

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

### **A Cl + CH<sub>3</sub>CN reakció mechanizmusainak és dinamikájának elméleti modellezése**

Munkánk első lépéseként a Cl + CH<sub>3</sub>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: HCl + CH<sub>2</sub>CN, ClCN/CNCl + CH<sub>3</sub>, ClCH<sub>2</sub>CN + H és CH<sub>3</sub>Cl + 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