

BESZÁMOLÓ A KECSKEMÉTI FŐISKOLA RÉSZVÉTELÉRŐL AZ ELSŐ NORVÉG-MAGYAR SZERVES KÉMIAI NYÁRI ISKOLÁBAN

A REPORT ON THE PARTICIPATION OF THE KECSKEMET COLLEGE IN THE FIRST NORWEGIAN- HUNGARIAN SUMMER SCHOOL ON BIOACTIVE SUBSTANCE RESEARCH

Kőházi-Kis Ambrus^{1*}, Görbe Mihály¹

¹ Természet- és Műszaki Alaptudományi Tanszék, GAMF Műszaki és Informatikai Kar, Pallasz Athéné Egyetem, Magyarország

Kulcsszavak:

Lézer, Szerves kémia, Lézeres kémia, Nyári iskola, Norvég Civil Támogatási Alap

Keywords:

Laser, Organic Chemistry, Laser Chemistry, Summer School, Norway Grants

Cikktörténet:

Beérkezett 2016. szeptember 21
Átdolgozva 2016. november 2.
Elfogadva 2016. november 5.

Összefoglalás

A szerzők, mint kutatási és oktatási területen szerteágazó tapasztalatokkal rendelkező lézerfizikusok, felkérést kaptak egy együttműködésre a Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékével, mely nyitni szeretne a lézerek kémiai alkalmazása felé. Együttes munkánk első állomásaként közös nyári iskolát tartottunk a Norvégiai Civil Támogatási Alap finanszírozásával a norvégiai Tromsøi Egyetemen. Együttműködésünk sikere érdekében a lézerek és a szerves kémia határterületét alaposan fel kell tárnunk. Dolgozatunkban rövid összefoglalást szeretnénk nyújtani a lézerek kémiai alkalmazásáról, valamint beszámolót nyújtunk a 2016. évi norvégiai szerves kémiai nyári iskoláról.

Abstract

The authors received an invitation for joint work with the Department of Organic Chemistry at the University of Szeged that is willing to use lasers for chemical applications. As the first step in our cooperation we held a joint summer school at the University of Tromsø, with the support of the Norway Grants. In order to be able to work successfully, we have to explore the frontiers of laser physics and organic chemistry thoroughly. In our paper we wish to present a short summary on the chemical applications of lasers, and a report on the 1st Norwegian-Hungarian Summer School on Bioactive Substance Research.

1. Bevezetés

A lézerek forradalmi újításokat hoztak a kémiában is, hasonlóan a tudományos élet más területeihez. A Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémia Tanszéke is nyitni szeretne a lézerek kémiai alkalmazása felé. Ennek érdekében kerestek meg bennünket, hogy vegyünk részt ennek a interdiszciplináris területnek a fejlesztésében.

* Kapcsolattartószerző.

E-mail cím: kohazi-kis.ambrus@gamf.kefo.hu

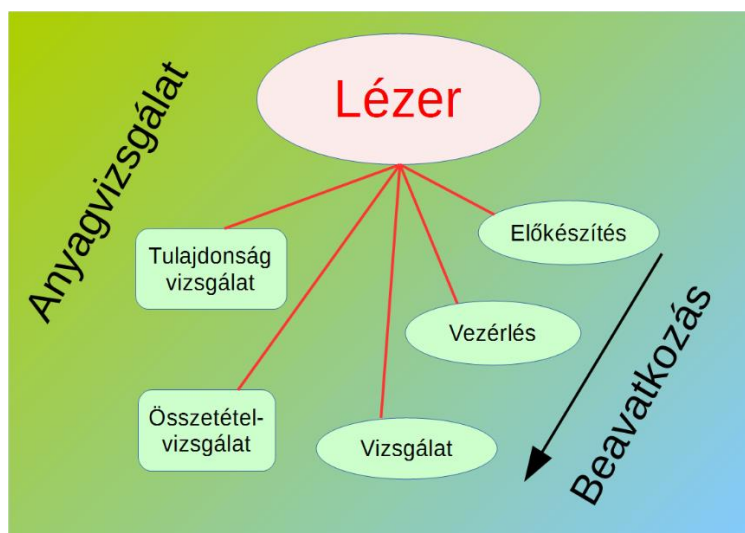
A lézerlaboratóriumi szakember/szakmérnök szakirányú továbbképzési szakunkon folytatott képzésünk kapcsán kerestek meg a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kara Szerves Kémia Tanszékének munkatársai (Dr. Frank Éva, Prof. Dr. Zsigmond Ágnes), hogy vegyünk részt egy a szerves kémia területén BSc., MSc, ill. PhD tanulmányokat folytató hallgatók számára tartandó nyári iskolában, ahol a lézerlaboratóriumokban alkalmazott technológiákról, lézerekről tartunk előadásokat. Továbbá fontos szempontként merült fel az is, hogy fizikusként mi is képet alkothassunk a modern szerves kémiai kutatások céljairól, állapotáról, alkalmazott módszereiről, különös tekintettel a továbbiakban körvonalazódó együttműködésünkre.

