

„Badanie właściwości termodynamicznych i strukturalnych cieczy polarnych i roztworów elektrolitów metodą Monte Carlo”

mgr inż. Rafał Górniak

promotor: Prof. UAM dr hab. S. Lamperski

Przedmiotem rozprawy doktorskiej jest opis właściwości termodynamicznych oraz strukturalnych cieczy polarnych oraz roztworów elektrolitu metodami symulacji Monte Carlo. Przedstawiono wyniki obliczonych wartości energii wewnętrznych, pojemności cieplnych oraz względnych przenikalności elektrycznych ośrodka dla modelu DHS (Dipolar Hard Sphere) oraz nieprymitywnego modelu elektrolitu w zespole kanonicznym. Określono także funkcje radialne i orientacyjne dla powyższych modeli.

Szczególny nacisk położono na obliczenie współczynników aktywności metodą IGCMC dla różnych modeli cieczy polarnych oraz dla nieprymitywnego modelu elektrolitu. Wyniki uzyskane z symulacji porównano z obliczonymi na podstawie teorii MSA (Mean Spherical Approximation) oraz PT (Perturbation Theory). W przypadku modelu DHS przebadano wpływ gęstości zredukowanej, momentu dipolowego, średnicy, oraz temperatury na wartości współczynnika aktywności. Natomiast, dla bardziej złożony model cieczy polarnej tj. dipolowego Yukawy i Stockmayera analizowano wpływ gęstości zredukowanej oraz zredukowanego momentu dipolowego na wartość współczynnika aktywności. Wyniki porównano z uzyskanymi z MSA, PT oraz z teorią opracowaną przez Kronome-Liszi-Szalai.

W przypadku nieprymitywnego modelu elektrolitu analizowano wpływ stężenia, zredukowanego momentu dipolowego oraz średnicy cząsteczek rozpuszczalnika na wartości współczynnika aktywności. Pokazano, że MSA daje lepsze wartości współczynników aktywności niż PT.