

MŰSZAKI SZEMLE

61. szám, 2013.

Szerkesztőbizottság elnöke / President of Editing Committee

Dr. Köllő Gábor

Szerkesztőbizottság tagjai / Editing Committee

Dr. Balázs L. György – HU,
Dr. Biró Károly Ágoston – RO,
Dr. Csibi Vencel-József – RO,
Dr. Fedák László – UA,
Dr. Karácsony János – RO,
Dr. Kása Zoltán – RO,
Dr. Kászonyi Gábor – HU,
Dr. Majdik Kornélia – RO,
Dr. Nagy László – RO,
Dr. Péics Hajnalka – RS
Dr. Puskás Ferenc – RO,
Dr. Szalay György – SK,
Dr. Turchany Guy – CH
Dr. Sebestyén-Pál György – RO

Kiadja / Editor

Erdélyi Magyar Műszaki
Tudományos Társaság – EMT
Societatea Maghiară Tehnico-Științifică
din Transilvania
Ungarische Technisch-Wissenschaftliche
Gesellschaft in Siebenbürgen
Hungarian Technical Scientific Society
of Transylvania

Felelős kiadó / Managing Editor

Dr. Köllő Gábor

A szerkesztőség címe / Address

Romania
400604 Cluj, Kolozsvár
B-dul 21. Decembrie 1989., nr. 116.
Tel/fax: 40-264-590825, 594042
Levélcím: RO – 400750 Cluj, C.P. 1-140.

Nyomda / Printing

Incitato Kft.

ISSN 1454-0746

www.emt.ro

emt@emt.ro

Content – Tartalomjegyzék – Cuprins

A fényrács vektoregyenlete The Vector Equation of the Diffraction Grating Ecuatia vectorială a rețelei optice	
BÍRÓ Tibor	3
Négy öszvértartóból kialakított közúti hídszerkezet Composite Steel-concrete Decks, with Four Beams, for Two Lanes Pod rutier din patru grinzi longitudinale cu secțiune mixtă oțel-beton	
BOLDOR Iulia Raluca, KÖLLŐ Gábor	13
Hemin és torma-peroxidáz alapú amperometriás bioszenzor: előállítás, elektrokémiai jellemzés és a hidrogén-peroxid kimutatása Amperometric Biosensor with Hemin and Horseradish Peroxidase: Preparation, Electrochemical Characterization and Hydrogen Peroxide Detection Biosenzor Amperometric conținând Hemină (Hm) și Peroxidază din Hrean (HRP): Preparare, Caracterizare electrochimică și Detecția Peroxidului de Hidrogen	
MARES Georgeta-Maria, TURDEANGraziella Liana, POPESCU Ionel Cătălin	17
Hozzájárulások a gázvezetékknél használt polietilén mikrobiológiai rongálódásának tanulmányozásához Contribution to Study of Microbiological Degradation of Polyethylene from the Gas Pipelines Contribuții la studiul degradării microbiologice a polietilenei utilizate la realizarea țevelor de distribuție a gazelor naturale	
LINGVAY Mónika, SZATMÁRI Ilona, BUTOI Nicoleta, MARINESCU Virgil	29
Amfoter karakterű vegyületek a rezolválásban Compounds with Amphoteric Character in the Resolution Processes Metode de rezolvare a compușilor cu caracter amfoter	
PÁLOVICS Emese, Szeleczki Zsolt, FAIGL Ferenc, FOGASSY Elemér	34
A gépgyártási technológiák számítógépes fejlesztése The Development of Computer Technologies in Machine Building Dezvoltarea informatică a tehnologiilor în construcții de mașini	
SZÉL Sándor, SZÁLLASI [Dzițac] Mirela	38

A kiadvány megjelenését támogatta:
Bethlen Gábor Alapkezelő Zrt. – Budapest



A fényrács vektoregyenlete

The Vector Equation of the Diffraction Grating

Ecuatia vectorială a rețelei optice

BÍRÓ Tibor

Sapientia Egyetem, Műszaki és Humán Tudományok Kar, Marosvásárhely
biro17@freemail.hu

ABSTRACT

Any light ray, incident on a plain diffraction grating, produces a reflected and a transmitted system of light rays. As both incident and diffracted rays can be characterized by vectors, we will assign vectors to the diffraction grating as well. We are searching a vector equation whose solutions describe the rays diffracted on the grating. The obtained equation – that will be called the vector equation of the diffraction grating – can be directly applied for any plain – both linear and crossed – grating, and for incident rays of any direction.

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy síkrácsra eső fénysugár létrehozza a visszaverődéses, valamint az átmenő elhajlási sugarak rendszerét. Mivel, mind a beeső, mind az elhajlási sugarak irányához vektorokat használunk, vektorokat rendelünk a fényrácshoz is. Keresünk egy olyan vektoregyenletet, melynek megoldásai éppen a rácson diffraktált sugarak vektorai. A kapott egyenlet – a fényrács vektoregyenlete – közvetlenül használható bármely sík vonal-, illetve keresztrácsra eső, bárhonnan érkező beeső sugár esetére.

1. BEVEZETÉS

Ismert, hogy a fényvisszaverődés és -törés jelensége egységvektorokkal egyszerűen leírható [1],[2],[3]. Célunk, hogy ehhez hasonlóan alkalmazzuk a vektoros tárgyalásmódot, a fény rácson történő elhajlásánál is!

Essen az ismert jellemzőkkel rendelkező, egyszerre áteresztő és visszaverő fényrácsra, bármely szög alatt, egy λ hullámhosszú, sík, koherens, fényhullám, mely ezen elhajlást szenved. A fényrács lehet sík-, vonalrács vagy keresztrács.

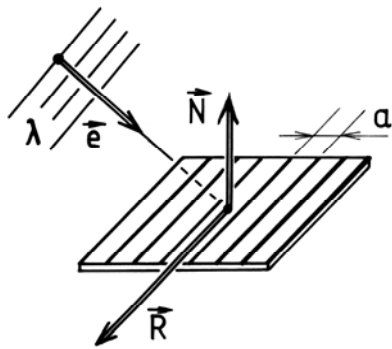
Keressünk egy olyan vektoregyenletet, amelyet az összes – átmenő és visszavert – elhajlási sugár egységvektora kielégít, tartalmazván a beeső sugár valamint a fényrács jellemzőit.

Ezt tekinthetjük a *rácson létrejövő fényelhajlás vektoregyenletének*.

A sík fényrácsok jellemzésére, és térbeli helyzetének megadására használjunk vektorokat!

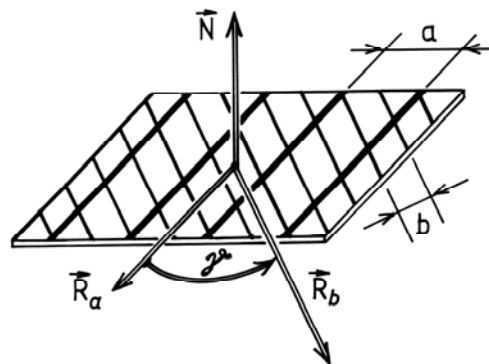
- A fényrács síkjának helyzetét a rá merőleges, (normális) \vec{N} egységvektorával adjuk meg.
- Vezessük be, a *vonlárács* sűrűsége és egyúttal a vonalak térbeli iránya megadása céljából, az \vec{R} *rácsvektort* (nevezzük így!). \vec{R} legyen párhuzamos a rácsvonalakkal és nagysága $|\vec{R}| = R = 1/a$, ahol a a rács vonalainak távolsága: $[R_{s,l}] = 1/m$, (1. ábra).
- A *keresztrácsot* pedig próbáljuk úgy elképzelni, mint két egymásra fektetett, vagyis azonos síkban fekvő, \mathbf{a} valamint \mathbf{b} állandójú „ \mathbf{a} ” és „ \mathbf{b} ” vonalrácsot (2. ábra). Az „ \mathbf{a} ” és „ \mathbf{b} ” vonalrácsokhoz viszont az \vec{R}_a és \vec{R}_b rácsvektorok tartoznak: $R_a = 1/a$, $R_b = 1/b$. Ezért a keresztrács az \vec{R}_a és \vec{R}_b rácsvektorok együttesével jellemezhető, melyek szöge γ .
- A rácsra eső, λ hullámhosszú fénysugár irányát a ráhelyezett \vec{e} egységvektorral adjuk meg, $|\vec{e}| = 1$

A térbeli rácsokra a diffrakciós irányok megkeresése jól kidolgozott [4], ezért ezt alkalmazni fogjuk a síkrácsok sajátos esetére.



1. ábra

A vonalrácshoz rendelt egységvektorok

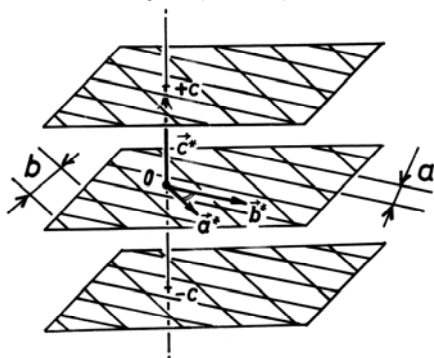


2. ábra

A kereszt rácshoz rendelt egységvektorok

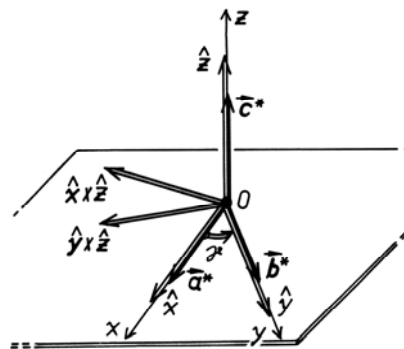
2. A KERESZTRÁCS VEKTOREGYENLETE

Bármely sík-kereszt rácshoz, az említett szerkezetnek megfelelően, választhatunk két elemi eltolási vektort, jelölje ezeket \vec{a}^* és \vec{b}^* . Ezekkel az \vec{a}^* és \vec{b}^* eltolási vektorokkal megadott sík-kereszt rácstól segítségével, képezzünk egy tér-rácsot, úgy, hogy ennek síkját – normálisa mentén – önmagával párhuzamosan egy \vec{c}^* vektorral rendre eltoljuk (3. ábra).



3. ábra

A kereszt rácscsal képezett térrács és eltolási vektorai



4. ábra

A térrácshoz rögzített koordinátarendszer

Tételezzük fel, hogy az így szerkesztett tér-rács minden rácspontjához a beeső fény egyformán eljut és az általuk szórt fény (melyek interferenciája révén az elhajlási sugarak létrejönnek) λ' hullámhossza változatlan marad: $\lambda' = \lambda$.

Ehhez, a sajátosan szerkesztett, \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^* elemi eltolási vektorokkal rendelkező térrácshoz, rögzítsük az x, y, z, O koordináta-rendszert, melynek egységvektorai \hat{x} , \hat{y} , és \hat{z} (4. ábra).

$$\text{Ebben felírható, hogy: } \begin{cases} \vec{a}^* = a^* \cdot \hat{x} \\ \vec{b}^* = b^* \cdot \hat{y} \\ \vec{c}^* = c^* \cdot \hat{z} \end{cases} \text{ és még } \begin{cases} \hat{z} = \vec{N} \\ \vec{a}^* \perp \vec{N} \\ \vec{b}^* \perp \vec{N} \end{cases}$$

A térrácsra eső, valamint az ezt elhagyó elhajlási sugár egységvektorai \vec{e} és \vec{e}' , így a nekik megfelelő hullámvektorok $\vec{K} = (2\pi/\lambda) \cdot \vec{e}$ és $\vec{K}' = (2\pi/\lambda) \cdot \vec{e}'$

A létrehozott térrács reciprok rácsának segítségével kapcsolatot teremtünk a \vec{K} és \vec{K}' hullámvektorok között, amely elvezet az \vec{e}' meghatározásához.