2016 nyarán a Norvég Civil Támogatási Alap finanszírozásában tartottunk a Szegedi Tudományegyetem és a norvégiai Tromsøi Egyetem munkatársaival és hallgatóival közösen Tromsøben két hetes nyári iskolát, melynek témája a szerves kémiai kutatások és a kémiában alkalmazható lézeres technológiák kölcsönös megismerése volt. Intézményünk részéről a dolgozat két szerzője három hallgatónkkal vett részt a nyári iskolán.

A nyári iskola a sarkkörön túl elhelyezkedő csodálatos kis tengerparti városka, Tromsø egyetemén 2016. július 11. és 26. között került megrendezésre. Házigazdánk Prof. Jørn Hansen a Tromsøi Egyetem szerves kémiai területén munkálkodó munkatársaival, PhD hallgatóival nagyszerű házigazdái voltak a rendezvénynek. Délelőttönként előadásokat hallhattunk a szerves kémiai kutatásokról, illetve a lézeres laboratóriumi eszközökről, módszerekről. Délutánonként pedig szerves kémiai laboratóriumi gyakorlatokon vettünk részt.

A megkezdett együttműködést a továbbiakban is folytatni akarjuk. A szegedi és a tromsøi szerves kémikus kollégákkal lézeres kémiai folyamatokat, újszerű reakciókat kívánunk tanulmányozni, kifejleszteni. Különösen a kémiai reakciók segítése, katalízisszerű meggyorsítása, a nem kívánt alternatív reakció-utak lezárása céljából kívánunk lézeres módszereket kipróbálni, újakat kifejleszteni.

A kémia egy olyan tudomány, amely az anyag jellemzőit és átalakíthatóságát tanulmányozza. A lézer monokromatikuságával, nagy teljesítménysűrűségével nagyon hatékonyan egészíti ki a hagyományos anyagvizsgálati módszereket.



1. ábra. Lézerek alkalmazási területei a kémiában

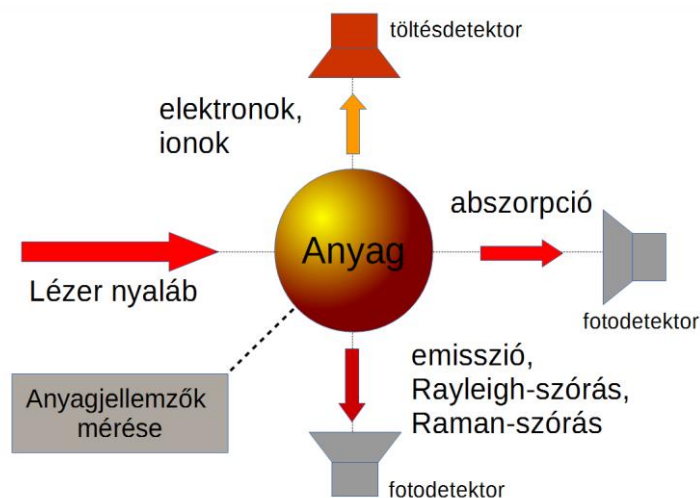
A lézerek alkalmazásait kategorizálhatjuk aszerint is, hogy azok mennyire anyagvizsgálatra azaz összetétel, illetve tulajdonság vizsgálatára, illetve kémiai reakciók kiváltására, nyomon követésére szolgálnak (lásd az 1. ábrát).

