

Badanie równowag ciecz-ciecz metodą przepływową

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, POLITECHNIKA WARSZAWSKA

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

Opiekun naukowy:

Afiliacja opiekuna naukowego:

Występowanie równowagi ciecz-ciecz stanowi główną cechę układów ekstrakcyjnych. Eksperymentalne badanie takich równowag wykorzystuje trzy możliwe techniki: analityczną oraz dwie dynamiczne, w których zmienia się albo temperaturę układu przy stałym całkowitym stężeniu, albo skład w warunkach izotermicznych. Ta ostatnia metoda jest szczególnie wygodna w badaniu układów trój- i wieloskładnikowych.

Praca ma charakter konstrukcyjny i eksperymentalny, a jej celem jest skonstruowanie przyrządu pomiarowego do pomiarów rozpuszczalności (krzywej binodalnej) z wykorzystaniem pompy dyfuzyjnej, której celem ma być precyzyjne dozowanie składników tworzących mieszaninę.

Proponowana praca obejmuje:

1. Przegląd literaturowy dotyczący technik pomiarowych równowagi ciecz-ciecz.
2. Zaznajomienie się z podzespołami mającymi stanowić elementy aparatu.
3. Budowę urządzenia.
4. Wypracowanie metodologii pomiarowej.
5. Wykonanie pomiarów dla układu modelowego skonstruowanym aparatem oraz równolegle za pomocą istniejącej aparatury, wykorzystującej technikę zmiany temperatury przy stałym stężeniu.
6. Szczegółową analizę błędów eksperymentalnych.

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

Trójskładnikowe układy ekstrakcyjne zawierające wodę i czynnik hydrofilowy

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, POLITECHNIKA WARSZAWSKA

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

Opiekun naukowy:

Afiliacja opiekuna naukowego: Zakład Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny PW

Znaczenie ciekłych mieszanin, w których występują dwie fazy ciekłe w równowadze ma wymiar zarówno praktyczny (układy ekstrakcyjne) jak i teoretyczny – są to układy wykazujące bardzo duże odchylenia od doskonałości i w związku z czym trudne w opisie. Wciąż istnieje potrzeba „projektowania” nowych układów ekstrakcyjnych na potrzeby konkretnego procesu technologicznego. Duże zainteresowanie budzą metody ekstrakcyjne oparte na dwufazowych układach zawierających wodę, składnik ciekły mieszający się z wodą bez ograniczeń oraz czynnik hydrofilowy, którego dodanie do układu dwuskładnikowego powoduje pojawienie się luki mieszalności.

Zaletą takich układów jest wielka różnorodność nowych możliwości ekstrakcyjnych oraz hydrofilowość obu faz, co jest szczególnie cenne w przypadku mieszanin związków o znaczeniu biologicznym. Jednocześnie samo zjawisko wystąpienia rozpadu na dwie fazy ciekłe nie jest do końca zrozumiane i możliwości przewidzenia ilościowego są bardzo ograniczone. Stąd też zalecenia przy tworzeniu układów ekstrakcyjnych są w większości empiryczne.

Celem pracy jest wykonanie pomiarów równowagi ciecz-ciecz i ciecz-ciało stałe dla układu woda + acetonitryl + cukier prosty w szerokim zakresie temperatur oraz odtworzenie pełnego diagramu fazowego .

Proponowana praca obejmuje:

1. Uzupelnienie przeglądu literatury dotyczącego istniejących danych oraz sposobu opisu układów typu: woda + niskocząsteczkowy związek polarny + czynnik wywołujący efekt analogiczny do wysalania.
2. Pomiary równowag ciecz-ciecz i ciecz-ciało stałe w układach trójskładnikowych.
3. Opis modelowy uzyskanych danych eksperymentalnych.

Temat przeznaczony jest dla:	Proszę zaznaczyć właściwe pola wstawiając w sąsiedniej komórce znak „X”	
studentów kierunku*	Biotechnologia **	X
	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

Wpływ izomerii pozycyjnej na entalpie parowania eterów alifatycznych

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, POLITECHNIKA WARSZAWSKA

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

Opiekun naukowy:

Afiliacja opiekuna naukowego:

Kluczem do opisu matematycznego właściwości fizycznych mieszanin jest prawidłowy opis ich oddziaływań międzycząsteczkowych. Poziom złożoności ciekłych mieszanin wyklucza praktyczne zastosowanie metod mechaniki kwantowej – w tym celu używa się głównie modeli półempirycznych. Te najważniejsze wykorzystują koncepcję udziałów grupowych, zakładającą ściśle zdefiniowane wartości parametrów strukturalnych i energetycznych opisujących grup funkcyjne i ich wzajemne oddziaływania. Główną wadą takiego sposobu postępowania jest niemożność odróżnienia właściwości energetycznych izomerów pozycyjnych, tj. związków różniących się jedynie konfiguracją grup funkcyjnych budujących cząsteczkę. Efekt ten nie jest dokładnie zbadany, stąd nie jest jasne, jaki błąd w konkretnym przypadku wynika z zastosowania metody udziałów grupowych.

Praca dyplomowa ma stanowić fragment projektu, którego celem jest bezpośrednio zbadanie wpływu wzajemnego ułożenia grup funkcyjnych na właściwości termodynamiczne. Obiektem badań będą entalpie parowania dla szeregu eterów alifatycznych, różniących się usytuowaniem grupy eterowej w prostym łańcuchu alifatycznym. Standardowe entalpie parowania są bezpośrednią miarą oddziaływań przyciągających pomiędzy identycznymi cząsteczkami.

Proponowana praca obejmuje:

1. Przegląd literaturowy dotyczący pomiarów entalpii parowania, a entalpii parowania eterów alifatycznych w szczególności.
2. Pomiar entalpii parowania w funkcji temperatury dla kilkunastu eterów alifatycznych - C8, C9, C10 i C12.
3. Dyskusję oddziaływań międzycząsteczkowych w badanych układach.
4. Zastosowanie opisu modelowego, opisującego znalezione zależności.

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

Wpływ definicji grup funkcyjnych na właściwości modeli nadmiarowej funkcji Gibbsa

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ, WYDZIAŁ CHEMICZNY, POLITECHNIKA WARSZAWSKA

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

Opiekun naukowy:

Afiliacja opiekuna naukowego: Zakład Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny 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 zdefiniowanie grup funkcyjnych, co w ogólnym przypadku nie jest jednoznaczne. W konkretnych realizacjach obserwuje się tutaj dużą 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 różnych definicji grup funkcyjnych w cząsteczce na dokładność przewidywania właściwości termodynamicznych ciekłych mieszanin.

Zagadnienie jest czysto obliczeniowe i wymaga umiejętności programowania w Pascalu lub języku pokrewnym.

Proponowana praca obejmuje:

1. Przegląd literatury dotyczący 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*	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