

# Reakciókörülmények hatása aromás vegyületek vákuum- ultraibolya fotolízisére



Arany Eszter<sup>1</sup> - Kozmér Zsuzsanna<sup>2</sup> -  
Apáti László<sup>2</sup> - Alapi Tünde<sup>1,2</sup> -  
Gajdáné Schrantz Krisztina<sup>1,2,3</sup> -  
Dombi András<sup>1</sup>



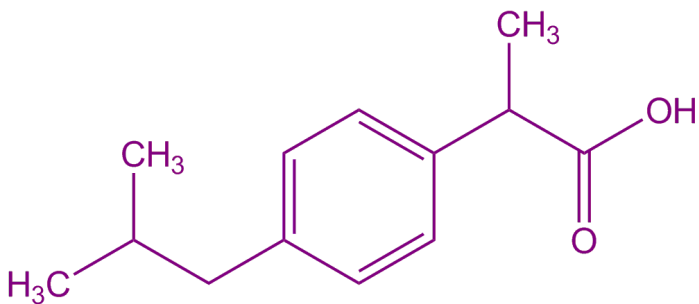
<sup>1</sup>SZTE TTIK Kémiai Tanszékcsoport, Környezetkémiai Kutatócsoport

<sup>2</sup>SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

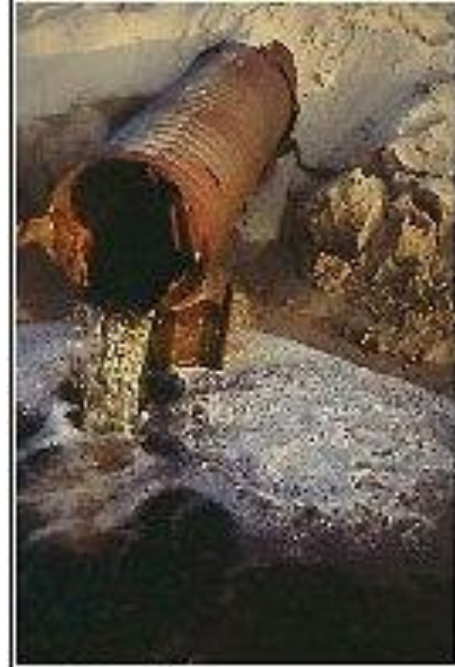
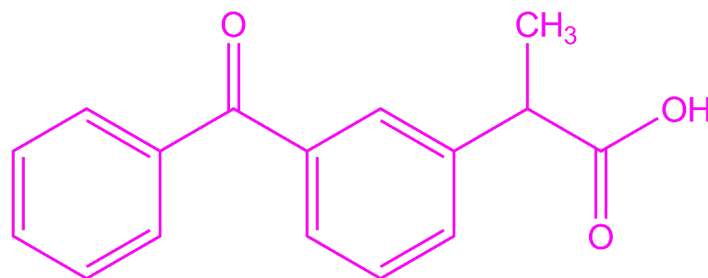
<sup>3</sup>EMPA, Swiss Federal Laboratories for Material Testing and Research, Laboratory for High Performance Ceramics

