № 74-87.

(см.  $\text{LiH}_2^+$ ; III)

$\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$


1988

Davy R. D., Hall M. B.

Inorg. Chem., 1988, 27,

N 8, 1417 - 1421.

емрук-  
мура

(,  $\text{Li}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; IV)

$\text{HNaO}^+$   
( $\text{NaOH}^+$ )

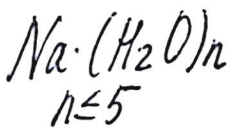
Com. 30490

1988

Jacox M.E.,

Ti, Di;

J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1988, 17, n2, 288.



1988

Schulz C.P., Haugstaet-  
ter R., et al.,  
Z. Phys. D: At. Mol. Clus-  
ters 1988, 10(2), 279-90.

(9) Free sodium-water clusters:  
photoionization studies in a pulsed  
molecular beam source.

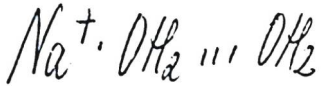
C.A. 1989, 110, N6, 47 899e

Na<sup>+</sup> " OH<sup>-</sup> lot. 30303 1988

Шевардина Л. Б.,  
Тимчук В. в.

Энергия  
связи,  
э

ж. структ. химии,  
1988, 29, N 4, 37-42.



(DM. 28 536)

1988

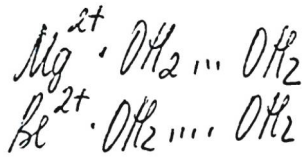
109: 197588w Quantum-chemical study of the structure of a water dimer coordinated to the  $\text{M}^{n+} \cdot \text{OH}_2 \cdots \text{OH}_2$  cation ( $\text{M}^{n+} =$  sodium(1+), magnesium(2+), beryllium(2+), aluminum(3+). Sizova, O. V.; Baranovskii, V. I. (Leningr. Gos. Univ., Leningrad, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1988, 29(1), 168-70 (Russ). The structure of a water dimer coordinated to a  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{2+}$ , or  $\text{Al}^{3+}$  ion was optimized from MO SCF calcns. using the GAUSSIAN-80 program. The system was constrained to planar geometry and equal OOH-angles. The O-O distance is smaller than in the uncoordinated water dimer and decreases in the order  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{2+}$ .

снруктура

(+2)



C.A. 1988, 109, N 2:2



$\text{Na}_2\text{OH}^-$

(DM-32048) 30387 1988

гладетр.,  
структура,  
сид. поле,  
колебат.  
спектрот,  
расчетот

Соловьев В.Б.,

Слезнаев В.В. и др.

Ж. Структур. Ионизм,  
1988, 29, N5, 22-31.

Na<sup>+</sup>-H<sub>2</sub>O

[OM. 32422]

1989

Трунгерская Е. В., Шапош-  
ник В. А.,

ВОН

Оптика и спектроскопия,  
1989, 67, N1, 42-46.




$\text{Na}^+ - \text{H}_2\text{O}$

1989

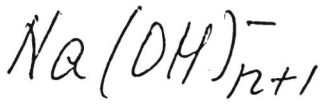
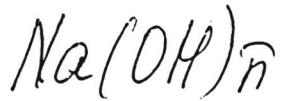
Бутырская Е. В.,  
Шапошников В. А.

Оптика и спектроскопия. 1989. 67, №4.  
С. 800 - 804.

и.п.

(сер.   $\text{Li}^+ - \text{H}_2\text{O}$ ; III)

1990



Погребная Г. Г.,  
Соломонович В. Г.

Сел. посей.,  
гастотта  
керш. колед.,  
рачѣт

Молекула: структура.  
Зваренова, 1990. с. 59-71.



$\text{Na}(\text{OH})_2^-$  1990

Позребная Г. Г.,  
Соломошкин В. Г.

л. п.

Молекулярная структура.  
Иваново, 1990. с. 59-71.

