

Väitöstiedote

4.8.2014

Termodynaamisia tietoja ja laskentamenetelmiä uusille polttoainekomponenteille.

Väitöskirjan nimi	Measurements and modeling of physical properties for oil and biomaterial refining
Väitöskirjan sisältö	Fossiilisten polttoaineiden loppuminen tulevaisuudessa on luonut tarpeita uusiutuvien energianlähteiden käyttöönotolle. Uusien prosessien tai polttoaineiden lisäkomponenttien kehitys vaatii termodynaamisia tietoja komponenttien ominaisuuksista tai luotettavat menetelmät näiden ominaisuuksien arvioimiseksi. Kokeellisia ja laskennallisia tuloksia yhdistämällä voidaan tuottaa nopeasti termodynaamisia ainearvoja uusien tai olemassa olevien prosessien suunnitteluun. Tässä työssä on mitattu faasitasapainoja 40:lle teollisesti merkittävälle seokselle. Saadut termodynaamiset tiedot täydentävät toisiaan ja antavat mahdollisuuden mallintaa eri kemikaalien fysikaalisia ominaisuuksia eri olosuhteissa entistä luotettavammin. Tulosten perusteella on kehitetty laskentaparametreja puoliempiiriisiin termodynaamisiin malleihin (Wilson, NRTL, UNIQUAC). Kokeellisia tuloksia on vertailtu kriittisesti ennustavien mallien UNIFAC ja COSMO-RS antamiin arvoihin. Väitöskirjassa on esitetty uusi laskentamenetelmä, joka tehostaa aiemmin tutkimattomien kemikaalien aineominaisuuksien arviointia tunnettujen yhdisteiden ominaisuuksien perusteella. Tutkitut seokset, ennustavien menetelmien arviointi ja uusi laskentamenetelmä parantavat tietämystä kemikaaleista, joita ei ole aiemmin käytetty laajemmin kemian teollisuudessa, mutta joita tarvitaan polttoaineiden kehitystyössä. Uuden tekniikan käyttö ja termodynaamiset tiedot mahdollistavat teollisten prosessien paremman optimoinnin.
Väitöskirjan ala	Kemian tekniikka
Väittelijä	M.Sc. Anna Zaitseva
Väitöksen ajankohta	15.8.2014 klo 12
Paikka	Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu, Kemian tekniikan talo, Komppa-sali, Kemistintie 1, (käynti Biologinkujan puolelta), Espoo
Vastaväittäjä	Professori Wolfgang Arlt, Friedrich Alexander University, Saksa
Valvoja	Professori Ville Alopaeus, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu, biotekniikan ja kemian tekniikan laitos
Väitöskirjan verkko-osoite	https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/51
Väittelijän yhteystiedot	M.Sc. Anna Zaitseva anna.zaytseva@aalto.fi 040 588 4482