# Bevezetés

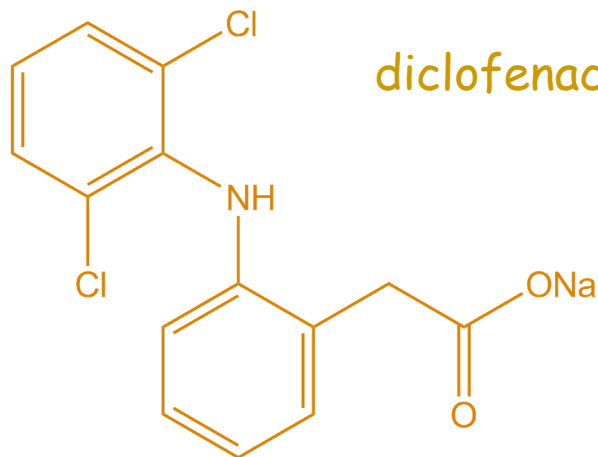
ibuprofen



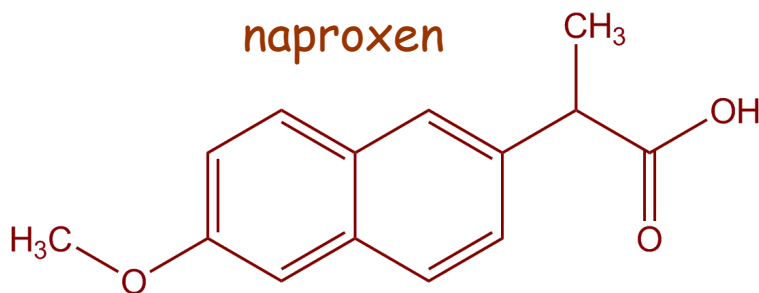
ketoprofen



diclofenac

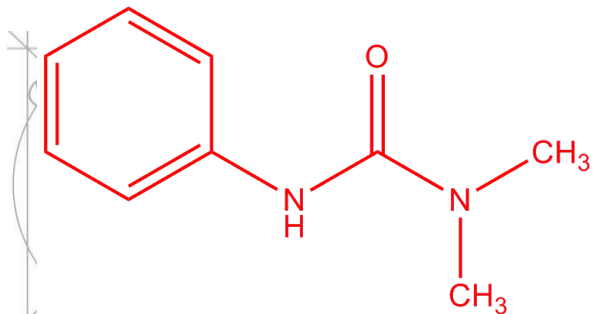


naproxen

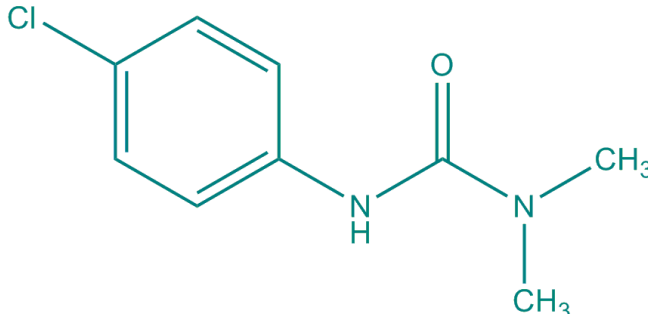


felszíni vizekből  
 $\mu\text{g dm}^{-3}$ -es  
koncentrációban  
mutatták ki

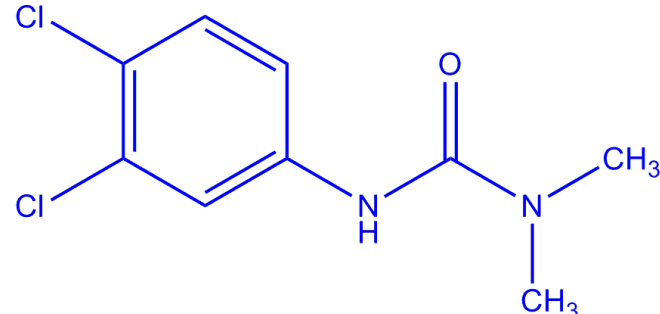
fenuron



monuron



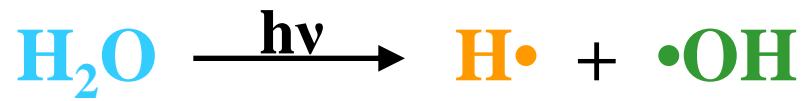
diuron



# Nagyhatékonyságú Oxidációs Eljárások



Vákuum-ultraibolya (VUV) fotolízis



- ✓ egyszerű, "tisztá" módszer
- ✓ adalékanyagok alkalmazása nélkül



# Célkitűzés

a reakciókörülmények változtatása

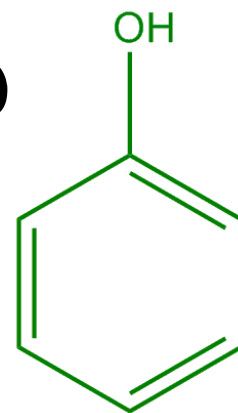


a gyökkészlet változtatása



a gyökkészlet hatásának vizsgálata

- ✓ gyógyszerhatóanyagok (ibuprofen, ketoprofen, diclofenac és naproxen)
- ✓ peszticid-hatóanyagok (fenuron, monuron és diuron)
- ✓ egy egyszerű modellvegyület (fenol)



VUV-átalakulásának sebességére



# A kísérleti berendezés

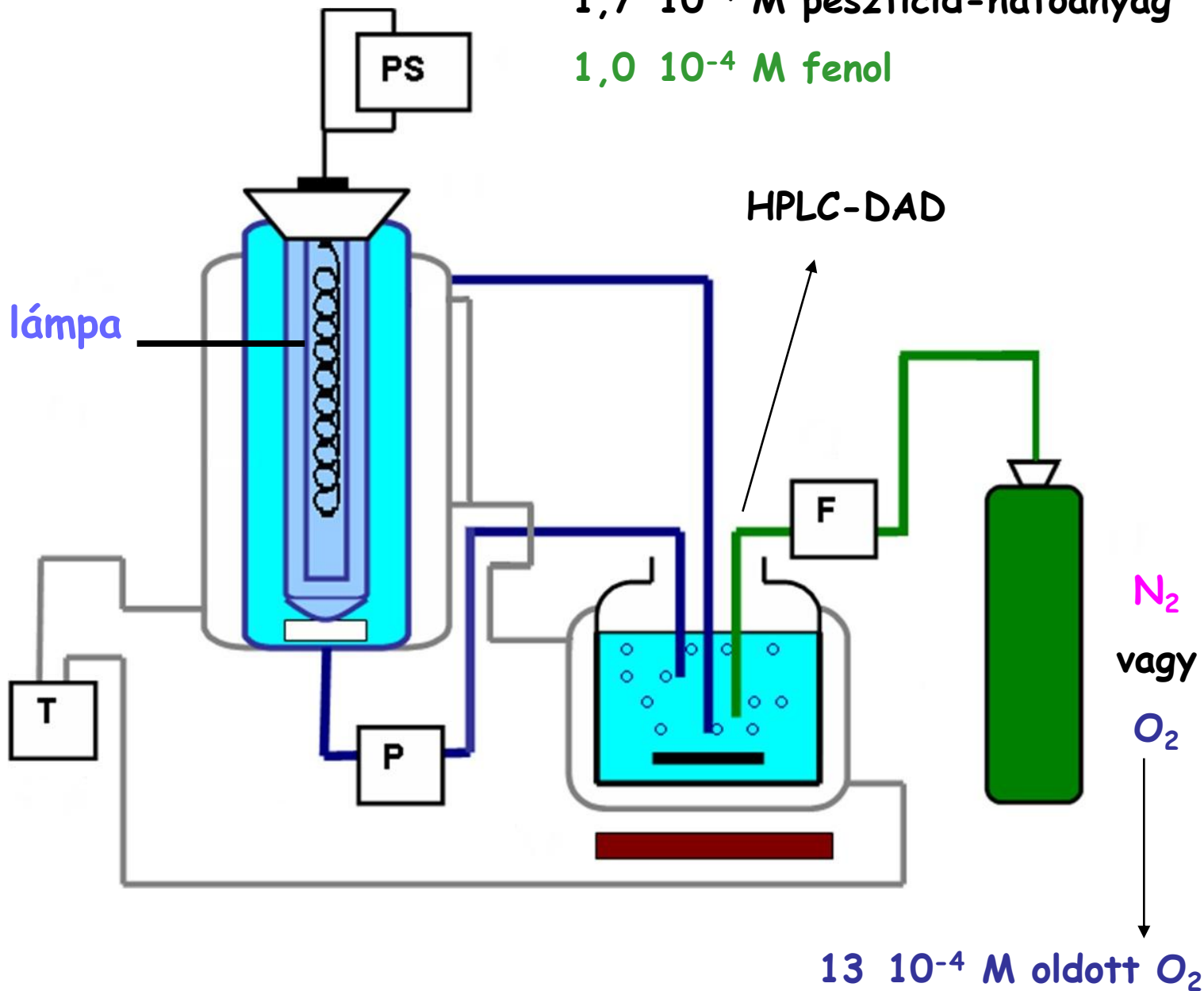
$1,0 \cdot 10^{-4}$  M gyógyszerhatóanyag