A rács \vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^* elemi eltolási vektoraival megszerkesztjük reciprok rácsának $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ alapvektorait; (nagyjából a [4] jelöléseit használjuk!):

$$\begin{cases} \vec{A} = 2\pi \frac{(\vec{b}^* \times \vec{c}^*)}{\vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*)} = 2\pi \frac{b^* c^* (\hat{y} \times \hat{z})}{a^* b^* c^* \sin \gamma} = 2\pi \frac{(\hat{y} \times \hat{z})}{a^* \sin \gamma} \\ \vec{B} = 2\pi \frac{(\vec{a}^* \times \vec{c}^*)}{V} = 2\pi \frac{a^* c^* (\hat{x} \times \hat{z})}{a^* b^* c^* \sin \gamma} = 2\pi \frac{(\hat{x} \times \hat{z})}{b^* \sin \gamma} \\ \vec{C} = 2\pi \frac{(\vec{a}^* \times \vec{b}^*)}{V} = 2\pi \frac{a^* b^* (\hat{x} \times \hat{y})}{a^* b^* c^* \sin \gamma} = 2\pi \frac{1 \cdot 1 \cdot \hat{z} \sin \gamma}{c^* \sin \gamma} = 2\pi \frac{\hat{z}}{c^*} \end{cases}$$

V az elemi cella térfogata:

$$V = \vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*) = a^* [\hat{x} \cdot (\hat{y} \times \hat{z})] b^* c^* = a^* b^* c^* \cdot 1 \cdot 1 \cdot \cos(90^\circ - \gamma) = a^* b^* c^* \sin \gamma.$$

Ezekkel az alapvektorokkal megadhatók a reciprokrács \vec{G} vektorai:

$$\vec{G} = n_a \vec{A} + n_b \vec{B} + n_c \vec{C}.$$

Az n_a, n_b, n_c egész-szám értékeire, a \vec{G} , a reciprokrács csomópontjait határozza meg. Amennyiben a hullámvektor változása $\Delta \vec{K} = \vec{K}' - \vec{K}$ éppen egybeesik valamelyik reciprokrács csomópontot megadó \vec{G} reciprokrács-vektorral, akkor a diffrakció-maximum LAUE-féle feltételei teljesülnek: $\Delta \vec{K} = \vec{G}$. Részletesebben:

$$\Delta \vec{K} = \vec{K}' - \vec{K} = (2\pi/\lambda) \vec{e}' - (2\pi/\lambda) \vec{e},$$

és

$$\vec{G} = n_a \frac{2\pi(\hat{y} \times \hat{z})}{a^* \sin \gamma} + n_b \frac{2\pi(\hat{x} \times \hat{z})}{b^* \sin \gamma} + n_c \frac{2\pi \hat{z}}{c^*},$$

vagyis:

$$(2\pi/\lambda)(\vec{e}' - \vec{e}) = n_a \frac{2\pi(\hat{y} \times \hat{z})}{a^* \sin \gamma} + n_b \frac{2\pi(\hat{x} \times \hat{z})}{b^* \sin \gamma} + n_c \frac{2\pi \hat{z}}{c^*},$$

és mivel $a^* \sin \gamma = a$, $b^* \sin \gamma = b$, $c^* = c$ (5. ábra):

$$\vec{e}' - \vec{e} = n_a \frac{\lambda(\hat{y} \times \hat{z})}{a} + n_b \frac{\lambda(\hat{x} \times \hat{z})}{b} + n_c \frac{\lambda \hat{z}}{c} \quad \left| \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} \right.$$

A fenti egyenlőséget \hat{z} -ral vektorosan szorozva a tér-rácsról visszatérünk a sík-keresztrácsra:

$$(\vec{e}' - \vec{e}) \times \hat{z} = n_a \frac{\lambda(\hat{y} \times \hat{z}) \times \hat{z}}{a} + n_b \frac{\lambda(\hat{x} \times \hat{z}) \times \hat{z}}{b} + n_c \frac{\lambda(\hat{z} \times \hat{z})}{c}.$$

A 4. ábra alapján: $(\hat{y} \times \hat{z}) \times \hat{z} = -\hat{y}$, $(\hat{x} \times \hat{z}) \times \hat{z} = -\hat{x}$, $(\hat{z} \times \hat{z}) = 0$, így

$$(\vec{e}' - \vec{e}) \times \hat{z} = -n_a \frac{\lambda \hat{y}}{a} - n_b \frac{\lambda \hat{x}}{b}.$$

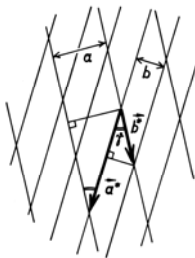
De mivel: $\hat{z} = \vec{N}$, $\hat{y}/a = \vec{R}_a$, $\hat{x}/b = \vec{R}_b$, kapjuk, hogy:

$$(\vec{e}' - \vec{e}) \times \vec{N} = -n_a \lambda \vec{R}_a - n_b \lambda \vec{R}_b.$$

Nyilván, minden egyes egész-számok alkotta (n_a, n_b) számpárnál, amelyre az egyenlet megoldható, létezik egy bizonyos \vec{e}' elhajlási sugár, ezt *megfelelőbb*, ha $\vec{e}_{n_a n_b}$ -vel jelöljük, (n_a és n_b a megfelelő diffraktált sugár rendszámjai).

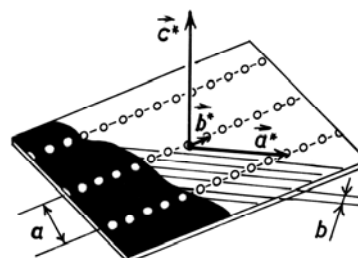
Így, a sík-keresztrács keresett vektoregyenlete:

$$(\vec{e}_{n_a n_b} - \vec{e}) \times \vec{N} + n_a \lambda \vec{R}_a + n_b \lambda \vec{R}_b = 0.$$



5. ábra

A keresztrács eltolási vektorai és rácsállandói



6. ábra

Átmenet keresztrácsról vonalrácsra

3. A VONALRÁCS VEKTOREGYENLETE

Keresztrácsból vonalrácsot kaphatunk, ha ennek egyik összetevő vonalrácsát, például a „b” rácsot annyira összesűrítjük, hogy a \vec{b}^* irányú fényt szóró rácspon-t-sorai tulajdonképpen vonalakká álljanak össze (6. ábra). Ez bekövetkezik, ha $\vec{b}^* \rightarrow 0$, illetve ha $b \rightarrow 0$, de, mivel $|\vec{R}_b| = 1/b$ következik, hogy ekkor $|\vec{R}_b| \rightarrow \infty$.

Látható, hogy ezen elfajult keresztrács vektoregyenletének csak az $n_b = 0$ értékre van értelme, így a vonalrácsra: $(\vec{e}_{n_a,0} - \vec{e}) \times \vec{N} + n_a \lambda \vec{R}_a = 0$.

Ez egyszerűbben is felírható, mivel most csak egy vonalrács van. Ennél az elhajlási sugár rendszáma $n_a = n$, $\vec{e}_{n_a,0} = \vec{e}_n$ és $\vec{R}_a = \vec{R}$, ezért a sík-vonalrács vektoregyenlete:

$$(\vec{e}_n - \vec{e}) \times \vec{N} + n \lambda \vec{R} = 0.$$

4. A KERESZTRÁCS VEKTOREGYENLETÉNEK MEGOLDÁSA

Célunk:

- Megvizsgálni a vektoregyenlet megoldásai által szolgáltatott elhajlási sugáregyüttest;
- ezek közül néhányat kísérletileg is kivitelezni;
- majd összehasonlítani.

Az irányok rögzítése céljából helyezzük a keresztrácsot egy úján felvett x, y, z, O derékszögű koordinátarendszer (O) kezdőpontjához, úgy, hogy az összetevő rácsok egyike (például most az „a” rács, vagyis az \vec{R}_a) az Ox , és normálisa (\vec{N}) az Oz irányba mutasson!

Jelölje $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ az új koordinátarendszer tengelyirányú egységvektorait. Mivel az \vec{R}_a az Ox tengelyen fekszik, és \vec{R}_b vele – az xyO síkban – γ szöveget alkot (7. ábra), ezek vektorösszetevői:

$$\vec{R}_a \begin{cases} R_{ax} = R_a = 1/a \\ R_{ay} = 0 \\ R_{az} = 0 \end{cases}, \vec{R}_b \begin{cases} R_{bx} = R_b \cos \gamma = \cos \gamma / b \\ R_{by} = R_b \sin \gamma = \sin \gamma / b \\ R_{bz} = 0 \end{cases}, \vec{N} \begin{cases} N_x = 0 \\ N_y = 0 \\ N_z = 1 \end{cases}.$$

A rácsra eső \vec{e} , valamint az n_a, n_b -rendű $\vec{e}_{n_a n_b}$ elhajlási sugár egységvektorának összetevői viszont:

$$\vec{e} \begin{cases} e_x = \sin \alpha \cdot \cos \beta \\ e_y = \sin \alpha \cdot \sin \beta \\ e_z = -\cos \alpha \end{cases} \text{ és } \vec{e}_{n_a n_b} \begin{cases} e_{n_a n_b x} = ? \\ e_{n_a n_b y} = ? \\ e_{n_a n_b z} = ? \end{cases}.$$

A keresztrács vektoregyenlete általában:

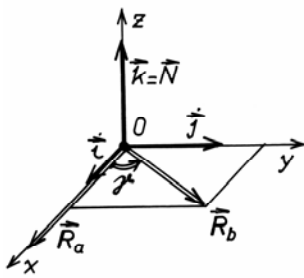
$$(\vec{e}_{n_a n_b} - \vec{e}) \times \vec{N} + n_a \lambda \vec{R}_a + n_b \lambda \vec{R}_b = 0,$$

melynek megoldása:

$$\vec{e}_{n_a n_b} \begin{cases} e_{n_a n_b x} = \sin \alpha \cdot \cos \beta + \lambda n_b \cdot R_b \cdot \sin \gamma \\ e_{n_a n_b y} = \sin \alpha \cdot \sin \beta - \lambda (n_a \cdot R_a + n_b \cdot R_b \cos \gamma) \\ e_{n_a n_b z} = \pm \sqrt{1 - e_{n_a n_b x}^2 - e_{n_a n_b y}^2} \end{cases}.$$

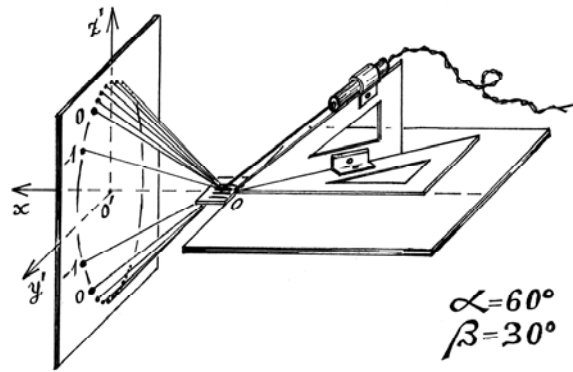
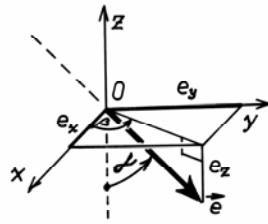
Ha az elhajlási sugár:

- visszaverődő (reflektált \mathbf{r}): $e_{n_a n_b z} = +\sqrt{1 - e_{n_a n_b x}^2 - e_{n_a n_b y}^2} > 0$,
- átmenő (transzmissziós \mathbf{t}): $e_{n_a n_b z} = -\sqrt{1 - e_{n_a n_b x}^2 - e_{n_a n_b y}^2} < 0$.



