

[H, C, N, Se] izomerek vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával

Vörös Tamás, I. évfolyam Kémia MSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Tarczay György**, docens
ELTE TTK Kémiai Intézet

A [H, C, N, O] rendszerek kémiájának megismerése – mely többek között olyan fontos jelenségek felfedezéséhez, megismeréséhez vezetett el, mint az izomerizáció – évtizedek óta kutatott terület. A reaktív részecskék tanulmányozására is kiválóan alkalmazható mátrixizolációs technika kifejlesztésével a kutatók érdeklődése a homológok előállítására is kiterjedt. Mára több [H, C, N, O], illetve [H, C, N, S] izomert is ismerünk, melyeknek jelentősége a csillagközi tér fizikai és kémiai állapotának jellemzésében betöltött szerepük miatt jelentős.

A homológ sor következő tagjának, a [H, C, N, Se] izomereknek a kémiája a fentieknél jóval kevésbé ismert terület. Ebből a családból eddig csak két izomerről, a HNCSe-ről és a HCNCSe-ről vannak kísérleti adatok. Munkám célja [H, C, N, Se] izomerek előállítása és vizsgálata volt. Ezeknek a rendkívül reaktív izomereknek az előállítása nem csak szép és érdekes kihívás, de szélesebb körű megismerése hozzájárul a periódusos rendszeren belüli tendenciák feltérképezéséhez, mélyebb megértéséhez is.

Munkám során először kvantumkémiai számításokat végeztem az egyes izomerek szerkezetének, relatív energiájának, valamint IR, Raman és UV spektrumának meghatározása céljából. Ezek ismeretében a gyakorlati munka első lépéseként egy, a HNCSe előállításával analóg, valamint egy, az irodalomban korábban leírt módszert próbáltam ki a HNCSe előállítására. Ezek közül az utóbbi (a kiindulási anyagok előállítását is igénylő, nehezebb módszer) bizonyult sikeresnek. A HNCSe molekula sikeres előállítását és az irodalmi mátrixizolációs IR spektrum asszignációjának pontosítását követően áttértem a kiindulási anyag fotolízisének vizsgálatára. A számolt UV spektrum alapján feltételezhető volt, hogy a kiindulási anyag szelektív, 260 nm körüli fotolízisével előállíthatóak új izomerek, melyek szélessávú UV fényre bomlanak. A HNCSe:Ar mátrix kényelmesen kivitelezhető 254 nm-es fotolízisekor a kiindulási HNCSe sávjainak intenzitás csökkenésével párhuzamosan több új sáv megjelenését is tapasztaltam az IR spektrumban. Ezeknek a sávoknak egy része a vártaknak megfelelően szélessávú UV fény hatására eltűnt. Ezek közül a legintenzívebb három sáv 2065, 840 és 595 cm^{-1} értéknél jelent meg. Ezek a mért és számított hullámszám és intenzitás értékük alapján egyértelműen hozzárendelhetők egy új izomerhez, a HSeNC molekulához. Ezeket a vizsgálatokat elvégeztem a (szintén újabb kiindulási anyagok előállítását igénylő) deuterált származékkal is. A kapott eredmények megerősítették azt, hogy sikeresen előállítottam a korábban nem ismert HSeNC izomert. A számított UV spektrum kísérleti reprodukciójára több kísérletet is tettem, melyek közül tömény mátrix alkalmazása során sikerült felvennem a HNCSe UV spektrumát is.

A fenti eredményeket összefoglalva elmondható, hogy sikerült a [H, C, N, Se] rendszerekről egy elméleti összefoglalást adni, valamint a HNCSe és DNCSe molekula előállítása mellett egy új [H, C, N, Se] izomert, a HSeNC molekulát és ennek deuterált származékát is előállítani. Számítási eredményeink alapján várható, hogy további izomereket is elő lehet állítani. Számításaink szerint ezek más módszerekkel, például mátrixizolációs Raman spektroszkópiával mutathatók ki.