$1,7 \cdot 10^{-4}$  M peszticid-hatóanyag

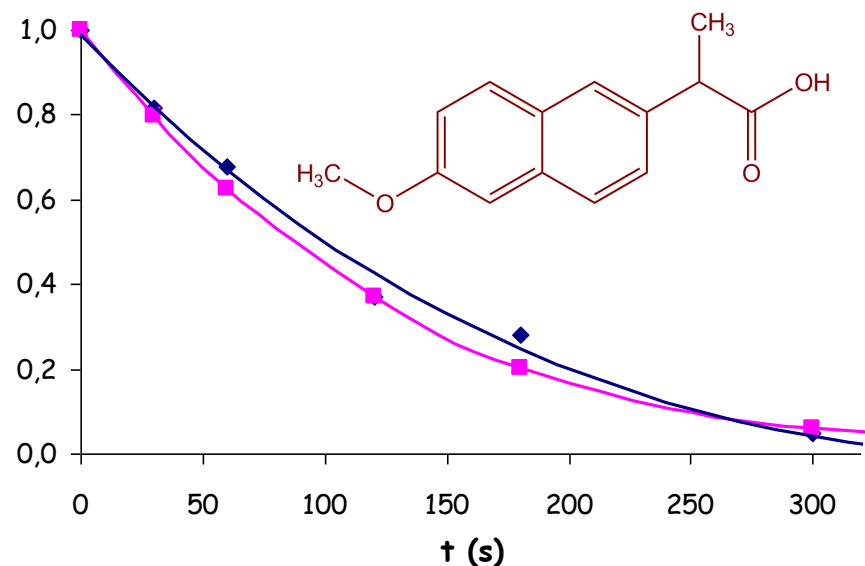
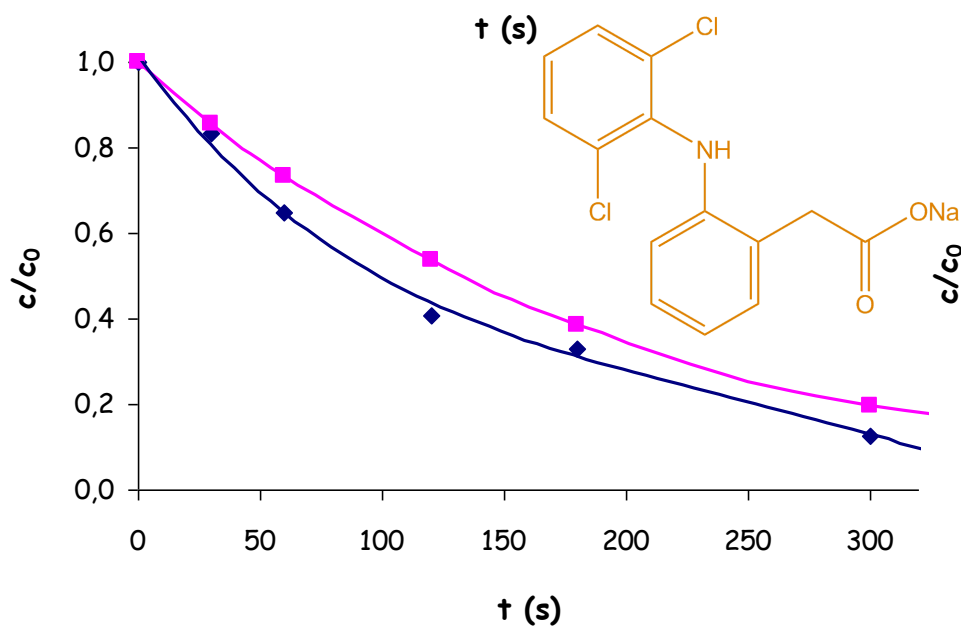
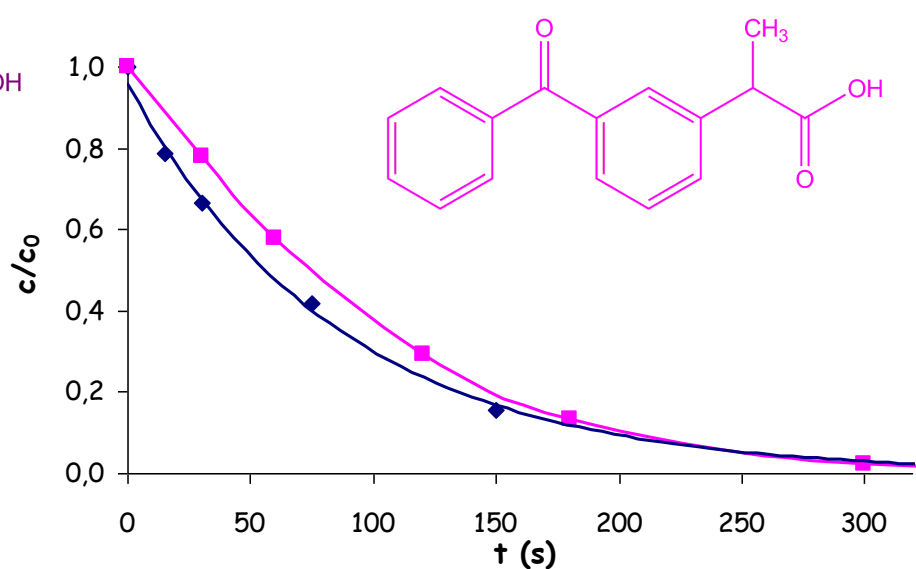
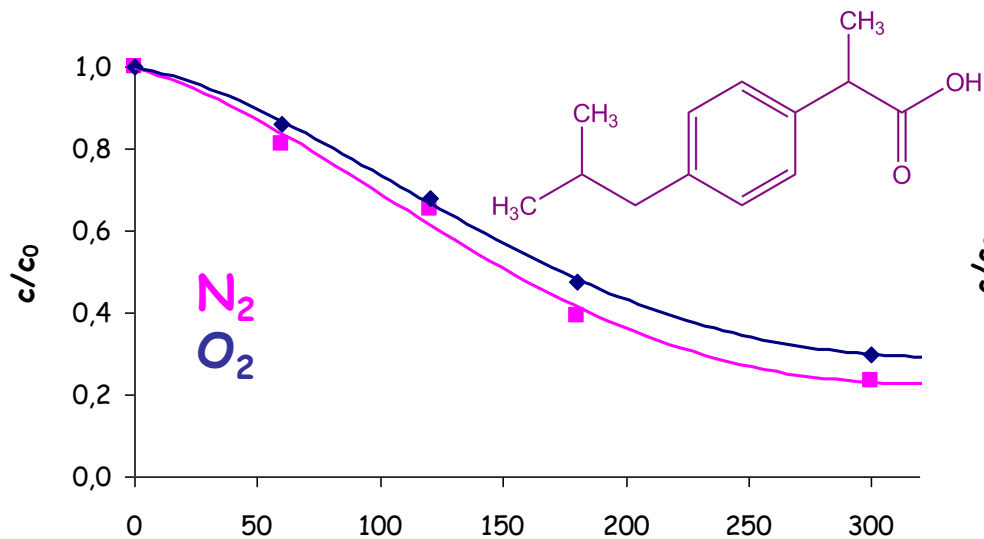
$1,0 \cdot 10^{-4}$  M fenol

