**Федоров, Михаил Карлович.**

## Влияние давления на свойства и строение водных растворов 1-1 электролитов при температурах 423-623 К : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.04. - Ленинград, 1982. - 422 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор химических наук Федоров, Михаил Карлович

ВВЕДЕНИЕ.

I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

1.1. Структура жидкой воды и влияние на нее температуры и давления

1.1.1. Модели жидкой воды.

1.1.2. Результаты спектроскопических исследований структуры жидкой воды при повышенных температурах и давлениях •

1.1.3. Результаты "машинных" экспериментов по исследованию структуры жидкой воды

1.1.4. Влияние Р,Т-факторов на структуру жидкой воды.

1.2. Строение водных растворов электролитов и его зависимость от Р,Т,Х-факторов.

1.2.1, Термодинамические модели гидратации

1.2.2. Кинетические модели гидратации.

1»2,3, Ассоциация ионов в водно-электролитных растворах

1.2.4, Структура водных растворов электролитов, Разбавленные и концентрированные растворы.

1.2.5, Числа гидратации.

1.2.6, Влияние Р,Т-факторов на структуру растворов электролитов.

1.3. Уравнения для описания Р,У,Т,Х-свойств растворов.

1,3.1. Уравнение Тейта

1,3.2, Уравнение Тёйта-Гибсона и другие виды частных уравнений состояния для растворов электролитов.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1. Плотность растворов.бб

2.1 Л. Выбор метода измерений и описание установки.бб

2.1.2. Результаты измерений и сравнение с литературными данными

2.2. Давления насыщенного пара растворов.

2.2.1. Методика измерений.

2.2.2. Сравнение с литературными данными

2.3. Теплоемкость растворов

2.3.1. Средние удельные ортобарные теплоемкости водных растворов хлоридов лития, натрия, калия и морской океанической воды в интервале температур 298-Т.

2.3.2. Удельные теплоемкости морской океанической воды при температурах 298-363 К.

2.4» Вязкость растворов

2.4 Л ♦ Выбор метода измерений и описание установки

2.4.2. Методика эксперимента и оценка погрешности измерений

2.4.3. Сравнение с литературными данными

3. ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ СЖИМАЕМОСТЬ, КОЭФФИЦИЕНТЫ ТЕРМИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ, ВНУТРЕННЕЕ ДАВЛЕНИЕ РАСТВОРОВ

3.1. Изотермическая сжимаемость растворов

3.1 Л. Уравнение состояния для расчета коэффициентов изотермической сжимаемости.

3.1.2. Вычисление коэффициентов изотермической сжимаемости.

3.1.3. Изотермическая сжимаемость растворов и ее зависимость от Р,Т,Х-факторов.

3.2. Коэффициенты термического расширения и внутреннее давление растворов.

3.2.1. Вычисление коэффициентов термического расширения растворов.

3.2.2. Зависимость коэффициентов термического расширения растворов от Р,Т.Х-парамет

3.2.3. Внутреннее давление растворов и чистой воды при повышенных температурах.

3.2.4. Вклад энергии водородных связей в жидкой воде и его зависимость от температуры и давления.

4. ПАРЦИАЛЬНЫЕ МОЛЬНЫЕ ОБЪЕМЫ, ЭЛЕКТРОСТРИКЦИЯ, ЧИСЛА ГИДРАТАЦИИ

4.1. Парциальные мольные объемы и электрострикция

4.1.1. Вычисление парциальных мольных объемов и оценка их погрешности

4.1.2. Электрострикция и гидратация.

4.1.3. Способы вычисления электрострикции.

4.1.4. Расчет предельных парциальных мольных объемов растворенных солей и предельной электрострикции

4.2. Разделение предельной электрострикции на слагаемые ближней и дальней гидратации; числа гидратации.

4.2.1. Электрострикционные числа гидратации.

4.2.2. Гидродинамические числа гидратации.

4.2.3. Разделение предельной электрострикции на вклады ближней и дальней гидратации.

5. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И ЭНТРОПИЙНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВОДЫ В РАСТВОРАХ, КОЭФФИЦИЕНТЫ АКТИВНОСТИ РАСТВОРЕННЫХ СОЛЕЙ

5.1\* Энергетические и энтропийные характеристики растворителя

5.1.1. Вычисление ортобарных и изобарных активностей растворителя.

5.1.2. Вычисление коэффициентов активности растворителя.

5.1.3. Вычисление относительных парциальных мольных энтальпий и избыточных парциальных мольных энтропий растворителя

5.1.4. Зависимость парциальных мольных характеристик растворителя от Р,Т,Х-факторов

5.1.4.1. Коэффициенты активности растворителя

5.1.4.2. Избыточные парциальные мольные энтропии воды.

5.2. Коэффициенты активности растворенных электролитов

5.2.1. Вычисление средних моляльных коэффициентов активности растворенных электролитов и оценка их погрешности.

5.2.2. Концентрационная зависимость коэффициентов активности растворенных электролитов при комнатных температурах

5.2.3. Зависимость от Р,Т,Х-факторов. б. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О ГИДРАТАЦИИ И СТРОЕНИИ РАСТВОРОВ ЭЛЕКТРОЛИТОВ, ПОЛУЧАЕМЫЕ НА ОСНОВЕ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ И ВЯЗКОСТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

6.1. Термодинамические функции растворения и оценка температурной устойчивости гидратных комплексов . 230 6.1.1. Расчет интегральных функций растворения.

- б

6.1.2. Зависимость ортобарных функций растворения от Т,Х-параметров

6.1.3. Интегральные энтальпии растворения при давлениях, превышающих равновесное. ± ±

6.1.4. Оценка температурной устойчивости гидратных комплексов.

6.1.5. Р,Т,Х-зависимости интегральных энтальпий и энергий Гиббса образования растворов при давлениях,больших давления насыщения.

6.2. Вязкость растворов и гидродинамические параметры гидратации

6.2.1. Зависимость вязкости растворов от Р,Т,Х

- факторов при комнатных и повышенных температурах.

6.2.2. Гидродинамические параметры гидратации растворенных электролитов

7. НЕКОТОРЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПОЛУЧЕННЫХ

РЕЗУЛЬТАТОВ

7.1. Удельные энтальпии растворов

7.2. Оценка барической зависимости констант ионных равновесий в высокотемпературных водных растворах.

7.3. Возможности оценки степени ассоциации в концентрированных высокотемпературных растворах

ВЫВОДЫ.