(сер. ●  $\text{LiOH}$ ; III)



1990

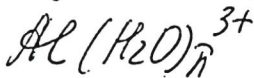
$$n = 1, 2, 3, 4, 6$$

114: 12337a A quantum chemical investigation on the hydrates of sodium, magnesium and aluminum ions. Probst, Michael M. (Inst. Anorg. Anal. Chem., Univ. Innsbruck, A-6020 Innsbruck, Austria). *THEOCHEM* 1990, 67(1-2), 45-55 (Eng). Calcns. on the complexes  $\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n$  with M being  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  or  $\text{Al}^{3+}$  and  $n = 1, 2, 3, 4$  or  $6$  were performed using the Hartree-Fock method. With fully optimized geometries, the vibrational frequencies of the water mols. in the complexes were calcd. The dependence of geometry, vibrational frequencies and water-cation interaction energies on coordination no. and ionic charge of the complexes is discussed and compared with expts.

mainem  
konempuu,

Di

(42)



C.A. 1991, 114, N 2

1991

$NaH_2O^+$   
 $Na(H_2O)_2^+$

18 Б1067. Теоретическое изучение  $Na(H_2O)_n^+$  ( $n=1-4$ ). A theoretical study of  $Na(H_2O)_n^+$  ( $n=1-4$ ) / Bauschlicher Charles W. (Jr), Langhoff Stephen R., Partidge Harry, Rice Julia E., Komornicki Andrew // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 7.— С. 5142—5148.— Англ.

жесткие  
связи, колебл  
гастоме  
интеракции  
теорет. расч

В приближении ССП и теории возмущений Мёллера—Плессета МП2 оптимизированы структуры и рассчитаны энергии связи, колебат. частоты и интенсивности переходов в ИК-спектрах для комплексов  $Na(H_2O)_n^+$ , имеющих достаточно высокую симметрию:  $NaH_2O^+—C_{2v}$ ,  $Na(H_2O)_2^+—D_{2d}$ ,  $Na(H_2O)_3^+—D_3$  и  $Na(H_2O)_4^+—S_4$ . Связывание в  $Na(H_2O)_n^+$  преимущественно электростатическое, и геометрия молекулы  $H_2O$  при вхождении в координац. сферу  $Na^+$  практически не изменяется. При увеличении  $n$  отталкивание между лигандами усиливается, длина связи  $Na—O$  увеличивается, а ее энергия (на одну молекулу) уменьшается. Теория хорошо согласуется с экспериментом; наибольшее

X. 1992, N 18.

расхождение составляет 1,4 ккал/моль. Для сравнения  
рассчитаны энергии связи в комплексах  $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_n^+$ ,  
 $n=1-4$ , и в комплексах, где  $\text{Na}^+$  заменен точечным  
зарядом.

Ю. В. Новаковская



$H_2O \cdot Na^+$

1991

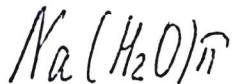
3 Д65. Неэмпирические исследования функции потенциальной энергии и вращательно-колебательных энергий  $H_2O \cdot Na^+$ . An ab initio investigation of the potential energy function and rotation-vibration energies of  $H_2O \cdot Na^+$  / Spirko Vladimir, Daadoch Nadim M., Jensen Hans Jørgen Aa, Jørgensen Poul, Helgaker Trygve // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 185, № 3—4.— С. 265—269.— Англ.

Для основного электронного состояния комплекса  $H_2O \cdot Na^+$  в 9 точках проведены неэмпирич. расчеты в приближении МК ССП энергий молекулы, градиентов энергии и гессианов. Для 9 геометрий получены величины энергий вплоть до  $2000 \text{ см}^{-1}$  от энергии равновесного состояния. Рассчитаны также 30 первых производных и 108 вторых. По этим данным восстановлена поверхность потенц. энергии. С использованием приближенных гамильтонианов получены колебательные и вращательные энергии. Величины этих энергий могут быть использованы для эксперим. идентификации комплексов  $H_2O \cdot Na^+$  в молекулярной спектроскопии высокого разрешения. Влияние ионов на структуру молекул представляет большой интерес для химии растворов и биохимии.

М.П.

Ф. 1992, № 3.