$Xe_2^*$  excimer lámpa

20 W  
172 nm

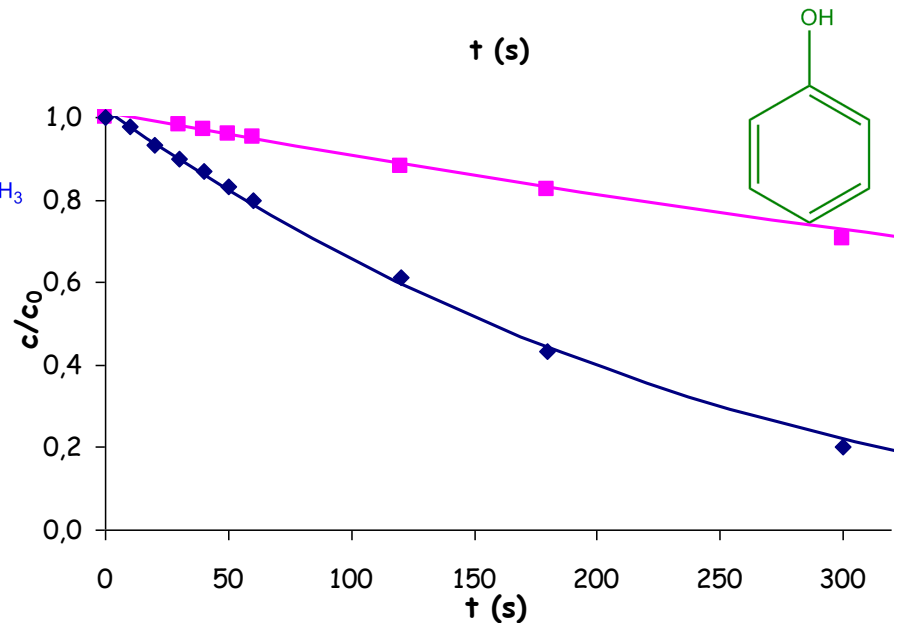
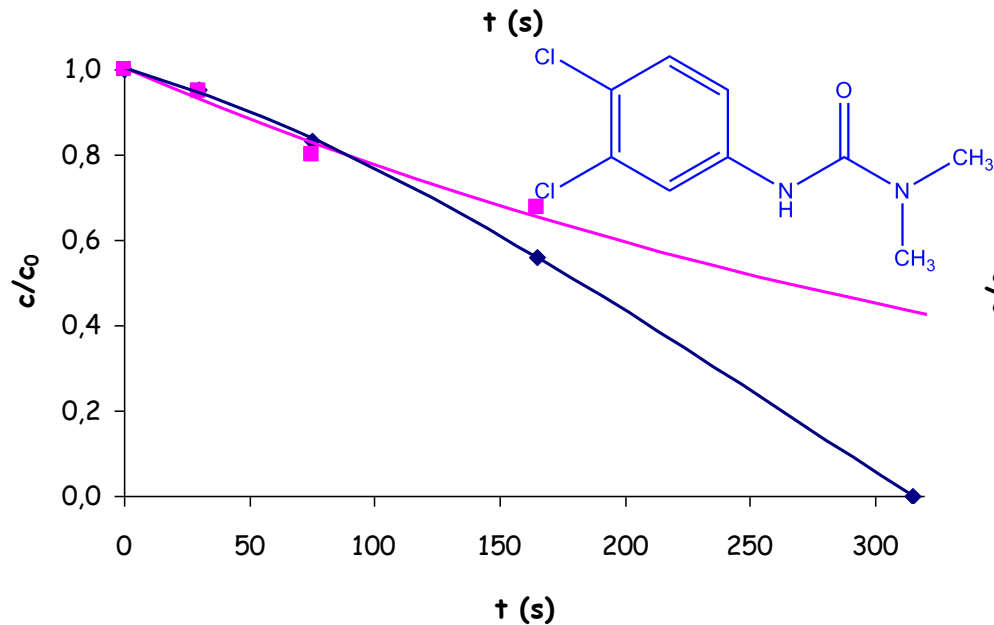
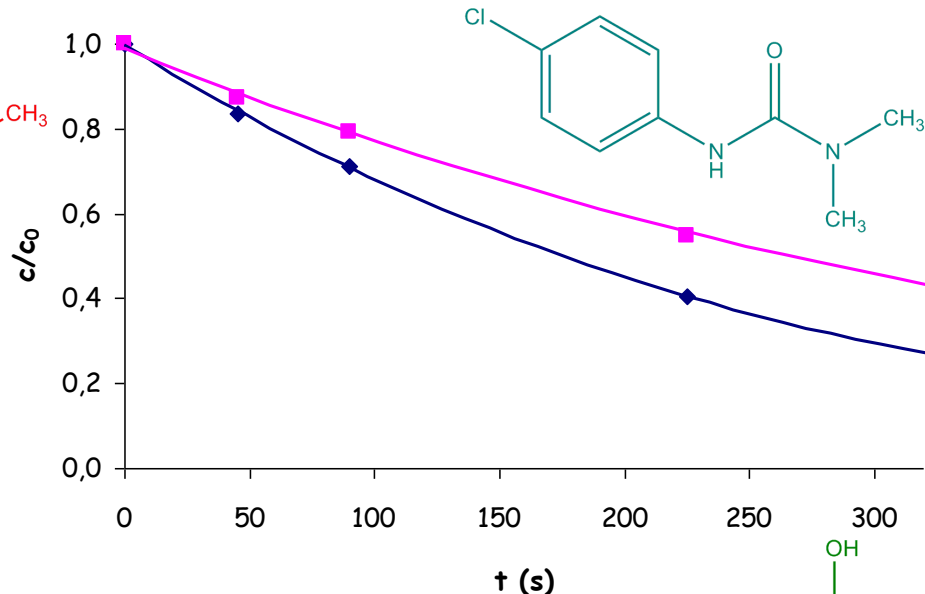
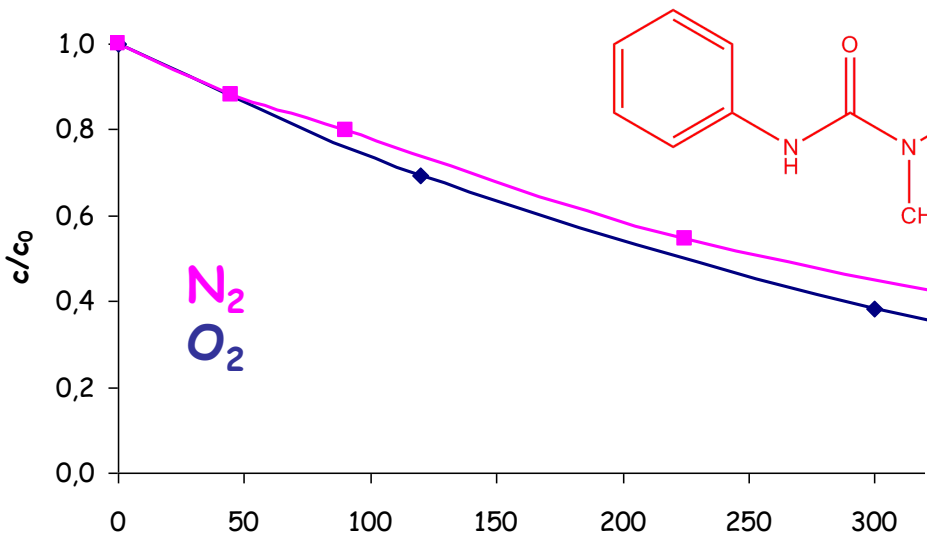


