

Tóth Petra (SZTE Móra Ferenc Szakkollégium), Szűcs Tímea, Czakó Gábor

A $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ reakció mechanizmusainak és dinamikájának elméleti modellezése

Munkánk első lépéseként a $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ rendszer potenciálisenergia-felületének (PES) stacionárius pontjait térképeztük fel. A lehetséges reakcióutak a hidrogén-absztrakció, metil-szubsztitúció, hidrogén-szubsztitúció és cianid-szubsztitúció, melyek sorban a következő termékekhez vezetnek: $\text{HCl} + \text{CH}_2\text{CN}$, $\text{ClCN/CNCl} + \text{CH}_3$, $\text{ClCH}_2\text{CN} + \text{H}$ és $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{CN}$. Az egyetlen exoterm reakció a hidrogén-absztrakció, a többi mind endoterm. Meghatároztuk a benchmark klasszikus és rezgésileg adiabatikus relatív energiákat a legpontosabb, CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVQZ értékek felhasználásával, további korrekciókat is figyelembe véve. Ezek a zérusponti-energia korrekció, a (T)-n túli elektronkorreláció, a skaláris relativisztikus effektus, a törzselektron korreláció és a spin-pálya csatolás.

Az eredményekre alapozva egy teljes dimenziós analitikus potenciálisenergia-felületet fejlesztettünk, permutációra invariáns polinóm megközelítést és a ROBOSURFER programcsomagot alkalmazva. Trajektória szimulációkat futtattunk kvázi-klasszikus közelítést alkalmazva, a PES-en különböző ütközési energia és impakt paraméter értékeket beállítva. Ezek alapján meghatározható például a reakcióvalószínűség, az integrális hatáskeresztmetszet és a szórási szög eloszlás.

MUNKÁNKAT TÁMOGATTA A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL (K-125317), A TKP2021-NVA-19 SZÁMÚ PROJEKT AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM NEMZETI KUTATÁSI FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL NYÚJTOTT TÁMOGATÁSÁVAL ÉS A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA LENDÜLET PROGRAMJA.

A KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS MINISZTERIUM ÚNKP-23-2 - KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSzíROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.

Tóth Szilárd (Újvidéki Egyetem Európa Kollégium)

Pneumatikus rendszer fogyasztásának tesztelése

Az utóbbi évtizedekben egyre több és több figyelmet kap az energiahatékonyság. A mérnökök jelentős időt fektetnek a fogyasztás optimalizálásába, ami még nagyobb értelmet kap napjaink energiaárait szemlélve. A fogyasztást legegyszerűbben a befektetett energia és a hasznos munka relációjaként lehet

leírni. Egy igazán jó rendszer nemcsak a funkcióját végzi el, de ezt úgy teszi meg, hogy a feladat elvégzéséhez a legkevesebb energiát használja fel. Kutatómunkám alapvető gondolata ezen alapszik.

A pneumatika a magasnyomású levegővel működő rendszerekkel foglalkozó tudomány. A levegő megszámlálhatatlan mennyiségben vesz körül bennünket, ebből kifolyólag ideális alapanyagoknak tűnik. A gond ott adódik, hogy a folyamat, amellyel használható magasnyomású levegőt kapunk, relatív drága. A pneumatikában a használt levegő a légkörbe távozik, ennek következtében sok az elvesztegetett erőforrás, emiatt rendkívül fontos megtalálni a rendszer ideális nyomását, azt a nyomást, amellyel a befektetett energiát a leeffektívebb módon használjuk fel.

A munka célja megtalálni azt a minimális nyomást, amellyel a rendszer késleltetés nélkül elvégzi a funkcióját, vagyis minimális befektetett energia mellett zavartalanul működik. A problémát gyakorlati szempontból közelítettem, ami azt jelenti, hogy egy valós rendszer fogyasztását analizáltam. Az eredmények alapján egy optimalizált rendszer szignifikánsan kevesebb energia felhasználásával is el tudja végezni feladatát az adott kereteken belül.

Tóth Ugyonka Helga (EKKE Kepes György Szakkollégium), Hantal György, Szőri Milán, Jedlovsky Pál

A HCN adszorpciója amorf jégen, csillagközi körülmények között

A hidrogén-cianid (HCN) közönséges körülmények között illékony, áttetsző, jellegzetes illatú folyadék. Ismeretes, hogy a HCN megtalálható a csillagközi térben. Jeges felszíneken való reakcióképessége nagyobb biomolekulák kialakulásához vezethet, így például az adeninéhez, mely formálisan a HCN pentamerje. Ilyen oligomerizációs reakció csillagközi körülmények között is végbemehet, feltéve, hogy a HCN koncentrációja elég nagy. A HCN-dúsulás egyik lehetséges mechanizmusa az adszorpció alacsony sűrűségű amorf jégen (low-density amorphous ice, LDA-ice), mely az üstökösök és a csillagközi por felszínét borítja.

Ezt az adszorpciós folyamatot a nagykanonikus Monte Carlo (GCMC) számítógépes szimulációs módszerrel vizsgáltuk, nagykanonikus (μ, V, T) sokaságon, három különböző hőmérsékleten, nevezetesen 50K, 100K, 200K-en. A hidrogén-cianid kémiai potenciálját szisztematikusan változtattuk, az adszorbeálódott molekulák számát a kémiai potenciál függvényében számítottuk. Az így kapott eredményekből meghatározhattuk az adszorpciós izotermát mindhárom hőmérsékleten. Az első rétegben adszorbeálódott, illetve a tömbfázisba beoldódó HCN molekulák meghatározására az ITIM (Inden-