

**PRZEWIDYWANIE TEMPERATURY TOPNIENIA CIECZY JONOWYCH
– NOWE MODELE OPARTE NA METODACH CHEMOINFORMATYCZNYCH**

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, PW

Kierujący pracą: dr inż. **Kamil Paduszyński**

Niskotopliwe sole organiczne, zwane cieczami jonowymi (CJ, ang. ionic liquids) wykazują szereg interesujących właściwości fizykochemicznych i termodynamicznych, istotnych z punktu widzenia wielu dziedzin zarówno podstawowych jak i stosowanych nauk chemicznych. To co czyni CJ szczególnie wyjątkowymi, to znacząco niższa temperatura topnienia tych soli w porównaniu z „tradycyjnymi” solami znanymi z chemii nieorganicznej. Jednakże, nie wszystkie sole nazywane cieczami jonowymi są w ciekłe w warunkach „pokojowych”, co ogranicza zastosowanie tych związków w procesach, w których kluczową rolę odgrywa faza ciekła (np. ekstrakcja).

Celem pracy jest opracowanie nowych modeli empirycznych, umożliwiających przewidywanie temperatury topnienia CJ w funkcji struktury chemicznej. Struktura jonów zostanie zakodowana w formie zbiorów liczb (zwanymi deskryptorami molekularnymi), obliczonych na podstawie składu atomowego i lokalnego otoczenia atomów, topologii cząsteczek, geometrii cząsteczek oraz rozkładu ładunku elektronowego. Związek struktura-właściwość zostanie przedstawiony w postaci popularnych metod obliczeniowych stosowanych w chemoinformatyce, takich jak: krokowa regresja wieloliniowa, sztuczne sieci neuronowe, maszyna wektorów nośnych. Modelowanie obejmować będzie zarówno regresję dostępnych danych eksperymentalnych (tzn. modele umożliwią uzyskanie prognostycznej wartości temperatury topnienia danej struktury), jak również ich klasyfikację (tzn. model pozwoli jedynie ocenić, czy dana CJ będzie cieczą czy stałą w zadanych warunkach). Dokładność i możliwości predykcyjnej nowych modeli zostaną porównane z modelami opisanymi w literaturze.

Proponowana praca obejmuje:

1. Przegląd literatury pod kątem modelowania temperatury topnienia CJ.
2. Budowa bazy danych temperatury topnienia CJ.
3. Nowe modele – regresja/klasyfikacja, walidacja wewnętrzna/zewnętrzna.
4. Analiza statystyczna dokładności otrzymanych modeli (wielkość odchyień, rozkład odchyień, itp.).
5. Porównanie nowych modeli z metodami opisanymi w literaturze.

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