

ce-H-O

4965

$H_2OClO_4$  (к)

Tm

140-I-TXB

Мигунов С.В.?

Исследования поавлених перхлората  
та оксония  $H_2OClO_4$ , 1с.

~~1565~~

$\text{HClO}_4(\text{x})$   
( $C_p, S, \Delta_f H, T_m, \Delta_m H$ )      139-1-ТКВ

Резницкий Л.А.

Теплоемкость, энтропия, энтальпия, температура и теплота плавления хлорной кислоты, 3с.

$\text{ClO}_2^-$ ,  $\text{ClO}_2$ ,  $\text{HClO}_2$

123-I ~~1965~~.

(р-р;  $\infty \text{H}_2\text{O}$ )

Васильев В.П.

Стандартный изобарный потенциал  
образования и окисления  $\text{ClO}_2^-$ ,  $\text{HClO}_2$   
и  $\text{ClO}_2$  в водном растворе,  $\text{pH}$ .

Н.003.

I-2072

Bφ - 2072 - I

1878

Berthelot

47. Ann. chim. phys. 14, 368 (1878)

$\text{HCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ;  $T_m$ ,  $\Delta H_m$

Circ. 500

$\mu, K$

$\phi$

7 - 2141

1882

Berthelot

79. Ann. chim. phys. 27, 214 (1882)

|                                                         |   |                           |
|---------------------------------------------------------|---|---------------------------|
| $\text{HClO}_4$ ; <i>ac.</i>                            | ) |                           |
| <i>p-p.</i> ;                                           | ) |                           |
| $\text{HClO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; <i>kp.</i> ; | ) | $\Delta \text{H}_f^\circ$ |
|                                                         | ) |                           |
| $\text{HClO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ; <i>ac.</i>  | ) |                           |

Circ. 500

B, M

Ø

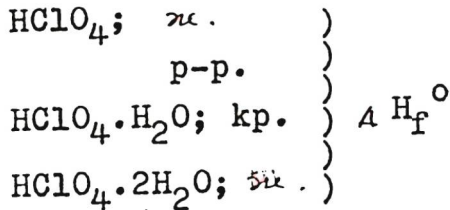
I. 2142

Bφ-5500-I

1882

Berthelot

80. Ann. chim. phys. 27, 222 (1882)



Circ. 500

~~B~~ M

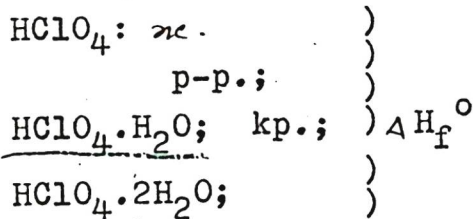
φ

I - 2137

1882

Berthelot

80. Ann. chim. phys. 27, 222 (1882)



Circ. 500

$\beta, M$

$\phi$

7-2136

1882

Berthelot

79. Ann. chimphys. 27, 214 (1882)

$\text{HClO}_4$ ;  $\kappa$ .;  $\Delta H_f^\circ$

p-p.;  $\Delta H_f^\circ$

$\text{HClO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; kp.;  $\Delta H_f^\circ$

$\text{HClO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ;  $\kappa$ .;  $\Delta H_f^\circ$

Circ. 500

B, M

I-1880

1884

Roozeboom

2. Rec. trav. chim. 3, 54 (1884)

$\text{Cl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ; крист.  $\Delta$   $\text{Hf}^{\text{O}}$

Bull

Circ. 500

✓

I-2074

I884

Roozeboom

4. Rec. trav. chim. 3, 73 (1884)

$Bz_2$ ;  $T_b$ ,  $\Delta H_b$

HCl.2H<sub>2</sub>O;  $T_m$ ,  $\Delta H_m$

Circ. 500

K

? (p-1)

I-2073

I884

Roozeboom

3. Rec. trav. chim. 3, 59 (I884)

HCl. 2H<sub>2</sub>O; T<sub>m</sub>, ΔH<sub>m</sub>

Bz. 10H<sub>2</sub>O; K<sub>p</sub>; ΔH<sub>f</sub><sup>o</sup>

Bz<sub>2</sub>; T<sub>b</sub>, ΔH<sub>b</sub>

Circ. 500

μ, κ

? (9p-1)

I-1881

I885

Roozeboom

5. Rec. trav. chim. 4, 65 (I885)

$\text{Br}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ ; крист.;  $\Delta H_f^\circ$

$\text{Cl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ; крист.;  $\Delta H_f^\circ$

$\text{SO}_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ; кр.;  $\Delta H_f^\circ$

Circ. 500

✓ (B)  
(H)

I-1878

Bφ-5508-1

1901

do Forcrand

39. Compt. rend. 133; 1304 (1901.)

$\text{Cl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ; крист. ;  $\Delta H_f^\circ$

B, m

circ. 500

φv

$\text{OH}_3 \text{ClO}_4$

1931.

Smith G. F.

Goekler O E.

" Incl. Eng. Chem. Anal.  
1931, 3, 58-61.

Tm

bp-3659-T

I-2135

1939

Arlman

1. Rec. trav. chim. 58, 871 (1939)

$\text{HClO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; крист. ;  $\Delta H_f^\circ$

$\text{Se}(\text{OH})_3\text{ClO}_4$ ;  $\Delta H_f^\circ$

$T_m$

Circ. 500

( $\mu, \beta$ )



$\phi$

I-1879

~~Bφ~~-1879-I

1943

Harris

1. Nature 151, 309 (1943).

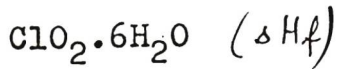
$\text{Cl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ;  $\text{kp.}; \Delta H_f^\circ$

Circ. 500 (B, M)

90

I-3044

1949



v. Stackelberg M.

Naturwissenschaften, 1949, 36,  
3593-362

Feste Gashydrate

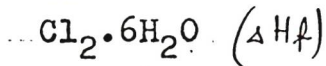
C.A., 1950, 44, 7107h

u.

1/0

I-3042

1949



v. Stackelberg M.

Naturwissenschaften, 1949, 36,  
359-362

Feste Gashydrate

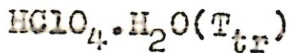
C.A., 1950, 44, 7107h

u.

↓  $\phi$

I-2/39

1958



Росоловский В.Я., Зиновьев А.А.  
Ж.неорган.химии, 1958, 3, № 7, 1589-1591.

Хлорная кислота и ее производные УИ 0 поли-  
морфизме перхлората оксония.

РЖХим., 1959,  
I4905.

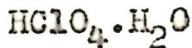
K



✓

97-1

I - 2143



( $T_{tr}$ )

1958

Зиновьев А.А., Бабаева В.П.

Ж.неорганической химии, 1958, 3, № 6, 1428-1432.

Хлорная кислота и ее производные.  
IV. Двойная система моногидрат хлорной кислоты - уксусная кислота.

РЖХим., 1958, № 23, 76672

К, Б

I-2147

ВФ-2132-I

1958

$\text{HClO}_4$  ( $T_m$ )

$\text{H}_3\text{OClO}_4$  ( $T_{tr}$ )

Зиновьев А.А., Росоловский В.Я.

Ж. неорганической химии, 1958, 3, № 10, 2382-2389.

