

Modelowanie związków polarnych i asocjujących równaniem stanu opartym na idei udziałów grupowych

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, PW

Kierujący pracą: dr inż. Kamil Paduszyński

Opiekun naukowy: -

Afiliacja opiekuna naukowego: -

Termodynamiczny opis mieszanin jest ważny zarówno z poznawczego jak i użytecznego punktu widzenia. Przede wszystkim pozwala on interpretować makroskopowe dane eksperymentalne (np. właściwości fizyko-chemiczne, diagramy fazowe, nadmiarowe funkcje mieszania) na podstawie wartości różnego rodzaju parametrów występujących w stosowanych modelach (m.in. równaniach stanu, np. PC-SAFT). Najważniejsze jest jednak to, że przy pomocy pewnych modeli można przewidywać właściwości układów zupełnie nieznanymi. W szczególności umożliwia to „projektowanie” substancji chemicznych o określonych i pożądanym właściwościach bez jakiegokolwiek wysiłku eksperymentalnego. Najpopularniejszą ideą umożliwiającą przeprowadzenie tego typu projektowania jest idea udziałów grupowych, zgodnie z którą właściwości układu są wyrażone nie tyle przez właściwości cząsteczek go budujących co przez właściwości różnego rodzaju grup funkcyjnych tworzących te cząsteczki.

W ramach pracy, opracowane zostanie nowe równanie stanu oparte na metodzie PC-SAFT i metodzie udziałów grupowych, tzw. hetero-segmentowy model PC-SAFT (hs-PC-SAFT), dla kilku wybranych klas związków polarnych i/lub asocjujących (np. chloroalkany, ketony, alkohole). Model zostanie użyty zarówno do opisu szeregu właściwości substancji czystych, jak również do przewidywania właściwości mieszanin (równowaga cieczer-para, cieczer-cieczer, rozpuszczalność, ciepło mieszania, itp.). Wyniki obliczeń zostaną porównane z danymi eksperymentalnymi dostępnymi w literaturze.

Proponowana praca obejmuje:

1. Przegląd literatury przedmiotu.
2. Budowa bazy danych literaturowych – wybór substancji i układów badanych.
3. Przygotowanie/modyfikacja programu (obliczenia w środowisku MATLAB).
4. Obliczenia wstępne – parametryzacja modelu hs-PC-SAFT.
5. Przewidywanie właściwości mieszanin.
6. Analiza statystyczna i przegląd wyników.

Temat przeznaczony jest dla:	Proszę zaznaczyć właściwe pola wstawiając w sąsiedniej komórce znak „X”	
studentów kierunku*	Biotechnologia **	
	Technologia Chemiczna	X
studentów studiów*	I stopnia – praca inżynierska	
	II stopnia – praca magisterska	X
Wyrażam zgodę na zamieszczenie streszczenia pracy dyplomowej w wirtualnym dziekanacie***		TAK

* proszę wybrać jedną z 2 możliwych opcji

** jeżeli temat może być również przeznaczony dla studentów specjalności *Applied biotechnology*, proszę wstawić AX

*** proszę o wpisanie słowa TAK lub NIE