

Mieszając ze sobą dwie ciecz, w zależności od ich właściwości możemy otrzymać jednorodny roztwór, bądź mieszaninę, która rozdziela się na dwie widoczne ciekłe fazy nie mieszające się ze sobą. To czy dwie ciecz mieszają się ze sobą przy danym składzie zależy także od warunków zewnętrznych tj. temperatury i ciśnienia. Określenie warunków mieszania danych cieczy, a zatem określenie tzw. diagramu fazowego jest szczególnie ważne z punktu widzenia praktycznego zastosowania cieczy. Niezbędne jest to w różnych dziedzinach przemysłu takich jak chociażby przemysł kosmetyczny, farmaceutyczny, spożywczy, samochodowy, przemysł barwników i tuszy do drukarek jeśli patrzymy na stabilność otrzymywanych produktów. W przypadku kosmetyków, leków czy produktów spożywczych produkt musi pozostać jednorodną cieczą i nie ulegać rozwarstwieniu przy zmianie warunków, np. temperatury. Również przy produkcji i oczyszczaniu różnorodnych substancji mają użycie mieszane rozpuszczalniki, a warunki ich mieszania, bądź rozdziału są szczególnie istotne. Ograniczona mieszalność cieczy może być wykorzystywana do rozdziału składników w procesie ekstrakcji.

Ciecze jonowe to stosunkowo nowa grupa rozpuszczalników. Są to sole, które topią się poniżej 100°C. Są one zatem zbudowane z jonów, w odróżnieniu od cieczy molekularnych, takich jak np. woda, które składają się z obojętnych elektrycznie cząsteczek. Ich zastosowanie przedstawia się dosyć obiecująco zwłaszcza, że można je syntezować, tak aby wykazywały oczekiwane właściwości. Układy zawierające ciecz jonowe są uważane za przyjazne środowisku i zaliczane do tzw. „zielonej chemii” i z tego powodu wydaje się pożądane zastępowanie nimi tradycyjnych rozpuszczalników. Brak jest jednak wielu danych eksperymentalnych dotyczących warunków mieszania tych cieczy, a dostępne dane często różnią się ze sobą. Szczególnie brakuje danych dotyczących wpływu ciśnienia na mieszanie cieczy jonowych. Z powodu nieograniczonej możliwości syntezy nowych związków zasadne wydaje się być stworzenie bazy danych dla jak największej liczby związków, znalezienie korelacji pomiędzy nimi i z użyciem odpowiednich modeli matematycznych możliwości przewidywania właściwości mieszanin i warunków ich wzajemnego mieszania. W literaturze brak jest praktycznie danych dotyczących wpływu ciśnienia na warunki mieszania cieczy jonowych. Z kilku dostępnych prac, zajmujących się tym tematem wynika, że wpływ ciśnienia na równowagi ciecz – ciecz w mieszaninach zawierających ciecz jonowe jest zdecydowanie większy niż na mieszaniny „klasycznych” znanych nam rozpuszczalników. Jest to temat, w którym zostało jeszcze dużo do odkrycia.

Celem projektu jest wyznaczenie diagramów fazowych wybranych mieszanin cieczy jonowych wykorzystując dwie połączone techniki pomiarowe oraz wykorzystanie modeli matematycznych do opisu i przewidywania właściwości mieszanin cieczy jonowych w tym także wykorzystanie techniki uczenia maszynowego oraz sztucznych sieci neuronowych czyli elementów sztucznej inteligencji. Jedną z technik pomiarowych wykorzystuje zmianę wartości przepływu ciepła w kalorymetrze w trakcie zmian temperatury próbki związanej z rozwarstwieniem się cieczy. Drugą jest tradycyjną metodą wykorzystującą zmianę intensywności światła przechodzącego przez próbkę wywołaną pojawianiem się zmętnienia roztworu w momencie rozdziału faz. Nasz projekt przewiduje modyfikację aparatury pozwalającą na równoczesny odczyt temperatury rozdziału faz dwoma metodami.

Planujemy również wykonanie badań wpływu ciśnienia na mieszanie cieczy jonowych, wykorzystując proponowaną technikę, która eliminuje użycia gazów obojętnych w celu wytworzenia ciśnienia, co jest stosowane w wielu komercyjnych przyrządach, a powoduje rozpuszczanie gazów w cieczach, co może zmieniać warunki mieszania cieczy. Zastosowanie modeli matematycznych takich jak równania stanu opartych o dane i zależności termodynamiczne pozwala na szacowanie właściwości cieczy oraz równowag fazowych. Na podstawie uzyskanych i dostępnych już danych eksperymentalnych przewidujemy wyznaczenie parametrów, które pozwolą na przewidywanie warunków mieszania cieczy jonowych, tak żeby można było je wykorzystywać praktycznie bez konieczności wykonywania eksperymentu. Technika uczenia maszynowego również pozwoli na przewidywanie właściwości cieczy jonowych w szczególności równowag fazowych na podstawie wyszukiwania prawidłowości i korelacji w dostępnych już zbiorach danych. Dzięki zastosowaniu tej techniki będzie można skonstruować diagram fazowy wybranych cieczy na podstawie wprowadzonych parametrów dotyczących czystych cieczy.

Podsumowując przedmiotem proponowanego projektu jest unikatowa synergia: 1) modelowania termodynamicznego równowag ciecz-ciecz w oparciu o równanie stanu połączona z 2) wyznaczaniem diagramów LLE przy wykorzystaniu metod uczenia maszynowego i sztucznych sieci neuronowych oraz 3) eksperymentalnym wyznaczeniem dla wybranej grupy cieczy jonowych diagramów LLE w warunkach ciśnienia atmosferycznego oraz podwyższonego (do 7000 bar) w oparciu o własnej konstrukcji przyrządy pomiarowe. Połączenie tych trzech podejść umożliwi nie tylko odkrycie nieodkrytego obszaru - ciśnieniowych diagramów układów cieczy jonowych, ale poczynione modyfikacje w optymalizacji równań stanu oraz zaproponowane rozwiązania uczenia maszynowego pozwolą na nowo rzucić światło na modelowanie termodynamiczne równowag ciecz-ciecz.