Х. Системы хлорный ангидрид-вода.

РЖХим., 1959.

30482

К



7-2/38



1960

✓ (B)

Кривцов Н.В., Росоловский В.Я., Зиновьев А.А.  
Ж. неорганической химии, 1960, 5, № 4, 772-774.

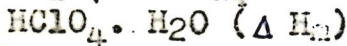
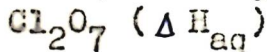
Интегральные теплоты растворения хлорной  
кислоты.

РЖХим., 1960

83896

I-2140

1960



✓ (B)

Росоловский В.Я., Кривцов И.В., Зиновьев А.А.  
Ж. неорганической химии, 1960, 5, № 4, 778-781.

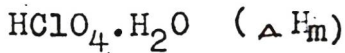
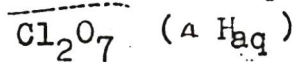
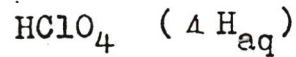
Интегральные теплоты растворения хлорного ангидрида и его смесей с хлорной кислотой в воде при 25°.

РЖХим., 1960.

83897

1-2145

1960



Росоловский В.Я., Кривцов Н.В., Зиновьев  
А.А.

Ж.неорганической химии, 1960, 5, № 4, 778-781.

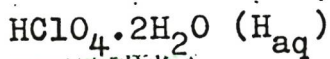
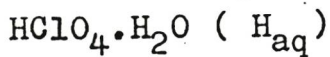
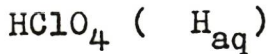
Интегральные теплоты растворения хлорного ангидрида и его смесей с хлорной кислотой в воде при 25°.

РЖХим., 1960, 83897

К, В

I - 2/44

1960



Кривцов Н.В., Росоловский В.Я., Зиновьев  
А.А.

Ж.неорганич.химии, 1960, 5, № 4, 772-774.

Интегральные теплоты растворения хлорной  
кислоты.

РЖХим., 1960,  
83896

М, В

✓

HClO<sub>4</sub> · n H<sub>2</sub>O

1962

Guy. cl.

St. Pavia, A. Potier

Tm

Bp - 5326 - 1

"C. 2. Acad. Sci"

1962, 254, N 18,

3213-15

50818.1452

Ch

 $\text{HClO}_2$  (Кр, К)

1965

ВФ - XI 1936

Leonesi Dante, Piantoni Giammario. Costante di dissociazione e spettro dell'acido cloroso. "Ann chimica", 1965, 55, N 7, 668-675

(итал.; рез. франц., англ.)

MB

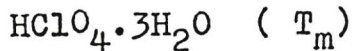
Есть оригинал.

ВИНИТИ

876

I-3101

1963



Mascherpa Guy, Pavia André, Potier  
Antoine. Equilibres liquide-solide  
dans le binaire acide perchlorique-eau.  
"C.r.Acad.sci.", 1962, 254, N 18, 3213-  
3215 (fran.).

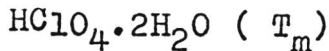
PX., 1963, 3, 6392

5

242 ap.

I-3101

1963



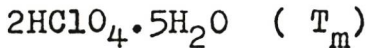
Mascherpa Guy, Pavia André, Potier Antoine.  
Equilibres liquide-solide dans le  
binaire acide perchlorique-eau. "C.r.Acad.  
sci.", 1962, 254, N 18, 3213-3215 (fran)

PX., 1963, 3, 6392

276 ep.

I-3101

1963



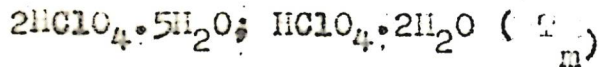
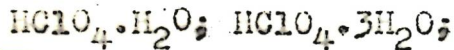
Mascherpa Guy, Pavia André, Potier  
Antoine. Equilibres liquide-solide  
dans le binaire acide perchlorique-eau.  
"C.r.Acad.sci.", 1962, 254, N 18, 3213-  
3215 (frany.)

PX., 1963, 3, 6392

842 op.

I-3101

1963



Mascherpa Guy, Pavia André, Potier  
Antoine. Equilibres liquide-solide  
dans le binaire acide perchlorique-eau.  
"C.r.Acad.sci.", 1962, 254, II 18, 3213-  
3215 (Paris, )

PX., 1963, 3, 6, 392

(5)

Σy3. p.

H<sub>2</sub>O . 4HClO<sub>4</sub> (T<sub>42</sub>) XI 2028 1963

Mascherpa G.,

C. z. Acad. sci., 1963, 257(22),

3414-16

Perchloric acid hydrate

б

(сп)

вас ето

ЕСТЬ ф. н.



саву

$\text{HClO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  ( $T_m, T+2$ ) XI 2027 1985

Mascherpo Guy,

Rev. chim. minér, 1965, 2, N 3,  
379-433

5

Есть оригинал

$X^-(H_2O)_n$  ( $\Delta H, \Delta G, S$ )

11 X1850 1970

$X = F, Cl, Br, I$

Arshadi M., Yamadagni R., Kebarle  
J. **Phys. Chem.** 1970, 74, 17, 1475-82 (and S);  
Hydration of the halide negative  
ions in the gas phase. II Comparison  
of hydration energies for the al-  
kali positive and halide negative  
ions.

M, B\O (98)

(cu. F-H-O, I)

CA, 1970, 72, N22, 115417V

OH<sup>-</sup> &  $\Delta H$

X = OH, F, Cl, Br, I

11

1970

Arshadi M., Kebabian P., XI 17

J. Phys. Chem., 1970, 74, No 7, 1483-5 (ann.)

Hydration of OH<sup>-</sup> and O<sub>2</sub><sup>-</sup> in the gas phase. Comparative solvation of OH<sup>-</sup> by water and the hydrogen halides. Effects of acidity.

M B (V) (P)  
— (ccu. H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, I)

Есть оригинал  
CB, 1970, 72, 162, 1153-98

XI-1024

1970

$\text{ClF}_3$  (2a) ( $\Delta H_{298, D_0}^\circ$ )

[HCl. 100H<sub>2</sub>O] ( $\Delta H_f$ )

King R.C., Armstrong G.T.,  
J. Res. Nat. Bur. Stand., 1970, A 74,  
N6, 769-79

M

Носе, Доце, Тосе, НО<sub>4</sub>и, ДО<sub>4</sub>и, ТО<sub>4</sub>и 1970  
СЕО<sub>4</sub>и, СЕО<sub>4</sub>А<sub>2</sub>, СЕО<sub>4</sub>F, LiO<sub>4</sub>А<sub>2</sub>, LiO<sub>4</sub>F (термодинам.  
свойства)

Кулагин В.И., Борисов М.И., Антонов А.А.,  
Маслов П.Г., Степанов А.С. X 4722  
Редколлегия "М. физ. химии" АН СССР, М.,  
1970, 13 с.

Внутренне согласованные формулы явной зависи-  
мости термодинамических свойств некоторых  
производных H<sub>2</sub>O<sub>4</sub> в замкнутой фазе от  
температуры и давления

Р.И. Хим. 1970  
1954'87 деп.

