Szilárd halmazállapotú szénsav infravörös spektroszkópiás vizsgálata

VÁMI ÁRMIN

Mentor: Dr. GÓBI SÁNDOR
Molekulaspektroszkópiai Laboratórium, ELTE TTK Kémiai Intézet

ELTE EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

ABSZTRAKT

A szénsav földi körülmények között, vizes oldatban rövid élettartamú vegyület. A közelmúlt laboratóriumi és csillagászati kutatásai azonban kimutatták, hogy asztrokémiai körülmények között stabil, szilárd halmazállapotban is létezhet. Az ilyen molekulák vizsgálata elengedhetetlen a csillagközi jegekben és a sűrű molekulafelhőkben lejátszódó kémiai folyamatok megértéséhez. Az infravörös (IR) spektroszkópia hatékony eszköz a molekulák azonosítására. A laboratóriumi IR-spektroszkópiai mérések ezért kulcsfontosságúak a csillagászati megfigyelések értelmezéséhez és a megbízható asztrokémiai modellek kidolgozásához.

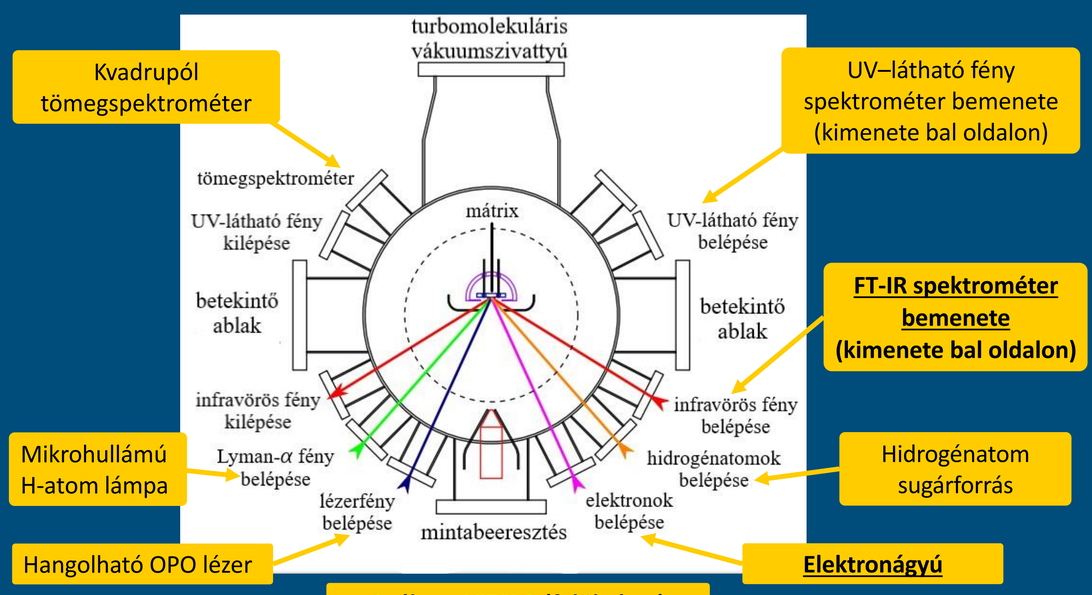
CÉLKITŰZÉS

A kutatás célja a szénsav képződésének, stabilitásának és spektroszkópiai jellemzőinek vizsgálata volt szilárd és gázfázisban, asztrofizikai szempontból releváns körülmények között. A kísérlet arra kereste a választ, hogy a szénsav stabil marad-e szublimáció közben, és kimutatható-e gázfázisban. Ezzel a kutatás a legújabb csillagászati megfigyelések alátámasztását és hiteles laboratóriumi referenciaadatok szolgáltatását célozta meg.

ANYAG ÉS MÓDSZER

A kísérleteket a VIZSLA (*Versatile Ice Zigzag Sublimation Setup for Laboratory Astrochemistry*) elnevezésű szimulációs kamrában végeztük.

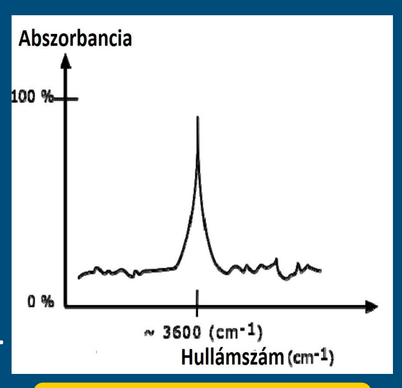
- Modelleztük a csillagközi térben jelenlévő körülményeket.
- Tanulmányoztuk a molekulákat az asztrofizikailag releváns körülmények (abszolút zérus közeli hőmérséklet, ultranagy vákuum, nagy energiájú sugárzások) között.



