

Karbamidok klatrátképzésen alapuló minta-előkészítési módszer fejlesztése gázolajok komponens-specifikus stabil szénizotóp-analízisében

Palya Dóra, II. évf. kémia BSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Eke Zsuzsanna**, egyetemi adjunktus
ELTE TTK Analitikai Kémiai Tanszék
Novák Márton, PhD hallgató
ELTE TTK Analitikai Kémiai Tanszék

A fosszilis energiahordozók fokozott felhasználása együtt járt és jár a környezetünkben megjelenő szénhidrogén-szennyezésekkel. A kárelhárítással kapcsolatos felelősség megállapításához kiemelten fontos olyan minta-előkészítési és mérési módszerek kidolgozása, amelyek segítségével következtethetünk a szennyező anyag származási helyére és a kibocsátás idejére. Ezen kérdések megválaszolására egy hatékony módszer a komponens-specifikus stabil szénizotóp-analízis. A technika lényege, hogy azokat a komponenseket, amelyekben a szén stabil izotópjainak arányát mérjük, előzetesen elválasztjuk, és az egyes komponensekre szelektíven adjuk meg a $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ arányt. Ez a mérés gázkromatográfhoz (GC) kapcsolt izotóparány-mérő tömegspektrométerrel (IRMS) történik egy égetőkemencén keresztül, melyben a minta széntartalma szén-dioxiddá alakul. A szennyező komponensek stabil szénizotóp-arányának – mint kémiai ujjlenyomatnak – segítségével a különböző forrásból származó kőolajszármazékok megkülönböztethetők. Céлом ennek felhasználásával egy olyan módszer kidolgozása volt, amely alkalmas lehet gázolajok származási helyének azonosítására.

Kutatásom során a gázolajokban lévő C_{10} – C_{24} szénatomszámú n -alkánoknak vizsgáltam a $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ arányát. Az izotóparány pontos meghatározásához fontos, hogy a kromatográfiai elválasztás során alapvonalon elváló csúcsokat kapjunk. Azonban a gázolajok összetettsége miatt szükséges az n -alkánok és a zavaró mátrixkomponensek elválasztására szolgáló minta-előkészítési eljárás alkalmazása. A kidolgozott módszer az előzetes szilikagélen végzett frakcionálás után az alifás frakció karbamidok klatrátképzésen alapuló minta-előkészítése. A karbamid ugyanis ún. aktivátor jelenlétében az n -alkánokkal klatrátot, vagy zárványvegyületet képez, de az elágazó láncú szénhidrogénekkal nem. A karbamidok klatrátképzési módszere esetén a klatrátképzés paramétereinek optimalizálása szükséges, melyet eddig még nem írt le a szakirodalom. Az általam vizsgált paraméterek az aktivátor anyagi minősége, térfogata, az aktiválás, valamint a klatrátképzés ideje és hőmérséklete. A kifejlesztett módszer alkalmazhatóságát vizsgáltam a GC-IRMS méréshez. Továbbá négy különböző eredetű gázolajminta megkülönböztethetőségét vizsgáltam n -alkán-tartalmuk stabil szénizotóp-aránya alapján főkomponens-analízis segítségével.

Kutatómunkám során kidolgoztam egy olyan minta-előkészítési módszert, amely alkalmas az n -alkánok szelektív elkülönítésére a gázolajokból 80-100%-os visszanyeréssel. Ez biztosítja a gázkromatográfiai elválasztás során az alapvonalon elváló n -alkán csúcsokat, ezért a kidolgozott minta-előkészítési módszer és a GC-IRMS mérés alkalmas lehet gázolajok stabil szénizotóp ujjlenyomatának vizsgálatára.