# Az oldott $O_2$ hatása a gyógyszerhatóanyagok bomlására



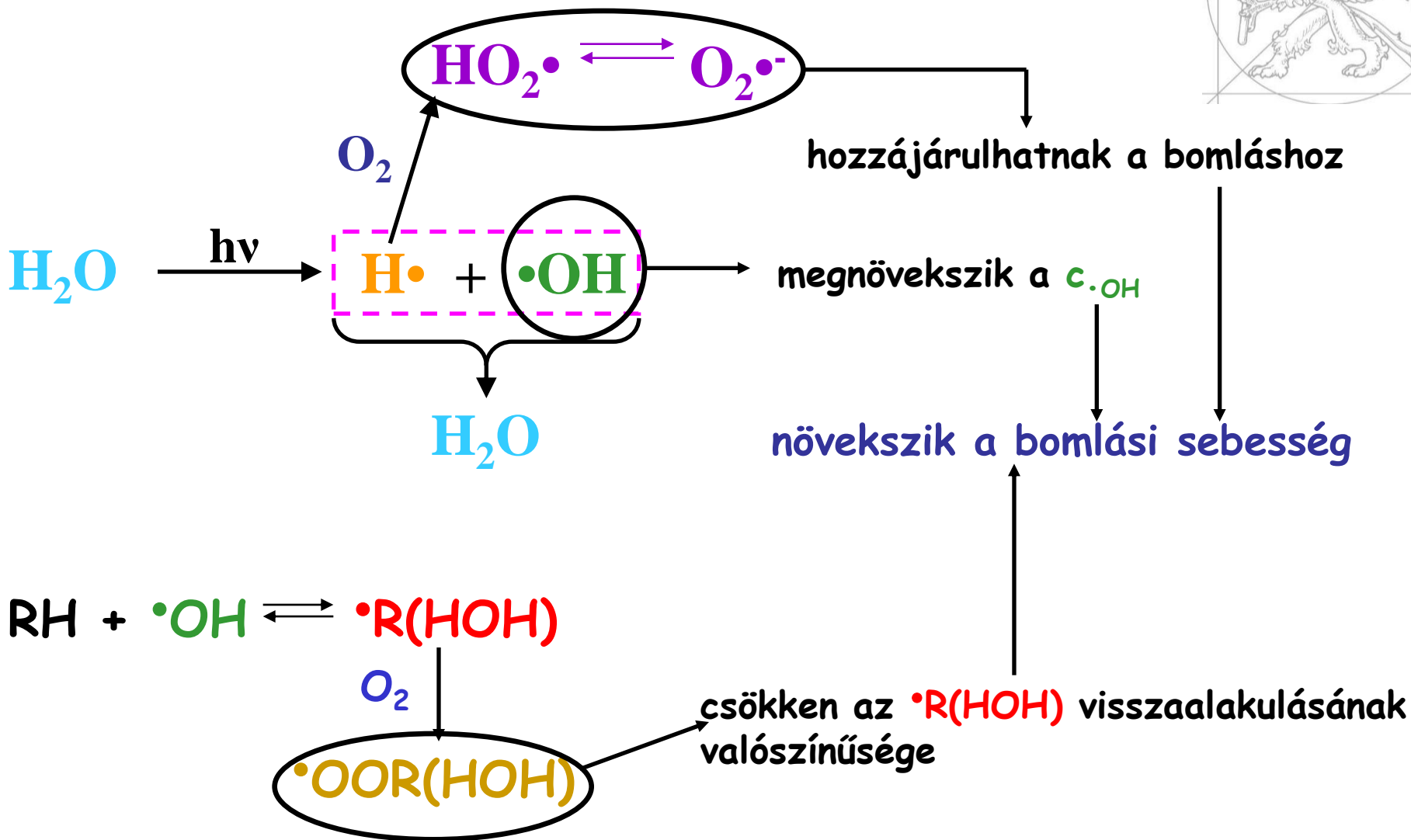
Az oldott  $O_2$  nem befolyásolta a gyógyszerhatóanyagok bomlási sebességét.