18 HO(Ф)

XI-1846

1970

$\text{Cl}_2$  in  $\text{H}_2\text{O}(\text{K})$  (Kp,  $\Delta H$ )

Wilkes D.A., Van Haute A.A.,  
Proc. Int. Symp. Fresh Water  
Sea, 3<sup>rd</sup>, 1970, 3, 117-129.

M

$\text{HClO}_4 \cdot 2.5 \text{H}_2\text{O}$  (Tm) " XI 2593 1971

Årnöf J., Lundgren J.-O., Olovsson I.  
Acta crystallogr., 1971, B27, N5, 898-904 (cont.)  
Hydrogen-bond studies. XLV. The crystal  
structure of  $\text{HClO}_4 \cdot 2\frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$ .

Pl.4 Xuv., 1972  
15436



5 5 (9)

Перхлораты

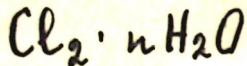
1971

3 Б194. Отнесение высокочастотной полосы в водных растворах перхлоратов — ответ на возражение Субраманяна и Фишера. Kecki Zbigniew, Dzyjański Piotr. Assignment of high-frequency band in aqueous perchlorate solutions- a reply to the argument of S. Subramanian and H. F. Fisher. «Rocz. chem.», 1971, 45, № 5, 937—938 (англ.)

(Дискуссионная статья (см. пред. реферат).

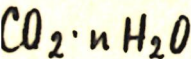
Б. В. Рассадин

2, 1972, 3



XI - 4127

1973



(ΔHf)

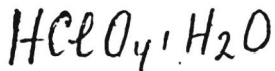
74777g Properties of the hydrates of chlorine and carbon dioxide. Bozzo, A. T.; Chen, Hsiao-Sheng; Kass, J. R.; Barduhn, A. J. (Syracuse Univ., Syracuse, N.Y.). *Proc. Int. Symp. Fresh Water Sea*, 4th 1973, 3, 437-51 (Eng). Edited by Delyannis, A. Work. Party Fresh Water Sea: Amaroussion, Greece. The phase diagram of chlorine hydrate up to 125 psig and  $\text{CO}_2$  hydrate up to 45 atm. were detd. in pure  $\text{H}_2\text{O}$  and aq. NaCl solns. of up to 10% NaCl. Heats of formation, hydrate compn., crit. decompn. conditions, salt effects, and other data are given.

William I. Neef

(+1)

IX

C.A. 1974. 80. N14



1973

85:39452d Proton jumps in crystalline hydronium perchlorate. Janik, J. M.; Rachwalska, M.; Janik, J. A. (Inst. Chem., Jagiellonian Univ., Krakow, Pol.). *Rap. - Inst. Fiz. Jad. (Krakow)* 1973, 846/PS, 21 pp. (Eng). The phase transition of  $\text{HClO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  at  $248^\circ$  was studied by sp. heat and quasielastic neutron-scattering measurements. The sp. heat was detd. at  $100\text{--}300^\circ\text{K}$  and gave an exact temp. of transition of  $248.4 \pm 0.1^\circ\text{K}$  with an enthalpy of  $1.30 \pm 0.03$  kcal/mole and an entropy of  $5.25 \pm 0.12$  cal/mole- $^\circ\text{K}$ . A Gaussian elastic scattering peak occurs in the low-temp. phase which becomes complicated by a Lorentzian component in the high-temp. phase. This component indicates an av. time between proton jumps in the double-well potential of the H bond of  $\sim 2.7 \times 10^{-12}$  sec. There appears to be a dynamic equil. of  $\text{H}_3\text{O} \cdot \text{ClO}_4 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} \cdot \text{HClO}_4$ .

 $T_{tr}; C_p,$  $\Delta H_{tr}$ 

C. A. 1976 85N6

$F^- - H_2O$ ;  $Cl^- - H_2O$  (структ. парам.,  
расчёт XI 3) 1973

Kistenmacher H., Popkie H.,

Clementi E.,

J. Chem. Phys., 1973, 58, 1112, 5627-  
- 38 (англ.)

Structure of molecular com-  
plexes. III. Energy surface of a  
water molecule in the field  
of a fluorine or chlorine atom.  
J. Chem. Phys., 1973, 79, 1122, 12944m

40227.7515

SIS, Ch, TE

$Cl^+ + H_2O \bar{X} - 8463$

40892

1973

4-3825

(*cur. Li<sup>+</sup>... H<sub>2</sub>O*) III

Kistenmacher H., Popkie H., Clementi E.

Study of the structure of molecular complexes. V. Heat of formation for the Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, F<sup>-</sup>, and Cl<sup>-</sup> ion complexes with a single water molecule. "J. Chem. Phys.", 1973, 59, NII

5842-5848

(англ.) 0054-4120

039 040 0 0 4 6

ВИНИТИ

24 Б787. Электропроводность перхлората оксония путем диффузии протонов. Potier Antoine, Rouselet Daniel. Conductivité électrique et diffusion du proton dans le perchlorate d'oxonium. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1973, 70, № 6, 873—878 (франц.; рез. англ.).

В интервале от  $-50$  до  $+50^\circ$  измерена электропроводность перхлората оксония. Установлено, что в точке фазового перехода ( $P_{nma} \rightarrow P_{21/c}$ ) при  $-24^\circ$  наблюдается скачок электропроводности. Очень высокая собственная проводимость фазы с симметрией  $P_{nma}$  ( $3,41 \times 10^{-4} \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ ) связывается с присутствием ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Предполагается, что электропроводность осуществляется гл. обр. за счет переноса протонов. Измерения самодиффузии Н и О ( $\text{T}$  и  $^{18}\text{O}$ ) подтверждают справедливость этого предположения. Механизм переноса протонов подобен механизму, описанному ранее для  $\text{NH}_4\text{ClO}_4$  и для льда Н из  $\text{H}_3\text{O}^+$  захватывается  $\text{ClO}_4^-$ , а структура  $\text{H}_3\text{O}^+\text{ClO}_4^-$  содержит ряд протонных дефектов (дырки и избыточные  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{HClO}_4$ ). Из резюме

Х. 1973 № 24

X-9191

1973

$\text{Li}(\text{H}_2\text{O})^+$ ,  $\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})^-$ ,  $\text{F}(\text{H}_2\text{O})^-$  u gr  
(cippa, bogop. ob. etc)

Schuster P.

Struct. Water Aqueous' Solutions,  
Proc. Int. Symp., 1973 (Pub. 1974), 141-164

40906.1867

Ph, TC, Ch



A. H. реану.

40892

02

2367

Howard Carleton J., Fehsenfeld M.F.C.,  
McFarland M. Negative ion-molecule reactions with atomic hydrogen in the gas phase at 296°K.

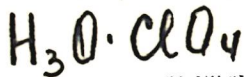
"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 12, 5086-5089

(англ.)

0186 мк. 1

152 156

ВИНИТИ



XI-4138

1974

21 Б872. Скачки протона в кристаллическом перхлорате гидрония. Janik J. M., Rachwalska M., Janik J. A. Proton jumps in crystalline hydronium perchlorate. «Physica», 1974, 72, № 1, 168—178 (англ.)