7. ábra

A keresztrácshoz rögzített koordinátarendszer és a beeső sugár irányát meghatározó α és β szögek



8. ábra

A fényrácsos kísérleteknél használt egyszerű berendezés

5. A VONALRÁCS VEKTOREGYENLETÉNEK MEGOLDÁSA

Amint a vonalrác vektoregyenletének levezetésénél láttuk az $n_b = 0$, amelyet behelyettesítve a keresztrácsnál kapott megoldásba, azonnal adódik a vonalrácé is:

$$\vec{e}_n \begin{cases} e_{nx} = \sin \alpha \cdot \cos \beta \\ e_{ny} = \sin \alpha \cdot \sin \beta - \lambda n R \\ e_{nz} = \pm \sqrt{\cos^2 \alpha + 2 \lambda n R \sin \alpha \cdot \sin \beta - \lambda^2 R^2 n^2} \end{cases} .$$

6. AZ ELHAJLÁSI SUGARAK IRÁNYÁNAK VIZSGÁLATA

6.1. Keresztrác esete

Mekkora szöget alkot az n_a, n_b rendszámú elhajlási sugár a keresztrác \vec{R}_a és \vec{R}_b vektoraival?

Az elhajlási sugár egységvektorának a rácsvektorral való skaláris szorzatát képezve,

$$\vec{e}_{n_a n_b} \cdot \vec{R}_a = |\vec{e}_{n_a n_b}| \cdot |\vec{R}_a| \cdot \cos \rho_{n_a n_b \vec{R}_a} = e_{n_a n_b x} \cdot R_{ax} ,$$

amiből szögük meghatározható:

$$\cos \rho_{n_a n_b \vec{R}_a} = \sin \alpha \cdot \cos \beta + \lambda n_b R_b \sin \gamma .$$

Teljesen hasonlóan: $\cos \rho_{n_a n_b \vec{R}_b} = \sin \alpha \cdot \cos(\beta - \gamma) - \lambda n_a R_a \sin \gamma .$

Következtetés:

- Amint látható, a $\rho_{n_a n_b \vec{R}_a}$ szög nem függ az n_a -tól, így adott n_b rendszám esetén az összes n_a rendszámú $\vec{e}_{n_a n_b}$ elhajlási sugár az \vec{R}_a rácsvektorral (esetünkben az $0x$ tengellyel is) azonos $\rho_{n_b \vec{R}_a}$ szöget alkot. Ezért ezek egy \vec{R}_a tengelyű *körkúp felületén* (mint alkotók) vannak.
- Hasonlóan, a $\rho_{n_a n_b \vec{R}_b}$ szög független az n_b -től, amiért adott n_b esetén az $\vec{e}_{n_a n_b}$ az \vec{R}_b -vel, minden n_a -ra, azonos szöget zár be, így ezek az \vec{R}_b tengelyű *körkúp felületének* az alkotói.
- Így, *általánosan* kijelenthető, hogy az elhajlási sugarak az \vec{R}_a , valamint az \vec{R}_b tengelyű, közös O csúcspontú, *két körkúp-rendszer* felületeinek a metszésvonalain fekszenek! (Egyaránt, ha ezek transzmissziós, vagy akár reflexiós sugarak.)
- Helyezzünk az elhajlási sugarak útjába egy *vetítőernyőt*. Az ernyő síkjával metszve a két körkúp rendszerét, rajta két kúpszeletstort kapunk. Ezen *kúpszeletek metszéspontjaiban* jelennek meg az interferencia fényfoltjai.

6.2. Vonalrács esete

Jelölje $\rho_{n\vec{R}}$ a vonalrács \vec{R} vektorának az n -ed rendű, \vec{e}_n , elhajlási sugárral alkotott szögét. Ezt, azonnal megkapjuk, ha a $\rho_{n_a n_b \vec{R}_a}$ kifejezésébe az $n_b = 0$ értéket behelyettesítjük. Így: $\cos \rho_{n\vec{R}} = \sin \alpha \cdot \cos \beta$.

Következtetés:

- Mivel a $\rho_{n\vec{R}}$ szög kizárólag a beeső sugár rácshoz viszonyított (α, β) beállításától függ, bármely rendű rácson elhajlott sugár, az \vec{R} rácsvektorral – azaz a rács vonalaival – azonos szöget alkot! Így nyilvánvaló, a diffraktált sugarak az \vec{R} tengelyű, $\rho_{n\vec{R}} = \rho$ nyílásszögű *körkúp* palástjának alkotói lesznek.
- Belátható még, hogy ez a ρ szög éppen a beeső (\vec{e}) sugárnak az Ox tengellyel alkotott szögével egyenlő.

7. KÍSÉRLETEK FÉNYRÁCSOKKAL

Következtetéseink helyességének igazolására világítsunk meg néhány kereszt-, illetve vonalrácsot egy $P=10mW$ -os félvezetőlézer elég erős, keskeny, koherens, vörös sugarával ($\lambda=655nm$). A kísérlet könnyebb kivitelezhetősége kedvéért a 8. ábra szerint összeállított *egyszerű* berendezést használjuk. A rácson elhajlott visszatérő (**r**), valamint áthaladó (**t**) sugárkévék létrehozta fényfoltok – ugyanazon a vetítőernyőn történő – felfogására, helyezzük ennek $O'y'z'$ síkját merőlegesen az Ox tengelyre. (A fényrácshoz továbbra is az előzőekben használt $Oxyz$ derékszögű koordinátarendszer van rögzítve.)

Megjegyzés:

- Szokványosan, a fényfelfogó ernyőt, vagy a beeső sugárra, vagy ennek a rácssíkról visszatükrözött irányára, *merőlegesen* helyezik el. Nyilván vektoregyenletünkkel tanulmányozható az így kivetített diffrakciós kép is.
- A rács vektoregyenlete csak az elhajlási sugarak irányára vonatkozik, nem ad tájékoztatást azok viszonylagos fényerősségéről, amely – egyébként – a rendszám növekedésével csökken.

8. AZ ERNYŐRE KIVETÍTETT FÉNYFOLTOK HELYZETÉNEK MEGHATÁROZÁSA

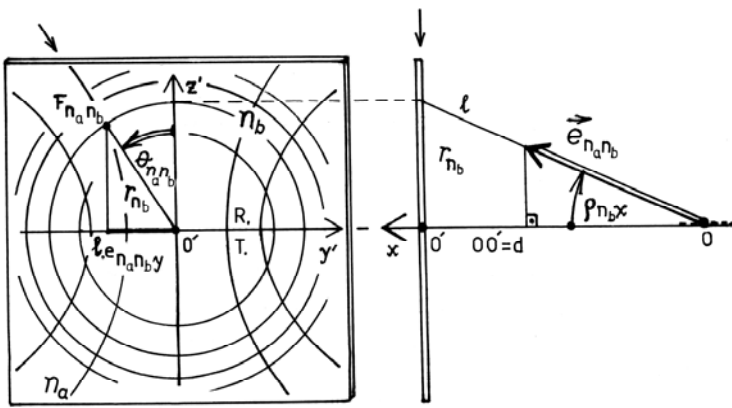
Határozzuk meg az ernyőn (az $O'y'z'$ síkban) az „F” fényfolt (r, θ) polár koordinátáit. Az Ox tengelyre merőleges síkú vetítőernyő rácstól mért távolsága legyen d ($d=OO'$).

8.1. Keresztrács esete

Az n_b -hez tartozó körkúpnak a tengelyére merőleges ernyő-síkkal való metszésvonala egy $r_{n_a n_b} = r_{n_b}$ sugarú kör. Mivel ismert az $F_{n_a n_b}$ fényfolthoz mutató $\vec{e}_{n_a n_b}$ egységvektor Ox tengellyel (az \vec{R}_a -val) alkotott $\rho_{n_b \vec{R}_a} = \rho_{n_b x}$ szöge, az r_{n_b} sugár kiszámítható (9. ábra): $r_{n_b} = d \cdot \operatorname{tg} \rho_{n_b \vec{R}_a}$.

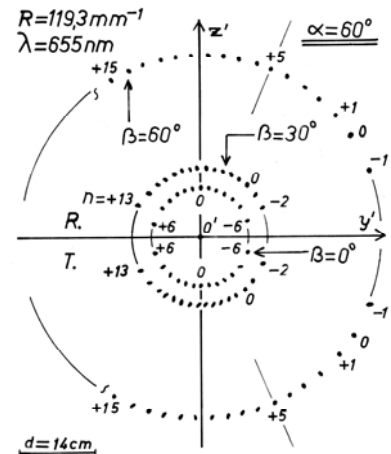
Az $F_{n_a n_b}$ fényfolthoz tartozó $\vec{O'F}_{n_a n_b}$ helyzetvektor $O'z'$ tengellyel – a normális irányával – alkotott szögét jelölje $\theta_{n_a n_b}$. Ezt, az ábra alapján, mind az átmenő (t) mind a visszaverődéses (r) sugarak esetére kiszámítva, kapjuk:

$$\sin \theta_{n_a n_b (r)} = \sin(-\theta_{n_a n_b (t)}) = \frac{\lambda(n_a R_a + n_b R_b \cos \gamma) - \sin \alpha \sin \beta}{\sqrt{1 - (\sin \alpha \cos \beta + n_b \lambda R_b \sin \gamma)^2}}.$$



9. ábra

A fényfoltok polár-koordinátái (r, θ) a vetítőernyőn



10. ábra

Fényelhajlás vonalrácson:
 $\alpha = 60^\circ$ -nál $\beta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ$

8.2. Vonalrács esete

A vonalrács összefüggéseihez az $n_b = 0$ esetén jutunk. Ennél $R = R_a$. Jelölje a fényfoltot: $F_n = F_{n_a, (n_b=0)}$ amely az $r = r_{n_b=0} = d \cdot \tan \rho$ sugarú körön van és a normálissal alkotott szöge legyen $\theta_n = \theta_{n_a, n_b=0}$.

$$\sin \theta_{n(r)} = \sin(-\theta_{n(t)}) = \frac{\lambda n R - \sin \alpha \cdot \sin \beta}{\sqrt{1 - \sin^2 \alpha \cdot \cos^2 \beta}}$$

9. FÉNYELHAJLÁSI KÍSÉRLETEK EGY VONAL- ÉS EGY KERESZTRÁCSON

Kísérleteinket, a már említett, egyszerű berendezéssel végezzük. Amennyiben a beeső-, vörös-lézersugár irányát meghatározó α és β szögek értékét a $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ -ra korlátozzuk, akkor ezeket néhány derékszögű vonalzó megfelelő elhelyezésével könnyen beállíthatjuk.

A kivetített fényfoltokat papírra rajzolásuk után azonosítjuk rendszámaikkal, majd *lemérjük* az r és θ polár koordinátáit. Ezt követően, az összehasonlítás céljából, e fényfoltoknak a koordinátáit *ki is számítjuk*.

