

Na przestrzeni ostatnich lat można zaobserwować wzmożoną aktywność naukową pod kątem badań ciśnieniowych i temperaturowych cieczy, w szczególności ich właściwości fizykochemicznych. Podstawowe kwestie, które należy ustalić to przede wszystkim tzw. termodynamiczne funkcje odpowiedzi układu oraz właściwości termofizyczne badanych substancji w szerokim zakresie temperatury i ciśnienia. Pozwala to ujawnić wszelkie regularności i anomalie zachodzące w badanym obiekcie. Studia te prowadzą nie tylko do rozwoju badań podstawowych nad fazą skondensowaną, ale także umożliwiają precyzyjniejsze dostosowywanie do potrzeb inżynierskich oraz, co jest również ważne w wielu aspektach, bardziej ekonomiczne zastosowanie w dziedzinach przemysłowych i społecznych.

Znajomość termodynamicznych funkcji odpowiedzi układu, właściwości termofizycznych oraz równowag fazowych odgrywają istotne znaczenie we wszystkich dziedzinach chemii, technologii i inżynierii chemicznej. Podstawowa relacja matematyczna łącząca je to tak zwane równanie stanu. Stanowi ono bowiem fundament wszystkich rozważań termodynamicznych, a zakres jego zastosowań jest bardzo szeroki nie tylko w chemii, ale i m.in. medycynie, biologii i biotechnologii, fizyce, *etc.* W literaturze przedmiotu od dawien dawna postuluje się wyprowadzanie równań stanu bazujących na termodynamice fenomenologicznej. Takie równania zawierają szereg parametrów, które zostały oszacowane w odniesieniu do konkretnych grup układów ciekłych. W konsekwencji badanie poszczególnych grup cieczy wymaga każdorazowo skonstruowania równania dedykowanego dla konkretnego układu. Wobec powyższego, często w miejsce termodynamiki fenomenologicznej stosuje się termodynamikę statystyczną, posiadającą szersze spektrum analizy strukturalnej i dające uniwersalne rozwiązanie. Jednakże jak pokazuje stan obecnej wiedzy w zakresie dostępności użytecznych z praktycznego punktu widzenia równań stanu, powyższe podejście również nie wydaje się w pełni słuszne. Przykładem jest rodzina najnowocześniejszych równań stanu *SAFT* charakteryzująca się wysoką funkcjonalnością. Niemniej jednak ich selektywność i stopień komplikacji natury matematycznej uniemożliwiają szeroką, łatwą i szybką stosowalność. Należy zwrócić uwagę, że pomimo tak wielu prób i wysiłków skierowanych na sformułowanie jednego uniwersalnego równania stanu, żadne z wyprowadzonych dotychczas modeli nie okazało się odpowiednio wydajne do przewidywania właściwości szerszej grupy cieczy w szerokim zakresie zmienności ciśnienia.

Realizacja niniejszego projektu ma na celu dogłębne poznanie natury oraz zachowania termodynamicznych funkcji odpowiedzi dla cieczy w szerokim zakresie zmienności temperatury i ciśnienia w połączeniu z innymi charakterystycznymi cechami stanu ciekłego jakimi są fluktuacje wielkości termodynamicznych.

Autorzy niniejszego projektu są przekonani, na podstawie dogłębnej analizy dotychczasowych dokonań naukowych innych autorów, że proponowane przez nich badania podstawowe w oparciu o ciekłe węglowodory alifatyczne i aromatyczne, alkohole alifatyczne i aromatyczne, paliwa ciekłe, płyny technologiczne z unikatowymi właściwościami jak ciecze hydrauliczne, a w szczególności nowoczesne rozpuszczalniki oparte na cieczach jonowych z czwartorzędowym kationem fosfoniowym, badane wysokociśnieniową metodą akustyczną oraz tranzycyjometryczną, poparte modelowaniem równań stanu, przyczynią się do skonstruowania względnie uniwersalnego i predykcyjnego równania stanu opartego na teoriach fluktuacji i perturbacji. Poprawnie zaprojektowany model matematyczny pozwoli na przewidywanie właściwości fizykochemicznych cieczy pod wysokim ciśnieniem bez uprzedniej znajomości jakichkolwiek parametrów odnoszących się do wysokiego ciśnienia. Ponadto proponowane badania, oprócz wyraźnych cech poznawczych, gdzie wyniki doświadczalne oraz modelowe będą stanowić ważny wkład w badania cieczy w obszarze wysokiego ciśnienia, zawierają również potencjalne aspekty aplikacyjne dla inżynierii płynów.

Nowatorskość prezentowanego projektu opiera się na połączeniu unikatowych wysokociśnieniowych badań połączonych z jednoczesnym modelowaniem termodynamicznym, pozwalającym sformułować proste równanie stanu przewidujące takie podstawowe wielkości jak: gęstość, izobaryczny współczynnik rozszerzalności termicznej oraz prędkość dźwięku dla cieczy w obszarze wysokiego ciśnienia bez uprzedniej wiedzy na temat natury cieczy pod ciśnieniem.