

Tóth Petra, Czakó Gábor

## A $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ reakció potenciálenergia-felülete és rezgési módspecifikus reakciódinamikája

A klóratom és az acetonitril ( $\text{CH}_3\text{CN}$ ) reakciója kiváló modellrendszer a többatomos reakciók mechanizmusának és dinamikájának tanulmányozására, különösen olyan esetekben, amikor több versengő reakcióút és bonyolult energiaátadási folyamat játszik szerepet. Kutatásunk célja egy nagy pontosságú, teljes dimenziós potenciálenergia-felület (PES) létrehozása és a reakció dinamikájának részletes feltárása volt. Ehhez kiterjedt *ab initio* számításokat végeztünk a lehetséges reakciócsatornák (hidrogén-absztrakció, hidrogén-, metil- és cianid-szubsztitúció) jellemzésére, majd a kapott adatok alapján analitikus PES-t fejlesztettünk, amelyen kvázi-klasszikus trajektória szimulációkat hajtottunk végre különböző ütközési energiák, impakt paraméter értékek alkalmazásával. A dinamikai vizsgálatok során elemeztük a reakciómechanizmusok energiatartását, a szórás- és támadási szögeloszlásokat és az energiamegoszlás jellemzőit is a keletkező termékek között. Emellett rezgési módspecifikus szimulációkat is végeztünk, amelyek során a reagáló  $\text{CH}_3\text{CN}$  molekula különböző kezdeti rezgési gerjesztéseinek hatását vizsgáltuk az energiaátadásra, a reakcióhatékonyságra és a dinamikai tulajdonságokra. Eredményeink részletes képet adnak a reakció dinamikai tulajdonságairól, és hozzájárulnak a komplex reakciódinamikai mechanizmusok mélyebb elméleti megértéséhez.

Török Péter

## LiCl átalakítása LiOH-dá trikalcium-alumináttal

Az elmúlt évtizedben a lítium-hidroxid-monohidrát ( $\text{LiOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) prekursorként egyre nagyobb szerepet játszik a lítiumion-akkumulátorok, ezen belül az ún. NMC-katódok előállításában. A LiOH előállításának egyik legfontosabb kiindulási anyaga a felszíni és felszín alatti vizekben található LiCl, ami a világ teljes lítiumkészletének kb. kétharmadát teszi ki. A jelenlegi szintézismódszer a  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  lecsapásán és  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -dal történő hidroxiddá alakításán alapszik. Mivel az utolsó lépés tömény szuszpenziók esetén ( $> 10 \text{ g L}^{-1} \text{ Li}^+$ ) alacsony konverzióval megy végbe, fontos kutatási irányvá vált a LiOH  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  köztitermék kihagyásával történő szintézise. E célból munkánk során a LiCl, CaO és trikalcium-aluminát ( $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ ) reakcióját vizsgáltuk, mely során egy lépésben LiOH képződik, kloridion-tartalmú réteges kettős hidroxid (Friedel-só)  $[\text{Ca}_2(\text{Al}(\text{OH})_6)]_2\text{Cl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  kiválása mellett.

A reakciók kivitelezése során a kiindulási  $\text{Li}^+$  koncentráció  $5 \text{ g L}^{-1}$  és  $10 \text{ g L}^{-1}$