

Wspomagane komputerowo projektowanie cieczy jonowych do zastosowań w wybranych procesach rozdzielania

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, PW

Kierujący pracą: dr inż. Kamil Paduszyński

Opiekun naukowy: dr inż. Marek Królikowski

Afiliacja opiekuna naukowego: Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska

Ciecze jonowe to rozpuszczalniki wykazujące wiele interesujących właściwości fizykochemicznych. Ze względu na pomijalnie niską lotność oraz zdolność rozpuszczania różnego typu materiałów, rozważa się te związki jako interesujące rozpuszczalniki w nowoczesnych i „zielonych” procesach ekstrakcji i destylacji ekstrakcyjnej.

Ze względu na ogromną różnorodność struktur kationów i anionów tworzących ciecze jonowe, nie jest możliwe eksperymentalne zbadanie wszystkich możliwych związków. Dlatego też, modelowanie komputerowe właściwości cieczy jonowych, szczególnie diagramów równowag fazowych, wydaje się być bardzo interesującym narzędziem do projektowania struktur optymalnych z punktu widzenia konkretnych zastosowań.

W ramach pracy, do zaprojektowania optymalnej struktury zostaną wykorzystane dostępne modele oparte na systemach uczących się (np. sztuczne sieci neuronowe) oraz modele termodynamiczne, przede wszystkim COSMO-RS. Na podstawie obliczonych wartości selektywności w modelowych procesach odsiarczania benzyny i rozdzielania węglowodorów aromatycznych od alifatycznych zostanie wybrana optymalna struktura, która zostanie następnie zsyntezowana i scharakteryzowana fizykochemicznie. Wyniki projektowania komputerowego zostaną zweryfikowane eksperymentalnie na podstawie pomiarów równowag fazowych ciecz-ciecz i współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim.

Proponowana praca obejmuje:

1. Przegląd literatury przedmiotu.
2. Komputerowe projektowanie struktury cieczy jonowej (Matlab, COSMOtherm).
3. Wybór optymalnej struktury i synteza odpowiedniego związku.
4. Pomiary fizykochemiczne właściwości czystej cieczy jonowej (gęstość, lepkość, DSC).
5. Pomiary współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim oraz wyznaczenie diagramów fazowych ciecz-ciecz w układach ciecz jonowa-heptan-tiofen oraz ciecz jonowa-heptan-toluen – weryfikacja eksperymentalna wyników modelowania.

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	X
	II stopnia – praca magisterska	
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