

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Основной целью физико-химических исследований растворов является установление взаимосвязи термодинамических и физических свойств индивидуальных веществ, их бинарных и многокомпонентных смесей с составом, структурой и характеристиками межмолекулярного взаимодействия. Изучение и разработка новых методов прогнозирования свойств жидких смесей диктуется необходимостью решения и ряда практических задач, связанных с подбором оптимального состава растворителя для реализации конкретного технологического процесса, с разработкой многокомпонентных составов различного назначения, с оптимизацией процессов разделения природных и промышленных смесей. Во многих случаях процессы смешения компонентов сопровождаются значительным экзотермическим эффектом, который должен определяться экспериментально или прогнозироваться и учитываться при проведении тепловых расчетов технологических процессов. С задачами прогнозирования физико-химических свойств бинарных, тернарных и многокомпонентных смесей постоянно сталкиваются разработчики рецептур, что также требует выработки определенной методологии поиска оптимальных компонентов и выбора их оптимального соотношения. В этой связи поиск новых эмпирических моделей взаимосвязи свойств бинарных и тернарных смесей является **актуальной задачей.**

**Цели и задачи работы** состояли в разработке метода прогнозирования физико-химических свойств тернарных смесей неэлектролитов по свойствам бинарных систем. Для достижения данной цели решались следующие задачи: 1) статистический анализ известных моделей взаимосвязи свойств бинарных и тернарных смесей неэлектролитов; 2) разработка симметричных и асимметричных нестехиометрических моделей для прогнозирования физико-химических свойств тернарных смесей; 3) разработка алгоритма выбора асимметричной вершины при прогнозировании свойств по асимметричным моделям; 4) разработка нестехиометрической модели изотерм бинарных смесей с модифицированным по Гильдебранду-Скетчарду объемно-

дисперсионным вкладом; 5) установление закономерностей изменения изотерм свойств бинарных смесей (в гомологических рядах и температурных сериях) и прогнозирование на их основе свойств тернарных смесей.

**Научная новизна** результатов работы заключается в том, что в ней

- предложены новые нестехиометрические модели для прогнозирования свойств тернарных смесей неэлектролитов;
- разработан алгоритм выбора асимметричной вершины, основанный на сопоставлении структурно чувствительных физико-химических свойств индивидуальных компонентов тернарной смеси;
- разработан метод интерполяционного прогнозирования свойств тернарных смесей на основе интегралов-инвариантов изотерм бинарных смесей и инвариантов модели баланса вкладов мнимых эндо- и экзотерм.

**Практическая значимость работы** состоит в том, что предложенные нестехиометрические модели позволяют существенно повысить точность прогнозирования свойств тернарных смесей, сократить объем тестового эксперимента, ограничив его проведение лишь в характеристических точках (точки экстремумов).

**Апробация работы.** Результаты диссертации докладывались и представлены в материалах Международного форума «Актуальные проблемы современной науки» (Самара, 2008), VIII Республиканской школы студентов и аспирантов «Жить в XXI веке» (Казань, 2008), Международной юбилейной научно-практической конференции «Передовые технологии и перспективы развития ОАО «Казаньоргсинтез» (Казань, 2008), Городской студенческой конференции «Междисциплинарные исследования в области естественных наук» (Казань, 2008), II Международного студенческо-аспирантского форума «Актуализация социально-экономического и естественнонаучного образования в науке и предпринимательстве» (Казань, 2009), конференции "Материалы и технологии XXI века" (Казань, 2009), XVII Международной конференции по химической термодинамике в России (Казань, 2009), Итоговой научной конференции Казанского научного центра РАН за 2009 г., электронной конференции «Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных задач»