

Pirolízis maradékok UV-Vis spektrumainak elemzése

**Czinkota Imre, Rácz Istvánné, Simándi Péter,
Tolner László**

2013. szeptember 26.



A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.

Módszer:



TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015

Adott felfűtési sebességgel és adott ideig hőkezelt minták bontási maradékainak feloldása, majd a spektrofotometrálnálása.

Kutatási célok:

- Az alapanyagok hatásának vizsgálata a végtermékekre,
- A végtermékek kémiai viselkedésének tanulmányozása,
- A spektrum elemzésével következtetni a kioldott anyagok összetételére, kémiai jellemzőire.



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

- **5 féle műanyag alapanyag**
- **minden műanyag alapanyag három ismételtsben**
- **Véletlenszerű elrendezést készítettünk**
- **Szomszéd hatások kiszűrése érdekében, üres kémcsöveket is helyeztünk a vizsgáltak közé.**



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Oxigénszegény kísérleti körülmények előállítása



TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015

kémcsövekbe előkészített mintákra 5 cm³ desztillált vizet öntöttünk,

- majd alufóliával dugót formáztunk a kémcsövek szájnyílásába**

- kb. 5 cm széles alufólia csíkkal a kémcsövek száját betekertük.**



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Használt kiindulási anyagok:

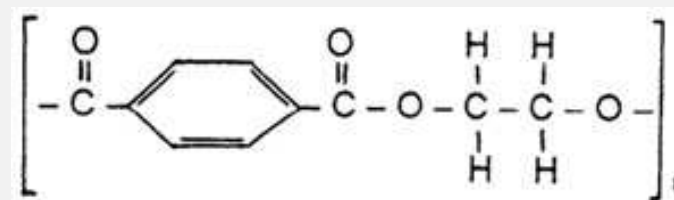


TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015

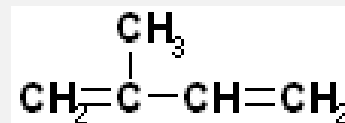
• **Ultramid** **Nylon 6,10. -NH(CH₂)₆NH-O(CH₂)₈CO-**

• **Poliram** **Poliamid**

• **PET** **Polietilén tereftalát**



• **Gumi** **Poli-izoprén**



• **Cellulóz** **Polikondenzált cukor** **-C₆H₁₁O₅-**

• **ABS** **Acrilnitril-Butadién-Stirol kopolimer**



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Használt oldószerek:

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015



Víz

Metanol

Benzin



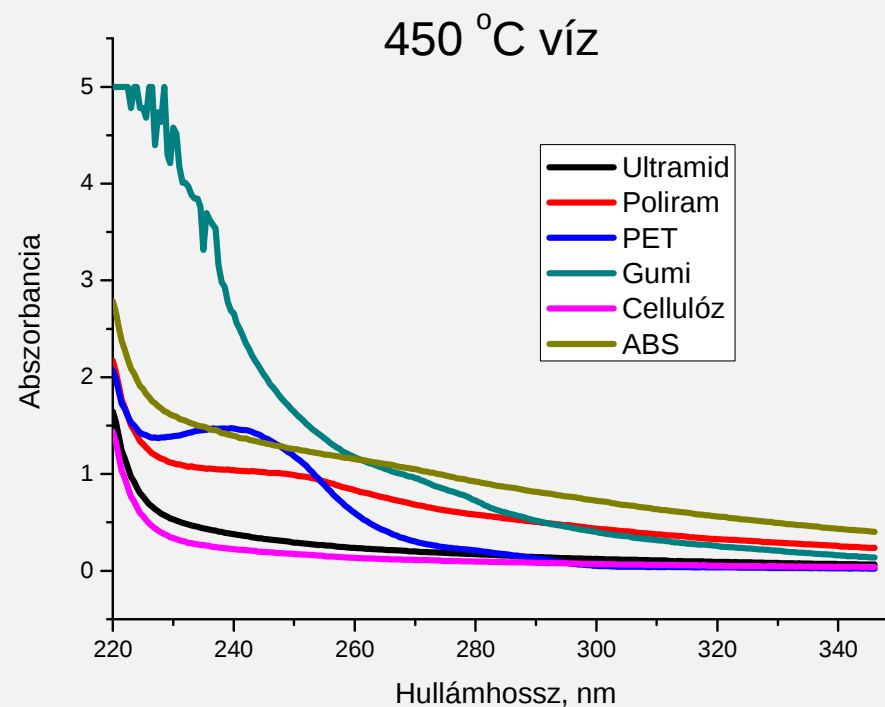
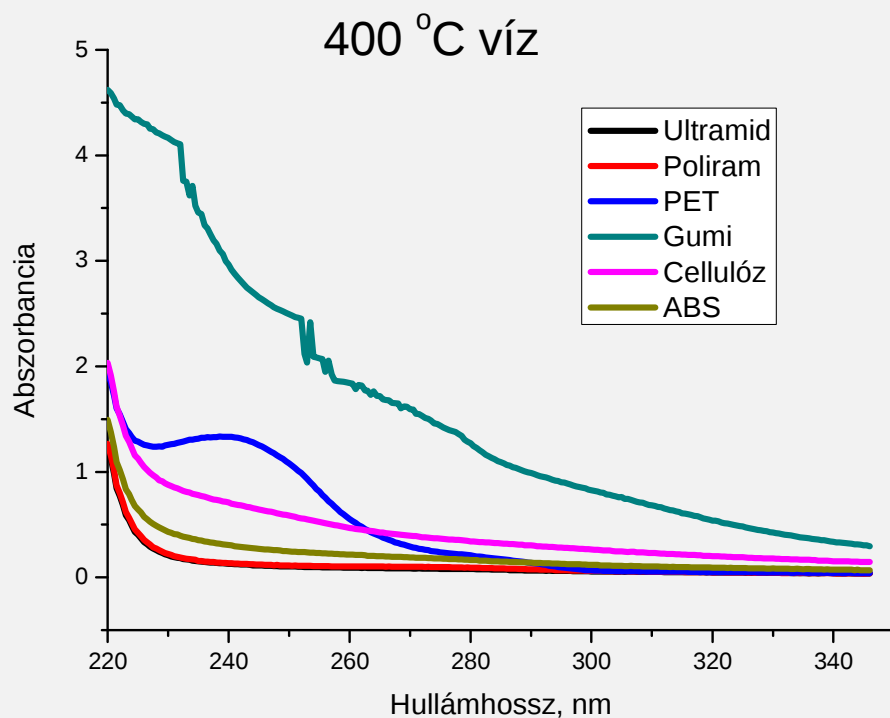
Növekvő polaritás



