

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Традиционно одной из основных задач физической химии является установление взаимосвязей «структура – свойство» для индивидуальных веществ и «состав-свойство» для бинарных и многокомпонентных смесей. Цели и задачи физической химии, касающиеся установления закономерностей и взаимосвязей «состав – свойство», тесно переплетаются с решением целого ряда прикладных задач, связанных с разработкой и созданием новых способов производства веществ, материалов, а также с модернизацией существующих технологических процессов, предполагающих широкое использование смешанных растворителей. В химии растворов в последние десятилетия чрезвычайно большая роль отводится смешанным, чаще всего, бинарным растворителям, позволяющим направленно изменять и подбирать физико-химические свойства среды. При решении целого ряда практических задач нахождение составов, проявляющих синергетический эффект, является основной и конечной целью исследования. В этой связи, прогнозирование изотерм физико-химических свойств бинарных смесей является актуальной задачей физикохимии растворов.

Работа выполнялась в рамках «Основных направлений фундаментальных исследований», утвержденных постановлением Президиума РАН от 1 июля 2003 г. № 233 в части «Химия и физикохимия твердого тела, расплавов и растворов» и в соответствии с «Планом фундаментальных исследований Российской академии наук на период до 2025 года» в части 2.1.1. «Развитие теории конденсированных сред».

Цель работы. Основной целью данного исследования являлась разработка надежного количественного интерполяционного метода прогнозирования физико-химических свойств бинарных смесей неэлектролитов в температурных сериях и гомологических рядах (варьируемый второй компонент смеси) на основе эмпирических моделей изотерм.

Для достижения этих целей были поставлены следующие задачи:

- установление новых характеристик (инвариантов) изотерм, находящихся в линейной взаимосвязи с варьируемыми факторами (варьируемая температура, варьируемый второй компонент смеси), и пригодных к использованию в алгоритмах количественного анализа и прогнозирования изотерм;
- разработка новой модели баланса вкладов мнимых эндо- и экзотерм и формирование на ее основе инвариантов, дополняющих интегралы-инварианты изотерм в алгоритмах интерполяционного прогнозирования свойств бинарных смесей;
- определение на основе энтальпий испарения и нормальных температур кипения количественных критериев структурированности индивидуальных компонентов смесей, определяющих вид изотерм и коэффициенты эмпирических моделей, используемых для их описания;
- изучение особенностей изотерм физико-химических свойств бинарных смесей энантиомеров, обладающих одинаковой степенью структурированности;
- установление факторов и основных закономерностей, обуславливающих возникновение синергетических эффектов в смесях неэлектролитов.

Научная новизна работы состоит в том, что в ней для описания изотерм энтальпий смешения и других физико-химических свойств бинарных смесей предложена новая эмпирическая модель - модель баланса вкладов мнимых эндо- и экзотерм, инварианты которой позволяют прогнозировать температурные области возникновения микрогетерогенности и расслоения бинарной смеси;

- впервые для прогнозирования изотерм физико-химических свойств бинарных смесей неэлектролитов разработан алгоритм (во многом сходный с алгоритмами метода распо-

знавания образов), в котором использованы инварианты модели баланса и интегралы-инварианты различных порядков экспериментальных изотерм в крайних точках интерполяционного интервала;

- впервые на основе модифицированной неконтиуальной модели проведен статистический анализ нормальных температур кипения органических веществ различных классов, позволивший количественно оценить вклады специфических, дисперсионных и электростатических взаимодействий, а также предложить простые количественные критерии структурированности жидкости;

- впервые на основе неконтиуальной модели разработан новый метод количественной оценки вкладов специфических взаимодействий в энтальпии испарения веществ.

Практическая значимость работы состоит в том, что разработанный интерполяционный метод прогнозирования изотерм свойств бинарных смесей на основе интегралов-инвариантов изотерм позволяет при наличии лишь данных для двух-трех точек температурного интервала или для двух-трех членов гомологического ряда прогнозировать внутри данного интервала различные физико-химические свойства смесей.

Предложенные инварианты изотерм позволяют проводить кластерный анализ изотерм свойств бинарных смесей состава «постоянный компонент 1 – варьируемый компонент 2».

Публикации. Результаты работы опубликованы в 16 публикациях, в том числе в 4 статьях, 2 из которых опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК, и в 12 тезисах докладов конференций.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались и представлены в материалах на XVI Международной конференции по химической термодинамике в России (РССТ- 2007, г. Суздаль), Всероссийской научной конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации» (Новосибирск, 2007), Городской студенческой конференции «Междисциплинарные исследования в области естественных наук» (Казань, 2008), XII Международной конференции «Наукоемкие химические технологии - 2008» (Волгоград, 2008), I Всероссийской молодежной научной конференции «Молодежь и наука на севере» (Сыктывкар, 2008), Международной юбилейной научно-практической конференции «Передовые технологии и перспективы развития ОАО «Казаньоргсинтез» (Казань, 2008), Международном форуме «Актуальные проблемы современной науки» (Самара, 2008), IX Научной конференции молодых ученых, аспирантов и студентов научно-образовательного центра Казанского государственного университета "Материалы и технологии XXI века" (Казань, 2009), конференции "Материалы и технологии XXI века" (Казань, 2009), XVII Международной конференции по химической термодинамике в России (Казань, 2009) и Итоговых научных конференциях Казанского научного центра РАН за 2008 и 2009 гг.

Личный вклад автора: Диссертант лично получил основную часть экспериментальных и теоретических данных, провел статистическую обработку, детальное обсуждение и обобщение результатов, сформулировал основные положения в публикациях и написал диссертационную работу.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация изложена на 179 стр и состоит из введения, 4 глав, списка литературы из 133 наименований, 48 таблиц, 68 рисунков и 2 приложений.

Работа выполнялась в Лабораториях оптической спектроскопии и химии природных соединений Института органической и физической химии Казанского научного центра