

**EKSTRAKCJA ZWIĄZKÓW SIARKI Z MODELOWYCH PALIW CIECZAMI JONOWYMI
ZAPROJEKTOWANYMI METODAMI „IN SILICO”**

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, PW

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

Opiekun naukowy: dr inż. **Marek Królikowski**

Afiliacja opiekuna naukowego: Zakład Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, PW

Ciecze jonowe to rozpuszczalniki wykazujące wiele interesujących właściwości. 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/przewidywanie „in silico” właściwości cieczy jonowych, szczególnie diagramów równowag fazowych, wydaje się być bardzo ważnym oraz ambitnym problemem naukowo-inżynierskim.

Celem pracy jest zaprojektowanie struktur cieczy jonowych wykazujących wysokie wartości współczynników podziału i selektywności w procesie ekstrakcyjnej desulfuryzacji/denitryfikacji paliw ropopochodnych. Projektowanie zostanie wykonane w oparciu o screening obszernej biblioteki struktur z użyciem modelu COSMO-RS – zaawansowanego narzędzia współczesnej termodynamiki chemicznej opartego o metody z pogranicza chemii kwantowej i termodynamiki statystycznej. Modelowanie zostanie wykonane w oparciu o obliczenia równowagi podziałowej w układzie wieloskładnikowym {ciecz jonowa + modelowe paliwo}. Zaprojektowane struktury zostaną zsyntezowane, a następnie, celem weryfikacji, wykonane zostaną wieloetapowe ekstrakcje w układach z modelowymi paliwami. Pracę zakończy optymalizacja parametrów procesowych ekstrakcji (temperatura, liczba cykli, ilość ekstrahenta, ...).

Proponowana praca obejmuje:

1. Budowa biblioteki struktur kationów/anionów cieczy jonowych.
2. Screening biblioteki i wybór optymalnych struktur do syntezy
3. Synteza zaprojektowanej cieczy jonowej.
4. Pomiary fizykochemiczne czystej cieczy jonowej – DSC, gęstość, lepkość.
5. Eksperymenty ekstrakcyjne – analiza metodą GC.
6. Optymalizacja parametrów ekstrakcji.

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