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Különböző anyagok

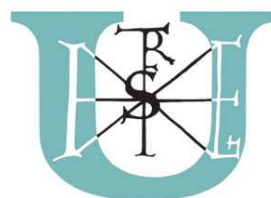
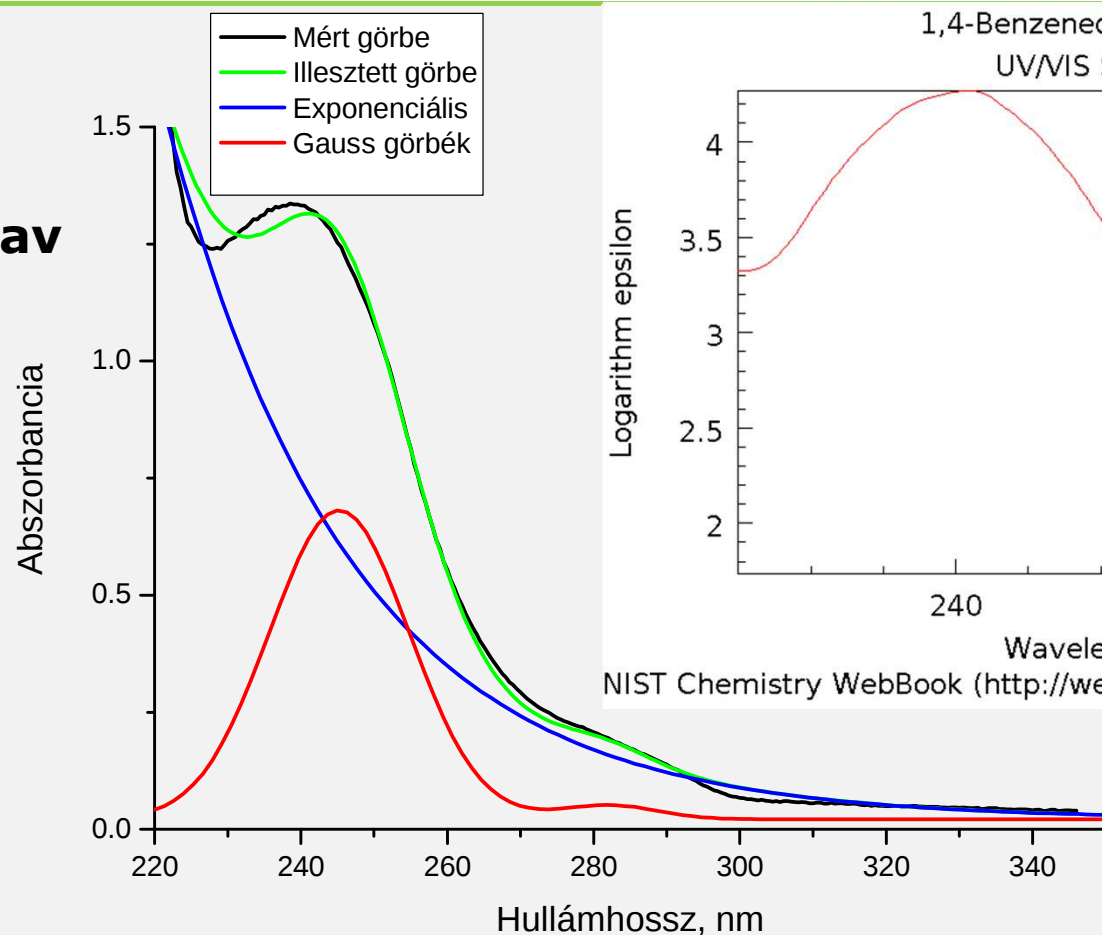
TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015