Методами калориметрии и нейтронографии изучены фазовые переходы в перхлорате гидрония  $\text{H}_3\text{O} \cdot \text{ClO}_4$  (I) [т. е. в моногидрате хлорной к-ты]. Установлено, что при  $248,4^\circ$  I претерпевает фазовый переход первого рода [кристаллографич. переход из монокл. фазы ( $P2_1/n$ ) в ромбич. фазу ( $Pnma$ )]. Скрытая теплота перехода и изменения энтропии составляют  $1,30 \pm 0,03$  ккал/моль и  $5,25 \pm 0,12$  э. е. На основании квазиэластичного рассеяния нейтронов установлено, что протон в группе  $\text{H}_3\text{O}$  в ромбич. фазе статистически колеблется между двумя эквивалентными положениями и среднее время такого колебания составляет  $\sim 3,5 \cdot 10^{-12}$  сек. На основании полученных результатов можно утверждать, что в ромбич. фазе I существует конфигурац. динамич. равновесие  $\text{H}_3\text{O} \cdot \text{ClO}_4 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} \cdot \text{HClO}_4$ .

А. В. Салов

$T_{tr}, \Delta H_{tr}$

$\Delta S_{tr}$

X.1974

N21

$H_3O \cdot ClO_4$  (Tb)

XI-4138

1974

(Ttr)

30520j/Proton jumps in crystalline hydronium perchlorate. Janik, J. M.; Rachwalska, M.; Janik, J. A. (Inst. Chem., Jagiellon. Univ., Cracow, Pol.). *Physica (Utrecht)* 1974, 72(1), 168-78 (Eng). Calorimetric measurements were made for solid  $H_3O \cdot ClO_4$ . The existence of the 1st-order phase transition at 248.4°K was proved and the thermodyn. parameters of this transition evaluated. Quasielastic neutron-scattering measurements were made for the same substance below and above the phase transition by applying the method of differentiation of the Be edge. In the high-temp. phase a lorentzian component of the quasi-elastic peak was obtained. From its width the av. time between proton jumps in a double-well potential of the H bond was  $\sim 3.5 \times 10^{-12}$  sec.

C.A. 1974, 81, NY

40918.7372  
Ch, Ph, TC

35223 02 1974  
 $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n^+$   
 $\Delta H: 45^\circ, 46, 98$  44-6262

Yamdagni R., Kebarle P.

The hydrogen bond energies in  $\text{ClHCl}^-$   
and  $\text{Cl}^-(\text{HCl})_n$ .

"Can. J. Chem.", 1974, 52, N 13, 2449-2453  
(англ., рез. франц.)

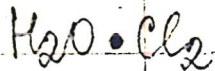
0192

157 160

2 0 4

ВИНИТИ

1975

 $\Delta H_f$ 

(+1)

Kb. mex. pacet

D) 137145j Theoretical study of intermolecular bonds by charge transfer. II. Water-chlorine bond. Leroy, G.; Louterman-Leloup, G. (Lab. Chim. Quant., Univ. Louvain, Louvain, Belg.). *J. Mol. Struct.* 1975, 28(1), 33-44 (Fr). The interaction was studied between an "ether" O atom and a Cl atom ( $\text{RR}'\text{O} \cdots \text{Cl}$ ) (the complex  $\text{H}_2\text{O} \cdots \text{Cl}_2$ ). Ab initio results show the existence of this complex and define its structure. A heat of formation of  $0.747 \text{ kcal mole}^{-1}$  was calcd. Charge transfer towards halogen is very weak compared with the polarization of the  $\text{Cl}_2$  mol.

C.A. 1975 83 N16

1975

$\text{Cl}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  ( $\Delta H_f$ )

XI-4749

Bozzo H.T., Chen Hsiao-Sheng,  
Kass J.R., Barduhn A.J.,

Desalination, 1975, 16 (3),  
303-20.

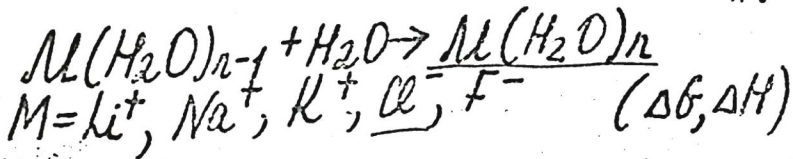
Properties of the hydrates of  
chlorine and  carbon dioxide.

C.A. 1975, 83 N22. 184540u MⓄ ?

BX-775

1976

118



Abraham F.F., Mruzik M.R.,  
Pound G.M.,

Faraday Discuss. Chem. Soc. 1976, 61  
(Precipitation), 34-47.

The thermodyn.

and structure of  
hydrated halide...

C.A. 1977 87, N8, 592154

B, In, X-9

(op. 1)

$D_3O \cdot ClO_4$

XI-5570  
nummer 5098

1976

(Cp)

87: 29994j An adiabatic calorimetry study of the phases in solid deuterated perchloric acid monohydrate. Czarniecki, K.; Janik, J. A.; Janik, J. M.; Pytasz, G.; Rachwalska, M.; Waluga, T. (Inst. Chem., Jagiellonian Univ., Krakow, Pol.). *Physica B + C (Amsterdam)* 1976, 85 B & C(2), 291-8 (Eng). Sp. heat measurements on  $(D_3O \cdot ClO_4)$  [24847-50-5] showed anomalies at 245.1 and 251.9 K. Entropies connected with these anomalies are 1.22 and 4.69 cal/(mol K). A structural model based upon  $D_3O^+$ -ion configuration is suggested for the interpretation of the obsd. phase situation.

C. A. 1977. 87 N 4

D3O.CEO4

XI-5570  
-om 5098

1976

8 E396. Изучение фаз в твердом  $D_3O \cdot ClO_4$  с помощью адиабатической калориметрии. Czarniecki K., Janik J. A., Janik J. M., Pytasz G., Rachwal-ska M., Waluga T. An adiabatic calorimetry study of the phases in solid  $D_3O \cdot ClO_4$ . «Physica», 1976, BC 85, № 2, 291—298 (англ.)

(Cp)

Теплоемкость измерена в интервале т-р 130÷350° К. Обнаружены резкие пики теплоемкости при 245,1 и 251,9° К, которым соответствуют изменения энтропии  $1,22 \pm 0,09$  и  $4,69 \pm 0,27$  кал/моль·град соответственно. Сравнение с данными для  $H_3O \cdot ClO_4$  приводит к выводу о важной роли динамики атомов водорода в фазовом превращении. Предложена структурная модель, объясняющая существование трех фаз у  $D_3O \cdot ClO_4$ .

ф. 1977 л. 8

$\text{H}_2\text{O} \cdot \text{ClO}_4$

оттиск 5098

1976

$\text{D}_2\text{O} \cdot \text{ClO}_4$

16 Б855. Исследование фаз в твердом  $\text{D}_2\text{O} \cdot \text{ClO}_4$  методом адиабатической калориметрии. Czarniecki K., Janik J. A., Janik J. M., Pytasz G., Rachwal-ska M., Waluga T. An adiabatic calorimetry study of the phases in solid  $\text{D}_2\text{O} \cdot \text{ClO}_4$ . «Physica», 1976, BC85, № 2, 291—298 (англ.)