Dolgozatunk célja a kémiában már napjainkban is alkalmazott lézeres mérési és beavatkozási eljárások rövid áttekintése.

2. Lézeres anyagvizsgálati módszerek a kémiában

Az anyagvizsgálat két fontos területre bontható: anyagok szerkezeti tulajdonságainak és a keverék anyagok összetételének vizsgálatára.

Lézernyaláb hatását mérve számos lehetőség nyílik az anyag jellemzőinek, legfőképpen összetételének meghatározására (lásd a 2. ábrát).



2. ábra. Lézeres anyagvizsgálati módszerek

2.1. Abszorpciós mérések

Az anyag elnyelő képessége miatt lecsökkent fénytjeljesítmény mérésével az anyagra spektrálisan jellemző abszorpciós képességét mérhetjük. Lézerek alkalmazása a nagy fénytjeljesítménnyel, és az alapvetően a fénynyalábok kitűnő nyalábvastagság-megtartó képessége miatt beállítható kiemelkedően nagy abszorpciós fény-utak beállíthatóságával teszi az abszorpció-mérést igazán pontos analitikai módszerré. Különleges abszorpciós cellák, pl. Herriott-cella segítségével akár többszáz-szoros fényterjedés is elérhető az elnyelő közeg hosszán.

A beeső fénynyaláb ingadozásának mérésével (monitorozásával) a mérési pontosság javítható. A közeg abszorpciója spektrális eloszlásának feltérképezéséhez vagy széles spektrumú lézertényre és az átjutott fény spektrális felbontásához spektrométerre, vagy hangolható hullámhosszúságú lézernyalábra van szükség.

2.2. Emissziós mérések [1]

A beeső fénynyaláb hatására számos módon keletkezik kibocsátott fény, amely térbeli- és spektrális eloszlásából az anyag tulajdonságaira következtethetünk.

A beeső **fény rugalmasan szóródhat** (pl. Rayleigh-szórás, illetve Mie-szórás), ekkor a beeső jel spektrális eloszlásától a fényszóródás szög szerinti eloszlása függ, amely a szóró részecskék méretéről, alakjáról, polarizálhatóságáról nyújt információt.

2.2.1. Lézer-indukált fluoreszcencia

Nemlineáris folyamatok esetén a beeső fény spektruma eltér a keltett, szórt fény spektrumától. A beeső fény elnyelődik a közegben, majd a gerjesztett anyag legerjesztődése során fényt bocsát ki, ezt az anyag fluoreszcenciájának nevezzük. A lézerral indukált fluoreszcencia (LIF) mérésével, különösen az ebben az esetben alkalmazható, a gerjesztő fény amplitúdójának modulációjával megvalósítható, fázis-érzékeny detektálás módszerével nagyon érzékeny analitikai eljárást nyerhetünk. A impulzusos gerjesztés esetén a keltett fluoreszcencia jel lecsengéséből a megfelelő anyagi kvantumállapot élettartama is megállapítható.

