

Kardos Beáta, II. éves gyógyszerészhallgató

JATE Fizikai Kémia Tanszék

**FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓS INFRAVÖRÖS ÉS RAMAN
SPEKTROSKÓPIAI ÖSSZEHAISONLÍTÓ VIZSGÁLATOK A
PROPIONSAV ÉS TEJSAV, VALAMINT Na- ÉS Ca-SÓIK
SPEKTRUMÁNAK ÉRTELMEZÉSÉHEZ**

A molekulák kémiai szerkezetkutatásának egyik leghatékonyabb módszere a rezgési spektroszkópia, azaz az infravörös és Raman spektroszkópia, amelyekből az utóbbi szervesen egészíti ki az előbbiből nyerhető információkat. Új távlatokat nyitott a kutatásban a lézeroptikát alkalmazó Fourier-transzformációs spektrométerek elérhetővé válása, mely lehetővé tette a teljes spektrális tartomány egyenértékű kezelését annak ellenére, hogy több nagyságrendű energiakülönbségeket kell megítélni.

Méréseimet a közép infravörös tartományban a Bio-Rad Digilab Division FTS 65-A/896 FT-IR (vizes oldatok esetén germánium egykristály segítségével ATR technikával) és FT-Raman spektrométerén végeztem. Valamennyi kísérleti anyagunk 98-99%-os tisztaságú MERCK termék volt. Elvégeztem vizsgált anyagaink – szerkezetük ismeretében – szimmetriaanalízisét és az egyes atomcsoportok pontcsoportba való besorolását. A vizsgált propionsav, tejsav, illetve ezek Na- és Ca-sóinak színeképeit folyadék, oldat illetve szilárd állapotban vettük fel. Elvégeztem a talált jellemző frekvenciák megfelelő rezgéstípusokhoz való hozzárendelését. Kimutattam az egyes rezgések megjelenésének identitását, vagy komplementaritását a színeképekben a szimmetriaviszonyoktól függően, a karboxil-karboxilát átalakulás eredményeképpen. Az ATR technika alkalmazásával megkíséréltem behatóbb adatokat nyerni vizsgálati anyagaink vizes oldataiban kialakuló állapotáról, ily módon kiegészítve a Raman technikával nyert adatokat.

Az általam vizsgált anyagok alapvetően ismert szerkezete és a különböző technikákkal nyert spektroszkópiai jellemzők között talált korrelációk megalapozzák a későbbiekben vizsgálni kívánt bonyolultabb, biológiaiilag aktív komplexek molekuláris szerkezetének kísérleti felderítését és kialakulásának elméleti interpretációját.

Témavezető: Dr. Andor József