Tereftálsav



SZENT ISTVÁN
EGYETEM



MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



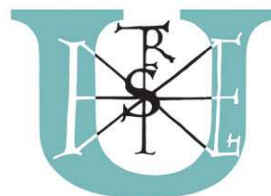
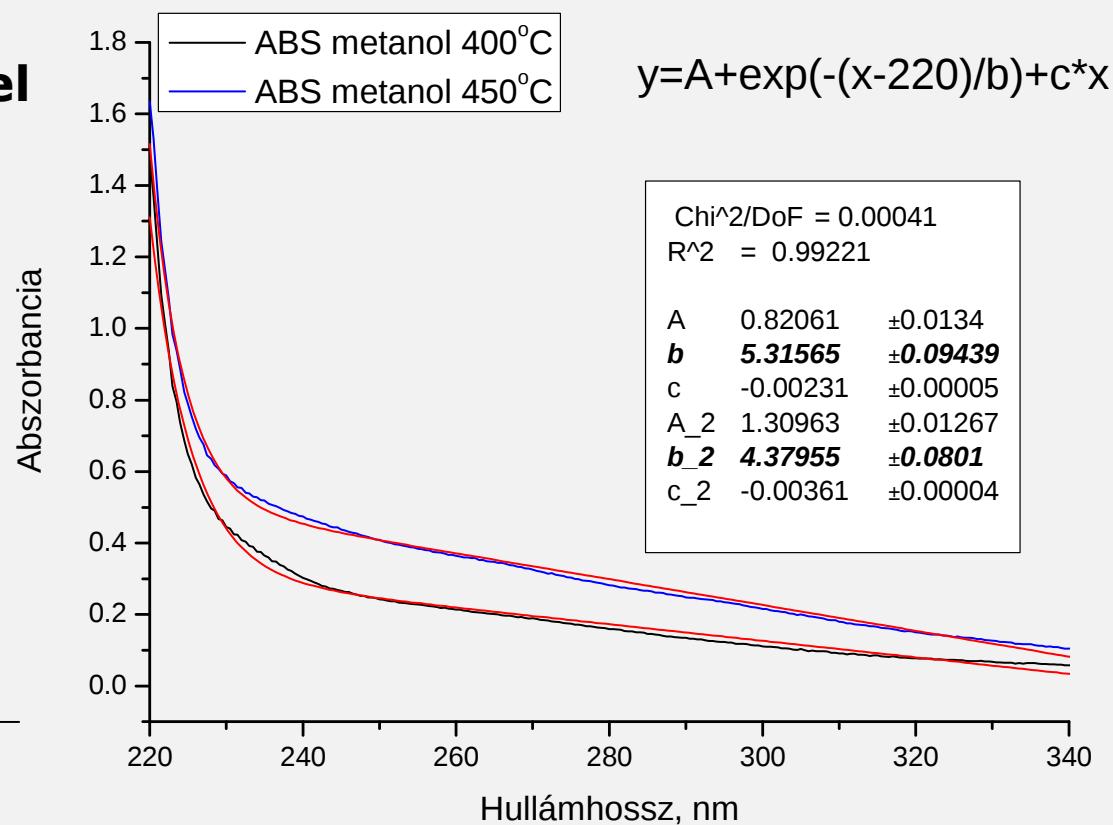
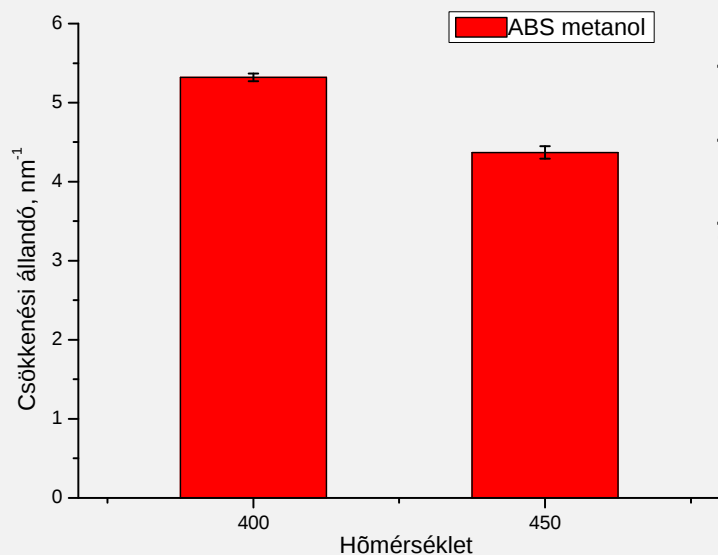
A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.

