

## 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