В интервале  $t$ - $p$  130—350 К измерена теплоемкость моногидрата дейтерированной хлорной к-ты  $\text{D}_2\text{O} \cdot \text{ClO}_4$  (I). Кривая  $t$ -ной зависимости  $C_p$  показала два полиморф. превращения при  $245,5 \pm 0,1$  и  $251,9 \pm 0,2$  К с энтальпиями  $300 \pm 23$  и  $1182 \pm 67$  кал/моль и энтропиями  $1,22 \pm 0,09$  и  $4,69 \pm 0,27$  э. е. Результаты сравнены с данными для  $\text{H}_2\text{O} \cdot \text{ClO}_4$  (II), имеющего один переход при  $248,4 \pm 0,1$  К с энтропией  $5,25 \pm 0,12$  э. е. Установле-

(71) X

Х. 1977. №16

но, что низкот-рная фаза I имеет орторомбич. структуру, а высокот-рная — моноклинную, что соответствует данным для II. Для промежуточной фазы I предположена моноклинная структура, отличающаяся от высокот-рной ориентациями двух групп  $D_3O^+$ . Наличие трех фаз у I, в отличие от двух у II, указывает на влияние динамики атомов водорода на фазовые переходы. Отмечено, что сумма энтропий обоих переходов I (5,91 э. е.) не очень отличается от энтропии перехода II. Для интерпретации фазовых переходов предложена структурная модель I, основанная на различных конфигурациях  $D_3O^+$ .

А. Кисилевский

1976

 $D_3O.ClO_4$ 

88:127283s An adiabatic calorimetry study of the phase situation in solid deuterated perchloric acid monohydrate. Czarniecki, Krzysztof; Janik, Jerzy A.; Janik, Janina M.; Pytasz, Gerard; Rachwalska, Malgorzata; Waluga, Tadeusz (Inst. Chem., Jagiellonian Univ., Krakow, Pol.). *Rap. - Inst. Fiz. Jad. (Krakow)* 1976, 924/PS, 31 pp. (Eng). Sp. heat measurements performed for deuterized perchloric acid monohydrate ( $D_3O.ClO_4$ ) led to the discovery of two anomalies: at 245.1 K and at 251.9 K. Entropies connected with these anomalies are 1.22 cal/mol.K and 4.69 cal/mol.K. A structural model based upon  $D_3O^+$  - ion configurations is suggested for the interpretation of the obsd. phase situation.

 $C_p, T, \Delta H$ 

C.A. 1978, 88, NB

Вр ЖТ-4955

1976

СНОН,  $\text{СНМeO}^-$ ,  $\text{СНСO}_3^-$ ,  
 $\text{СНМeCO}_2^-$ ,  $\text{СНСO}_2\text{H}^-$ ,  $\text{СНСН}_2\text{CO}_2^-$ ,  
 $\text{СНСF}_3\text{CO}_2^- (\Delta\text{H})$

Lam S. Y., Louis C., Benoit R. L.

J. Amer. Chem. Soc., 1976, 98, N5,

1156-1160

(B)

60219.3673

Ch, Ph, TC

40892

 $\text{Cl}^- (\text{H}_2\text{O})_2 (\text{aq})$  ( $\Delta G$ )

1976

4216

Mruzik Michael R., Abraham Farid F.,  
Schreiber Donald E., Pound G.M. A Monte  
Carlo study of ion-water clusters.  
"J. Chem. Phys.", 1976, 64, N 2,  
481-491 (англ.)

0554 ББК

541 541

546

ВИНИТИ

$\text{ClF}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

1976

$\text{CBrF}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

2 Б837. Давление диссоциации водных клатратов. Ступин Д. Ю., Тезиков В. Н. В сб. «II Всес. конф. по термодинамике орган. соедин., Горький. 1976. Тезисы докл.» Б. м., 1976, 35—36

Получены гидраты (дейтераты)  $\text{ClF}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{ClF}_3 \cdot n\text{D}_2\text{O}$  и  $\text{CBrF}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  при давл. гидратообразователей 750 мм и т-рах 276,55; 279,95 и 281,15 К соотв. Исследуемые гидраты — тв. соединения, плохо р-римые в воде. Равновесие в системе гидрат — жидкий р-р (в основном вода) — газ устанавливается за 12—18 час., а в системе гидрат — тв. р-р (в основном лед) — газ — не более, чем за 24 часа при изученных т-рах. В интервале 267—285 К с точностью  $\pm 0,4$  мм измерено суммарное давл. пара воды и гидратообразователя ( $\text{ClF}_3$ ,  $\text{CBrF}_2$ ) в указанных системах. По методу Шефера и Мейера определены составы гидратов:  $\text{ClF}_3 \cdot 17\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{ClF}_3 \cdot 17\text{D}_2\text{O}$  и  $\text{CBrF}_2 \cdot 17\text{D}_2\text{O}$ .

Резюме

$K_p, p$

(+1)



X 1977 N2

CLOH+

1977

Rosenstock M. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,  
1977, 6. suppl. n1, p 1-969

T. G.  
CB 6a

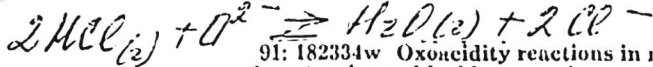
D<sub>3</sub>O.ClO<sub>4</sub>

1979

(Cp)

90:193379v An adiabatic calorimetry study of the phase situation in solid deuterated perchloric acid hydrate (D<sub>3</sub>O.ClO<sub>4</sub>). Czarniecki, K.; Janik, J. M.; Pytasz, G.; Rachwalska, M.; Janik, J. A.; Waluga, T. (Inst. Chem., Univ. Jagiellonski, Krakow, Pol.). Report 1976, INP-924/PS, 31 pp. (Eng). Avail. INIS. From *INIS Atomindex* 1979, 10(1), Abstr. No. 419539. Heat capacity measurements performed on deuterated perchloric acid minihydrate (D<sub>3</sub>O.ClO<sub>4</sub>) led to the discovery of 2 anomalies: at 245.1 and 251.9 K. Entropies connected with these anomalies are 1.22 and 4.69 cal/mol K, resp. A structural model based upon D<sub>3</sub>O<sup>+</sup>-ion configurations is suggested for the interpretation of the obsd. phase situation

C. A. 1979, 90, N24



1973

91: 182334w Oxide acidity reactions in molten lithium chloride + potassium chloride eutectic (at 470°C): potentiometric study of the equilibria of exchange of oxide ion between aluminum(III) systems and carbonate and water systems. Picard, G.; Seon, F.; Tremillon, B. (Ec. Natl. Super. Chim. de Paris, Univ. Pierre et Marie Curie, F-75231 Paris, 05 Fr.). *J. Electroanal. Chem. Interfacial Electrochem.* 1979, 102(1), 65-75 (Eng). The reaction between aluminum chloride and oxide anion were studied in molten LiCl + KCl eutectic at 470 °. For that purpose, a  $\text{pO}^{2-}$  indicator electrode made with a membrane in yttria-stabilized zirconia was used and tested by means of a carbonate ion whose dissocn. const.,  $10^{-2.16}$  atm, was detd. Then, the electrode was used to obtain the formation const. of  $\text{AlO}^+$  (solvated by  $\text{Cl}^-$ ) and the soly. product of  $\text{Al}_2\text{O}_3(\text{S})$ :  $10^{10.7}$  and  $10^{-27.4}$ , resp. (molality scale). The equil. const. of the system  $2\text{HCl}(g) + \text{O}^{2-} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}(g) + 2\text{Cl}^-$  was also detd.:  $10^{9.93}$  atm mol kg<sup>-1</sup>. The conditional soly. of alumina in LiCl + KCl melt is discussed.