2.2.2. Raman szórás

Ha a beeső fény nem rezonáns a vizsgált anyag elnyelésével, akkor is bekövetkezik nemlineáris folyamat, a nemlineáris fényszórás, mint például a Raman-szórás jelensége. Ekkor a beeső fény fotonenergiája az anyag belső energiaszintjeinek különbségi energiájával, az anyagra jellemző módon megváltozik. Ehhez az eljáráshoz nem szükséges a beeső fény rezonáns elnyelődése – egyetlen beeső monokromatikus fénynyaláb hatására a szóródó fényben

megjelennek az anyagra jellemző eltolódott spektrális vonalak. A jelenség igen gyenge jelet ad, még a rugalmasan szóródó beeső fény elkülönítésére is nagy figyelmet kell fordítani spektrális aluláteresztő vagy Notch-szűrő (band-stop filter) segítségével, amelyek áteresztőképességének a lehető leggyorsabban kell levágnia, hogy a gerjesztő fény kizárása mellett a kisebb energiájú átmenetek spektrális vonalai is megfigyelhetők legyenek.

2.3. Az anyag jellemzőinek mérésén alapuló módszerek

A lézer fényével megvilágított anyag makroszkopikus tulajdonságainak megváltozása mérésével is kaphatunk információt az anyag összetételéről, szerkezeti tulajdonságairól.

Az abszorbeált fény energiája felmelegíti az anyagot, a hőmérsékletváltozás különböző fajta mérhető jeleket eredményez (photothermal spectroscopy): hőmérséklet, sűrűség, nyomás és kémiai változások figyelhetők meg.

2.3.1. Fototermikus effektusok

Az abszorbeált fény felmelegíti az anyagot, ennek következtében a gerjesztő fénynyaláb helyén megváltozik az anyag sűrűsége, nyomása, törésmutatója. Rendszerint a gerjesztő fénynyaláb útján az anyagot megvilágítják abban nem abszorbeálódó teszt (úgynevezett próba) nyalábbal, amely az megváltozott tulajdonságú anyagon áthaladva magával viszi az anyag módosulásának jelét. Ezt a jelet érzékelhetik interferometriával, a teszt fénynyaláb vastagságát megváltoztató hatás észlelésével (termikus lencsésedés), illetve a teszt fénynyaláb terjedési irányának eltéréseinek észlelésével.

Különösen fontos és hatékony a fotoakusztikus eljárás, amely során az abszorbeált modulált teljesítményű fény hatására a közeg periodikusan kitágul, majd összehúzódik – hanghullámok keletkeznek, amelyet keskeny spektrális szélességű, érzékeny mikrofonokkal észlelnek. A moduláció frekvenciájával megegyező frekvenciájú jel erőssége arányos az adott hullámhosszúságú fény elnyelődésével, az elnyelő részecskék koncentrációjával. Ezt az eljárást gyakran alkalmazzák kis mennyiségű, esetleg veszélyes, vagy tiltott összetevők pontos észlelésére. [2]

2.3.2. Optogalvanikus spektroszkópia

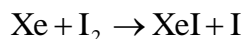
Elektromos kisülések ionizált gázában, plazmájában a gerjesztő lézernyalábot rezonánsan elnyelő részecskék koncentrációja függvényében megváltozhat a kisülés elektromos vezetőképessége. Érzékeny áramerősség-, illetve feszültségmérő berendezéssel észlelhetjük a fényt rezonánsan elnyelő részecskék jelenlétét. Ezzel a módszerrel olcsó és nagyon hatékony észlelő eljárásokat fejlesztettek ki [3].

3. Lézeres reakciókontroll

A lézerek kémiai alkalmazásának egyik legújabb és leggyorsabban fejlődő területe a kémiai reakciók lézerimpulzusokkal történő irányítása. Ennek alapötlete az, hogy az ultrarövid — néhány száz femtoszekundumos és rövidebb — lézerimpulzusok megfelelő formálása lehetőséget nyújthat kötések rezgésállapotának szelektív gerjesztésére. A impulzushossz rövidségének nagyságrendjéről femtokémiának is nevezik az új határdiszciplínát.