Az eredmények értelmezése

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015



Általában exponenciálisan
csökkenő fényelnyelés a
hullámhossz növekedésével



SZENT ISTVÁN
EGYETEM



MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



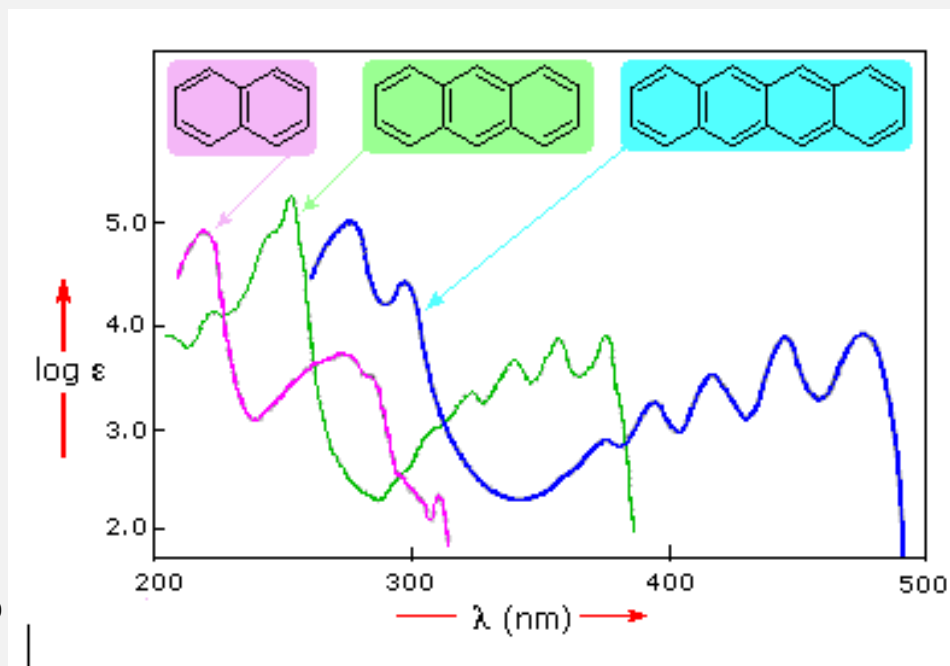
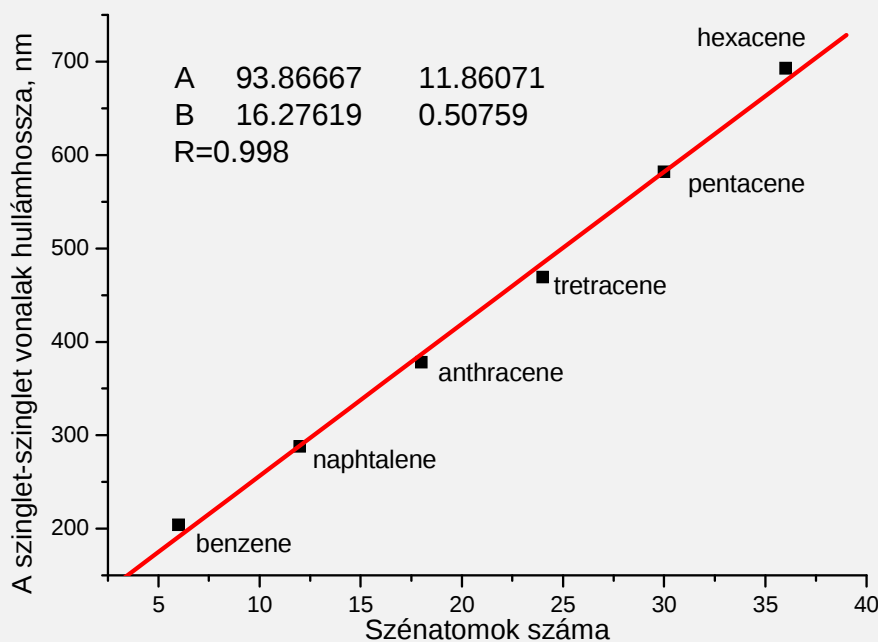
A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.