9.1. Vonalrács esete

A plexi lapra karcolt, $119,3$ vonal/mm-es, didaktikai célra készült vonalrács állandója $a = 10^{-3} \text{ m} / 119,3 = 8,382 \mu\text{m}$, rácsvektora $|\vec{R}| = 1/a = 1,193 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}$.

A fényrácstól három *különböző* irányból „ferdén” (tehát nem a vonalakra merőlegesen) megvilágító sugár diffrakciós ábráját ugyanarra a papírlapra rajzolva láthatjuk (10. ábra). Mindháromnál a rács-ernyő távolság $d = 14 \text{ cm}$ és a beeső sugárnak a rács normálisával alkotott szöge $\alpha = 60^\circ$. A β viszont rendre $0^\circ, 30^\circ$, és 60° . A fény hullámhossza $\lambda = 655 \text{ nm}$.

Kiszámítjuk, és le is mérjük az ernyőn az interferencia létrehozta fényfoltok (\approx pontok) r és θ koordinátáit, majd ezeket összehasonlítjuk. *Jó az egyezés*, bármely diffraktált sugárnál a megfelelő mért és számított értékénél a hiba úgy 1% körüli, amely ennél a mérési eljárásnál nyilván nem veendő figyelembe.

9.2. Keresztrács esete

Keresztrácsként szolgáljon egy nagyon vékony *fém-rostalemez*, mely tulajdonképpen egy vidikoncső szitája. Ez egy *négyzetes* ($\gamma = 90^\circ$) keresztrács, mért rácsállandói $a = b = 34 \mu\text{m}$, rácsvektorai $R_a = R_b = 1/34 \mu\text{m} = 2,94 \cdot 10^4 \text{ m}^{-1}$.

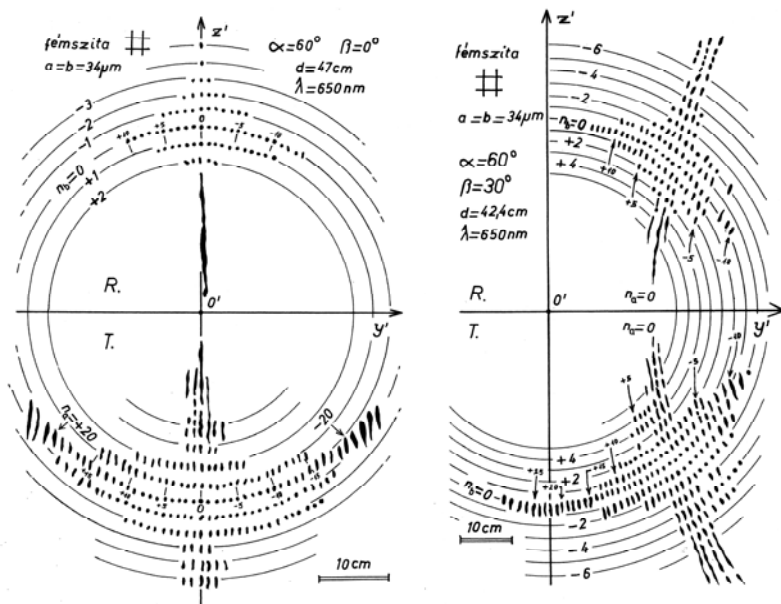
Kísérletünkhöz továbbra is az előbbi berendezést használjuk, és:

- a keresztrács elhelyezésénél \vec{R}_a mutasson az Ox tengely irányába;
- az ernyő síkja legyen merőleges az Ox tengelyre;

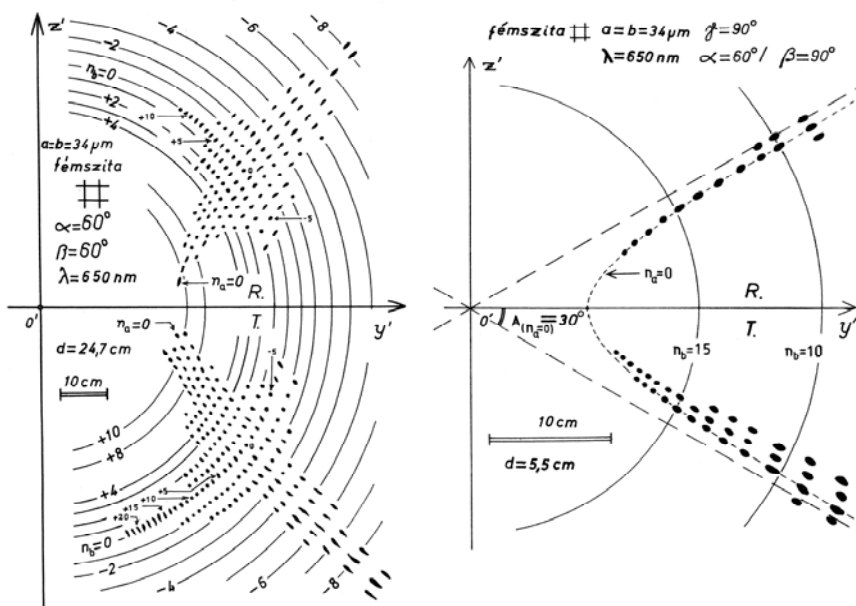
- az általánosság megszorítása nélkül, a könnyebb beállítás kedvéért, a beeső sugár alkotson a normálissal állandóan $\alpha = 60^\circ$ -os szöget, míg a β szöget állítsuk sorra $\beta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ -os értékekre (α, β, γ értelmezése a 7. ábra szerint).

A kivetített interferencia fényfoltokat papírlapra rárajzolva láthatjuk a 11. és a 12. ábrákon. A fényerősebb (r), valamint a (t) interferencia fényfoltok közül néhányat taláломra kiválasztunk és azonosítjuk az $n_a n_b$ rendszám-párjával. Ezeknél, az $F_{n_a n_b}$ foltoknál, lemérjük, valamint ki is számítjuk az $r_{n_b}, \theta_{n_a n_b}$ koordinátáik értékét.

Példa legyen erre az $\alpha = 60^\circ, \beta = 60^\circ$ beállítás mellett felvett rajz (12. ábra). A szemléletességért az ábrára az $r_{n_b, \text{számított}}$ sugarú köröket is feltüntettük. A fényfoltok polár-koordinátáinak a *mért* és a *számított* értékei *jól egyeznek*. Ez látható több, taláломra kiválasztott fényfolt mért és számított adatait tartalmazó 1. táblázatban.



11. ábra
Fényelhajlás kereszttrácson: $\alpha = 60^\circ$ -nál $\beta = 0^\circ, 30^\circ$



12. ábra
Fényelhajlás kereszttrácson: $\alpha = 60^\circ$ -nál $\beta = 60^\circ, 90^\circ$

1. táblázat:
A keresztrács néhány diffrakciós sugara, ernyőn mért és a számított, polár-koordinátájának táblázata

$\alpha=60^\circ \mid \beta=60^\circ \mid d = 24,7 \text{ cm} \mid \lambda = 655 \text{ nm} \mid a = b = 34 \text{ } \mu\text{m} \mid \text{fémiszita} \mid \text{a } \theta \text{ szög fokban mérve}$

$n_a \backslash n_b$	-5	-2	0	+2	+5	+9	+13	+22	R_{n_b} (cm) számított						
-6		+56,26	+55,5 -55,8	+52,27	+51,8 -51,9	+48,61	+48,0 -48,2		73,78						
-2	+67,50	+59,10	+58,4 -58,2	+54,70	+54,6 -54,1	+50,74	+50,1 -50,5	+45,34 +45 -44,9	+38,87 +38,6	57,55					
-1	+68,38	+67,0 -67,2	+60,01	+59,5 -59,3	+55,47	+55,0 -55,0	+51,40	+51,2 -50,7	+45,89 +45,4 -45,7	+39,30 +39,2	+33,28 +32,7	54,89			
0	+69,87	+69,0 -68,7	+61,00	+60,8 -60,2	+56,31	+56,3 -55,7	+52,12	+52,2 -51,9	+46,49	+46,2 -46	+39,77	+39,5 -40,0	+33,66 +33,8	+21,22 +20,5	51,41
+1	+71,61	+70,7 -70,8	+62,14	+61,5 -61,8	+57,23	+56,8 -57,2	+52,91	+52,5 -52,8	+47,13	+46,9 -46,8	+40,28	+39,7	+34,06		48,70
+2		+63,40	+63,0 -63,0	+58,26	+58,1 -57,9	+53,78	+53,8 -53,5	+47,84	+47,8 -47,8	+40,83	+40,6				46,20
+4		+66,46	+66,3 -66,0	+60,69	+60,6 -60,7	+55,81	+55,9 -56,0	+49,46	+49,5						41,65
+8				+67,89	+68,2 -68,1	+61,51	+61,6								34,05

Következtetés: Mind a vonal-, mind a keresztrácsnál, az elhajlási sugarak egyenletből számított iránya egyezik a kísérletivel. Ez nyilván vektoregyenleteik helyességét igazolja.

10. KÉT FELADAT A FÉNYRÁCSRA VISSZATÜKRÖZÖTT ELHAJLÁSI SUGARAKKAL

10.1. Első feladat

Egy áteresztő-visszaverő vonalrácsra eső \vec{e} egységvektorú lézersugár beesési pontjába, a T' és T'' tükrökkel, tükrözzük vissza az n' és n'' rendű $\vec{e}_{n'}$, $\vec{e}_{n''}$ elhajlási sugarakat! Mindkét visszatérített sugár a rácson újból diffraktál, létrehozván az m' , valamint m'' rendű $\vec{e}_{m'}$ és $\vec{e}_{m''}$ sugár-rendszereiket.

Mi a feltétele annak, hogy ezekből a másodszeri elhajlási sugarakból, egy-egy sugár egymásra tevődjön?

Megoldás:

- Alkalmazzuk a vonalrács vektoregyenletét a tetszőleges irányból érkező-beeső, és a rá visszatükrözött, két elhajlási sugárra. Kapjuk, hogy a sugár egymásra-tevődés feltétele:
- $m'' - m' = n'' - n'$, vagyis ha $n'' - n' = \Delta n_{\text{tükrök}}$ akkor $m'' = m' + \Delta n_{\text{tükrök}}$.
- Nyilván, az n és m lehet bármely transzmissziós-, illetve reflexiós-sugár rendszáma egyaránt.
- A másodszeri elhajlási sugarak egymásra tevődésének a feltétele *független* a beeső sugár (α , β) irányától és hullámhosszától!
- Az is belátható, hogy az összes másodszeri elhajlási sugár az Ox tengellyel $\rho_{mx} = \pi - \rho$ szöget zár be.

10.2. Második feladat

Egy áteresztő-visszaverő vonalrácsra eső \vec{e} sugár elhajlási sugara n, \vec{e}_n . Ezek közül a T' tükrörel, a rácstra, visszafordítjuk az n' , $\vec{e}_{n'}$ diffraktált sugarat, mely létrehozza az m' , $\vec{e}_{m'}$ elhajlási sugaraikat.

Mi lesz a *feltétele* annak, hogy a másodszeri, valamint az egyszeri diffrakció során keletkező sugarak közül, egy-egy sugár egymásra tevődjön?