1993



$$1 \leq n \leq 8$$

(*J*, *meop.*  
*vacuum*)

118: 198732m Hydration of sodium in water clusters. Barnett, R. N.; Landman, Uzi (Sch. Phys., Georgia Inst. Technol., Atlanta, CA 30332 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1993, 70(12), 1775-8 (Eng). Hydration of sodium in water clusters,  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$  with  $1 \leq n \leq 8$ , was studied by using nonlocal pseudopotentials, and local-spin-d.-functional theory with exchange-correlation gradient corrections. Addn. of water mols. to an Na atom resulted in a successive decrease in the

ionization potential, with a marked reduced variation for  $n > 4$ . This reflected the formation of a mol. shell about the Na for  $n \sim 4$ , accompanied by expulsion of the metal valence electron from the hydration cavity and its delocalization in a "surface Rydberg-like state."

C.A. 1993, 118, N20



Na (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>

1993

119: 56582j Structures, stabilities and ionization potentials of sodium hydrate (Na(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>) and sodium ammoniate (Na(NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>) (n = 1-6) clusters. An ab initio MO study. Hashimoto, Kenro; He, Shaoren; Morokuma, Keiji (Institute for Molecular Science, Myodaiji, Okazaki, Japan 444). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 206(1-4), 297-304 (Eng). The structure and stability of the title clusters have been calcd. at the HF/3-21G level. For n ≥ 4 Na(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> is a surface complex, where Na atom tends to be situated on the surface of (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> cluster. Na(NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub> is an inclusion complex where Na is surrounded by NH<sub>3</sub> mols. Water-water H bonds play an essential role in stabilizing Na(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>, whereas stabilization by Na-N bond formation is more important for Na(NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>. Calcd. ionization potentials as functions of n can reproduce qual. the exptl. found different trends between Na(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> and Na(NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>, which are related to the above-mentioned different structural features.

структура,  
стабильность,  
γ

(+) ⊗



Na(NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub>

© A. 1993, 119, N 6

Na<sub>3</sub>OH

1993

Shen, Ming Yuh;  
Ho, Gia Yen

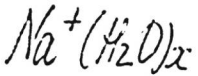
структура,  
стабильн.,  
теор. рас-  
чет 1-10.

Мухоме 1993, 51 (1),

(см. Li<sub>3</sub>OH, ● III)

1994

Om. 37 594



$x = 1-4$

Dalleska N.F., Tjelta B.h.,  
et al.,

констан.  
тачності,  
зменше  
впливу

J. Phys. Chem. 1994, 98,  
4191-4195.

Sequential Binding and Energies  
of Water to  $\text{Na}^+$  (33°),  $\text{Mg}^+$  (33°), and

$Al^+$  ( $3s^2$ ).

$\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_4$

1994

121: 92404c Ab initio theoretical study of 'surface' and 'interior' structures of the  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_4$  cluster and its cation. Hashimoto, Kenro; Morokuma, Keiji (Computer Center, Tokyo Metropolitan University, Minami-Ohsawa 1-1, Hachioji-shi, Tokyo, Japan 192-03). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 223(5-6), 423-30 (Eng). The structures and stabilities of  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_4$  and its cation were studied at the ab initio HF/6-31+G(d), HF/6-31++G(d, p) and MP2/6-31+G(d) levels. For the neutral complex, both the surface structure and the interior structure are min. on the potential energy surface. The energies of these 2 structures are close to each other at the highest level. For both surface and interior structures, some characteristic features are found in the vibrational spectra, which may be the best method for exptl. identification. For the cation cluster, only the interior structure is stable.

структура

и

стабильн.

теор. расч.