Az eredmények értelmezése

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015

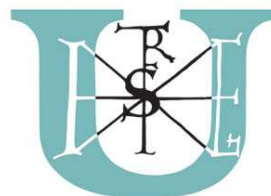


Az adott méretű fotonnal kölcsönható π -elektronrendszer



W. Schmidt Photoelectron spectra of polynuclear aromatics.

V. Correlations with ultraviolet absorption spectra in the catacondensed series J. Chem. Phys. 66, 828 (1977);



SZENT ISTVÁN
EGYETEM

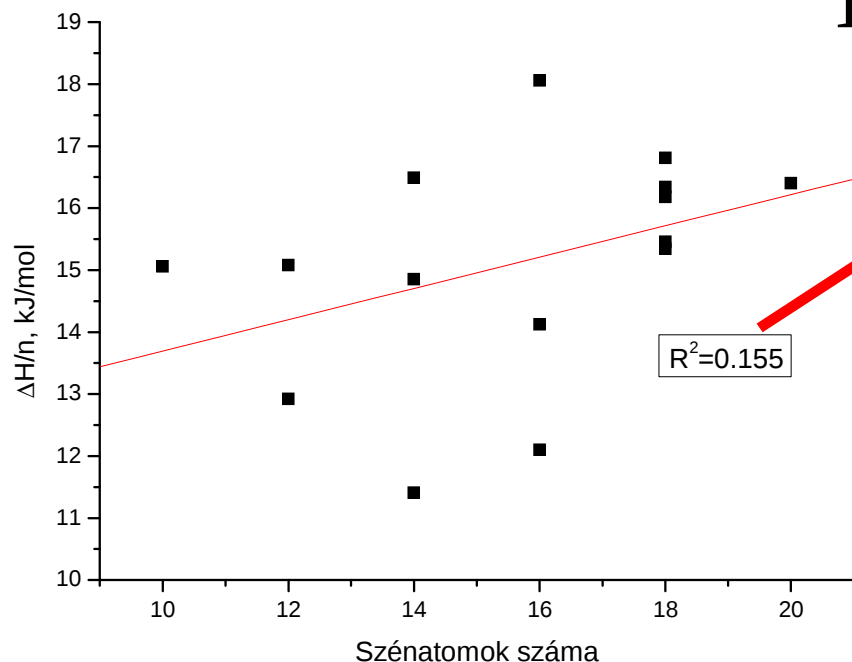


MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.

Van't Hoff egyenlet



$$K = e^{-\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R}}$$

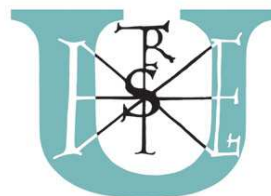
$$\Delta H = 0$$

$$K = e^{\frac{\Delta S}{R}}$$

$$\frac{dS}{dw} = -\frac{R}{b}$$

$$\frac{dS}{dn} = -\frac{16,3.8,4}{b} = -\frac{137}{b}$$

William J. Welsh , Weida Tong, Elizabeth R. Collantes, James S. Chickos, Sergei G. Gagarin Enthalpies of sublimation and formation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) derived from comparative molecular field analysis (CoMFA): Application of moment of inertia for molecular alignment. 1996 Thermochimica Acta 290 55- 64



**SZENT ISTVÁN
EGYETEM**



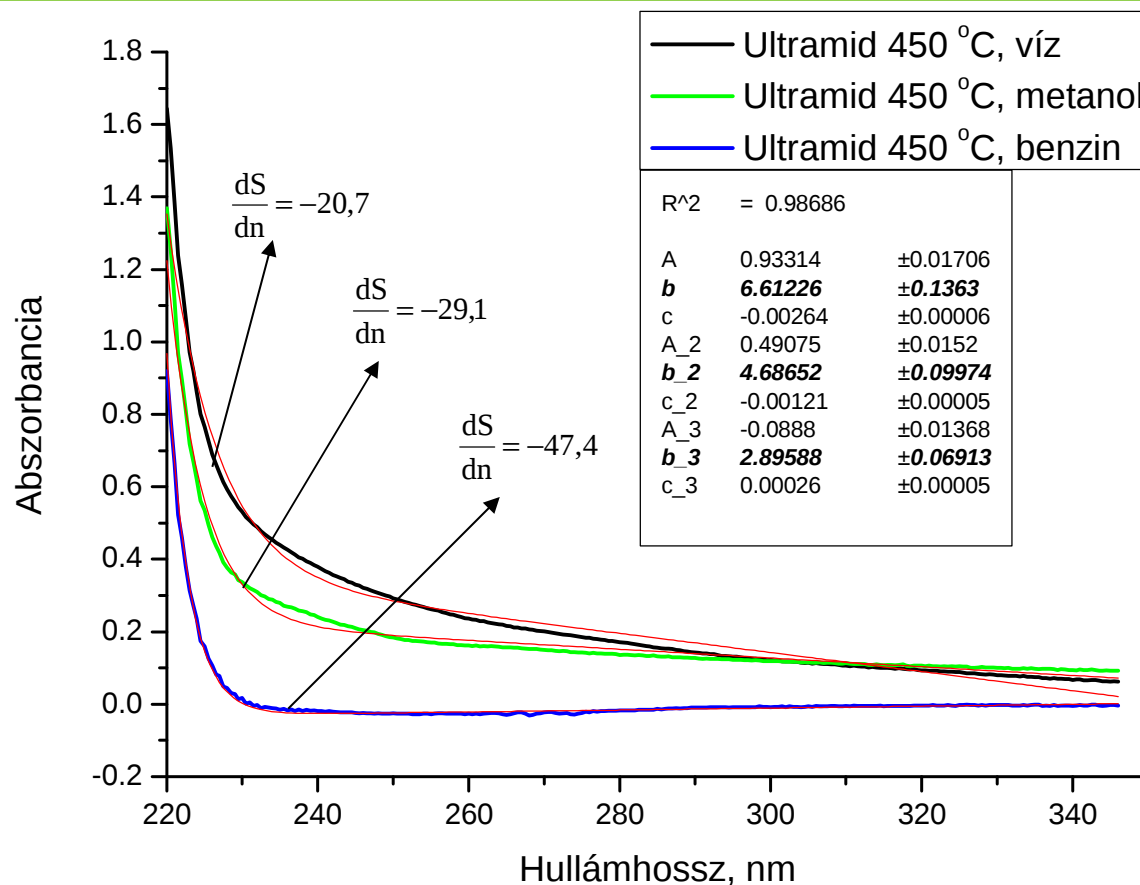
MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Az eredmények értelmezése