Megoldás: Alkalmazzuk a rács vektoregyenletét a beeső és a visszatükrözött sugárra. Innen következik, hogy az először- és a másodszeri diffraktált sugarak egymásra tevődnek ha a rácstra beeső sugár merőleges a

rács vonalaira, és akkor is csak bizonyos $\alpha = \alpha_E$ értékű szögekre. Ezek a szögek: $\alpha_E = \arcsin(E \cdot \lambda / 2a)$, ahol $E \in [0, \pm 1, \pm 2, \dots]$, amely a létező n, n', m' elhajlási rendszámokból képezhető $(n + n' - m') = E$ egész szám valamelyike.

Számpéldák: Mekkora az egyszeres, és a kétszeres elhajlási sugarak egymásra-tevődését lehetővé tevő α_E beesési szögek értéke, amennyiben a fényrácsként használt **CD**, illetve **DVD** korongdarabkát egy félvezető-lézer vörös fényével világítjuk meg?

Mindkét „fényrács” esetén a kiszámított α_E értékeket táblázatba foglaltuk (2. táblázat).

Megjegyzés: Az előbbi két feladat megfogalmazható és megoldható *keresztrács* esetére is!

2. táblázat:

Az előszöri és a másodszeri elhajlási sugarak egymásra-tevődését megengedő beesési szögek táblázata

fényrács	a (μm)	λ (nm)	α_E	β
CD	1,50	655	$0^0; \pm 12,5^0; \pm 25,7^0; \pm 40,5^0; \pm 60,1^0$	90^0
DVD	0,74	655	$0^0; \pm 26,1^0; \pm 61,5^0$	90^0

HIVATKOZÁSOK

- [1.] Ábrahám György (Ed.): *Optika*. Panem – Mc.Graw-Hill, 1998.
- [2.] Uliu Florea: *Utilizarea calcului vectorial în optică* (Vektorok alkalmazása a fénytanban), Revista de Fizică și Chimie no. 9 (1987)
- [3.] Bíró Tibor: A fényvisszaverődés és fénytörés törvénye vektorosan. *Firka* 3-6/2003-2004, 1/2004-2005.
- [4.] Charles Kittel: *Introducere în Fizica Corpului Solid* (Bevezetés a szilárdtest fizikába), 1971.

Négy öszvértartóból kialakított közúti hídszerkezet

Composite Steel-concrete Decks, with Four Beams, for Two Lanes

Pod rutier din patru grinzi longitudinale cu secțiune mixtă oțel-beton

BOLDOR Iulia Raluca, KÖLLŐ Gábor

Kolozsvári Műszaki Egyetem

ABSTRACT

The composite action, steel-concrete of a structure is developed when tasks are undertaken by two structural materials that behave as a single unit, meaning that the two materials in a structure are linked together. The steel structure of a bridge is fixed to the concrete structure as the steel and concrete work together, reducing deflection and increasing the endurance of the whole structure.

In this paper we present a study on road bridge decks on multi-beams networks consisting of laminated beams (IPE) working with a concrete slab.

The deck are considered to have a span of 30 m and consist of five identical beams with a 2.70 m distance between beams, HE + HL profiles, supporting a concrete slab, we considered in the paper several slab thicknesses. Transverse beams are connected by cross braces, placed at 5 m spacing .

The width of the bridge is 7.80 m, with two lanes of 3.50 m, a 0.40 m safety area and two sidewalks each having 1.50 m.

The bridges were analyzed in a computer program, called Acobri, that verifies and analyzes different types of sections and allows a fast static calculation. The ACOBRI program uses as a criterion, sagging class 1 or 2 (ULS) criterion or the deflectioncriterion (SLS).

Keywords: bridge deck, slab thickness, IPE beams, mixed section steel-concrete.

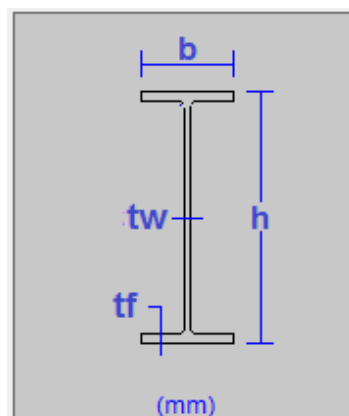
ÖSSZEFOGLALÓ

Az itt bemutatott hídszerkezetet négy acél-beton keresztmetszetű tartó segítségével terveztük meg 30 m-es nyílással, két forgalmi sáv részére. A hossztartók 2,70 m távolságban vannak elhelyezve, biztosítva így egy 7,8m útszélességet.

A hossztartók 5 m-ként kereszttartókkal vannak összekötve. A felhasznált acéltartók jellemzőit az 1. ábrán, valamint az 1. táblázatban láthatjuk.

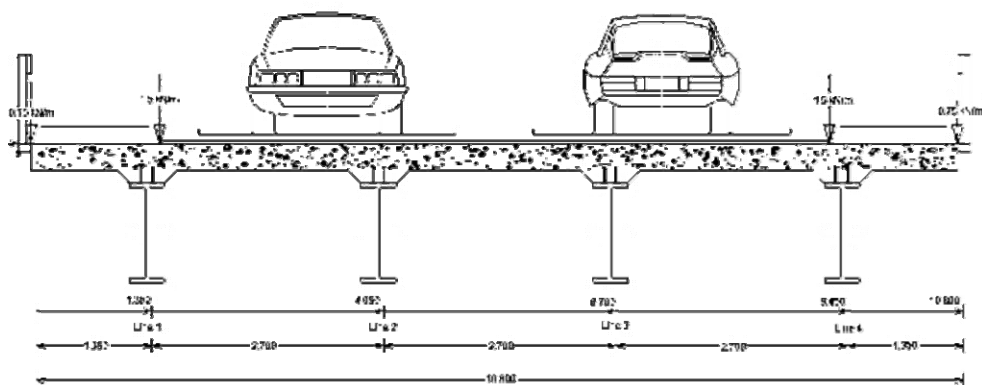
1. táblázat

Profiles features HE+HL				
Beam profile	h [mm]	tw [mm]	b [mm]	tf [mm]
HL1100R	1118	26	405	45
HL1100M	1108	22	402	40
HL1100B	1100	20	400	36



1. ábra

A híd keresztmetszeti kialakítása a 2. ábrán látható.



2. ábra

A felhasznált acél S355, a beton C30/37 osztályú. A tervezésnél figyelembe vettük az ide vonatkozó EUROCODE előírásokat, mind az anyagok megválasztásánál, mind a hídszerkezet terhelésénél (LM1). Az igénybevételek valamint a lehajlások számítását az ACOBRI program segítségével végeztük el. A hossztartók közötti távolságot úgy választottuk meg, hogy a beton lemezt teljes szélességében aktív lemezek tekinthetjük.

A hídszerkezetet a következő szerkezeti kialakításban elemeztük (2. táblázat):

2. táblázat

Beam no.	Space between the beams [m]	Steel	Concrete	Profile	Span [m]	Minim slab width [m]
4	2.70	S 355	C30/70	HL1100R	30	0.120
				HL1100M		0.150
				HL1100B		0.295

2. A SZERKEZET IGÉNYBEVÉTELEINEK MEGHATÁROZÁSA

A különböző szerkezeti elemek (hossztartók, betonlemez vastagság, acéltartók) bemutatása a 2-es táblázatban található. A megfelelő szerkezet kiválasztásánál figyelembe vettük a leginkább igénybevett keresztmetszetet (az alsó acélöv, valamint a nyomott betonöv teherbírását a megfelelő határállapotban, valamint a megengedett lehajlásokat). A következőkben összefoglalva mutatjuk be ezeket az igénybevételeket egy 30m-es hídszerkezet elemzésével (3, 4, 5. táblázat, 3, 4, 5. ábra).

3. táblázat

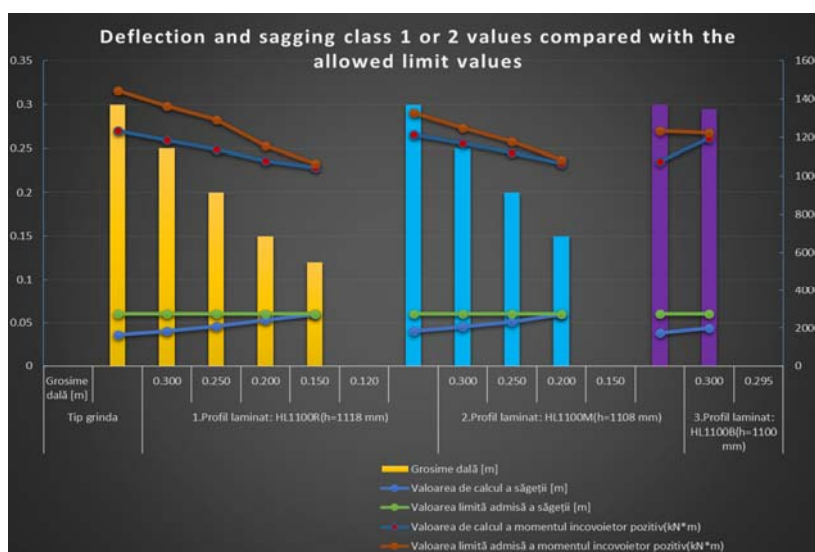
1.Profil: HL1100R(h=1118 mm)										
	Slab with 30 cm		Slab with 25 cm		Slab with 20 cm		Slab with 15 cm		Slab with 12 cm	
	Value	Limit	Value	Limit	Value	Limit	Value	Limit	Value	Limit
Criterion	Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.76<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.85<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.88<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.95<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.98<1.00	
Stress in top fibre of steel (MPa)	171.24	335.00	159.36	335.00	150.12	335.00	148.01	335.00	150.15	335.00
Stress in bottom fibre of steel (MPa)	281.85	335.00	275.06	335.00	260.69	335.00	262.97	335.00	260.19	335.00
Concrete compressive stress 1 (MPa)	7.91	18.00	8.940	18.00	10.33	18.00	12.38	18.00	14.16	18.00
Concrete compressive stress 2 (MPa)	1.53	13.50	1.71	13.50	1.94	13.50	2.25	13.50	2.48	13.50
Deflection (m)	0.360	0.060	0.040	0.060	0.046	0.060	0.053	0.060	0.059	0.060
Sagging class (1 or 2) (kN*m)	12353.1 4	14445.0 7	11869.3 3	13648.4 5	11356.4 8	12928.3 5	10801.6 6	11572.5 5	10444.3 2	10659.2 7

4. táblázat

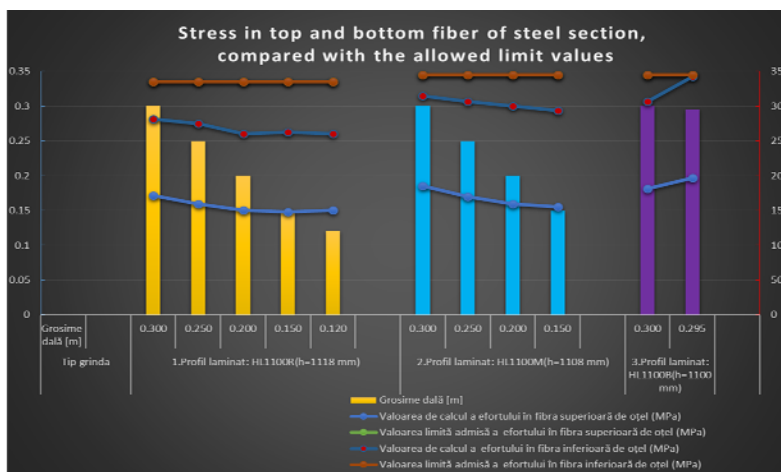
2.Profil laminat: HL1100M(h=1108 mm)								
	Slab with 30 cm		Slab with 25 cm		Slab with 20 cm		Slab with 15 cm	
	Value	Limit	Value	Limit	Value	Limit	Value	Limit
Criterion	Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.81<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.93<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.95<1.00		Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.98<1.00	
Stress in top fibre of steel (MPa)	185.72	345.00	170.23	345.00	159.06	345.00	155.15	345.00
Stress in bottom fibre of steel (MPa)	314.47	345.00	307.04	345.00	300.04	345.00	293.69	345.00
Concrete compressive stress 1 (MPa)	8.23	18.00	9.28	18.00	10.73	18.00	12.88	18.00
Concrete compressive stress 2 (MPa)	1.58	13.50	1.77	13.50	2.02	13.50	2.35	13.50
Deflection (m)	0.040	0.060	0.045	0.060	0.051	0.060	0.059	0.060
Sagging class (1 or 2) (kN*m)	12141.46	13292.36	11683.16	12501.46	11195.86	11787.07	10664.75	10841.50

