

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Прогнозирование физико-химических свойств бинарных систем является важной задачей физикохимии растворов, решение которой является шагом к пониманию свойств многокомпонентных систем. Существующие теории растворов предоставляют ряд моделей описания концентрационного хода изотерм, среди которых выделяются квазихимические модели, наделяющие универсальные (ван-дер-ваальсовы) взаимодействия стехиометрией, несвойственной их природе. Многие модели в значительной мере запараметризованы и имеют в своей основе небесспорные положения, связанные с описанием различных свойств веществ (или молекул) на основе принципа скалярной аддитивности этих свойств по образующим молекулу фрагментам. Широкое распространение в интерпретации свойств жидкостей и эффектов универсальной сольватации получил континуальный подход. Однако, использование этого подхода все больше убеждает исследователей в ограниченности его возможностей. Количественное объяснение на основе континуальной модели (включая ее различные модификации) такой фундаментальной характеристики вещества как температура кипения, приводимой в справочной литературе среди 3–5 самых основных его характеристик, также встречает трудности.

Таким образом, анализ современного состояния теории физикохимии растворов указывает на необходимость поиска новых моделей, которые бы связали энергию межмолекулярного взаимодействия с макро - и микрохарактеристиками среды. Поэтому диссертационная работа, посвященная разработке новой нестехиометрической модели описания изотерм физико-химических свойств бинарных смесей неэлектролитов, представляется **актуальной**.

Целью работы является разработка нестехиометрической модели описания изотерм физико-химических свойств бинарных смесей неэлектролитов.

Научная новизна и практическая значимость работы. Разработана и апробирована новая нестехиометрическая модель описания изотерм физико-химических свойств бинарных смесей неэлектролитов.

На основе этой модели дано количественное объяснение неидеальности изотерм физико-химических свойств бинарных конденсированных систем и крайней степени проявления этой неидеальности – синергетическим эффектам.

В отличие от известных моделей Редлиха-Кистера и Хванга (Hwang), являющихся, своего рода, полиномиальными лекалами для описания экспериментальных изотерм, разработанная модель позволяет разложить изотерму на составляющие, идентифицируемые как вклады процессов структурирования и взаимного деструктурирования компонентов.

Впервые для объяснения эффекта синергизма в свойствах бинарных смесей введено понятие "гипотетического гомоморфа" вещества и предложен способ расчета его физико-химического свойства.

Заложенный в основу разработанной модели подход к количественному выделению структурирующей, гомоморфной и деструктурирующей составляющих изотерм

свойств бинарных систем может быть использован для обоснования выбора исходных компонентов при создании бинарных систем с заданными свойствами.

Предложенная модель может быть использована также для предсказания температурных зависимостей физико-химических свойств бинарных систем.

Разработанная модель и полученные при ее использовании результаты могут найти применение как в теоретических областях физической химии (теория растворов), химической синергетики, наук о материалах, так и в решении широкого круга прикладных задач, связанных с разработкой стратегии поиска и создания новых композиционных материалов, каталитических систем, используемых в различных отраслях промышленности.

Предложен фракционно-межфазнотензиометрический метод анализа углеводородных техногенных смесей, позволяющий определять групповой углеводородный состав и содержание оксигенатных добавок.

Личное участие автора. Автор лично проанализировал и обобщил литературные данные по рассматриваемой проблеме. Он принимал активное участие в разработке нестехиометрической модели и ее апробации. Им получена основная часть экспериментальных данных, проведено обсуждение и обобщение результатов и сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

На защиту выносятся:

1. Нестехиометрическая модель описания изотерм физико-химических свойств бинарных смесей неэлектролитов.
2. Установленная взаимосвязь коэффициентов модели с молекулярными характеристиками компонентов бинарных смесей ван-дер-ваальсовых жидкостей.
3. Использование нестехиометрической модели в градуировке межфазнотензиометрического метода определения содержания метил-трет-бутилового эфира в многокомпонентных углеводородных системах.
4. Межфазнотензиометрический метод определения группового углеводородного состава светлых нефтепродуктов.
5. Обоснование введения понятия «гипотетического гомоморфа» и характеристик неидеальности гомоморфной составляющей изотерм.
6. Способ интерпретации синергетических эффектов в изотермах физико-химических свойств бинарных систем и отклонений от закона Рауля.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены на VII Международной конференции по интенсификации нефтехимических процессов (Нижнекамск, 2005 г.), Всероссийском симпозиуме "Эффекты среды и процессы комплексообразования в растворах" (Красноярск, 2006 г.), III Международной научной конференции "Теоретическая и экспериментальная химия" (Караганда, 2006 г.), I Региональной конференции молодых ученых "Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем" (Крестовские чтения) (Иваново, 2006 г.), III Всероссийской конференции «Физико-химические процессы в конденсированном состоянии и на межфазных границах» (ФАГРАН-2006) (Воронеж, 2006 г.), XVI Международной конференции по химической термодинамике в России (RCCT 2007) (Суздаль, 2007 г.),