

1. Cylinders, not cups, should be used whenever possible. The analysis of oscillating-body viscometer given by Kestin, Newell, and coworkers replaces all older, less rigorous theories. If, nevertheless, cups have to be used the rigorous solution (e. g. [6]), with 200 summation terms, is recommended for small or medium-sized bodies. Much simpler working equations [2, 5], derived from the same theory, are available for liquids with viscosities less than approximately 10 centipoise if larger bodies (cups or cylinders) with radius  $\sim 1$  cm are used. Noble metal spheres, with their inherent dimensional inaccuracies, must now be considered obsolete.
2. The method of timed intervals [2, 7] permits inherently accurate determinations of amplitude decrements and oscillational periods in quite simple instrumental arrangements. In particular, there is no need for accurate adjustments of the reflected light beam as done by Abe et al. [1] and others [8]; this latter technique is, in fact, less accurate because of residual uncertainty in locating the oscillation zero base line. The rigorous treatment used by us is available upon request in the form of a BASIC program.
3. High-temperature, absolute viscometers should be designed to permit accurate control measurements in water, whose viscosity is sufficiently well known. Furthermore, the design must enable an estimate to be made of the errors that arise in transition to high-temperature work for the check against water to be meaningful.

4. Be aware that gas bubble formation on the oscillating body surface may be a major source of error. Errors up to 10% have been observed [9].

These and other comments have been elaborated in an internal note which is available upon request to H. A. Øye, Institute of Inorganic Chemistry, Norwegian Institute of Technology, 7034 Trondheim-NTH, Norway.

#### References

- [1] Y. Abe, O. Kosugiyama, and A. Nagashima, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **84**, 1178 (1980).
- [2] K. Tørklep and H. A. Øye, *J. Phys. E: Sci. Instrum.* **12**, 875 (1979).
- [3] G. J. Janz, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9**, 791 (1980).
- [4] A. Nagashima, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **6**, 1133 (1977).
- [5] W. Brockner, K. Tørklep, and H. A. Øye, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **83**, 1 (1979).
- [6] J. M. Grouvel and J. Kestin, *Appl. Sci. Res.* **34**, 427 (1978).
- [7] T. Ohta, O. Borgen, W. Brockner, D. Fremstad, K. Grjotheim, K. Tørklep, and H. A. Øye, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **79**, 335 (1975).
- [8] J. Kestin and H. E. Khalifa, *Appl. Sci. Res.* **32**, 483 (1976).
- [9] W. Brockner, K. Tørklep, and H. A. Øye, *J. Chem. Eng. Data* **26**, June (1981).

(Eingegangen am 16. Juni 1981)

E 4973

## Titel der zur Veröffentlichung angenommenen Arbeiten

### Bestimmung der Elektronendichte in Hochfrequenz-Entladungen mehratomiger Gase

G. KRUPPA, H. SUHR

Institut für Organische Chemie der Universität Tübingen

G. JANZEN, W. STAIB

Institut für Plasmaforschung der Universität Stuttgart

(Eingegangen am 4. Juni 1981)

### Photoelectrochemical Cells with Polycrystalline Cadmium Sulfide as Photoanodes

M. NEUMANN-SPALLART and K. KALYANASUNDARAM

Institut de Chimie Physique, Ecole Polytechnique Fédérale, CH-1015 Lausanne, Switzerland

(Eingegangen am 19. Mai 1981, endgültige Fassung am 24. Mai 1981)

### Self Diffusion in Carbon Dioxide Near the Critical Point

K. KRYNICKI, A.-L. MERAGI, and J. G. POWLES

The Physics Laboratories, The University of Kent, Canterbury, Kent, England

(Eingegangen am 5. Juni 1981)

### The Mercury Sensitized Photolysis of Tetramethylsilane in the Temperature Range 650 – 800 K. The Heat of Formation of 2-Methyl-2-Silapropene

P. POTZINGER, B. REIMANN, and R. S. ROY

Max-Planck-Institut für Strahlenchemie, Stiftstraße 34 – 36, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr

(Eingegangen am 16. April 1981, endgültige Fassung am 20. Juni 1981)

**Untersuchung von Trübungserscheinungen im Einphasengebiet wäbriger Lösungen nichtionogener Tenside**

G. PLATZ

Institut für Physikalische Chemie der Universität Bayreuth, Postfach 3008, Universitätsstraße 30, D-8580 Bayreuth

(Eingegangen am 22. Dezember 1980, endgültige Fassung am 30. Juli 1981)

**Formation of an Inversion Layer in n-Type MoSe<sub>2</sub> Electrodes: Observation in the Presence of Highly Oxidizing Redox Systems**

C. D. JAEGER, H. GERISCHER, and W. KAUTEK

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4–6, D-1000 Berlin 33, Federal Republic of Germany

(Eingegangen am 20 Juli 1981)

**Zum thermischen unimolekularen Zerfall von Methanol**

K. SPINDLER und H. Gg. WAGNER

Institut für Physikalische Chemie der Universität, Tammannstraße 6, 3400 Göttingen

(Eingegangen am 26. Juli 1981)

**Calculated Koopmans' Defects for Transition Metal Compounds in the Framework of an Effective Semiempirical Hamiltonian: Bis( $\pi$ -pentadienyl)dinickel**

MICHAEL C. BÖHM

Institut für Organische Chemie der Universität, Im Neuenheimer Feld 270, 6900 Heidelberg, Federal Republic of Germany

(Eingegangen am 15. Juni 1981, endgültige Fassung am 11. August 1981)

## Buchbesprechungen

I. Prigogine and S. A. Rice (Eds.): *Advances in Chemical Physics*, Vol. XLIV. John Wiley and Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto 1980.