5. táblázat

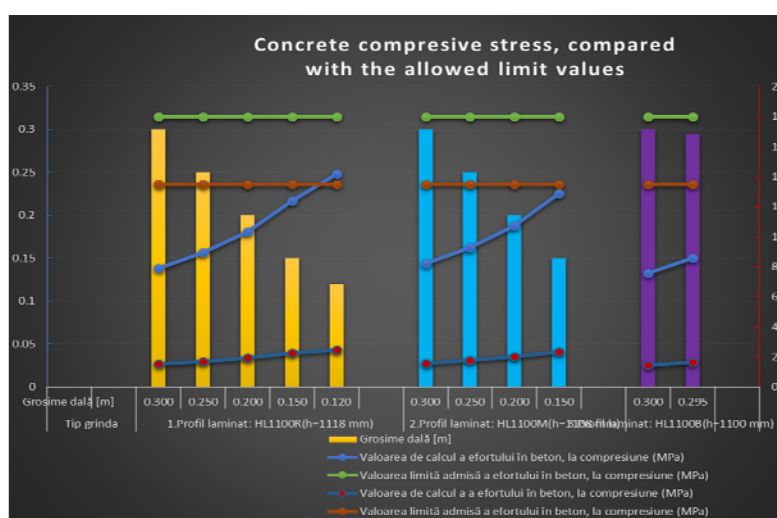
3.Profil laminat: HL1100B(h=1100 mm)				
	grosime dală 30 cm		grosime dală 0.295	
	Value	Limit	Value	Limit
Criterion	Sagging class(1 sau 2) ULS /Raport 0.87<1.00		Stress in bottom fibre of steel section (SLS) / Raport 0.99<1.00	
Stress in top fibre of steel (MPa)	181.05	345.00	197.23	345.00
Stress in bottom fibre of steel (MPa)	306.90	345.00	342.50	345.00
Concrete compressive stress 1 (MPa)	7.58	18.00	8.59	18.00
Concrete compressive stress 2 (MPa)	1.46	13.50	1.65	13.50
Deflection (m)	0.038	0.060	0.044	0.060
Sagging class (1 or 2) (kN*m)	10768.11	12337.29	11947.50	12255.05



3. ábra



4. ábra



5. ábra

ÖSSZEFOGLALÓ

Ezek a hídszerkezeti elemzések, amelyeket más 5 tartós és 6 tartós szerkezetekre és más fesztávolságokra is kiterjesztettük, megkönnyítik a tervezők munkáját, a szerkezeti elemek (hossztartók, keresztartók, beton lemezzvastagság) megválasztásánál, valamint ezeknek a hidaknak a tervezésénél.

FELHASZNÁLT IRODALOM

- [1] <http://cfdp.utcb.ro/doctorat/CURS%202.pdf>.
- [2] http://eurocodes.jrc.ec.europa.eu/doc/WS_334_1/2010_Bridges_EN1994_JRaoul_MOrtega.pdf.
- [3] Eurocode 4, Common Unified Rules for Composite Steel and Concrete Structures, ENV 1994-1-1, 1992.
- [4] Cusens, A. R. and Pama, R. P.: Bridge Deck Analysis. John Wiley and Sons. London, 1975.
- [5] Jaeger, L. G., and Bakht, B., The Grillage Analogy in Bridge Analysis, Canadian Journal of Civil Engineering, Vol. 9. Part 2. 1982, PP. 224-235.
- [6] C.Avram, V. Bota: Structuri compuse oțel-beton, beton precomprimat-beton aramat. Editura Tehnică, București, 1975.

ACKNOWLEDGMENT: This paper was supported by the project "Improvement of the doctoral studies quality in engineering science for development of the knowledge based society-QDOC" contract no. POSDRU/107/1.5/S/78534, project co-funded by the European Social Fund through the Sectorial Operational Program Human Resources 2007-2013.

Hemin és torma-peroxidáz alapú amperometriás bioszenzor: előállítás, elektrokémiai jellemzés és a hidrogén-peroxid kimutatása

Amperometric Biosensor with Hemin and Horseradish Peroxidase: Preparation, Electrochemical Characterization and Hydrogen Peroxide Detection

Biosenzor Amperometric conținând Hemină (Hm) și Peroxidază din Hrean (HRP): Preparare, Caracterizare electrochimică și Detecția Peroxidului de Hidrogen

MARES Georgeta-Maria doktorandusz, Graziella Liana TURDEAN docens,
Ionel Cătălin POPESCU egyetemi tanár

Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca. nr. 11, RO-400028, Cluj-Napoca, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818
web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: gmares73@yahoo.com

ABSTRACT

Iron(III)-protoporphyrin-IX (hemin, Hm) was attached by adsorption on the surface of a graphite (G). On the graphite/hemin modified electrode (G/Hm) was attached horseradish peroxidase (HRP) into a chitosan polymer film (Chit) in order to obtain an amperometric biosensor. Both modified graphite/hemin electrode (G/Hm) and the biosensor were used to amperometrically detect the hydrogen peroxide (H₂O₂).

Keywords: biosensor, graphite electrode, chitosan, horseradish peroxidase, H₂O₂.

ÖSSZEFOGLALÓ

A grafit(G) elektród felületére, vas(III)-protoporfirin-IX(Fe(III)P), azaz hemin (Hm) adszorpciójával, grafit/hemin (G/Hm) módosított elektród állítható elő. Ezen felületre peroxidáz (HRP) rögzítésével kitozán (Kit) polimerben, amperometriás bioszenzor nyerhető. A módosított grafit/hemin (G/Hm) elektród illetve az enzimes bioszenzor egyaránt alkalmas a hidrogén-peroxid kimutatására.

Kulcsszavak: bioszenzor, grafit elektród, kitozán, torma-peroxidáz, H₂O₂.

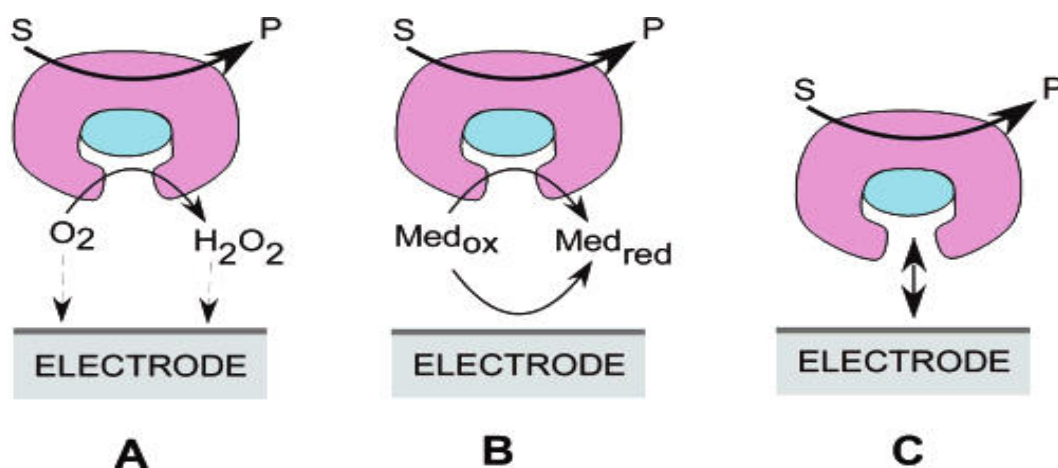
1. BEVEZETÉS

A kémiai és biológiai folyamatok követése, megértése szempontjából az analitikai kémia fejlődésének kiemelt szerepe van. Ennek a fejlődésnek három irányvonala az automatizálás, miniaturizálás és egyszerűsítés, melyben fontos szerep jut a gyors, megbízható érzékelők (szenzorok) fejlesztésének. A szenzor egy olyan technológiai eszköz vagy biológiai alapú egység, ami detektálja/érezkeli a jelet vagy fizikai változást.[1]

A bioszenzorok (biológiai szenzorok) a kémiai szenzorok alcsoportját alkotják, amelyeknél a felismerő anyag biológiai eredetű, és a szelektív felismerési lépés biológiai folyamatra épül. A különböző biológiai anyagok közül legáltalánosabban az enzimeket használják. A jelátvitel lehet elektrokémiai (amperometriás, potenciometriás), optikai vagy reakcióhő mérésén alapuló. A bioszenzor technológia egyedi tulajdonságai miatt valós mintákra alkalmazható eljárások lehetőségét ajánlja, s számos előnye (magasfokú szelektivitás és specifitás, megvalósíthatóság és tárolás relatív alacsony költsége, miniaturizálás lehetősége, automatizálhatóvá és hordozhatóvá tétel) alapanyag és minőségügyi laborok ellenőrző rendszereinek részévé teheti. A bioszenzor fejlesztések a legkülönbözőbb felhasználási területekre koncentrálnak, mint pl: klinikai, környezetvédelmi,

mezőgazdasági, biotechnológiai [2,3]. Bioszenzorral alapozott fejlesztések élelmiszertermékeknel is használhatóak lehetnek, főleg összetétel meghatározás, nyersanyag és késztermék szennyezettség, illetve fermentációs folyamatok beépített (on-line) ellenőrzése terén. A bioszenzorok megfelelő hőmérséklet és pH igénye a biológiai aktivitás biztosításáért szükséges. Az amperometriás bioszenzorok azt az áramot mérik, amit az elektródon egy elektroaktív anyag képez egy adott potenciálon. Ez a mért áram egyenes arányban áll a kérdéses anyag oldatbeli koncentrációjával. Az amperometriás bioszenzorok gyorsak, hiszen nem kell várni a termodinamikus egyensúly beállításáig, s érzékenyebbek, pontosabbak, mint a potenciometriás képviselőik. Ugyanakkor azonban szelektivitás terén a rendszerben jelenlévő elektroaktív anyagok redox potenciálja a meghatározó, ami ahhoz vezet, hogy a mért áram több anyag-együttes, különböző arányú jeléből tevődik össze. Az amperometriás bioszenzorok jelentik egyelőre a legsikeresebb osztályt a bioszenzorok történetében.[1]

Az első, glükóz mérésére alkalmas amperometriás bioszenzor glükóz oxidáz és Clark oxigén elektród felhasználásával készült [4], s a rendszerben bekövetkező oxigén fogyását követte nyomon. A termék keletkezésének vagy a reakciópartner (oxigén) fogyásának figyelemmel kíséréseivel követhetjük a vizsgálandó anyag koncentrációjára. Ezek a bioszenzorok az úgynevezett első generációsak. A mediátorral módosított amperometriás bioszenzorok jelentik a bioszenzorok második generációját, hiszen itt a mediátor redox tulajdonságai segítik az elektron transzfert az enzim és az elektród felszíne között. Direkt elektrontranszfert tesznek lehetővé a direkt enzim-elektrod kapcsolatos vagy mediátormentes bioszenzorok, melyek a szenzorok harmadik generációját jelentik. Ez utóbbi esetben az elektron közvetlenül jut el az elektródtól az enzimig, s onnan a szubsztrát molekulához (vagy fordítva) (1. ábra). Ebben a mechanizmusban az elektron egyfajta másodlagos szubsztrátként van jelen, s katalitikus áram képződését eredményezi. A szubsztrát átalakítása alapvetően egy katalitikus folyamat [5].

