

Az etil jodid hőbontásának vizsgálata

Varga Tamás, II. évf. Vegyész MSc hallgató
ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

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

Munkám során az etil-jodid hőbomlásának modelljét vizsgáltam a Prof. Matthias Olzmann (Karlsruhei Műszaki Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék) kutatócsoportjával együttműködésben. Az etil-jodidot általánosan használják lökeshullámcső-kísérletekben mint hidrogénatom-prekurzort. A TDK-munkám eredményei hozzájárulnak ahhoz, hogy az etil-jodid felhasználásával végzett lökeshullámcső-kísérleteket jobban meg lehessen tervezni, és eredményeiket hatékonyabban lehessen majd kiértékelni.

Elvégeztem az etil-jodid hőbomlása reakciókinetikai modelljének optimalizációját a Karlsruhei Műszaki Egyetemen végzett olyan lökeshullámcső-kísérletek alapján, amelyekben H-ARAS és I-ARAS detektálást használtak. A kísérleteket 900 – 1400 K hőmérséklettartományban, 1,3 – 1,8 bar nyomástartományban, argon hígítógáz mellett végezték. A feladatra az ELTE Reakciókinetikai Laboratóriumának munkatársaival közösen, az én közreműködésemmel is fejlesztett OPTIMA programot használtam.

A rendelkezésre álló lökeshullám-cső mérési adatok és független közvetlen sebességi együttható mérések alapján meghatároztam a R1: $C_2H_5I \Rightarrow C_2H_5 + I$, R3: $C_2H_5I \Rightarrow C_2H_4 + HI$, R4: $H + HI \Rightarrow H_2 + I$ és R5: $C_2H_5I + H \Rightarrow C_2H_5 + HI$ reakciók sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggését.

A kapott sebességi együtthatók felhasználásával végzett szimulációk sokkal jobban írják le a kísérleti adatokat, mint a német együttműködő partnereink által korábban becsült értékeket használó modell. Meghatároztam az egyes reakciólépések Arrhenius-paramétereinek kovariancia mátrixát, aminek alapján kiszámítható a sebességi együtthatók hőmérsékletfüggő bizonytalansága. Mindegyik reakciólépés esetén a kapott sebességi együtthatók összeegyeztethetők az irodalomban fellelhető mérésekkel és az új értékeket sokkal kisebb bizonytalansággal határoztam meg, mint a korábbi irodalmi sebességi együtthatók becsült bizonytalansága.

Megmutattam, hogy paraméterbecslő eljárás során meghatározott sebességi együtthatók nagyon erősen korreláltak. Emiatt azok várható értéke és szórása nem értelmezhető a többi sebességi együtthatótól függetlenül.