# Az oldott $O_2$ hatása a peszticid-hatóanyagok és a **fenol** bomlására



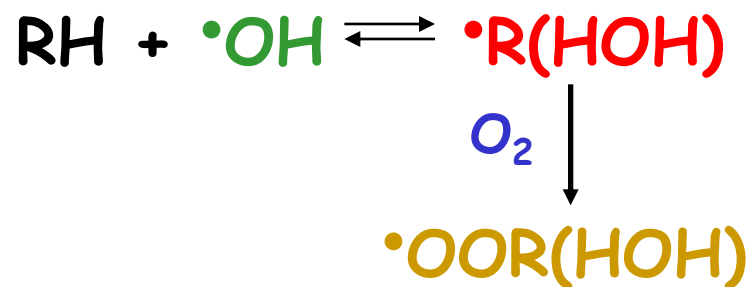
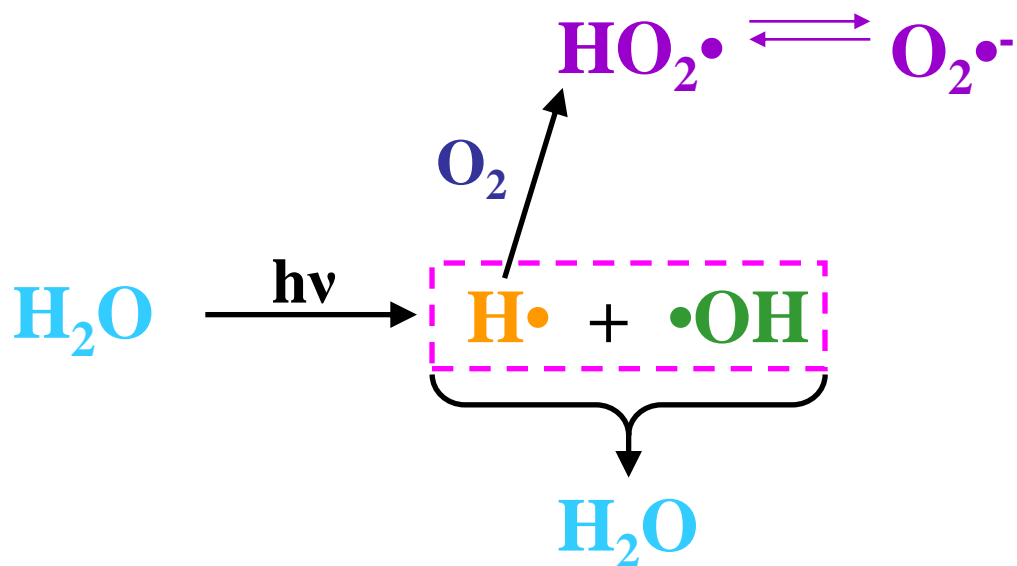
Az oldott  $O_2$  növelte a **diuron** és a **fenol** bomlási sebességét.

# Az oldott $O_2$ szerepe a VUV-fotolízis során





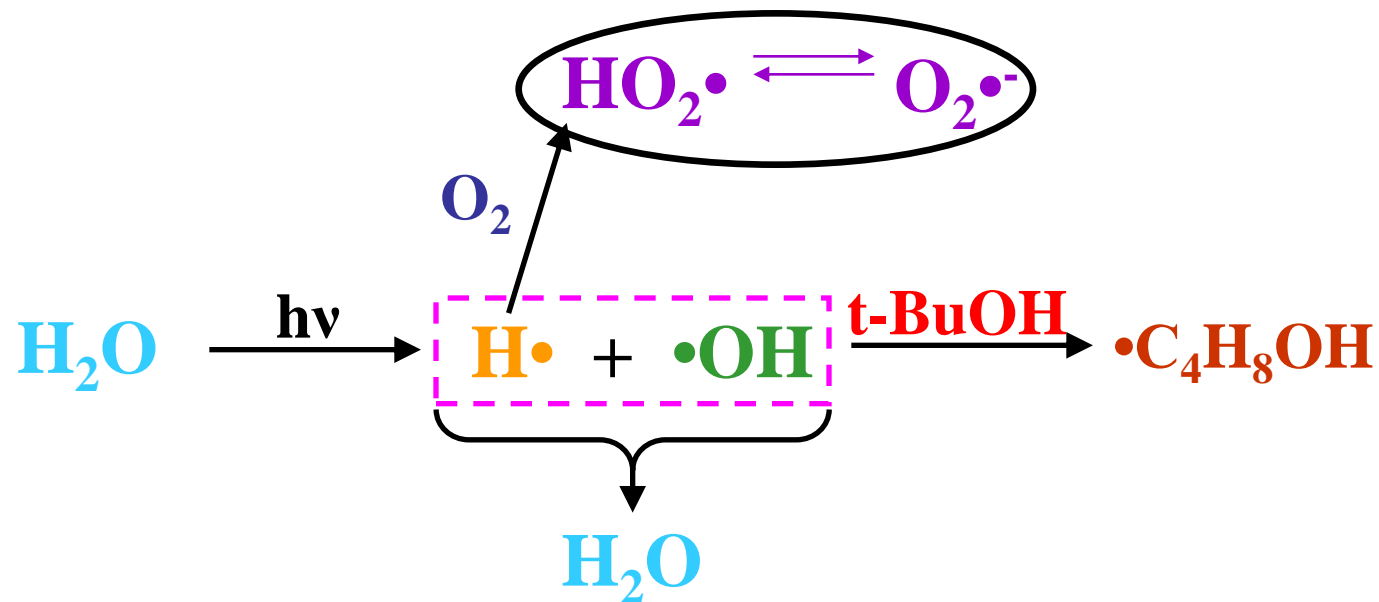
# Az oldott $O_2$ szerepe a VUV-fotolízis során



Amennyiben a bomlási sebesség nem változik  $O_2$  jelenlétében, lehetséges, hogy a célvegyületek:

- kiragadják a kalitkából a primer gyököket
- $\text{H}\cdot$ -kal való reakciója jelentős
- $O_2$  jelenlétében a megnövekedett  $\text{c}\cdot\text{OH}$  -t és  $\text{c}\text{HO}_2\cdot/\cdot\text{O}_2^-$ -t kompenzálja a lecsökkent  $\text{c}_\text{H}\cdot$ .
- az  $\cdot\text{R}(\text{HOH})$  továbbalakulásának sebessége  $\gg$  visszaalakulásának sebessége

