

Streszczenie w języku polskim rozprawy doktorskiej pt. „Ciecze jonowe w rozdzielaniu układów azeotropowych – badania eksperymentalne i modelowanie COSMO-RS”

Tematem rozprawy doktorskiej było zbadanie możliwości ekstrakcyjnych wybranych cieczy jonowych w rozdzielaniu układów azeotropowych. W tym celu zostało przeprowadzone szereg badań termodynamicznych, takich jak wyznaczenie współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim czy równowag fazowych układów trójskładnikowych ciecz-ciecz. Dodatkowo zbadano właściwości fizykochemiczne czystych cieczy jonowych: gęstości i lepkości.

W pierwszym etapie zbadano współczynniki aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim dla sześciu cieczy jonowych o anionie trifluorotris(perfluoroetylo)fosforanowym, (ang. *trifluorotris(perfluoroethyl)phosphate*, stosowany skrót $[FAP]^-$) różniących się strukturą kationu. Na podstawie otrzymanych wyników możliwe było obliczenie parametrów ekstrakcji: współczynników selektywności i wydajności. Badania pozwoliły ocenić wpływ budowy kationu na wartości tych współczynników. Wśród zbadanych związków była ciecz o kationie 1-etylo-3-metyloimidazoliowym, często występującym w literaturze, co pozwoliło porównać wyniki dla cieczy z anionami o innej strukturze. Współczynniki selektywności i wydajności zostały obliczone i porównane dla różnych typów układów ekstrakcyjnych: mieszanin węglowodorów alifatycznych i aromatycznych, węglowodorów alifatycznych i związków polarnych, wody i związków polarnych, a także mieszanin dwóch związków polarnych.

Następnie zbadano równowagi trójskładnikowe typu ciecz-ciecz w układach cieczy jonowych, heptanu oraz metanolu, tiofenu bądź benzotiofenu. Stanowią one rozszerzenie badań współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim i są istotnym elementem podczas projektowania i optymalizacji w przemysłowych procesach separacji. Umożliwiają ocenę przydatności cieczy jonowej w konkretnym procesie ekstrakcji, ponieważ pozwala to na dokładniejsze określenie zachowania cieczy jonowej jako ekstrahenta w różnych stężeniach badanej mieszaniny. Badania zostały wykonane dla cieczy o anionie $[FAP]^-$, a także rozszerzone o trzy inne z anionem bis(trifluorometylosulfonylo)imidkowym $[NTf_2]^-$ i kationami piperydyniowymi, różniące się długością podstawnika alkilowego, co pozwoliło ocenić jego wpływ na parametry ekstrakcji.

Dla badanych cieczy jonowych $[FAP]^-$ zmierzono dodatkowo ich gęstości i lepkości.

Na koniec przeprowadzono badania ekstrakcji związków siarki z mieszaniny modelowej paliwa. Zakres badanych cieczy został w tym przypadku rozszerzony o inne związki o różnych strukturach kationu i anionu. Wykonanie tego typu badań dostarcza dodatkowych informacji o ekstrakcji danego związku siarki podczas współekstrakcji innych związków siarki, jak również węglowodorów aromatycznych.

Jako podsumowanie badań eksperymentalnych, przeprowadzono obliczenia za pomocą modelu COSMO-RS współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim oraz równowag fazowych zbadanych układów trójskładnikowych. W przypadku współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim, pomiary rozszerzono o inne zbadane wcześniej związki: trifluorometanosulfonian 1-butylo-3-metylopirydyniowy, [1,3bmPY]-[CF₃SO₃] oraz cieczy [NTf₂]⁻. Pozwoliło to na określenie dokładności w przewidywaniu modelu w zależności od anionu cieczy jonowej. Analiza została dokonana pod kątem zarówno jakościowym, jak i ilościowym. Ponadto porównano zależność współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim od temperatury z badaniami eksperymentalnymi, a także sprawdzono wpływ różnych konformerów kationów i anionów cieczy jonowych na wartość współczynnika. W przypadku układów trójskładnikowych, obok porównania uzyskanych diagramów fazowych, zestawiono ze sobą wartości współczynników selektywności i podziału uzyskanych zarówno z obliczeń COSMO-RS jak i badań eksperymentalnych.