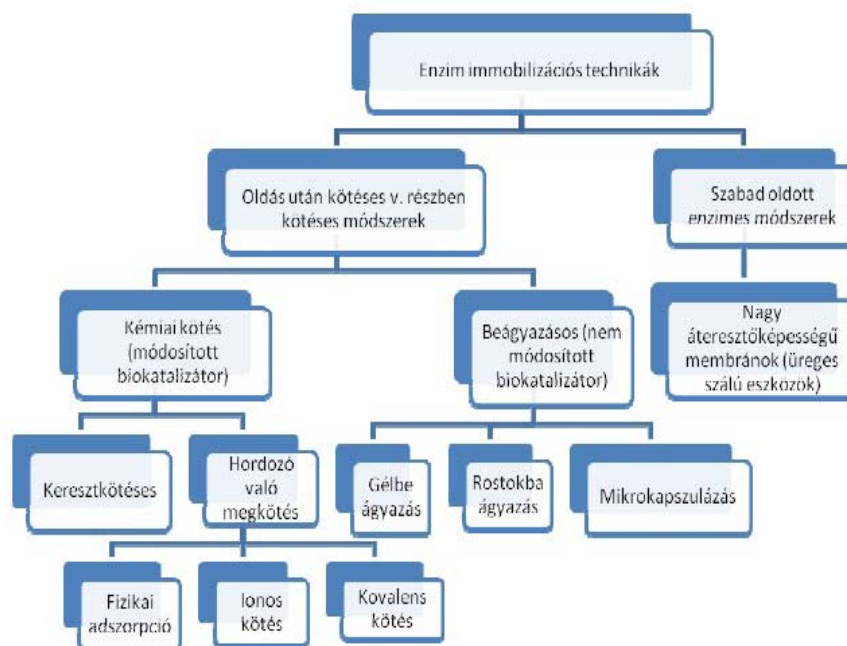


1. ábra

Amperometriás bioszenzorok: A-első generáció, B-második generáció, C-harmadik generáció [7].

Az élelmiszerelemzések esetében a bioszenzorok többsége az amperometrián és valamilyen oxidáz kombinációján alapszik. Ezek a típusú szenzorok annak köszönhetik népszerűségüket, hogy az enzim általában jó aktivitást mutat, magas érzékenység érhető el velük, s könnyű a reakció nyomon követése[6].

A biológiai alapú szenzor alapanyagok valamilyen szilárd felszínen történő rögzítése számos módon történhet [8]. Ezen rögzítési módszerek között szerepel az adszorpció, keresztkötés, kovalens kötés, valamilyen hordozóba zárás vagy kapszulázás, szilárd kötést segítő mátrix. A rögzítő mátrix szerepet játszhat csak és kizárólag a kötésben, de akár a jelátalakításban is (mediátor). Mindegy, hogy milyen rögzítési módszerről beszélünk, mivel minden esetben a cél a biológiai komponens lehető legmagasabb aktivitása, hosszú stabilitásideje és a jelátviteli egységhez mért kis távolsága a rögzítés után. Meghatározó része a rögzítés hatékonyságának, hogy a vizsgálandó anyag tudjon ki- és bevándorolni a létrehozott rétegben. A megfelelő rögzítési módszer kiválasztása függ magától az alkalmazandó biológiai anyagtól, a jelátalakítás módjától, a célmolekula fizikai-kémiai tulajdonságaitól és a bioszenzor működési feltételeitől (2. ábra).



2. ábra

Enzim megkötésekre alkalmazott módszerek összefoglalása [8]

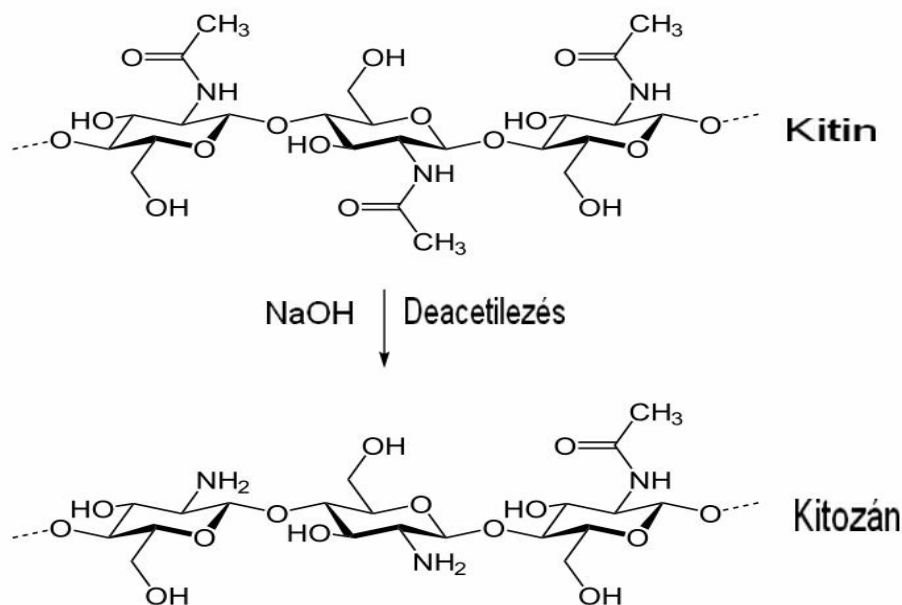
A leggyakrabban rögzítés céljából az adszorpció és a kovalens kötés módszerét alkalmazzák. A van der Waals erők vonzásán alapuló fizikai adszorpció a legegyszerűbb és legrégebben használt módszer. Ebben az esetben általában az enzimdát, sejt szuszpenzió vagy szövet metszet úgy kerül a jelátalakító felszínére, hogy egy, a célmolekulára féláteresztő membrán lefedi. Ezen módszer esetén nem szükséges a biológiai komponens kémiai módosítása, lehetőség van a membrán mátrix regenerálására. Főként az egyszerűség a nagy előnye ennek a megoldásnak, illetve, hogy egyszerre akár többféle biológiai komponens is használható, azonban jelentős aktivitás csökkenés tapasztalható, ha pH, ionerősség és hőmérsékletváltozás lép fel mérés közben. [1] A gélekbe, polimerekbe, pasztákba vagy tintákba történő bezárás jelentősen növelheti a stabilitást, s hasonló teljesítményhez vezethet, mint a kovalens kapcsolás.

Kovalens kötés során a biológiai komponens közvetlen a jelátalakító felszínéhez vagy a membrán mátrixához kapcsolható. Ezek a módszerek a fehérje terminális funkciók csoportjainak (a katalitikus aktivitást nem befolyásoló) és a felszín szabad funkciók csoportjainak reakcióin alapszanak. Enzimekben és fehérjékben ezek a lehetséges funkciók az aminosav oldalláncokon találhatóak (pl.: a lizin ϵ -amino, az aszpartát és glutamát karboxil, a cisztein szulfhidrid és a tirozin fenil-hidroxil csoportja). A különböző aktív funkciók csoportokat tartalmazó membránok nagy hatékonysággal képesek a biokomponensek megkötésére. Emellett arra is lehetőség van, hogy az enzimet vízoldható részecskékhez kötjük és két szelektíven átteresztő membrán közé zárjuk. Enzimek vagy fehérjék esetén ugyancsak használnak bifunkciós (homo vagy hetero funkciók) reagenseket, mely során makroszkópikus részecskék és térhálós szerkezet keletkezik a kovalens kötések kialakulása során a hordozó felszínén. A leggyakrabban használt homofunkciós vegyületek a glutáraldehid, karbodiimid, míg heterofunkciósakból a trikloro triazin- és a 3-metoxidifenil metán-4,4' diizocianát.[1]

Az elektrokémiai polimerizációval történő rögzítés is gyakran használatos szerves molekulák esetén, s számos előnye közzé tartozik a mikroléptékű kivitelezés, film vastagság befolyásolása, homogenitás és ismételhetség.

1.1. Kitozán

A kitozán a második leggyakoribb természetes polimer a cellulóz után. Megtalálható a rákok páncéljában, gombákban. A kitozán, amelyet a kitin lúgos deacetilezésével állítanak elő (3. ábra), egy lineáris, kristályos szerkezetű biopolimer, mely számos előnyös tulajdonsággal rendelkezik: biológiailag lebontható, nem mérgező, valamint antimikrobiális hatása. A deacetilezési fok (DD) 60-100%-ig terjedhet. Ezen jellemzőknek köszönhetően széles körben alkalmazzák akár önmagában, akár egyéb, természetes illetve mesterséges polimerekkel keverve. [9]



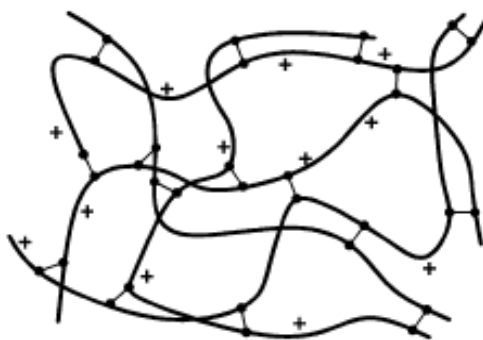
3. ábra

Kitozán előállítása a kitin deacetilezésével [10,11]

A kitozán biokompatibilis, nem toxikus, és jó adszorpciós tulajdonságokkal rendelkezik, ezért kiválóan alkalmas funkcionális anyagok előállítására. Híg savakban, például ecetsavban és hangyasavban könnyen oldódik. Az aminok jellegzetes reakcióit mutatja, ezek közül a legfontosabbak az N-acilezés és a Schiff-bázis képzés. Alkalmazása rendkívül széles körű. Kelátképző tulajdonsága miatt képes megkötni a mérgező nehézfémeket, például a higanyt, a nikkelt és a kadmiumot, ez lehetővé teszi használatát a szennyvíztisztításban. Antibakteriális és gombaölő hatása miatt előszeretettel használják kozmetikumok, pl. testápolók, krémek, körömlakkok adalékolására. A protonált aminocsoport kötést létesít a mikroorganizmusok alkotóinak anionos csoportjával, ami meggátolja a szaporodásukat. A kitozán rendelkezik az eddig említetteken kívül minden olyan kedvező tulajdonsággal (optikai tisztaság, mechanikai stabilitás, nedvesedés stb.), ami lehetővé teszi, hogy kontaktlencsét készítsenek belőle. A kitozán zsírmegkötő hatása sem elhanyagolható: képes kötést létesíteni vele a gyomorban még mielőtt az megemésztődne, ezzel megakadályozza a felszívódását a béltraktusban.

