

ÖSSZEFOGLALÓ (ABSTRACT)

- Téma:** *Aromás szénhidrogének jégen történő adszorpciójának vizsgálata számítógépes Monte Carlo szimulációval*
- Készítette:** *Mészár Etelka Zsuzsanna*, vegyészmérnök hallgató BME VBK
- Témavezető:** *Dr. Jedlovsky Pál*, egyetemi magántanár, ELTE Kémiai Intézet

A feladatom során négy aromás vegyület jégfelületen történő adszorpcióját vizsgáltam Monte Carlo szimulációval. A négy aromás molekula az egy gyűrűből álló benzol, a két gyűrűből álló naftalin, valamint a három-három gyűrűből álló antracén és fenantrén. Utóbbi két molekula azonos szénatomszámú, de különböző geometriai szerkezettel jellemezhető.

Ezek az aromás vegyületek jégen történő adszorpciója elsősorban a felsőbb légrétegekben játszódik le a természetben, ahová a repülőgépek által kibocsátott koromból jutnak aromás szennyeződések. Fontos tudni, hogy ezek az aromás vegyületek ilyen körülmények között milyen módon adszorbeálódnak a jég felületén, hiszen ezáltal bekerülhetnek a vízkörforgásba is. Jelen munkámban a troposzférában uralkodó körülményeknek megfelelően választottam meg a szimuláció paramétereit. A szimulációkban változtattam a kémiai potenciál értékét, és ennek függvényében vizsgáltam az aromás vegyületek adszorpcióját. A kapott eredmények alapján kiszámítottam az adszorpciós izotermákat, valamint további analízisekkel meghatároztam az adszorbeálódott molekulák kétféle darabszámsűrűség-profilját, a különböző molekulák közötti kölcsönhatási energiák eloszlását, valamint a felülethez viszonyított orientációjukat, majd összehasonlítottam a négy aromás szénhidrogénre kapott értékeket, és levontam a következtetéseket.

Az eredmények alapján megállapítottuk, hogy a naftalin és a fenantrén esetén a kondenzáció a teljes felületi borítottság elérése előtt következik be, míg a benzol és az antracén képes a kondenzációhoz közeli állapotban telített monoréteg létrehozására a jég felületén. A molekulák a fekvő, a felszínnel párhuzamos helyzetet preferálják, viszont a szerkezetükből adódóan ferde elhelyezkedés is megjelenik másodlagos preferenciaként. Ezeket az eredményeket az orientációs vizsgálat mellett az energia eloszlások,– valamint a rendszerekről készült pillanatfelvételek is igazolják.