# A t-BuOH hatása fenol VUV-fotolízisére



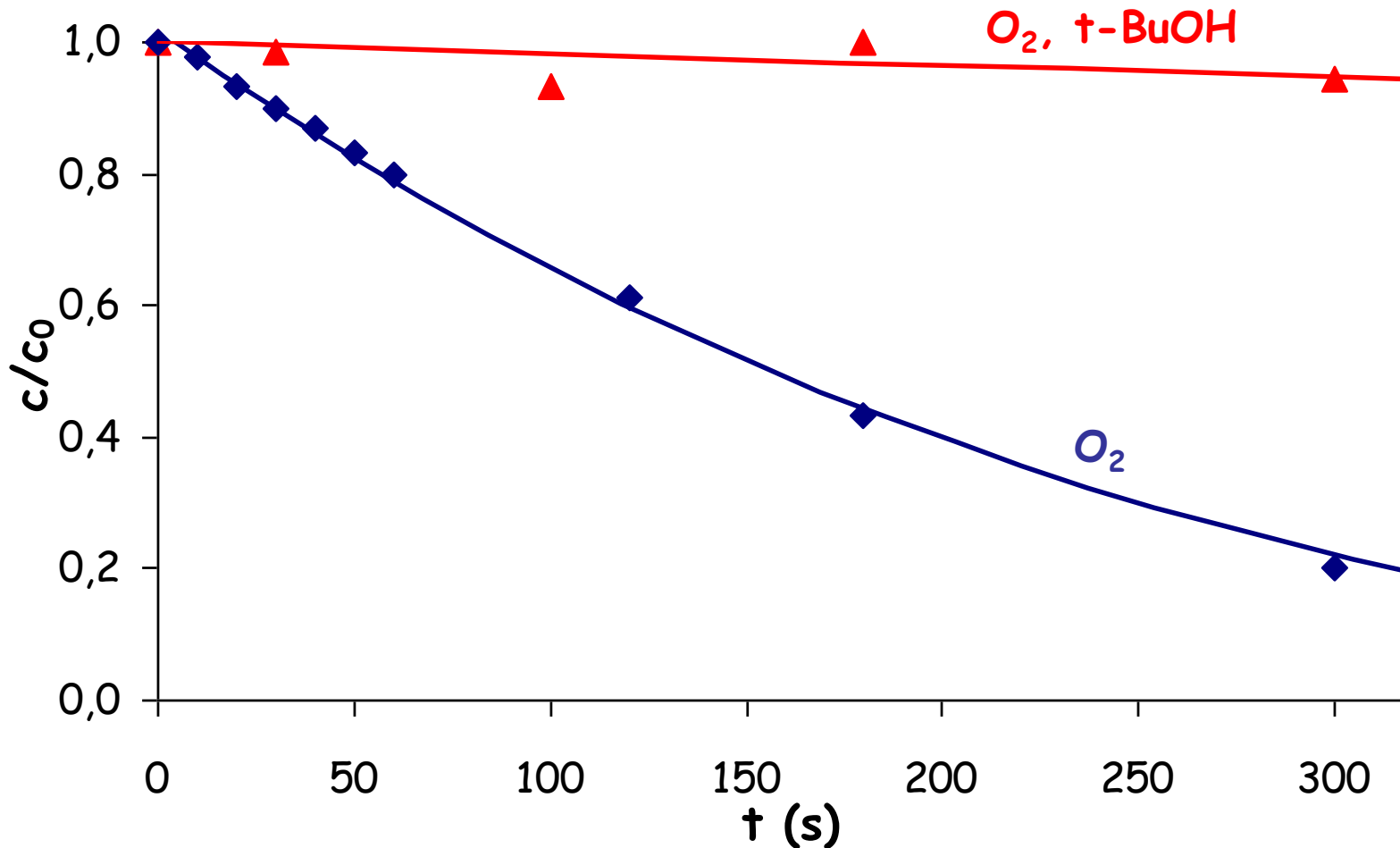
1,0  $10^{-4}$  M fenol

13  $10^{-4}$  M oldott  $\text{O}_2$

5000  $10^{-4}$  M t-BuOH



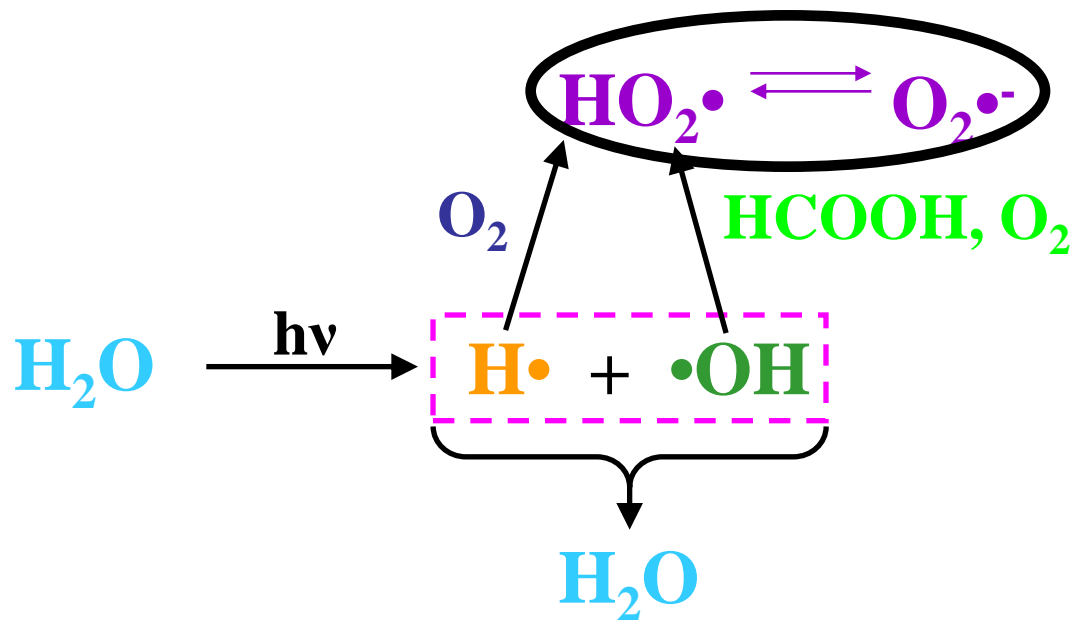
# A $t$ -BuOH hatása fenol VUV-fotolízisére



