

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