*fabrice*

C.A. 1979, 21, 622



1982

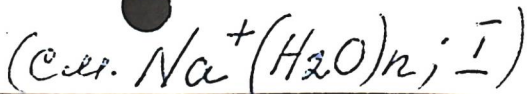
$n=0-6$

Bekmuratova E.M.

Izv. Akad. Nauk

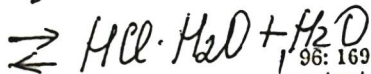
Δ Ηωγραιοας, Uzb. SSR, Ser.

Δ Σωγραιοας. Fiz.-Mat. Naek  
1982, (6), 59.





1982



96:169670m Proton NMR study of equilibria in concentrated solutions of hydrochloric and sulfuric acids. Kostromina, N. A.; Anikina, N. S.; Vdovenko, I. D. (Inst. Obshch. Neorg. Khim., Kiev, USSR). *Ukr. Khim. Zh. (Russ. Ed.)* 1982, 48(3), 230-5 (Russ). The equil. consts. for acid dissociation in concd. solns. were calcd. from NMR chem. shift data. For  $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{Cl}(\text{H}_2\text{O})^- \rightleftharpoons \text{HCl} \cdot \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$ ,  $K = 0.7 \pm 0.2$ . For  $\text{H}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HSO}_4(\text{H}_2\text{O})^- + \text{H}_3\text{O}^+$ ,  $K = 0.6 \pm 0.17$  and for  $\text{HSO}_4(\text{H}_2\text{O})^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{SO}_4(\text{H}_2\text{O})^{2-}$ ,  $K = 0.05 \pm 0.01$ .

Kp;

C.A. 1982, 96, N20

$Cl(H_2O)_n^-$   
(rate)

[Om. 16727]

1983

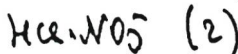
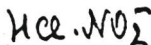
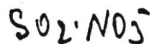
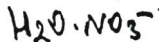
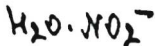
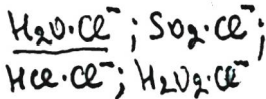
Pitzer K. S.,

J. Phys. Chem. 1983,  
87, N7, 1120-1125.

$K_p, \Delta H^\circ$

DM. 20498

1984



Кр. АМ

(15)

X. 1984, 19, 123

№ 23 Б4362. Исследование химии атмосферных отрицательных кластерных ионов и определение их энергий диссоциации. Studies on the bond energy and chemistry of atmospheric negative cluster ions. Böhringer H., Fahey D. W., Fehsenfeld F. C. «SASP'84: Symp. Atom. and Surface Phys., Maria Alm, Salzburg, 29 Jan.—4 Febr., 1984. Contrib.» Innsbruck, s. a., 210—212 (англ.)

Методом потока после разряда измерена т-ная зависимость констант равновесия р-ций обмена лигандов в отриц. кластерах  $X^- \cdot L$  ( $X = Cl^-$ ,  $NO_2^-$ ,  $NO_3^-$  и  $H_2SO_4^-$ ,  $L = H_2O$ ,  $SO_2$ ,  $HCl$ ,  $H_2O_2$ ). Из этих зависимостей определено изменение энтальпии, вызываемое присоединением различ. лигандов. Установлено, что  $SO_2$ ,  $H_2O_2$  и  $HCl$  сильнее связываются с  $X^-$ , чем  $H_2O$  (константы равновесия в 1000 раз больше). С учетом того, что содержание  $HCl$  и  $H_2O_2$  в средней стратосфере в 1000 раз меньше, чем  $H_2O$ , сделан вывод, что столь большие константы равновесия должны обуславливать содержание в стратосфере оптич. ионов с лигандом  $HCl$  и  $H_2O_2$  порядка 1%.

Е. Николаев

$\text{Cl}^- \cdot \text{H}_2\text{O}$

и др.

(Ом. 20498)

1984

4 Д123. Энергии связи молекул  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{HCl}$  с различными атмосферными отрицательными ионами. Bond energies of the molecules  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , and  $\text{HCl}$  to various atmospheric negative ions. Böh-

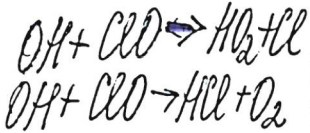
ringer H., Fahey D. W., Fehsenfeld F. C., Ferguson E. E. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 6, 2805—2810 (англ.)

Экспериментально исследованы энергии связи в кластерных ионах  $\text{X}^- \cdot \text{M}$ , где  $\text{X}^- = \text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$  и  $\text{HSO}_4^-$  и  $\text{M} = \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{HCl}$ . Найдено, что силы связей в этих кластерах варьируют в диапазоне  $\Delta H = 50 \div 102$  кДж/моль. В зависимости от молекулы лиганда значения  $\Delta H$  возрастают в следующем порядке:  $(\text{H}_2\text{O}) < (\text{SO}_2) \leq (\text{H}_2\text{O}_2) \leq (\text{HCl})$ . При  $T$ -рах 250—300 К значения константы равновесия для ассоциации  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{HCl}$  с отрицат. ионами на 3—4 порядка выше, чем для ассоциации  $\text{H}_2\text{O}$  с теми же ионами. Сделаны выводы о содержании различных кластерных отрицат. ионов в стратосфере.

Н. В. В.

Ф. 1985, 18, № 4

1984



6 Д232. Ветвление и температурная зависимость константы скорости реакции  $\text{OH} + \text{ClO}$ . Rate coefficient temperature dependence and branching ratio for the  $\text{OH} + \text{ClO}$  reaction. Hills Alan J., Howard Carleton J. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 10, 4458—4465 (англ.)

Разделение каналов реакции  $\text{OH} + \text{ClO} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{Cl}$  (а) или  $\rightarrow \text{HCl} + \text{O}_2$  (б) осуществлено в результате регистрации конц-ий радикалов  $\text{R} = \text{OH}$ ,  $\text{ClO}$  и  $\text{HO}_2$  в продуктах проточного разряда по методу резонансной магнитной лазерной спектроскопии. Подбором специально-го лазерного источника (в далекой ИК-области) и модуляцией магн. поля в зоне реакции обеспечивались резонансные условия поглощения излучения для дан-ного вращательного состояния  $\text{R}$ ; применение фазо-чувствительного метода регистрации позволило повы-сить чувствительность метода. Реакция изучена при давлении  $\sim 1$  Тор и т-рах 219—373 К. Получены: сум-марная константа скорости реакции  $k = (8,0 \pm 1,4) \cdot 10^{-12} \cdot \exp(235 \pm 46/T)$  см<sup>3</sup>/молекул·с, соотношение

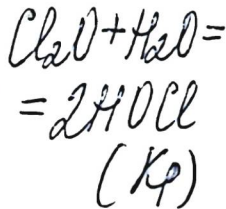
ΔHf

ф. 1985, 18, № 6

$k_a/k = 0,86 \pm 0,14$  и значение теплоты образования  
 $\Delta H^\circ_{t298}(\text{HO}_2) = 3,0 \pm 0,4$  ккал/моль. Г. А.