1. ábra : VIZSLA (felülnézet)

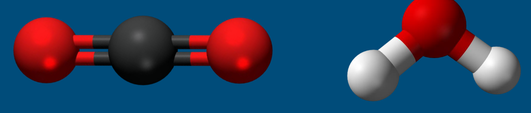
Azonosítás Fourier-transzformációs infravörös (FT-IR) spektroszkópiával:

A mintát besugároztuk IR fénnyel, ami elnyelte annak egy részét. Ezt detektorral nyomon követtük és az eredményeket spektrumon jelenítettük meg.

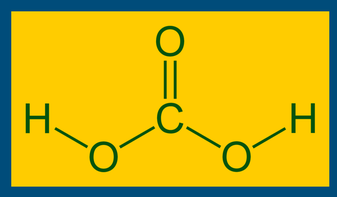


2. ábra: Minta spektrum

- A kiindulási anyag szén-dioxid és víz **3,5 : 1 mólarányú** jégkeveréke volt, amit 10 K-en arannyal bevont ezüsthordozóra választottunk le.



3. ábra : A víz és a szén-dioxid molekulamodelljei

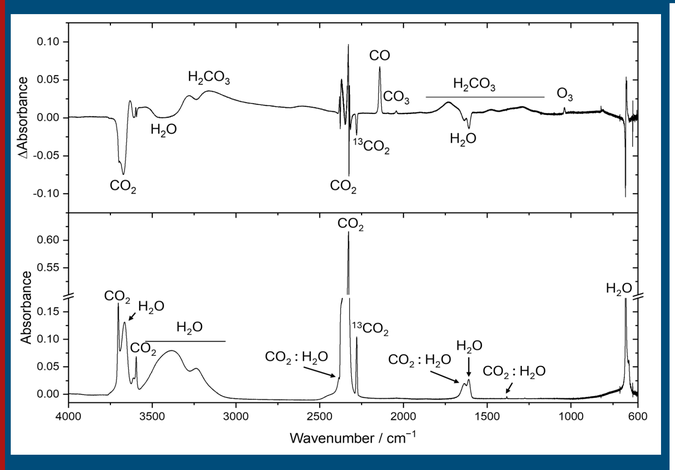


4. ábra : A szénsav szerkezete (H_2CO_3)

Műveletek:

- A mintákat a kozmikus sugárzás hatásának modellezésére 5 keV energiájú elektronokkal sugároztuk be.
  A kémiai változásokat FT-IR spektroszkópiával követtük nyomon.
- Kontrollált módon történő melegítést (**TPD**) is végeztünk, a mintát **10 K-ről 300 K-re** melegítettük, **1 K/perc** sebességgel.
- Bizonyos esetekben a szublimált részecskéket egy második, hideg hordozóra kondenzáltattuk vissza, majd **argonmátrix-izolációval** vizsgáltuk.

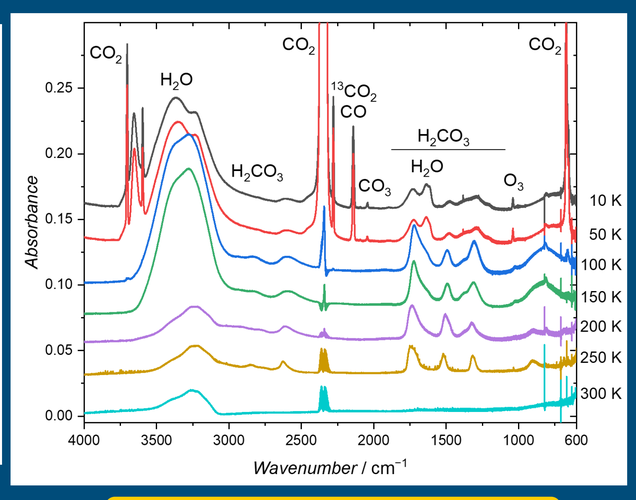
EREDMÉNYEK ÉS DISZKUSSZIÓ



5. ábra: A H_2O — CO_2 -jégkeverék IR spektruma (alul) és az elektronbesugárzás utáni különbségi spektrum (felül)

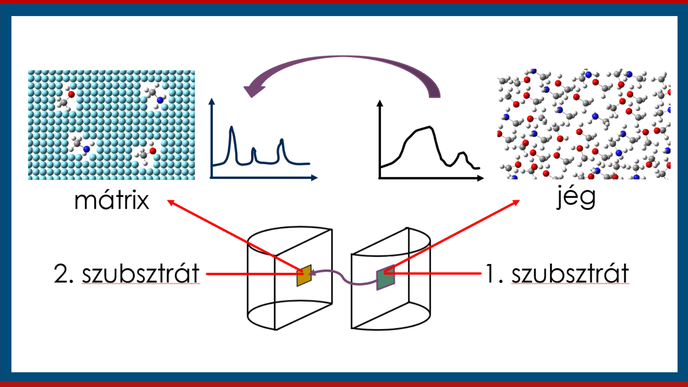
A különbségi spektrum mutatja a besugárzás hatására bekövetkező változásokat:

- A kiindulási anyagok csúcsai csökkentek.
- Megjelentek a H_2CO_3 és más termékek jelei.



