



národní
úložiště
šedé
literatury

Experimentální termodynamika fázových rovnováh - quo vadis?

Wichterle, Ivan
2015

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-201058>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 25.04.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní [nusl.cz](http://www.nusl.cz) .

Experimentální termodynamika fázových rovnovah – quo vadis?

Ivan Wichterle

Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, E-mail: wi@icpf.cas.cz

Poohlédeme se po minulosti a současnosti experimentálního výzkumu fázových rovnovah a pokusíme se odhadnout jeho budoucnost.

Podíváme se, jak rozvoj chemických technologií v čase měnil repertoár systémů, od kterých se potřebovala chybějící experimentální data. A také na to, jak byla „manuální“ náplň výzkumu fázových rovnovah ovlivněna vývojem přístrojových možností, co přinesla výpočetní technika, a jak se oba tyto faktory neblaze podepisují na celosvětovém bádání v důsledku většího člověčího pohodlí.

Tyto nepříliš příznivé aspekty mají svůj dopad v celém západním světě. Druhdy „experimentální velmoci“ upadají, ale jsou nahrazovány pilnými orientálcí a méně známými laboratořemi se standardním vybavením. Podle počtu publikací kvantita měření stagnuje, a kvalita se relativně zhoršila navzdory stále lepšímu experimentálnímu zázemí. Zdá se, že situace nebude lepší.

Ve zlatých 30. až 50. letech minulého století se ve velkém publikovaly nejrůznější modifikace základní rovnovážné techniky. Od založení pražské termodynamické školy (E. Hála) uplynulo skoro sedm desetiletí, během kterých byly vyvinuty desítky variant rovnovážných aparátů a experimentálních postupů, které vyvrcholily patrně nejdokonalejším známým cirkulačním přístrojem. Ale i jinde se před 30–40 roky vymýšlely nové metodiky, např. skoro kompletně automatizovaná sestava nebo pokus o standardizaci experimentálního postupu. Náročná špičková zařízení se nerozšířila; pokud se někde experimentuje, tak již jen na snadno komerčně dostupných měřicích sestavách, jež mají daleko do získávání prvotřídních a už vůbec ne speciálních dat.

Predikční metody – coby náhražka experimentů – by se sice měly stále zlepšovat, ale ani ty neposkytují spásu. Když budou chtít projektanti chemických procesů navrhnout optimální řešení (a to nejen z ekonomického hlediska), budou se muset v konečné fázi vždy spolehnout na experimentální potvrzení, např. z čtvrtprovozních údajů. Jakákoliv laboratorní data nejsou jen nenahraditelná, ale – když už nic jiného – jsou příspěvkem pro vývoj budoucích předpovědních modelů. I v budoucnosti to bude totiž úplně stejné tak jak tomu bylo nedávno či dnes: všechny dnešní modely jsou založeny na stovacet let trvající tvorbě báze experimentálních dat o fázových rovnováhách, která pokrývá přibližně 20 000 směsí a obsahuje asi čtvrt milionu experimentálních bodů. Během jednoho století měření si však málokterý experimentátor uvědomoval, že jeho data jsou pouze jednou z kapiček, které později pomohou vytvořit něco obecnějšího.

To platí i dnes. Pracnost a nákladnost pokusnění je pádný protiargument, avšak jen budoucí integrace dat a zevšeobecnování mnoha zdánlivě okrajových experimentů, které samy o sobě mnoho neznamují, může vést k dalšímu pokroku. K popudu pro získávání nových experimentálních dat však bohužel vůbec nepřispívá pohodlné vysedávání u počítačů při simulování dat.