

**WPLYW DEFINICJI GRUP FUNKCYJNYCH NA WLAŚCIWOŚCI MODELI OPISUJĄCYCH  
NADMIAROWĄ FUNKCJĘ GIBBSA**

**ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, PW**

Kierujący pracą: dr hab. inż. **Tadeusz Hofman**, prof. PW

Podstawowym modelami umożliwiającymi ilościowe lub półilościowe przewidywanie właściwości termodynamicznych mieszanin są modele oparte na koncepcji udziałów grupowych. Wykorzystują one parametry odnoszące się do wyraźnie wyodrębnionych elementów strukturalnych cząsteczek (grup funkcyjnych). Podstawą każdego modelu takiego typu jest definicja grup funkcyjnych, która w ogólnym przypadku nie jest jednoznaczna. W konkretnych realizacjach występuje tutaj duża dowolność, a wybrana definicja jest kompromisem pomiędzy dwiema przeciwstawnymi tendencjami – dokładnością opisu, co wymaga uwzględniania nawet niewielkich różnic pomiędzy grupami oraz uniwersalnością, dla zapewnienia której niezbędna jest minimalizacja liczby grup funkcyjnych. Zagadnienie to, jakkolwiek powszechnie uświadamiane, nie doczekało się systematycznego zbadania.

Celem pracy jest sprawdzenie wpływu dokładności różnych definicji grup funkcyjnych w cząsteczce na dokładność przewidywania właściwości termodynamicznych ciekłych mieszanin.

Problem do rozwiązania jest czysto obliczeniowy i wymaga umiejętności programowania w Pascalu lub języku pokrewnym.

**Proponowana praca obejmuje:**

1. Przegląd literatury dotyczącej praktycznych aspektów wykorzystywania metod udziałów grupowych.
2. Wybór zbioru danych.
3. Napisanie modułu programowego umożliwiającego optymalizację energetycznych parametrów grupowych.
4. Wykonanie obliczeń (parametryzacja + przewidywanie danych) dla różnych definicji grup.

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