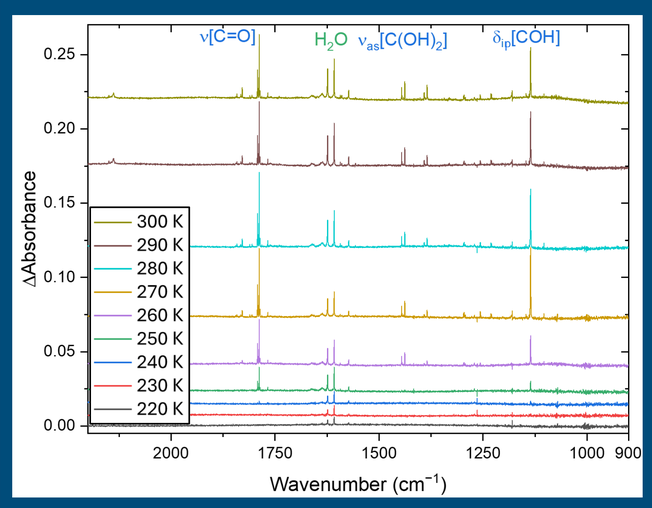
6. ábra : A besugárzott H_2O — CO_2 -jégkeverék IR spektrumai a TPD során

- 200 K-ig mindkét kiindulási anyag szublimált (CO_2 és H_2O).
- A visszamaradó szénsav 260–280 K között szublimált.

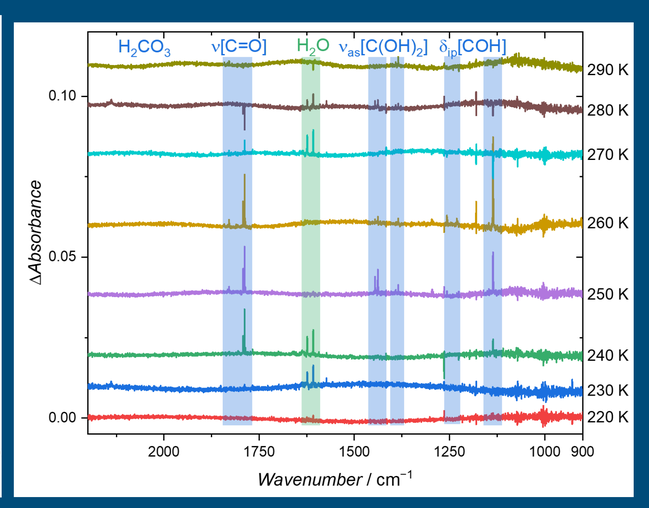


Az 1. hordozón levő szénsav TPD során elszublimált, majd újrakondenzálódott a 2. hordozóra, ahol inert argonmátrixban csapdázódott.

7. ábra : Az átpárologtatás folyamata



8. ábra : A besugárzott H_2O — CO_2 -jégkeverék különbségi spektruma átpárologtatás során



9. ábra: A besugárzott H_2O — CO_2 -jégkeverék másodlagos különbségi spektruma átpárologtatás során

- A szénsav elnyelési sávjai egyértelműen elkülönülnek a víz és a szén-dioxid sávjaitól.

→ **A molekula gázfázisban is stabil marad, miközben szublimációval átjut a másik hordozóra!**

KÖVETKEZTETÉS

A kutatás kísérleti bizonyítékot szolgáltat a szénsav képződésére és stabilitására szimulált asztrokémiai körülmények között. A kapott infravörös spektrumok és a hőmérsékletfüggő viselkedésre vonatkozó adatok hozzájárulnak a szénsav csillagászati környezetekben történő azonosításához, valamint a világűrben zajló szénkémiai folyamatok jobb megértéséhez.

IRODALOM

- BAZSÓ, G.; CSONKA, I. P.; GÓBI, S.; TARCZAY, G. (2021) REV. SCI. INSTRUM. 92, 124104.
- WEIJUN ZHENG; RALF I. KAISER (2007) CHEMICAL PHYSICS LETTERS 450, 55–60
- DENNIS F. DINU, BASTIAN KLEIN, CHAOJIANG ZHANG, RADU A. TALMAZAN, THOMAS LOERTING, HINRICH GROTHE, RALF I. KAISER, AND MAREN PODEWITZ CHEMPHYSCHEM (2025), 00, E202500282