HOCl

(ΔH)



C.A. 1985, 102, N6

1985

102: 53439f Applications of a new laboratory source of gaseous hypochlorous acid (HOCl): product distribution in the atomic chlorine + hypochlorous acid (HOCl) reaction and equilibrium constant for the reaction chlorine oxide (Cl<sub>2</sub>O) + water = 2 hypochlorous acid (2HOCl). Ennis, Christine A.; Birks, John W. (Dep. Chem., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *J. Phys. Chem.* 1985, 89(1), 186-91 (Eng). A new lab. source of gaseous HOCl is described. The new source is dynamic, whereby HOCl is formed by reaction of Cl<sub>2</sub> with aq. CaCO<sub>3</sub> and used before it equilibrates to form Cl<sub>2</sub>O and H<sub>2</sub>O. When compared to the conventional static prepn. of HOCl by Cl<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O-HOCl equilibration, the dynamic HOCl source has a substantially lower Cl<sub>2</sub>O impurity level. The new source was applied to the measurement of the product distribution in the reaction of Cl + HOCl in a low-pressure mass spectrometry-discharge flow system. The major reaction channel gives the products Cl<sub>2</sub> and OH, with a yield of 61 ± 6% at 298 K. In combination with other thermochem. and kinetic data, this result yields a value of -18.0 kcal mol<sup>-1</sup> for the std. heat of formation (ΔH°<sub>f</sub>) of HOCl. In addn., the dynamic source was used to achieve an abs. calibration of the response of the mass spectrometer to HOCl. Making use of this calibration and conventional equil. Cl<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O-HOCl mixts., we detd. the equil. const. (K<sub>eq</sub>) of the reaction Cl<sub>2</sub>O + H<sub>2</sub>O = 2HOCl to be 0.092 ± 0.011 at 298 K, where the uncertainty reflects both random errors and the est. of possible systematic errors of the measurement.

[Om-21496]

1985

$(H_2O \cdot Cl^-)_2$

Max T.C.W., So S.P.,

J. Mol. Struct.,  
1985, 127, N 3-4,  
375-377.

струк-  
тура

$H_2O-HCl_{aq}$

[Om. 21347]

1985

Sako T., Hakuta T., et al.,

J. Chem. Eng. Data

1985, 30, 224-228.

P;

$H_2O \cdot Cl^-$  (2) OM. 22 824 1985

Sieck L. Wayne.

J. Phys. Chem., 1985,  
89, N 25, 5552 -

Kp,  $H_2$ ; -5556.

(cal.  $CH_3 SO_4 \cdot C_6H_5 \cdot NO_2^-$ ; I)

$\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n(z)$       com. 25/91      1986

Keese R. G., Castleman  
A. W., Jr.,

$\Delta_f H, \Delta_f S,$       J. Phys. and Chem. Ref.  
 $\Delta_f G$       Data, 1986, 15, N3,  
1011-1071.

$\text{Cl}^- \cdot \text{HCl} \cdot (\text{H}_2\text{O})_n(n)$  [om. 25191] 1986

Reese R. G., Castlemar  
A. W., Jr.,

$\Delta_f H, \Delta_f S,$  J. Phys. and Chem. Ref.  
 $\Delta_f G$  Data, 1986, 15, N3,  
1011-1071.

$\text{Cl}^- \text{H}_2\text{O}(2)$  [Om. 25174] 1986

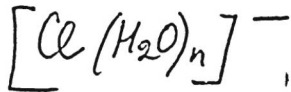
Yamabe S., Furumiya Y.,  
Hiraoka K., et al.,

ASH; Chem. Phys. Lett., 1986,  
131, N 3, 261-266.

$\text{H}_2\text{O} \cdot \text{Cl}^-$  [Dm. 24576] 1986

Zeegers - Huyskens Th;

ΔfH; Chem. Phys. Lett.,  
1986, 129, N 2, 172-175.



1987

20

9 Б3070. Газофазная сольватация  $Cl^-$  [молекулами]  $H_2O$ ,  $CH_3OH$ ,  $C_2H_5OH$ , изо- $C_3H_7OH$ , н- $C_3H_7OH$  и трет- $C_4H_9OH$ . Gas-phase solvation of  $Cl^-$  with  $H_2O$ ,  $CH_3OH$ ,  $C_2H_5OH$ , i- $C_3H_7OH$ , n- $C_3H_7OH$ , and t- $C_4H_9OH$ . Hiraoka Kenzo, Mizuse Susumu. «Chem. Phys.», 1987, 118, № 3, 457—466 (англ.)

С помощью масс-спектрометра ВД исследованы газофазные р-ции образования кластеров  $Cl^-(ROH)_{n-1} + ROH \rightleftharpoons Cl^-(ROH)_n$ , где  $ROH$  — вода или спирт,  $n \leq 11$ . В случаях  $CH_3OH$  и  $C_2H_5OH$  6 лигандов завершают оболочку, и при  $n \geq 7$  послед. молекулы располагаются во внешнем слое. Энергия связи  $D(ROH \dots Cl^-)$  увеличивается в ряду  $H_2O < CH_3OH < C_2H_5OH < \text{изо-}C_3H_7OH < \text{трет-}C_4H_9OH < \text{н-}C_3H_7OH$ . Высокая прочность связи н- $C_3H_7OH \dots Cl^-$  м. б. обусловлена тем, что к-тные атомы H групп  $CH_3$  и OH

X. 1988, 19, N 9

взаимодействуют с  $\text{Cl}^-$  с образованием наиболее выгодной конфигурации. Для р-ций  $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n + (\text{ROH})_n \rightleftharpoons \text{Cl}^-(\text{ROH})_n + (\text{H}_2\text{O})_n$  величины  $\Delta G_n^\circ$  при  $n=7$  сходятся к  $\Delta G^\circ$  переноса  $\text{Cl}^-$  из воды в  $\text{ROH}$  ( $n \rightarrow \infty$ ). Эта сходимость обусловлена компенсирующим изменением  $\Delta H_n^\circ$  и  $\Delta S_n^\circ$ . При  $n=1 \rightarrow 7$  происходит увеличение отклонения этих ф-ций от соотв. ф-ций переноса, что объясняется большей прочностью связей молекул спиртов с  $\text{Cl}^-$  по сравнению с водой и, как следствие неблагоприятным изменением энтропии из-за ограничения свободы движения этих молекул во внутр. оболочке кластера. По резюме

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

[om. 28865]

1987

Latajka Z., Schneiner S.,

$\Delta H^\circ(298\text{K})$  J. Chem. Phys., 1987,  
87, N10, 5928-5936.



$\text{HClO}_4 \cdot 5,5\text{H}_2\text{O}$

1987

Mootz D., Dellers E.-J.,  
et al.

