

A glicin UV-fotolízisének vizsgálata

Kovács Benjám, IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Tarczay György** egyetemi docens

ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

Varga Tamás PhD-hallgató

ELTE Fizikai Kémia Tanszék

A glicin az élet szempontjából igen fontos vegyületcsoport, az aminosavak legegyszerűbb képviselője. Ennek köszönhetően intenzíven kutatják azt, hogy milyen földönkívüli körülmények között található meg a glicin, valamint azt hogy hol, hogyan keletkezhet. Bizonyos csillagközi objektumokban, például meteoritokban már detektáltak aminosavakat. Ennek ellenére csillagközi felhőkben még mindig nem sikerült meggyőző bizonyítékot találni a jelenlétükre. Ezért a dolgozatom célja az volt, hogy a glicin fotostabilitását a csillagközi felhőkben uralkodó paraméterekhez hasonló körülmények között vizsgáljam.

Ennek megvalósítására a mátrixizolációs technika megfelelő módszernek mutatkozott, amellyel alacsony hőmérsékletet, erős intermolekuláris kölcsönhatásoktól mentes és reakcióktól védett környezetet lehet biztosítani. A világűrben a részecskéket különféle sugárzások érik. Az UV-sugárzás hatásának modellezésére a leválasztott mintákat többféle hullámhosszú UV-fénnyel sugároztam be.

Céljaim egyike az volt, hogy összefüggést találjak az alkalmazott sugárzás hullámhossza és a glicin stabilitása között. Három különböző hullámhosszon elvégzett besugárzás esetén a kvantumhatásfokra is becslést tettem. Korábbi mérések alapján a glicin fotobomlásának kétféle útját igazoltam: dekarboxileződés, illetve amino-ketén képződése. A bomlási termékeket IR-spektrumuk alapján azonosítottam, az egyértelműbb azonosításhoz a glicin mellett egy deuterált származék (N,N,O-glicin-d₃) fotolízisét is elvégeztem. Végül a glicin fotobomlásának folyamatait az OPTIMA nevű mechanizmusoptimaló szoftver segítségével vizsgáltam.

A mérések eredményei szerint, az általunk vizsgált spektrumtartományban megállapítható, hogy minél kisebb a besugárzó fény hullámhossza, annál kisebb a glicin stabilitása.

A bomlási utak fő termékeit az összes hullámhosszon való besugárzás esetén azonosítani tudtam. Az amino-ketén és a fotolízis hatására keletkező víz mennyisége csak kisebb hullámhosszak esetén válik jelentőssé. A deuterált glicin (N,N,O-glicin-d₃) bomlástermékeihez tartozó sávokat is azonosítottam. Ezek a sávok jól elkülönültek a deuterálatlan származék bomlástermékeihez tartozó sávoktól. A jövőben ezt a bomlás mechanizmusának vizsgálatában is fel lehet használni.

Az UV-besugárzás hatására a glicin konformerei gerjesztődnek, majd nemcsak fotobomlást szenvednek, hanem egymásba is alakulnak. A glicin fotobomlási mechanizmusának optimalálása során a – mérési körülményeink között stabil – három konformer fotobomlására, illetve a konformerek egymásba való alakulására jellemző sebességi állandókat kívántam meghatározni. Az alkalmazott modellünkben a gerjesztési folyamatokat beolvastottuk a többi folyamatba. Az OPTIMA szoftver segítségével kapott eredmények szerint az I-es és a II-es konformer közel azonos sebességgel, és jóval gyorsabban bomlik, mint a III-as konformer. Az I-es és a II-es konformer III-as konformerbe alakulása szintén közel azonos sebességű, de a III-as konformer gyorsabban alakul a II-es konformerbe, mint az I-esbe. Az I-es és a II-es konformer egymásba alakulása korlátolt a többi folyamathoz képest. Az eredményeket pontosítása végett a jövőben egy olyan mechanizmus optimalizációját fogjuk elvégezni, amely külön figyelembe veszi a gerjesztési folyamatokat is. Ennek céljából a minták besugárzását többféle hullámhosszon, többféle lézerteljesítmény mellett fogjuk elvégezni.

