



MISKOLCI EGYETEM
Műszaki Anyagtudományi Kar
Kerpely Antal Anyagtudományok és Technológiák
Doktori Iskola



Elméleti kémia módszerek alkalmazása ipari folyamatokhoz

Viskolcz Béla

TANTÁRGYLEÍRÁS

2016.
Szerző: Viskolcz Béla

Elméleti kémia módszerek alkalmazása ipari folyamatokhoz

Viskolcz Béla

Tantárgy jegyzője

Dr. Viskolcz Béla, egyetemi tanár, Kémiai Intézet.

Szoba: A/2. mfsz. 1. A1e-mail: bela.viskolcz@uni-miskolc.hu, tel: 1244, 305650830, <http://www.uni-miskolc.hu/>

Tantárgy célcsoportja

A tárgy a KerpelyAntal doktori iskolamindenhallgatójának ajánlott, de különösen a kémia és vegyipari technológiák területen kutatók számára.

Tantárgy nyelve

Magyar vagy angol.

Tantárgy célja

A tantárgy célja az, hogy a hallgató ipari folyamatok megértéséhez fel tudja használni az elméleti kémia eszköztárát, önállóan alkalmazza azokat az ipari reaktorokban lejátszódó folyamatok feltérképezéséhez. A modern számításon alapuló kémiai módszerek segítségével feltudja deríteni a lehetséges mellékfolyamatokat és azok mechanizmusát. Az ipari folyamatok elméleti mechanizmusainak segítségével képes legyen a folyamatok javítására javaslatot tenni.

Tantárgy módszertana

Kontaktóra és egyéni gyakorlatok keretében kerül a tananyag átadásra. Az általános mechanizmus és fizikai kémiai háttér ismertetése után, az alkalmazható elméleti módszerek áttekintése és alkalmazhatósága következik. Egy-egy önállóan választott probléma közös elemzésen keresztül ismerik meg a hallgatók az alkalmazható programcsomagokat.

Tantárgy tematikája

Elemi reakciók fogalma, reakciómechanizmus, elemi reakciókból felépülő reakcióhálózatok és azok értelmezése.

Elemi reakciók potenciál felületeinek sajátosságai, mechanizmusok részleges és teljes potenciálfelületeinek tulajdonsága és számítása.

Egy egyszerű ipari folyamat mechanizmusának számítása – önállóan.

Katalizátorok hatása a reakciómechanizmusra, hatékonyság és szelektivitás. Katalizátorok felületén történő számítási lehetőségek áttekintése

Egyes oxidációs és redukciós folyamatok teljes termék spektrumának meghatározása. Közti termékek és reakcióút valószínűség származtatása, melléktermékek képződési folyamatának megértése.

Összetett kinetikai modellek tervezése és kialakítása, adatbázisok keresése és feltérképezése, speciális önálló folyamat specifikus adatbázis építés.

Kutatási területhez kapcsolódó minta adatbázis önálló létrehozása

Csoportadditivitási szabályok ipari alkalmazhatósága. Adatbázisok illetve saját adatkészletek konzisztenciájának ellenőrzése az additivitási szabályok segítségével.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalmak

1. Veszprémi Tamás, Fehér Miklós: *A Kvantumkémia alapjai és alkalmazása*, Műszaki Könyvkiadó, 2002.
2. Christopher J. Cramer: *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd Edition), Wiley, 2004.
3. Mc Quarrie: *Physical Chemistry a molecular approach University Science Books, Sausalito, California, 1997.*
4. + Amennyiben a hallgató kutatási témája során használja a módszert, a témájához szorosan kapcsolódó irodalmat is kap.

Tantárgy teljesítése, számonkérés

Szóbeli vizsga.

Tantárgyhoz kapcsolódó komplex vizsga kérdések

1. Reakciómechanizmus és elemi reakciók kapcsolata a potenciális energia felülettel. Számításos kémiai módszerek szerepe a szerkezetvizsgálatban. Előnyök, hátrányok, korlátok.
2. Reakcióhálózatok és azok felhasználhatósága ipari folyamatok értelmezésére és optimalizálására.
3. Katalizátorokon lejátszódó elemi folyamatok értelmezése, azok hatása reakciómechanizmusra. Katalizátorok felületi tulajdonságai és a katalitikus hatás.
4. Adatbázisok létrehozása, adatok generálása elméleti módszerekkel, validálás és konzisztencia ellenőrzés
5. Elméleti módszereken alapuló mechanizmusok pontosság, gyakorlati alkalmazhatóságuk előnyei és korlátai.