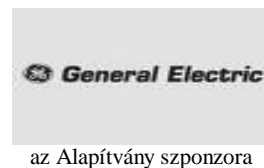




**MTA Kémiai Tudományok Osztálya**  
**Fizikai-kémiai és Szervetlen**  
**Kémiai Bizottság**  
**Polányi Mihály Kuratóriuma**  
**1051 Budapest, Nádor u. 7.**



az Alapítvány szponzora

---

## MEGHÍVÓ

**MTA Kémiai Osztálya**  
**és a Fizikai-kémiai és Szervetlen Kémiai Bizottság**  
ünnepi ülésére

Az ünnepi ülés tárgya:  
**a 2010. évi Polányi Mihály díjak átadása**

időpontja:  
2011. március. 11. 11:00 óra

színhelye:  
az MTA Székház Kisterme.

A 2010. évi díjazottak:

**Turányi Tamás**  
(fődíj)

**Szabó Tamás**  
(fiatal kutatói díj)

A díjakat átadja  
**Medzihradszky Kálmán**  
a MTA rendes tagja, a Kémiai Osztály elnöke

A díj átvétele után a díjazottak egy-egy kb. 45 perces előadást tartanak.

Az ünnepi ülés nyilvános, arra minden érdeklődőt várunk.

Lendvay György  
az MTA FKSzKB titkára

Pálincás Gábor  
az MTA FKSzKB elnöke

## A részletes reakciómechanizmusokon alapuló modellek megbízhatósága

Turányi Tamás

ELTE Kémiai Intézet, Reakciókinetikai Laboratórium

A legtöbb kémiai reakció során a kiindulási anyagokból nem közvetlenül keletkeznek a végtermékek, hanem sok reakciólépésen keresztül. A részletes reakciómechanizmusok akár több száz anyagfajta több ezer reakciólépését is tartalmazhatják. Ilyen reakciómechanizmusokat gyakran alkalmaznak égési, légkörkémiái és vegyipari folyamatok leírásánál. A részletes reakciómechanizmusokon alapuló szimulációkat fel lehet használni égések (kazánok, motorok, gázturbinák) és vegyipari folyamatok optimalizálására, hogy a berendezések hatékonyabbak legyenek és kevesebb szennyezőanyag keletkezzen. Az egyik kulcskérdés ezeknek a szimulációs eredményeknek a megbízhatósága.

A gázkinetikai és termodinamikai adatbázisok minden reakciósebességi együtthatóhoz illetve képződési entalpiához megadják azok bizonytalanságát is. Számítottuk több reakciókinetikai modell eredményének bizonytalanságát a kinetikai és termodinamikai adatok bizonytalansága alapján. Ezeket a számításokat úgy lehet finomítani, ha figyelembe vesszük a reakciókinetikai és termodinamikai paraméterek bizonytalanságának korreláltságát is. Ha a paramétereket számos mérési adat egyidejű felhasználásával számítjuk, akkor nemcsak az eddigieknél pontosabb értékeket kapunk, de pontosabban megismerhetjük a paraméterek együttes bizonytalansági tartományát is. Ennek alapján viszont az eddigieknél sokkal pontosabban tudjuk meghatározni a részletes reakciómechanizmusokon alapuló modellek eredményének megbízhatóságát.

# **Grafit-oxid/grafén alapú nanokompozitok és nanorétegek előállítása és tulajdonságai**

Szabó Tamás

SzTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Az anyagtudomány egyik legérdekesebb, az utóbbi időben egyre nagyobb intenzitással kutatott területe a grafének előállításának, szerkezetének, tulajdonságainak vizsgálata. A nagyarányú érdeklődést a grafén eddig megismert, sok esetben egzotikus fizikai és kémiai tulajdonságai indukálták. Ez az anyag a háromdimenziós grafitkristály elemi, kvázikétdimenziós építőköve, szénatomok hatszöges szimmetriájú síkhálója, amelyet szabad állapotban igen nehéz izolálni. Igen kevés hibahelyet tartalmazó grafén jelenleg csak fizikai módszerekkel állítható elő, makroszkópos mennyiségű lamella ugyanakkor kémiai exfoliációval, egyszerűen szintetizálható. Ez utóbbi módszerek közös jellemzője a grafitkristályok igen erélyes oxidációja, amely során ún. grafit-oxid (GO) keletkezik. Ez a nem-sztöchiometrikus, réteges szerkezetű hidrofil grafitvegyület vizes közegben elemi, grafén-oxid rétegekre hasítható, az elemi (elektromosan szigetelő) lamellák pedig – a kívánt technológiai lépések elvégzése után – redukciós módszerekkel (elektromosan vezető) grafénné alakíthatók át.

Előadásomban a grafit-oxid szerkezetének és tulajdonságainak ismertetése után különböző „3D” nanokompozitokkal (pl. nagy fajlagos felületű, mágnesesen módosított szén kompozit, fotokatalizátorok, protein/GO bionanokompozitok) és elektromosan vezető, transzparens „2D” nanofilmekkel kapcsolatos kutatási eredményeimet mutatom be.