**Наберухин, Юрий Исаевич.**

## Континуальная концепция строения воды и водных растворов неэлектролитов : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.04. - Новосибирск, 1984. - 292 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор химических наук Наберухин, Юрий Исаевич

Введение

Глава I. Основные идеи моделей строения воды

§ I.I. Краткий обзор моделей воды.II

1.1.1. Описание моделей . II

1.1.2. Сравнение непрерывных и смешанных моделей.

1.1.3. Двухструктурные модели.

1.1.4. Кластерные модели.

1.1.5. Машинное моделирование структуры воды.

§ 1.2 Доказательства отсутствия разорванных водородных связей в воде.

Глава 2. Теория формы полос в колебательных спектрах водных систем

§ 2.1. Основы теории формы спектральных линий в непрерывной модели

2.I.I. Теории уширения полос осцилляторов, возмущенных водородной связью

2.1.2. Связь мевду контурами комбинационного рассеяния и ИК-поглощения для молекул НОД

2.1.3. Температурная трансформация контуров молекул НОД.

§ 2.2. Расчет контуров валентных полос молекул

Н20 и JgO.

2.2.1. Метод парциальных осцилляторов.

2.2.2. Контуры комплексов воды с органическими основаниями.

2.2.3. Контуры чистой воды.

2.2.4. Резюме

Глава 3. Структура воды

§ 3.1. Понятие структуры жидкости

3.1 Л. Определение структуры.

3.1.2. Структура и ближний порядок.

3.1.3. Неудачное употребление термина "структура"

§ 3.2. Количественная интерпретация радиальной функции распределения воды.

3.2.1. Квазикристаллическое описание. -.

3.2.2. Характеристика экспериментального материала.

3.2.3. Анализ окриджской реализации модели Самойлова.

3.2.4. Критерий нельдоподобности сетки водородных связей.

§ 3.3. Случайная тетраэдрическая сетка как основа структуры воды.

Глава 4. Строение водных растворов неэлектролитов

§ 4.1. Проблема стабилизации.

4.1.1. Первоначальные данные о стабилизации сетки водородных связей воды неэлектролитом.

4.1.2. Исследование водных растворов неэлектролитов методом ИК-спектроскопии в области малых концентраций неэлектролита.

4.1.3. Сущность стабилизации.

§ 4.2. Проблема микрогетерогенности строения водных растворов.

4.2.1. Экспериментальные исследования водных растворов неэлектролитов при средних концентрациях. Колебательные спектры

4.2.2. Дифракция рентгеновских лучей

4.2.3. Термодинамические аномалии, связанные с микрогетерогенностью растворов.

§ 4.3. Общая картина строения водных растворов неэлектролитов.

Выводы.