

ÖSSZETETT JELENSÉGEK MODELLEZÉSE ALKOTÓIK VIZSGÁLATÁN ALAPULÓ GÖRBESEREGEK KOMBINÁLÁSÁVAL

Tolner László¹, Hajdók Ildikó¹, Vágó Imre², Kovács Attila¹, Czinkota Imre¹

¹ Szent István Egyetem, Környezettudományi Intézet, Gödöllő

² Debreceni Egyetem, AGTC MÉK, Agrokémiai és Talajtani Intézet, Debrecen

A műanyag hulladékok pirolízise során sokféle, vegyület keletkezik. A pirolízis maradék optikai vizsgálata során a sokféle pontosan nem definiált összetételű vegyület hatására összetett spektrumok keletkeznek. Ezek feldolgozása során a mérési pontokból álló görbeseregek összehasonlítására és lineáris kombinálására volt szükség.

Szerves vegyületek közül jellemzően azok a vegyületek lépnek kölcsönhatásba a közeli UV és a látható tartományba eső elektromágneses sugárzással, amelyek összetett Π elektronrendszerekkel (kettős kötésekkal) rendelkeznek. Minél kiterjedtebb ez a rendszer annál kisebb energiájú, azaz nagyobb hullámhosszú fényel lép kölcsönhatásba.



eténo

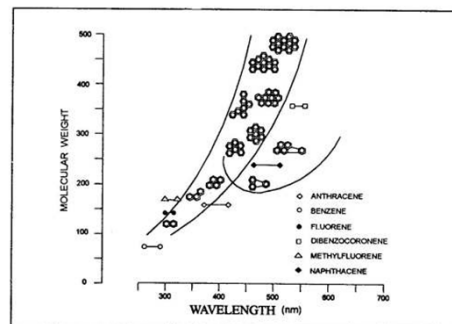
buta-1,3-dieno

hexa-1,3,5-trieno

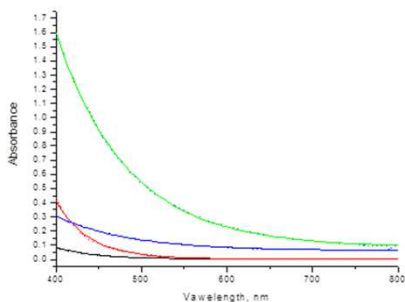
<http://www.chemguide.co.uk/analysis/uvvisible/theory.html>

molecule	wavelength of maximum absorption (nm)
ethene	171
buta-1,3-diene	217
hexa-1,3,5-triene	258

Szerves vegyületek levegő mentes körülmények között végrehajtott pirolízise során többszörösen telítetlen szénhidrogének nagy mennyiségben keletkeznek. Ezek közül a nagyobb molekulatömegűek a szilárd pirolízis-maradékban maradnak. A termékek jellemzően sötét színűek, tehát már a látható fényel is képesek optikai kölcsönhatásba lépni. A többszörös kettőskötéseket tartalmazó vegyületekkel együtt többszörösen összetett aromás vegyületek is keletkeznek. A végállapot a grafit, amely szintén többszörösen összetett aromás rendszernek tekinthető. Az összetettség függvényében nő az anyag által abszorbeálható fény hullámhossza is. http://www.tempe.mi.cnr.it/zizak/pah/cld2_eng.htm

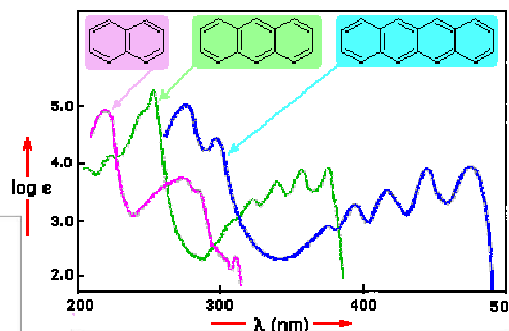


Pirolízis maradékok vizes kivonatainak spektrumai láthatók a következő ábrán:



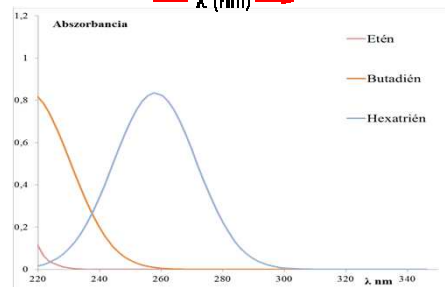
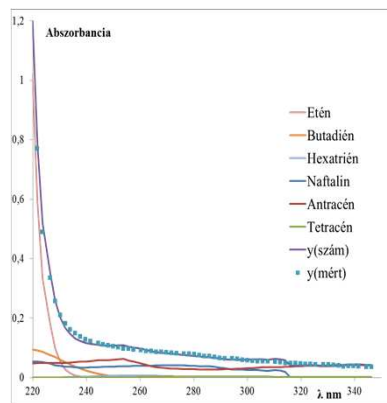
A görbék hasonló lefutásúak, közös jellemzőjük, hogy magasabb hullámhossz-tartományban a fény abszorpció egyre csökkenő mértékű.

A görbe lefutása többféle különböző hullámhossztartományban fényt elnyelő anyag abszorpciós spektrumának kombinálásával megközelíthető



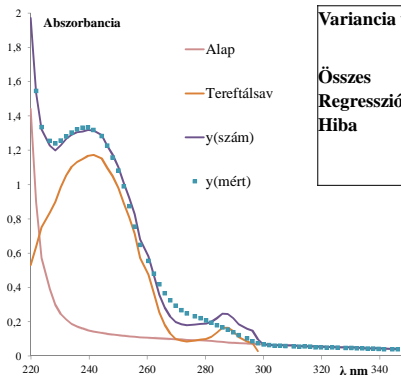
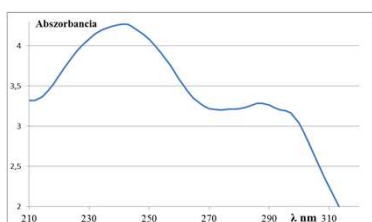
A hatféle anyag spektrumának szimplex lépegető algoritlussal meghatározott optimális kombinációja szoros illeszkedést eredményezett a mért adatokkal.

Variancia táblázat		SQ	FG	MQ	Farány	det.koeff. R ²
Összes	SQy	2,0478	63	0,032504	RMQ/HMQ	RSQ/ÖSQ
Regressió	SQy-HSQ	2,0430	6	0,3405	214,3138	0,9977
Hiba	$\Sigma(y-ysz)^2$	0,0048	3	0,0016	132,8475	invF(0,1%)
						Korrelációs koeff.: r = 0,9988



PET (Poli-etilén-tereftalát) pirolízisekor a spektrum lefutása nem monoton csökkenő.

Az anomália arra utal, hogy a pirolízis maradékban megjelenik a tereftálsav mint bomlástermék. A tereftálsav spektrumával (lásd az alábbi görbe) kombinálva ezek a spektrumok is jó közelítéssel illeszthetők.



Variancia táblázat		SQ	FG	MQ	Farány	det.koeff. R ²
Összes	SQy	10,8618	39	0,278507	RMQ/HMQ	RSQ/ÖSQ
Regressió	SQy-HSQ	10,7666	4	2,6916	84,8133	0,9912
Hiba	$\Sigma(y-ysz)^2$	0,0952	3	0,0317	65,3644	invF(0,3%)
						Korrelációs koeff.: r = 0,9956

Konklúzió: A vizsgált összetett spektrumok egyszerű spektrumok kombinálásával jó közelítéssel előállíthatók. Ezzel elősegítik a kémiai összetétel meghatározását.