

- 14:45 **Sepsey Annamária, IV. évfolyam vegyész mesterszak**
Különböző méretékben protonált anionok ionkromatográfiás csúcsalakjának vizsgálata az elválasztás hatékonyságának növelése céljából.
Témavezető: dr. Hajós Péter, dr. Horváth Krisztián
- 15:00 **Kovács Róbert, IV. évfolyam vegyészmérnök alapszak**
Párhuzamos töltött rétegek közé adszorbeálódott elektrolitok Monte Carlo szimulációs vizsgálata.
Témavezető: dr. Boda Dezső
- 15:15 **Fodor Melinda Anna, III. évfolyam kémia alapszak**
Vízoldható mangán-porfirin komplexek fotokémiai és fotofizikai vizsgálata
Témavezető: dr. Horváth Ottó
- 15:30 **Tóth Zoltán, I. évfolyam környezetmérnök mesterszak**
A diklofenák mint környezeti szennyező vizsgálata.
Témavezető: Szakácsné dr. Földényi Rita
- 15:45 **Zsűri értékelése**
- 16:15 **Záró értékelő ülés (Pannon Egyetem, B épület földszint, Konferenciaterem)**

2011. május 16., hétfő
Jedlik Ányos Szakkollégium, Tetőtér

- 10:30 **Selmeczy Géza Balázs¹, Drávecz Eszter²**
¹V. évfolyam, környezettudományi szak, ²I. évfolyam, környezettan alapszak
A Torna-patak és a Marcal makrogerinctelen faunája az iszapkatasztrófa után
Témavezető: Kovács Kata
- 10:45 **Lázár Ildikó, III. évfolyam vegyészmérnök alapszak**
Szénhidrogén-frakciók előállítása szennyezett ipari és egyéb hulladékok enyhe krakkolásával: az alapanyagok hatásának vizsgálata.
Témavezető: dr. Miskolczy Norbert
- 11:00 **Samu Gyöngyi, I. évfolyam környezetmérnök mesterszak**
Felületaktív anyagok és humuszanyagok kölcsönhatásának tanulmányozása
Témavezető: Szakácsné dr. Földényi Rita
- 11:15 **Kovács András, III. évfolyam anyagmérnöki alapszak**
A kaolinit szerkezetének módosítása mechanokémiai interkalációval.
Témavezető: Kristófné dr. Makó Éva
- 11:30 **Kontos János, III. évfolyam vegyészmérnök alapszak**
Kritikus tulajdonságok becslése mesterséges neurális hálózatok alkalmazásával
Témavezető: dr. Dallos András
- 11:45 **Medve Hunor, I. évfolyam mechatronikai mérnöki mesterszak,**
Permanens mágneses szinkron motorok érzékelő nélküli szabályozása.

Párhuzamos töltött rétegek közé adszorbeálódott elektrolitok Monte Carlo szimulációs vizsgálata

Szerző: Kovács Róbert

Szak, évfolyam: Vegyészmérnök BSc., IV. évfolyam

Témavezető: Dr. Boda Dezső

Intézet: Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

A két töltött fal között lévő elektrolit egy szokásos szimulációs elrendezés az elektromos kettősréteg vizsgálatára. Elektromos kettősréteg egy töltött fal és egy elektrolit határfelületén alakul ki. Amennyiben a két fal elég távol van egymástól, a falak mellett kialakuló kettősrétegek egymástól függetlenek és középen kialakul egy semleges tömbfázis.

Ha azonban a két fal közel van egymáshoz (rés, "slit"), a kettősrétegek átlapolódnak és a tömbfázis nem jelenik meg. Ez a geometria nagykanonikus sokaságon vizsgálható jól, ahol a tömbfázis egy adott kémiai potenciálokkal jellemzett virtuális, külső tároló. A valóságban mindig több rés létezik egymás mellett, szilárdfázisú töltött rétegekkel elválasztva egymástól (mint pl. rétegszilikát ásványokban).

A dolgozatban ezt a rendszert vizsgáljuk nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal, sűrűség-, töltés-, elektromos tér, és elektromos potenciál profilok számolásával. Vizsgálataink középpontjában a résrendszer elektromos viszonyai állnak. Megvizsgáljuk, hogy több egymás mellett lévő rés (résrendszer) mennyiben különbözik az elszigetelt réstől.

Mivel a résrendszerbe adszorbeálódó részecskék ionok, ezeknek le kell győzni egy elektromos potenciálgátat, hogy beléphessenek a rendszerbe, ezért azt ebben az esetben korrektebb a rendszert az őt határoló tömbfázisokkal együtt vizsgálni (az elszigetelt részre vonatkozó szimuláció erről nem ad felvilágosítást). A legyőzendő potenciálgát nagysága elsősorban a rendszert határoló kettősrétegek szerkezetétől függ, de azt találtuk, hogy ehhez még hozzáadódik egy a résrendszer külső rétegeinek polarizációjából adódó potenciálkülönbség.