

3.3. Intermolekuláris és felületi kölcsönhatások meghatározására szolgáló kromatográfiás és kalorimetriás kísérleti eljárások és termodinamikai számítási módszerek fejlesztése

Kutatásvezető:

Dallos András

Részvevők:

dr. Járvás Gábor, Gubik Zsuzsanna, Capári Dániel, Kontos János,
Mészáros Brigitta, Söjtöri Szabina

1. Gáz-szilárd kölcsönhatások, adszorpció és felületi energetikai jellemzők kutatások

Célok:

- Potenciális adszorbensek, kompozit-alkotók felületi energiája diszperziós és specifikus részének, a felület sav-bázis állandóinak meghatározása
- A Henry-tartományon belüli adszorpció izotermák, adszorpció termodinamikai paraméterek (pl. adszorpció entalpia) meghatározása

Eszközök:

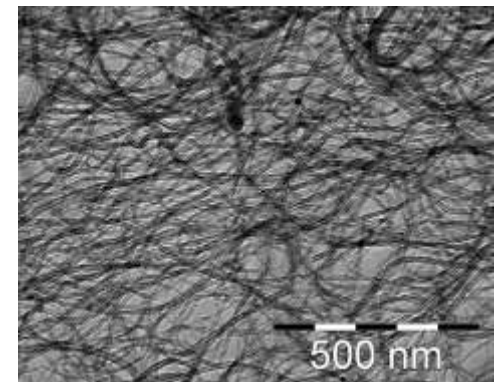
- Új, második generációs Surface Energy Analyzer
(Magyarországon az egyetlen!)
- 3 db hagyományos inverz gázkromatográf

Eddigi eredmények:

- Laboratórium kialakítása, készülékek átköltöztetése, beüzemelése, tesztelése
- Módszer-kidolgozás, szén-nanoszálak, kaolinit-minták felületi energetikai analízise
- 1 előadás és 3 poszter hazai és nemzetközi konferenciákon

Kapcsolódás más alprojektekhez:

- Nanoszerkezetű anyagok
- Vörösiszap
- Műanyag kompozitok
- Műanyag hulladékok kémia feldolgozása



2. Termoanalitikai kutatások

Célok:

- Termoanalitikai módszerek kifejlesztése vegyes műanyag-hulladékok (alapanyagok) jellemzőinek meghatározására
- Kalorimetria mérések a kompozitok és komponenseik szerkezeti átalakulásai (fázisátalakulások, olvadás, üvegesedés, kristályosodás, termikus bomlás) és reakciói tanulmányozására

Eszközök:

- Új, nagy-hőmérsékletű molekulabefogó-csapda rendszerrel összekapcsolt tömegspektrométer (MS) és szimultán termikus analizátor (STA) (Magyarországon az egyetlen!)
- Nagynyomású reakció kaloriméter (Magyarországon az egyetlen!)



Eddigi eredmények:

- Laboratóriumi készülékek átköltöztetése, beüzemelése
- Módszer-kidolgozás, szénhidrogén-frakciók Cp mérése
- 1 előadás hazai konferencián

Kapcsolódás más alprojektekhez:

- Műanyag kompozitok



3. Termodinamikai számítások

Célok:

- Kvantumkémia és statisztikus termodinamikai alapokon álló számítási módszerek kidolgozása reális, semleges vagy eredő töltéssel rendelkező komponensekből álló folyadékelegyek termodinamikai jellemzőinek előreszámítására
- Modellszámítások végzése erősen reális elegyek (ionfolyadékok, motorhajtóanyagok) jellemzőinek kiszámítására a molekulaszervezet alapján

Eszközök, szoftverek:

- Nagyteljesítményű PC-k, ABAKUS klasztergép
- COSMOTerm fázisegyensúly számító szoftver (Magyarországon az egyetlen!)
- COMSOL Multiphysics transzportfolyamat-modellező szoftver



Eddigi eredmények:

- Kvantumkémiai módszerekkel (DFT/TZVP) meghatároztuk **aminosavak** és **motorhajtó-anyag komponensek** optimális molekulaszervezetét, felületi töltéssűrűségét és az aminosavak pK (pI) értékét a COSMO-RS elmélet alkalmazásával.
- 3 előadás , 1 poszter hazai és nemzetközi konferenciákon

Kapcsolódás más alprojektekhez:

- Reakciótervezés és szerves szintézisek
- Alternatív oldószerek fejlesztése/alkalmazása
- Műanyag hulladékok kémia feldolgozása