С. А. 1994, 121, № 8.



$$n = 1-6$$

(ab initio  
parameter)

1994

121: 286915r Ab Initio Molecular Orbital Study of  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1-6$ ) Clusters and Their Ions. Comparison of Electronic Structure of the "Surface" and "Interior" Complexes. Hashimoto, Kenro; Morokuma, Keiji (Computer Center, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan 192-03). *J. Am. Chem. Soc.* 1994, 116(25), 11436-43 (Eng). The stability and structure of  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1-6$ ) as well as their ions have been investigated with the ab initio MO method. Both the surface structure where Na is situated on the surface of the water cluster and the interior structure where Na is surrounded by water mols. are min. on the potential surface. They are very close in energy, though the surface structure becomes dominant as  $n$  increases. The surface structure is stabilized mainly by the solvent-solvent interaction, while the interior structure is stabilized by the Na-solvent interaction. In the surface structure the SOMO electron is localized in the vicinity of Na opposite to the hydrating water mols., whereas in the interior structure the SOMO d. spreads into the region between water mols. This difference is responsible to the difference in the  $n$  dependency of the ionization potential.

C. A. 1994, 121, N 24

$\text{Na}(\text{OH})_{k+1}$

1994

Sliznev V.V.,  
Pogreb'naya T.P. et al.

Do, meop.  
pachem

Koord. Khim. 1994,  
20 (8-9), 641-7.

(ser.  $\text{ZiCl}_{k+1}$ ; III).

Na (H<sub>2</sub>O) - [Am. 38 691] 1997

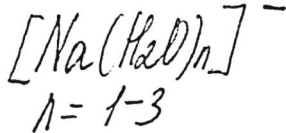
Na (D<sub>2</sub>O)

David A. Rodham,  
Geoffrey A. Blake,

M.A. Chem. Phys. Lett., 1997,  
264, NS, 522 - 530.



1997



ab initio  
на атом,  
смыслена,  
сн ас атомоу

126: 255670f Ab initio MO study of solvated negative alkali atom clusters:  $[\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$  and  $[\text{M}(\text{NH}_3)_n]^-$  ( $\text{M} = \text{Na}$  and  $\text{Li}$ ,  $n = 1-3$ ). Hashimoto, Kenro; Kamimoto, Tetsuya; Fuke, Kiyokazu (Computer Center, Tokyo Metropolitan University, 1-1 Minami-Ohsawa, Hachioji-shi, Tokyo, Japan 192-03). *Chem. Phys. Lett.* 1997, 266(1,2), 7-15 (Eng), Elsevier. The structures, stabilities and vertical electron detachment energies (VDEs) of  $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$ ,  $[\text{Na}(\text{NH}_3)_n]^-$  and  $[\text{Li}(\text{NH}_3)_n]^-$  ( $n = 1-3$ ) are investigated by the ab-initio MO method at the correlated level. The Na-H interactions and hydrogen bonds are important in  $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$ , while the metal-N bonds become essential in stabilizing the  $[\text{Na}(\text{NH}_3)_n]^-$  and  $[\text{Li}(\text{NH}_3)_n]^-$  with increasing  $n$ . The size dependence of the VDEs of  $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$  differs from that of  $[\text{Na}(\text{NH}_3)_n]^-$  and  $[\text{Li}(\text{NH}_3)_n]^-$  due to their structural features. In addn., the geometries and VDEs of  $[\text{Li}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$  ( $n = 1-3$ ) are predicted theor. The size dependence of their VDEs is similar to that of  $[\text{Na}(\text{NH}_3)_n]^-$  and  $[\text{Li}(\text{NH}_3)_n]^-$  rather than  $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$ .

□ (+3)

C. A. 1997, 126, N 19

- 
- 1)  $[\text{Li}(\text{H}_2\text{O})_n]^-$   $n = 1-3$
  - 2)  $[\text{Na}(\text{NH}_3)_n]^-$   $n = 1-3$
  - 3)  $[\text{Li}(\text{NH}_3)_n]^-$   $n = 1-3$

Na<sup>+</sup>. H<sub>2</sub>O

DM. 39985

1999

cmp-pa,  
cmadunsk. Pavel Soldán et al.,  
Chem. Phys. Lett.,  
1999, 313, 379-384.



$\text{Na}(\text{H}_2\text{O}/\bar{n})$

2000

Tsurusawa, Takeshi;  
Iwata, Suehiro,

$\bar{n}$ , meop.  
(parent)

J. Chem. Phys. 2000,  
112 (13), 5705-5710.

(all- $\text{Li}(\text{H}_2\text{O}, \bar{n})$ ; III)