J. Amer. Chem. Soc.,  
1987, 109, N 4, 1200-1202.

(corr.  $\text{HPO}_3 \cdot 7,67\text{H}_2\text{O}; \text{I}$ )

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

1987

(Δ<sub>f</sub> H°<sub>298</sub>)

meop. paper

C.A. 1988, 108,  
N 8

/ 108: 62701m Structure, energetics, and vibrational spectrum of water-hydrogen chloride. Latajka, Zdzislaw; Scheiner, Steve (Dep. Chem. Biochem., South. Illinois Univ., Carbondale, IL 62901 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(10), 5928-36 (Eng). H<sub>2</sub>O-HCl is studied using a no. of basis sets including 6-31G\*\* and variants which are augmented by a diffuse sp shell and a second set of d functions on O and Cl. Optimization of the geometry of the complex is carried out including explicitly electron correlation and counterpoise correction of the basis set superposition error (BSSE) at both the SCF and correlated levels. Correlation strengthens and shortens the H bond while BSSE correction leads to an opposite trend; these two effects are of different magnitude and hence cancel one another only partially. ΔH° (298 K) is calcd. to be -4.0 kcal/mol, 1/4 of which is due to correlation. Formation of the complex causes the strong intensification and red shift of the H-Cl stretching band normally assocd. with H bonding, whereas the internal vibrations of H<sub>2</sub>O are very little affected, except for a doubling of the intensity of the sym. stretch. With respect to the intermol. modes, the bends of the proton donor are of higher frequency than those involving the acceptor. While these intermol. bends are all of moderate intensity, comparable to the intramol. modes, the H-bond stretch ν<sub>3</sub> is very weak indeed, consistent with a principle involving subunit dipoles. All calcd. vibrational data are in excellent agreement with the spectra measured in solid inert gas matrixes.

$\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})^-$

1988

Larson J. W.,  
McMahon T. B.

J. Am. Chem. Soc. 1988,  
110 (4), 1087-93.

(see  $\text{H}_3\text{O}^+$ ; I)

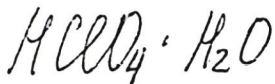
НСО

1990

Рабовский Б. Т.

Гос. н.-и. и проект. ин-т  
хлор. пром-сти. М.,  
1990. с. 1-19.

(ссылка, СЛО; I)



1991

/ 114: 254251k Nature of intermolecular forces in perchloric acid-water gas-phase mixtures. Karelin, A. I.; Dudin, A. V.; Rosolovskii, V. Ya. (USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1991, 36(2), 513-19 (Russ). IR absorption spectra (400-4000  $\text{cm}^{-1}$ ) are studied of  $\text{H}_2\text{O}:\text{HClO}_4$  gaseous mixts. (ratios from 5 to 130) at room temp. and up to 130°. The rotational-vibrational spectra do not depend on the above ratio and are equiv. to that of pure  $\text{HClO}_4$  which shows that  $\text{HClO}_4$  and  $\text{H}_2\text{O}$  form an ideal gaseous mixt. Conditions are considered for  $\text{H}_2\text{O}:\text{HClO}_4$  complex formation.

(Kp)

C.A. 1991, 114, N-26

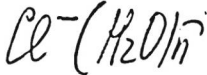
$\text{Cl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

1991

(Kp)

115: 36079q The phase diagram of the chlorine-water-chlorine hydrate system and the thermodynamic functions of the formations of chlorine hydrate. Kotai, Laszlo; Bodi, Ferenc; Sebestyen, Attila; Harfouch, Salman (Dep. Gen. Inorg. Chem., Univ. Veszprem, H-8201 Veszprem, Hung.). *Hung. J. Ind. Chem.* 1991, 19(1), 63-8 (Eng). The parameters of new invariant quadruple point were detd. from exptl. vapor pressure data and by the extrapolation of the dissocn. pressure or the satd. vapor pressure of the chlorine hydrate and chlorine. The phase diagram,  $p$ - $T$ , of chlorine hydrate was also introduced. The thermodynamical functions of the chlorine hydrate formation by the reaction  $\text{Cl}_{2(g)} + n\text{H}_2\text{O}_{(s)} = \text{Cl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}_{(s)}$  was calcd. The restrictions in applicability of the Clausius-Clapeyron equation within the system were demonstrated and the influence of the change in the compn. onto the values of the thermodyn. functions was evaluated.

C.A. 1991, 115, N 4

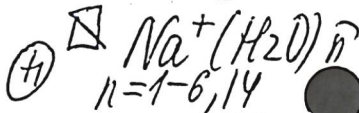


$$n=1-8, 14$$

1993

120: 227556f Limited effects of polarization for hydrated chloride and hydrated sodium(1+) ( $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n$  and  $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ) clusters. Jorgensen, William L.; Severance, Daniel L. (Dep. Chem., Yale Univ., New Haven, CT 06511-8118 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(5), 4233-5 (Eng). The enthalpies of binding for  $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1-8$  and 14) and  $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1-6$  and 14) clusters were calcd. by Monte Carlo simulation by using the OPLS (optimized potential for liq. simulation) parameters. The results are compared with mol. dynamics values obtained with the SPCE/POL polarization model, and the exptl data. The effects of including explicit polarization for these clusters are not as significant as previously indicated.

$\Delta H$ , meop. pac



$$n=1-6, 14$$

C.A. 1994, 120, N18

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

1993

120: 174624t Thermodynamics of Cl-H<sub>2</sub>O, Br-H<sub>2</sub>O, I-H<sub>2</sub>O, Au-Cl-H<sub>2</sub>O, Au-Br-H<sub>2</sub>O and Au-I-H<sub>2</sub>O systems at 298 K. Kelsall, G. H.; Welham, N. J.; Diaz, M. A. (Department of Mineral Resources Engineering, Imperial College, London, UK SW7 2BP). *J. Electroanal. Chem.* 1993, 361(1-2), 13-24 (Eng). The thermodyn. of halide-water and gold-halide-water systems are summarized as potential-pH and activity-pH diagrams, calcd. from recently published std. Gibbs energies of formation of the various species and phases considered. The stability of the gold-halide complexes increases in the order Cl < Br < I; which is reflected in the pH above which Au(OH)<sub>3</sub> (c) is predicted to form, though even the chloride complexes are stable at pH < 7. These diagrams enable predictions to be made of the behavior of gold in halide electrolytes; chloride is used in industrial gold electrorefining, and interest is increasing in coupled leach-electrowin processes involving electrogenerated chlorine, bromine and iodine.

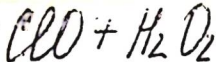
МЕМОРИУМ

ка. РК

T=298

(75) ☒

C. A. 1994, 120, N 14



1995

123: 209295c Ab initio prediction of the barrier height for abstraction of hydrogen from  $\text{H}_2\text{O}_2$  by ClO radical. Francisco, Joseph S.; Sander, S. P. (Jet Propulsion Laboratory, California Institute Technology, Pasadena, CA 91109 USA). *Mol. Phys.* 1995, 85(6), 1069-71 (Eng). The reaction of ClO radicals with  $\text{H}_2\text{O}_2$  has been investigated by ab initio MO theory with a variety of basis sets and levels of correlation. At the QCISD(T)/6-311++G(2df,2p) level of theory the heat of reaction for  $\text{ClO} + \text{H}_2\text{O}_2$  is  $-8.4 \pm 2 \text{ kcal mol}^{-1}$  and the classical barrier height is  $7.6 \pm 2 \text{ kcal mol}^{-1}$ .

( $\Delta_r H$ )

C. A. 1995, 123, N 16