

## Streszczenie popularnonaukowe

Jednym z podstawowych celów nauki jest poznanie rzeczywistości. Uzupełnienie opisu obserwowanych zjawisk i ich mechaniki stanowią stałe fizykochemiczne, które pozwalają na jednoznaczne scharakteryzowanie badanego układu. Dobrze poznanym procesem występującym naturalnie w przyrodzie jest dyfuzja, której tempo określa współczynnik dyfuzji. Zjawisko to polega na spontanicznym przemieszczaniu się materii lub energii pod wpływem siły napędowej, którą jest różnica odpowiednio stężenia lub temperatury. Szczególnym przypadkiem środowiska, w którym dyfuzja pełni ważną rolę, jest układ powietrze/woda z dodatkiem substancji amfifilowych. Związki te dzięki swojej specyficznej budowie posiadają właściwość rozpuszczania się zarówno w cieczach polarnych (np. woda), jak i niepolarnych (np. tłuszcze). Zachowanie to można opisać potocznie znanym prawem rozpuszczalności, czyli „podobne w podobnym”. Kolejną cechą substancji amfifilowych jest zdolność adsorpcji, czyli tworzenia monowarstwy zorientowanych cząsteczek na granicy faz, którą opisuje wielkość nazywana nadmiarem powierzchniowym. Wynikiem tego procesu jest obniżenie napięcia powierzchniowego układu, które definiuje się jako minimalną konieczną ilość pracy, aby powiększyć pole między dwiema fazami o jednostkę powierzchni. Adsorpcję niejonowych związków o budowie amfifilowej na powierzchni międzyfazowej gaz/ciecz opisują dwa mechanizmy - dyfuzja cząsteczek związku do granicy między fazą objętościową i powierzchniową oraz adsorpcja molekuł na niej. Model kontrolowany dyfuzyjnie zakłada, że zjawisko gromadzenia cząsteczek następuje bardzo szybko względem procesu ich transportu do warstwy międzyfazowej. Znaczący to, że ostatni ze wspomnianych procesów limituje całe zjawisko. Model dyfuzyjny pozwalający na wyznaczenie zmiany nadmiaru powierzchniowego w czasie jest przedstawiony równaniem całkowym Warda-Tordai.

Celem projektu jest zbadanie zmiany napięcia powierzchniowego układu powietrze/woda z dodatkiem wybranych substancji amfifilowych. Ponadto, określony zostanie wpływ wartości stężenia danego związku na napięcie powierzchniowe. Z otrzymanych danych zostaną wyznaczone wartości nadmiaru powierzchniowego, który jest parametrem niemierzalnym w rozważanym układzie. Następnie, poprzez wyznaczenie stałych fizykochemicznych do danych eksperymentalnych zostaną dopasowane wybrane izotermy adsorpcji, czyli krzywe obrazujące ilość zaadsorbowanej substancji na powierzchni w warunkach stałej temperatury. Wyznaczone zostanie krytyczne stężenie micelarne, którego przekroczenie powoduje brak wpływu wzrostu stężenia związku na spadek napięcia powierzchniowego układu. Kolejnym krokiem jest komputerowe obliczenie równania całkowego Warda-Tordai połączonego z izotermami adsorpcji, w celu określenia zachowania rozwiązania w zależności od wybranej izotermy. Ponadto, przeprowadzone zostanie badanie wpływu zmiany wartości współczynników występujących w równaniu Warda-Tordai na jego rozwiązanie. Ostatnim elementem jest zdefiniowanie, a następnie numeryczne rozwiązanie zagadnienia odwrotnego porównującego dane eksperymentalne nadmiaru powierzchniowego z wartościami otrzymanymi z symulacji, w celu wyznaczenia współczynnika dyfuzji wybranych związków amfifilowych w układzie powietrze/woda. Postawione zadanie jest problemem z zakresu optymalizacji, czyli poszukiwania najlepszego rozwiązania.

Szczególną innowacyjność w badaniach podstawowych wprowadza ostatni z przedstawionych punktów. W literaturze zauważalny jest brak jednoznacznie zdefiniowanego współczynnika dyfuzji dla wielu związków o budowie amfifilowej. Istnieje szeroki wachlarz metod doświadczalnych i przybliżonych wyznaczania współczynnika dyfuzji, jednak przedstawiana przez naukowców wartości różnią się znacznie między sobą, ze względu na poczynione uproszczenia. Rozwiązanie zagadnienia odwrotnego pozwala określić tą stałą fizykochemiczną z założoną dokładnością w sposób niebudzący wątpliwości. Ważną kwestią jest wprowadzenie izotermy adsorpcji o odpowiednim stopniu skomplikowania, aby wyniki symulacyjne odzwierciedlały dane eksperymentalne w jak największym stopniu. Dodatkową korzyścią jest uzyskanie stałych występujących w równaniach izoterm adsorpcji, które również posiadają swoją interpretację fizyczną, a ich wartość charakteryzuje dany układ. Komputerowa analiza zebranych pomiarów eksperymentalnych pozwoli na uzupełnienie opisu literaturowego zjawiska adsorpcji kontrolowanej dyfuzją na granicy faz powietrze/woda, przyczyni się do rozwoju interdyscyplinarnego obszaru badań oraz da szansę stworzenia jednoznacznej metody poszukiwania współczynnika dyfuzji.