**Емельянова, Ксения Александровна.**

## Станнат бария и антимонаты свинца в газовой фазе : структуры и термодинамические свойства : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.01 / Емельянова Ксения Александровна; [Место защиты: ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)»]. - Санкт-Петербург, 2020. - 147 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Емельянова Ксения Александровна

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности

Цель и задачи работы

Научная новизна работы и её теоретическая и практическая значимость

Методология и методы исследования

Положения, выносимые на защиту

Степень достоверности и апробация результатов

ГЛАВА

Обзор литературы

1.1 Газообразные соли кислородсодержащих кислот

1.1.1 Критерий термической устойчивости газообразных солей кислородсодержащих кислот

1.1.2 Метод оценки стандартных энтальпий образования газообразных солей. Изокатионные и изоанионные ряды

1.2 Газообразные соли кислородсодержащих кислот, образованные оксидами элементов 14 группы ПС

1.3 Оксиды углерода

1.3.1 Газообразные соли, образованные оксидами углерода

1.3.1.1 Карбонаты щелочных металлов

1.4 Оксиды кремния

1.4.1 Газообразные соли, образованные оксидами кремния

1.4.1.1 Силикат лития

1.4.1.2 Силикаты щелочноземельных металлов

1.5 Оксиды германия

1.5.1 Газообразные соли, образованные оксидом германия

1.5.1.1 Германат бария

1.5.1.2 Молибдаты германия

1.5.1.3 Вольфраматы германия

1.5.1.4 Фосфат германия

1.5.1.5 Борат германия

1.5.1.6 Ванадат германия

1.5.1.7 Ниобат германия

1.5.1.8 Танталат германия

1.6 Оксиды олова

1.6.1 Газообразные соли, образованные оксидом олова

1.6.1.1 Молибдаты олова

1.6.1.2 Вольфраматы олова

1.6.1.3 Фосфаты олова

1.6.1.4 Бораты олова

1.6.1.5 Ванадаты олова

1.7 Оксиды свинца

1.7.1 Газообразные соли, образованные оксидом свинца

1.7.1.1 Молибдаты свинца

1.7.1.2 Вольфраматы свинца

1.7.1.3 Ванадаты свинца

1.7.1.4 Бораты свинца

1.7.1.5 Перренат свинца

1.7.1.6 Фосфаты свинца

1.7.1.7 Арсенаты и антимонат свинца

1.7.1.8 Теллураты свинца

1.8 Квантово-химические расчеты равновесных структур и энтальпий реакций синтеза газообразных солей, образованных оксидами элементов 14 группы ПС

1.8.1 Карбонаты щелочных металлов

1.8.2 Силикаты щелочноземельных металлов

1.8.3 Соли германия

1.8.4 Соли олова

1.8.5 Соли свинца

ГЛАВА

Экспериментальная часть

2.1 Использованное оборудование

2.2 Методика эксперимента

2.2.1 Получение и обработка экспериментальных данных

2.2.1.1 Расшифровка масс-спектра

2.2.1.2 Расчет констант исследуемых реакций, энтальпий реакций и энтальпий образования газообразных солей

2.2.2 Квантово-химические расчеты

2.3 Экспериментальные результаты

2.3.1 Станнат бария и диоксид дибария

2.3.2 Антимонаты свинца

ГЛАВА

Обсуждение экспериментальных результатов

3.1 Определение парциальных давлений участников газофазных реакций и вычисление констант равновесия

3.2 Выбор различных квантово-химических методов расчета наборов молекулярных параметров и частот нормальных колебаний, необходимых для получения термодинамических функций

3.3 Проверка достоверности получаемых данных с позиций концепции термической устойчивости газообразных солей кислородсодержащих кислот и соответствия закономерности изменения энтальпии атомизации

3.4 Величины энтальпии реакций, полученные различными квантово-химическими методами

3.5 Оценка величин энтальпий атомизации и образования газообразных солей, не изученных к настоящему времени

3.6 Сравнение полученных нами результатов по определению величин энтальпий образования газообразных Ва202 и РЪ8Ъ204 с имеющимися литературными данными

3.7 Анализ литературных данных по определению энтальпий образования газообразных солей, образованных оксидами бария и свинца, которые, по нашему мнению, являются некорректными

3.8 Закономерность изменения энтальпий образования в изоанионных рядах солей, где катион-образующий оксид представляет собой МО, М = Ое, 8и, РЪ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ А Значения термодинамических функций, полученные с помощью различных методов квантовой химии для Ва202, Ва8и02 и 8щ02

ПРИЛОЖЕНИЕ Б Значения термодинамических функций, полученные с помощью различных методов квантовой химии для РЪ8Ъ02, РЪ8Ъ204 и 8Ъ406

ПРИЛОЖЕНИЕ В Аппроксимация справочных данных [28] по Фт для 8Ъ406

\_ о о

ПРИЛОЖЕНИЕ Г Аппроксимация справочных данных [28] по Ит — И298 для 8Ъ406

\_ о о

ПРИЛОЖЕНИЕ Д Аппроксимация справочных данных [28] по Ит — И298 для 8Ъ0

ПРИЛОЖЕНИЕ Е Данные для построения изокатионного ряда бария

ПРИЛОЖЕНИЕ Ж Данные для построения изокатионного ряда олова

ПРИЛОЖЕНИЕ И Данные для построения изокатионного ряда свинца