In der heutigen Zeit der zunehmenden Spezialisierung ist man immer mehr auf allgemein verständliche Übersichtsartikel angewiesen. Diesem Bedürfnis trägt auch dieser Band wieder Rechnung, in dem fünf Beiträge, vor allem aus dem Gebiet der Theorie der Flüssigkeiten und der Moleküleigenschaften, behandelt werden.

Der erste Beitrag von L. Engelbrecht und J. Hinze hat den Titel: "Molecular Properties Observed and Computed". Auf 137 Seiten wird die Berechnung der Gesamtwellenfunktion für ein isoliertes Molekül ausführlich wiederholt. Dabei wird von der adiabatischen Separation zwischen Elektronen- und Kernbewegung sowie der Rotation ausgegangen und dann alle Kopplungsterme, auch die relativistischen, diskutiert, wobei besonderer Bezug auf lineare Moleküle genommen wurde. Die Berechnung der molekularen Eigenschaften, wie es der Titel verspricht, kommt dabei leider etwas zu kurz.

Der zweite Beitrag von S. A. Adelman: "Generalized Langevin Equation and Many-Body Problems in Chemical Dynamics" präsentiert ein theoretisches Modell zur Behandlung der Dynamik chemischer Reaktionen in kondensierter Phase innerhalb der Näherung der klassischen Mechanik. Der Ausgangspunkt ist die Theorie der verallgemeinerten Brownschen Bewegung, die in dem ersten Kapitel ausführlich und gut verständlich mit Hilfe des modernen Korrelationsfunktions-Formalismus dargestellt wird. Dies führt zu einer effektiven Bewegungsgleichung mit einem Dämpfungsglied für das zu beobachtende System im Wärmebad. Aufgrund der Eigenschaften des Dämpfungskerns wird eine unendliche Hierarchie von gekoppelten effektiven Bewegungsgleichungen für das Vielteilchenproblem aufgestellt. Nach Einführung verschiedener Abbruchbedingungen, die verschiedene Modelle für das Wärmebad darstellen, wird dann die Berechnung der gemittelten Trajektorie bei endlicher Temperatur diskutiert. Im letzten Kapitel

wird dann eine einfache Modellrechnung für den Energieaustausch beim Stoß eines Atoms mit einer Festkörperoberfläche präsentiert, die als einfachstes Beispiel einer chemischen Reaktion in kondensierter Phase dienen soll.

Der Beitrag stellt sicherlich einen interessanten Einblick in die moderne theoretische Behandlung der Dynamik von Reaktionen in kondensierter Phase dar.

Der dritte Beitrag "Experimental and Theoretical Studies of Rotational Correlation Functions" von M. Evans, G. Evans and R. Davies beschäftigt sich mit der Dynamik von Flüssigkeiten und Mesophasen. In der Einleitung wird auf die verallgemeinerte Langevin Bewegungsgleichung und deren Lösung durch die Kettenbruchentwicklung von Mori eingegangen. Auch werden die experimentellen Methoden und Instrumente der Fouriertransform-Spektroskopie im THz Bereich beschrieben, die zur Bestimmung der Korrelationsfunktionen benötigt werden. In den folgenden Kapiteln werden dann die verschiedenen Modelle der Flüssigkeitsdynamik diskutiert, wobei vor allem der Einfluß der Rotations-Translationskopplung, respektive der entsprechenden Korrelationsmatrizen, auf die Absorptionsspektren im THz-Bereich eingegangen wird. Durchwegs wird an allen wichtigen Stellen der Bezug zum Experiment ausführlich dargestellt, wodurch dieser Beitrag sowohl für Theoretiker wie Experimentatoren von Interesse sein dürfte.

Der Abschnitt IV "On a Theoretical Description of Solvated Electrons" von A. M. Brodsky und A. V. Tsarevsky gibt eine Einführung in den heutigen Stand der Modellvorstellungen vom solvatisierten Elektron. Dabei werden kurz die verschiedenen Kontinuums- und Clustermodelle vorgestellt und anschließend die Transporteigenschaften in polaren und nicht polaren Medien diskutiert. Der Analyse der optischen Spektren des solvatisierten Elektrons wird ein längeres Kapitel gewidmet, wobei vor allem allgemein gültige Beziehungen wie Summenregeln und das Virialtheorem zur Beschreibung verwendet werden. Den Abschluß bildet ein kurzes Kapitel über die Thermodynamischen Eigenschaften des solvatisierten Elektrons.