

A hidrogén égésénél fontos reakcióparaméterek bizonytalanságának hőmérsékletfüggése

Sedyó Inez, I. évf. vegyész mesterszak

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Turányi Tamás** egyetemi tanár
ELTE TTK Fizikai Kémiai Tanszék
Zsély István Gyula egyetemi adjunktus
ELTE TTK Fizikai Kémiai Tanszék

A gázfázisú reakciók méltán tartanak igényt a figyelemre: segítségükkel leírhatók a különböző anyagok égései és a légkörkémiaili folyamatok, felhasználásukkal lehet környezetkímélő eljárásokat kifejleszteni és vegyipari folyamatok hatékonyságán javítani. Éppen ezért sokan tanulmányozták és tanulmányozzák ma is az egyes elemi reakciókat, és rengeteg adat áll azokról rendelkezésre. Ezeket az adatokat érdemes együtt vizsgálni, összehasonlítani és elemezni, hiszen az egyes mérések, vagy elméleti számolások külön-külön kevesebbet mondanak az adott reakcióról, mint azok összessége.

A rendelkezésre álló adatok fontos jellemzője azok bizonytalansága, melynek a reakciókinetikában általánosan használt szimulációknál fontos szerep jut. A reakciókinetikai bizonytalanságokkal kapcsolatban nem régen készült el Nagy Tibor PhD értekezése [1], mely egy egészen új megközelítése a problémának. Nagy Tibor egy reakció sebességi együtthatójának bizonytalanságáról feltételezi, hogy általában hőmérsékletfüggő, és levezet egy összefüggést a sebességi együttható hőmérsékletfüggő bizonytalansága, illetve az Arrhenius-paraméterek szórása és korrelációs együtthatói között. Jelen munkával célunk volt a fent említett elmélet kipróbálása a hidrogén égésmechanizmusának egyes fontos reakcióira, és ezáltal új, eddig nem számított eredményként megadni ezekre a reakciókra az Arrhenius-paraméterek szórását, illetve korrelációit. További célunk volt a fordított irányban lejátszódó reakció paramétereinek megállapítása is.

Ezek teljesítése érdekében meghatároztuk a megfelelő sebességi együtthatók és azok bizonytalanságának hőmérsékletfüggését, a lehető legtöbb rendelkezésre álló irodalmi adat alapján. A bizonytalanság megválasztásakor a fő szempontunk az volt, hogy a figyelembe vett mérési vagy számolási eredmények mind benne legyenek a bizonytalanság által megengedett intervallumban, amit minden esetben sikerült is teljesíteni. A bizonytalanság hőmérsékletfüggéséből egy nemlineáris mellékfeltételes illesztés segítségével jutottunk az Arrhenius-paraméterek szórásaihoz és korrelációs együtthatóihoz. A kapott eredmények minden esetben reálisak voltak. A korrelációs együtthatók alapján megállapítottuk, hogy erős korreláció áll fenn az Arrhenius-paraméterek között.

A fenti módszerrel pontos bizonytalansági adatokkal jellemzett paraméterkészlethez juthatunk tetszőleges reakció esetében. Ezek az információk felhasználhatók a reakciókinetikai mérések bizonytalanságának egy elvileg helyesebb és a korábbinál sokkal pontosabb meghatározásához.

[1] Nagy, T., *Reakciókinetikai modellek bizonytalanságanalízise és redukciója*, PhD értekezés, (2009)