3.1. XeI molekula keltésének lézeres kontrollja

Egy példa femtokémiailag kontrollált reakcióra a xenon nemesgázatom és a jódmolekula reakciója,



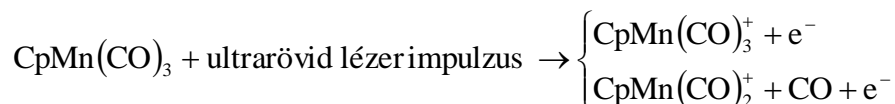
Ennek során különleges, csak gerjesztett állapotban létező, nemesgáz- és halogénatomból álló molekula (ún. excimer) keletkezik, melyhez hasonlókat (ArF, KrF, XeBr, XeCl, XeF, KrCl) évtizedek óta használnak a lézertechnikában.

A reakcióban a XeI termék hozama befolyásolható a besugárzó két ultrarövid impulzus időkülönbségén keresztül, amire az az egyszerűsített magyarázat, hogy az első impulzus gerjeszti az I₂ molekula rezgésállapotát, a második pedig a jódatomtörzseket hozza a XeI képződéséhez szükséges gerjesztett állapotba. Ha az impulzusok olyan időközben követik egymást, ami alatt a

jódatomoknak éppen elérik az egymástól való maximális távolságot, az a termékhozamban is maximumot eredményez [4].

3.2. Koherens kontroll

Egy másik példa a $\text{CpMn}(\text{CO})_3$ fotoionizációs termékei hozamának irányítása (itt a Cp a ciklopentadienil rövidítése). A reakció egy kb. 10 nm sávzélességű, 800 nm központi hullámhosszú impulzus hatására kétféleképpen is lejátszódhat [1]:



mely reakcióutak közül azonban az utóbbi lényegesen gyakoribb, a $\text{CpMn}(\text{CO})_3^+$ alig keletkezik.

A lézerimpulzus azonban átformálható optimálisan olyanná, mely nagyságrendekkel több $\text{CpMn}(\text{CO})_3^+$ keletkezését segíti elő. A vizsgálatok azt mutatták, hogy az optimális besugárzás valójában három egymást követő impulzusból áll, melyek időköze 85 fs, központi hullámhosszaik pedig rendre 799 nm, 800 nm és 801 nm.

A tapasztalatra itt is adható egy egyszerűsített magyarázat, nevezetesen az első impulzus létrehozza a kiinduló molekula ún. elődisszociációs állapotát, ezek ionizálódhatnak a második reakcióúton. A második impulzus azonban azon molekulák ionizálására szolgál, amelyek *nem* kerültek elődisszociációs állapotba. Az időzítés akkor optimális, amikor a molekula a vibrációjának a külső fordulópontján van, az első impulzus után 85 fs-mal. Az utolsó impulzus, ami az első kettőnél lényegesen gyengébb, a nem elődisszociált, de még nem is ionizált molekulák rezgésének belső fordulópontján ionizál és eredményez $\text{CpMn}(\text{CO})_3^+$ -t, tehát további 85 fs elteltével optimális időzítésű.

A lézeres reakciókontroll elve később alkalmazhatónak bizonyult általánosabb kvantummechanikai folyamatok irányítására, aminek tudományterületét *koherens kontrollnak* nevezték el.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönik a Norvég Civil Alap HU-0003-M4/IP/2015 számú, 1st Hungarian-Norwegian Summer School on Bioactive Substance Research című pályázatának támogatását.

Irodalomjegyzék

- [1] Helmut H. Telle, Ángel González Urena, Robert J. Donovan, „Laser Chemistry – Spectroscopy, Dynamics and Applications”, John Wiley & Sons Ltd., 2007.
- [2] D.V. Bageshwar, A.S. Pawar, V.V. Khanvilkar, V.J. Kadam, „Photoacoustic Spectroscopy and Its Applications – A Tutorial Review”, Eurasian J. Anal. Chem., vol. 5, pp. 187-203, 2010.
- [3] S.B. Rai, D.K. Rai, „Optogalvanic spectroscopy”, Proc. Indian natn. Sci. Acad., vol 62., pp. 475-512, 1996.
- [4] A.H. Zewail, Femtochemistry, Atomic-scale dynamics of the chemical bond using ultrafast lasers, http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1999/zewail-lecture.pdf, 1999.