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015



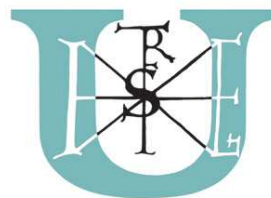
Mértékegység: J/molK

Megmutatja milyen mértékű a bomlás, a krakkolódás adott körülmények között.

Elhanyagolás:

Az állandó kiszámítása lineáris kondenzált gyűrűkből

Az arányok helytállóak!



SZENT ISTVÁN
EGYETEM



MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



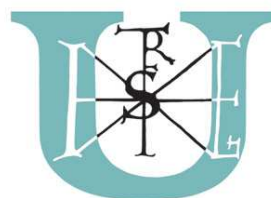
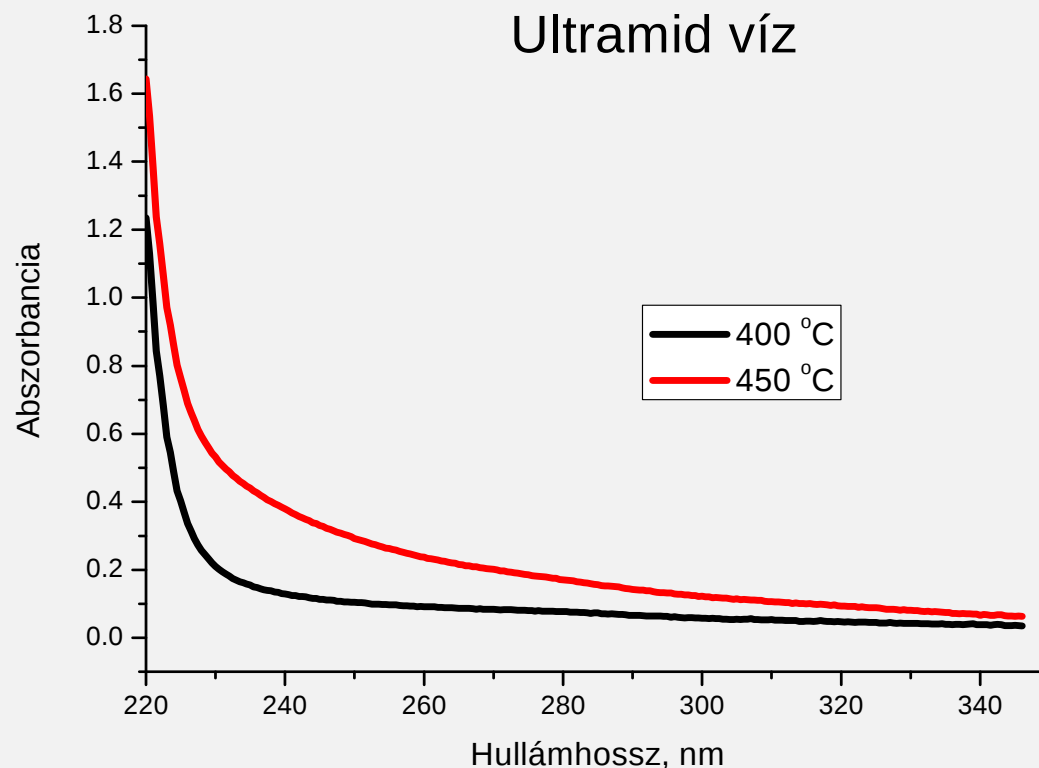
A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Hőmérséklet hatása