✓ a fenol bomlási sebessége jelentősen lecsökkent  $t$ -BuOH jelenlétében, valószínűleg a lecsökkent  $c_{\cdot OH}$  miatt

✓ ebben a koncentrációban a  $HO_2^{\cdot}/^{\cdot}O_2^-$ -k csak kis mértékben járulhatnak hozzá a fenol bomlásához

# A $\text{HCOOH}$ hatása fenol VUV-fotolízisére



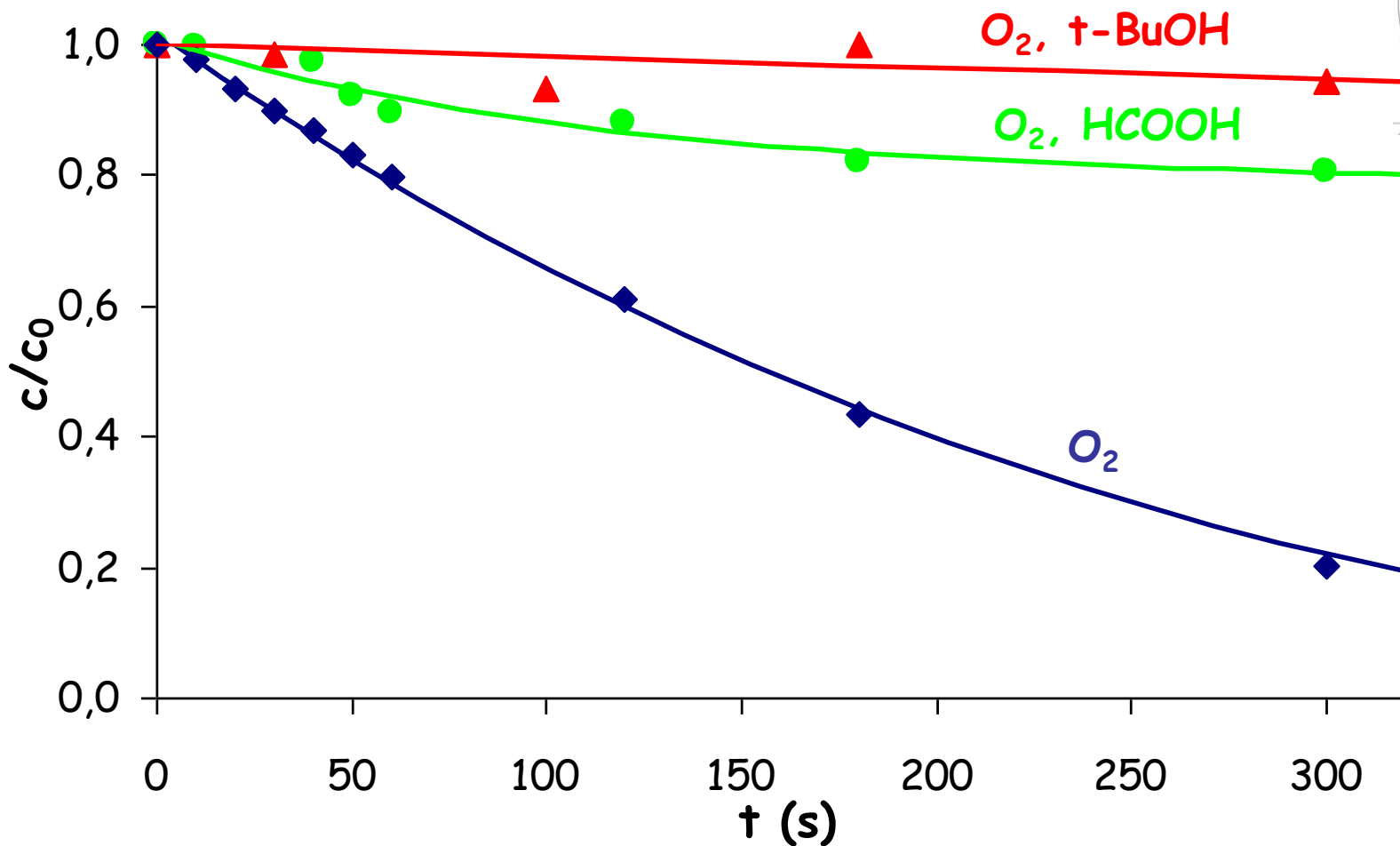
1,0  $10^{-4}$  M fenol

13  $10^{-4}$  M oldott  $\text{O}_2$

500  $10^{-4}$  M  $\text{HCOOH}$



# A $\text{HCOOH}$ hatása fenol VUV-fotolízisére



a fenol bomlási sebessége kisebb mértékben csökkent le  $\text{HCOOH}$  hatására



nagyobb koncentrációban a  $\text{HO}_2^{\bullet}/^{\bullet}\text{O}_2^-$ -k is hozzájárulhatnak a fenol bomlásához

# Összefoglalás

✓ a molekulárisan oldott  $O_2$  a kiindulási vegyület szerkezetétől függően befolyásolja szerves vegyületek VUV-fotolízisének sebességét

✓ a molekulárisan oldott  $O_2$  a  $C-OH$ , ill. a  $C_{HO_2} \cdot / \cdot O_2^-$  növelésén és a  $C_H \cdot$ , ill. a  $C \cdot R(HOH)$  csökkentésén keresztül is kifejtheti hatását a szerves vegyületek VUV-fotolízise során

✓ a **fenol** átalakulásában elsődleges szerepe a  $\cdot OH$ -knek van

✓ a  $HO_2 \cdot / \cdot O_2^-$ -k csak nagyobb koncentrációban járulhatnak hozzá a **fenol** bomlásához



*Köszönöm*

*a*

*figyelmet!*

Köszönjük a Társadalmi Megújulás  
Operatív Program (TÁMOP-4.2.1/B-  
09/1/KONV-2010-0005) és az Országos  
Tudományos Kutatási Alapprogramok  
(NKTH OTKA CK 80193) anyagi  
támogatását.

