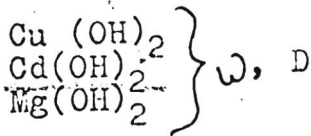


Cd - O - H

V 1965

1956



Cabannes Ott. C.

C.r. Acad. sci, 1956, 242, N 3, 355-57

Etude par spectrographie infrarouge des oxydes
hydrates de cuivre, cadmium et magnesium.



PJX, 1956, 77314

Est.fotok.

CdOH+

1970

XVI-162

20

9 Б1011. Реакции обмена зарядом H_3O^+ с металлами в пламенах. Hayhurst A. N., Telford N. R. Charge exchange reactions of H_3O^+ with metals in flames. «Trans. Faraday Soc.», 1970, 66, № 11, 2784—2793 (англ.)

С помощью квадрупольного масс-фильтра исследовано изменение концентрации ионов H_3O^+ и др. в продуктах горения смесей $H_2-O_2-N_2$ с добавками соединений металлов: Li, Na, K, Rb, Cs, Cd, Fe, Cu, Mn, Pb, Cr и Tl. Опыты проведены в диапазоне т-р 1815—2445° K и при

11



(+1) обз. 14

X. 1971. 9



атмосферном давл. Для щел. металлов и Tl основной механизм передачи заряда — $M + H_3O^+ = M^+ + H_2O + M$, а для остальных металлов, кроме Cd, $MO + H_3O^+ = MOH^+ + H_2O$; $M + H_3O^+ = MOH^+ + H_2$ и $MOH^+ + H = M^+ + H_2O$ (последняя р-ция быстро достигает равновесия). Константы скорости р-ций передачи заряда несколько уменьшаются с т-рой и имеют значения в пределах $0,5-50 \cdot 10^{-9}$ кон. см⁻³.сек⁻¹. В случае Cd передачи заряда не наблюдается. Оценена верхняя граница энергии диссоциации CdOH⁺, 323 кдж/моль. А. А. Борисов

~~В БИОЛ. А. МЕХАНИЗМ ГОРЕНИЯ СИСТЕМ СО СВЯЗАННЫМ~~

$\text{Cd}(\text{OH})_2$
 CdOHCl
 CdOHF
(крист.)

vi

л. 1988 - 17

11-5758

1987

17 Б222. Исследования гидроксосоединений металлов. IV. Инфракрасные спектры кадмиевых производных $\text{Cd}(\text{OH})_2$, CdOHCl и CdOHF . Srivastava O. K., Secco E. A. Studies on metal hydroxy compounds. IV. Infrared spectra of cadmium derivatives $\text{Cd}(\text{OH})_2$, CdOHCl , and CdOHF . «Canad. J. Chem.», 1967, 45, № 24, 3199—3201 (англ.)

С целью проверки и уточнения отнесенных частот в ИК-спектрах ZnOHCl и ZnOHF проведены аналогичные изменения с соотв-щими Cd-аналогами. Исследованы в области 2,5—16 μ поликристаллич. соли $\text{Cd}(\text{OH})_2$, CdOHCl и CdOHF и их дейтерированные аналоги. Показано, что при замещении одной из групп OH в $\text{Cd}(\text{OH})_2$ на Cl или F полоса вал. кол. νOH сме-

☒

щается в длинноволновую область, а в области 8—16 μ появляются интенсивные полосы поглощения. Для всех смещенных полос в спектрах дейтерированных аналогов отношение ν_H/ν_D составляет 1,35—1,37. Показано, что спектры как $ZnOH\Gamma$, так и $CdOH\Gamma$ ($\Gamma=ClF$) согласуются с симметрией плоской молекулы C_s или C_1 , однако возможна также интерпретация спектров в этой области на основе лишь колебаний OH -групп в гексагональной слоистой кристаллич. решетке. Сообщ. III см. РЖХим, 1968, 2В20.

В. Т. Калинин

CdOH

[Om. 19 392]

1984

Knight L.B., Miller
P.K.,
et al.,

exemp
to

manuscript

J. Chem. Phys., 1984,
80, N10, 4587-4592.

2001

$\text{Cd} \cdot \text{H}_2\text{O}$
 $\text{Cd}^{2+} \cdot \text{H}_2\text{O}$

ab initio
 pseudopotential
 calculations,
 hydrogen
 pseudopotential,
 hydrogen core
 C.A. 2001, 135, 121

135: 309123m Structure and Binding Energies of Monohydrated Cd and Cd^{2+} . Lee, Edmond P. F.; Soldan, Pavel; Wright, Timothy G. (Department of Chemistry, University of Southampton, Highfield, Southampton, UK SO17 1BJ). *J. Phys. Chem. A* 2001, 105(37), 8510-8515 (Eng), American Chemical Society. High-level ab initio calcs. have been performed on the neutral $\text{Cd} \cdot \text{H}_2\text{O}$ complex, and the dication, $\text{Cd}^{2+} \cdot \text{H}_2\text{O}$. Effective core potentials (ECPs) are employed for cadmium, augmented with a large, flexible polarization space, which also includes diffuse functions. The calcd. double ionization energy for Cd is within 0.03 eV of the exptl. value, suggesting that the basis set is able to describe both Cd and Cd^{2+} well. For both complexes, three main structures were considered: C_{2v} with the cadmium atom interacting with the oxygen atom of H_2O ; C_{2v} with the cadmium atom interacting with both hydro-

gens of H_2O ; and planar C_s , where the cadmium interacts with only one of the hydrogen atoms of H_2O . The global min. for $\text{Cd}\cdot\text{H}_2\text{O}$ is found to be the trans C_s structure, whereas for $\text{Cd}^{2+}\cdot\text{H}_2\text{O}$, the charge-dipole interaction leads to the C_{2v} geometry, with the cadmium interacting with the oxygen atom of H_2O being the lowest in energy. Our best values for the binding energies, D_e , are: $\text{Cd}\cdot\text{H}_2\text{O}$, 134 cm^{-1} (0.4 kcal mol^{-1}); $\text{Cd}^{2+}\cdot\text{H}_2\text{O}$, 78 kcal mol^{-1} , employing the CCSD(T) method. We conclude that the $\text{Cd}^{2+}\cdot\text{H}_2\text{O}$ complex is stable with respect to charge transfer and should be observable; after correction for zero-point vibrational energy, the stability of $\text{Cd}\cdot\text{H}_2\text{O}$ is less certain from the results of the calcns.