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015



**Magasabb hőmérsékleten
a nagyobb Pi rendszerű
molekulák nagyobb
valószínűséggel képződnek
(ennél az anyagnál)**



**SZENT ISTVÁN
EGYETEM**



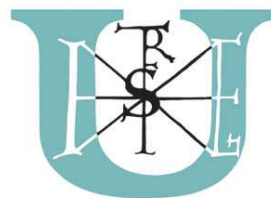
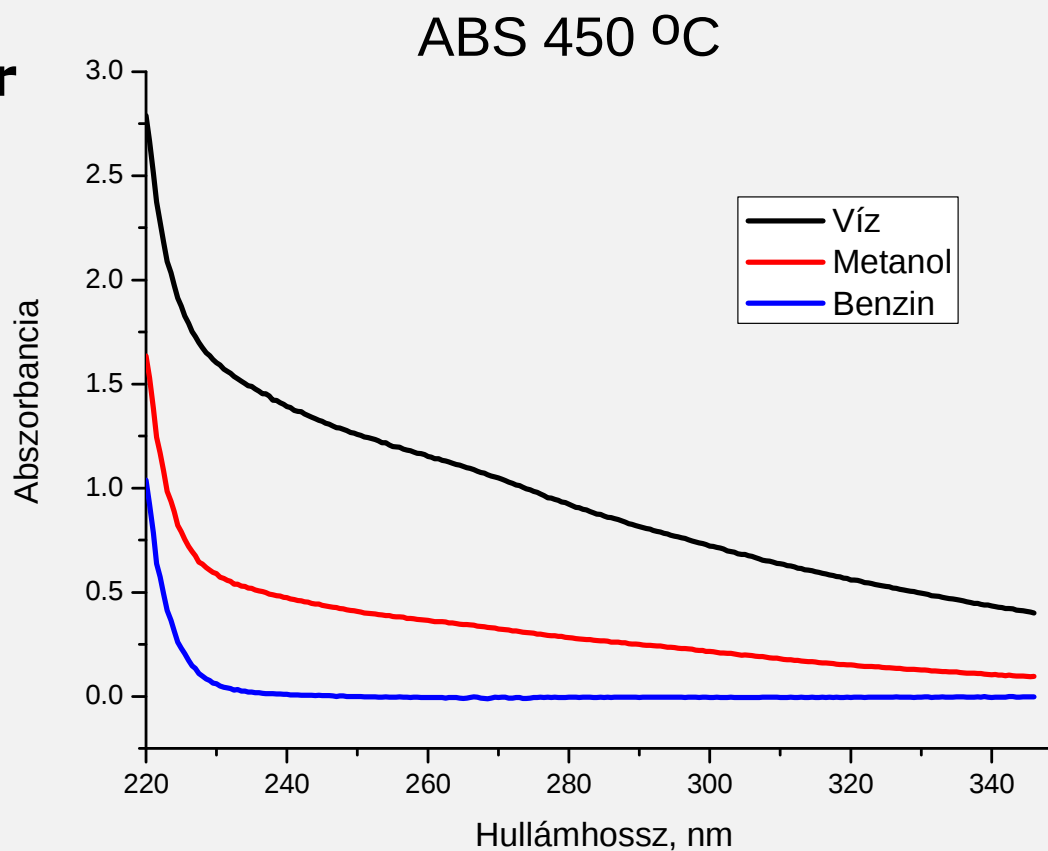
A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.

Az oldószer hatása:

TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0015



**A polárosabb oldószer
kisebb energiával
gerjeszthető,
kiterjedtebb
Pi kötés-rendszert
tartalmazó
molekulákat is kiold.**



**SZENT ISTVÁN
EGYETEM**



MAGYARORSZÁG MEGÚJUL



A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.

A spektrum vizsgálatával jól követhető

- Az alapanyagok hatása
- A bontási hőmérséklet hatása
- Az oldószer hatása
- A bomlás egyes termékeinek összetétele



A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Köszönöm a figyelmet !

Várom kérdéseiket, hozzászólásaikat !



A projektek az Európai Unió
támogatásával valósulnak meg.