Az így megkötött zsírok természetes módon ürülnek ki a szervezetből. A kitozán az aminocsoport reaktivitásának köszönhetően megfelelő körülmények között könnyen térhálósodik.[12]

Ez lehetséges ionos mechanizmussal: mivel a kitozán aminocsoportja savas, semleges és gyenge lúgos közegben protonálódik, ilyen körülmények között képes reverzibilis kötést létesíteni negatív töltésű molekulákkal. A térháló létrehozásának másik lehetősége elsőrendű kémiai kötések létrehozása a polimerláncok és egy többfunkciós molekula között.

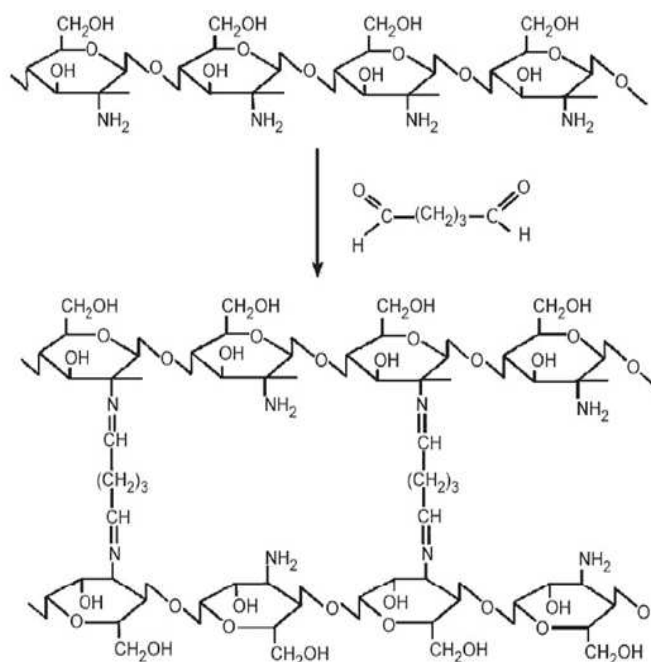


4. ábra

H-kötésekkel térhálósodott kitozán molekulák [13]

A kitozán polimer önmaga is egy fizikai térhálóval összetartott rendszer. Ha van olyan aminocsoport, ami nem protonálódott (és mindig van ilyen), akkor annak hidrogénje a szemközti hidroxil csoport oxigénjével hidrogénkötést létesít (4. ábra). Ennek a kölcsönhatásnak a valószínűsége a pH csökkenéssel ($-\text{NH}^{3+}$ -csoportok számának növekedésével) együtt csökken.[12]

A kitozánláncok közötti kapcsolat kiépíthető kismolsúlyú molekulák segítségével is (pl. dialdehidek). Az aldehidcsoportok a kitozán aminocsoportjaival Schiff-bázist képeznek, végül iminkötések jönnek létre köztük (5. ábra). A reakció segédanyagok nélkül, vizes közegben is végbemegy, ami a biokompatibilitás szempontjából nagyon fontos. A dialdehidek azonban gyakran mérgezőek (pl. a glutaraldehyd közepesen erős idegméreg), ezért a felhasználás előtt a szabad aldehidmaradékot alaposan ki kell mosni. Teljesen azonban lehetetlen, és ez egyelőre gátat szab az alkalmazásnak.[12]



5. ábra
Térhálósítás glutaraldehyddel [14]

A kovalens keresztkötés állandó vázat biztosít (kémiai térháló), ami lehetővé teszi a víz szabad diffúzióját a szerkezetbe, és javítja a mechanikai stabilitást is. Az így előállított rendszer tulajdonképpen porózus anyagként viselkedik, ennek köszönhetően a hatóanyag-hordozóként történő felhasználásakor a hatóanyag szabadon diffundál ki belőle. A kevésbé térhálós rendszerek szuperadszorbens hidrogélként viselkednek, a keresztkötések sűrűségének növekedésével csökken a duzzadási fok és a háló „pórusmérete”. A térhálósítószer koncentrációjának növelése csökkenti a kitozán és a vízmolekulák között létrejövő hidrogénkötések kialakulásának valószínűségét.

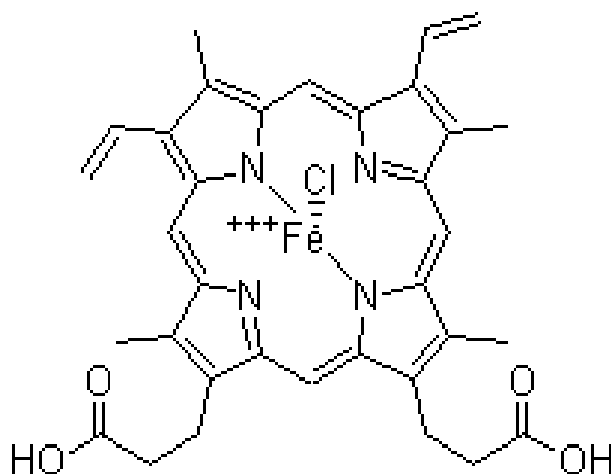
Minél kisebb a térháló sűrűség, annál hosszabb a polimerláncok relaxációs ideje, ami lassított hatóanyag-leadást jelent. [13]

1.2. HEMIN ($\text{C}_{34}\text{H}_{32}\text{ClFeN}_4\text{O}_4$) (HM)

A hemben levő kétértékű vas háromértékűvé oxidálható, mikoris ferihemnek nevezik. Ez képezhet hidroxidot (hematint) és kloridot, ez a hemin- $\text{C}_{34}\text{H}_{32}\text{ClFeN}_4\text{O}_4$ ($M=651,94$). Ez utóbbiak a Teichmann-féle kristályok: hosszúkas, vékony lemezek vagy jellegzetes letompított élű prizmakristályok, amelyek átnézéssel barnák, ráeső fényben acélkéken csillognak. Vízben és hígított savakban oldhatatlanok, erős szerves savakban és nátrium-hidroxidban, továbbá ammóniaoldatban oldódnak, miközben hematinná alakulnak. A hemin (a hemoglobin nem fehérje komponense) és a klorofill (a növényi sejtek kloroplasztiszainak alkotóeleme) a biológiai oxidációban, ill. a szén-dioxid asszimilációban döntő szerepet játszó vegyületek. A hemin és a klorofill különböznek egymástól: a pirrolgyűrűkön eltérő szubsztituensek találhatók. A hemin

koordinatív Fe^{2+} iont köt meg, míg a klorofill Mg^{2+} iont. Fischer szintetizált először hemint 1928-ban. Ezért, illetve a hemin és klorofill rokonságának bizonyításáért Nobel-díjat kapott 1930-ban. A hemin szerkezetének (6. ábra) felderítése során kezdetben a redukív lebontási termékek vizsgálatával valószínűsítették a négy pirrolváz jelenlétét.

Küster vázolta fel elsőként a hemin szerkezetét az oxidatív lebontási termékek alapján.[15,16,17]



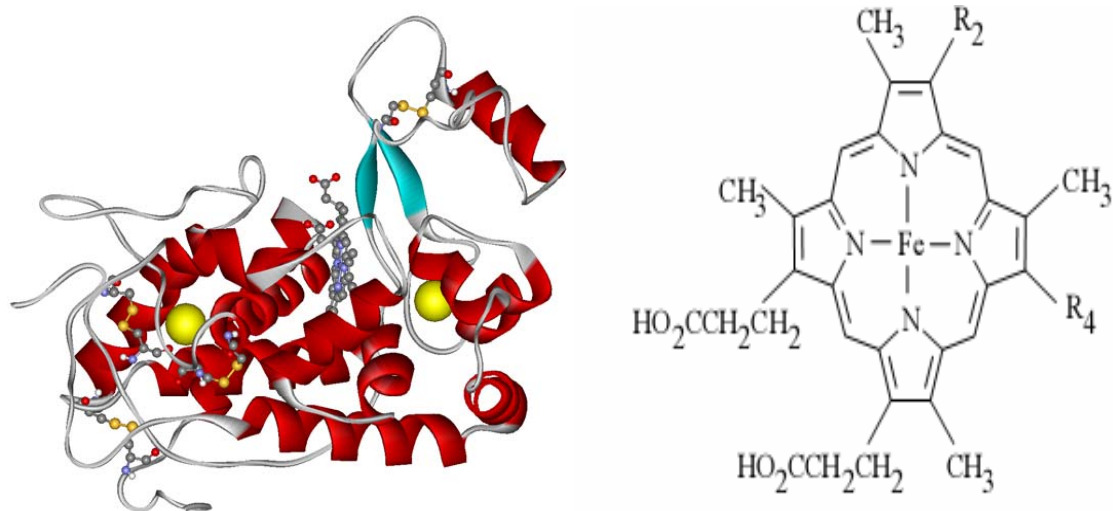
6. ábra
A hemin szerkezete

Mind a négy peptidlánc egy hemokromogénhez kapcsolódik, amelyben a vas hat koordinációs helye közül négyet a porfirinyűrű nitrogénjei foglalnak el. Az ötödik koordinációs helyhez kapcsolódik a peptidlánc egyik hisztidinje, a hatodik hely szabad, illetve nagyon gyengén vizet koordinál. A biológiai rendszerekben igen fontos szerepe van a pH változásnak, hiszen sok fiziológias paraméter függ a pH-tól, például az enzimek aktivitása, a membránok permeabilitása. A hemin csak semleges vagy lúgos közegben stabilis, savak hatására lebomlik. A bomlás és az azt kísérő csapadékkiválás az oldat hemin- és savkoncentrációjától is függ. A hemin pH = 6-ig stabilis, pH ≥ 6 értékek esetén még nagyobb heminkoncentrációnál sem történik csapadékképződés. Viszont egész kis pH-csökkenés hatására ez megváltozik: már pH = 5,5-ön is – a heminkoncentrációtól függően – néhány perc, esetleg néhány óra elteltével kiválik a csapadék. Alacsonyabb pH-jú oldatokban ez már egészen kis heminkoncentráció esetén is szinte azonnal megtörténik. A leggyorsabb csapadékkiválás pH = 3 esetben tapasztalható, ez alatt a csapadék kiválása a savkoncentráció növelésével kismértékben lassul.[16, 24-27]

1.3. Tormaperoxidáz (HRP- horseradish peroxidase)

A tormaperoxidáz (horseradish peroxidase - HRP) egy glikoprotein, amelyet először a torma növény gyökeréből izoláltak. Nagyszámú aromás szubsztrátot képes hidrogén donorként felhasználni. Az enzim natív állapotban egy ferri (Fe^{3+}) protoporfirint-IX-et (hem) tartalmaz, mint prosztetikus csoportot, amelyben a Fe^{3+} ötös koordinációjú helyzetben a proximális His-hez kötődik. Pontos szerkezetét Gajhede és társai derítették fel (1997) röntgen kristallográfiás módszerekkel. Funkciós csoportja és negyedleges szerkezete nagy hasonlóságot mutat a többi növényi peroxidázzal. A molekula tömege 44 kDa, amelynek kb. 18 %-át az aktív centrumot körülvevő aminosavak, az úgynevezett zseb teszi ki.

A fehérje két Ca^{2+} – disztális és proximális – iont, négy diszulfid hidat és egy Trp-t tartalmaz. A térszerkezetet a két Ca^{2+} ion stabilizálja (7. ábra), amelyek szükségesek a megfelelő felgombolyodáshoz, valamint a fehérjén belül a hem csoport számára kedvező környezet megteremtéséhez. [20]



7. ábra

A tormaperoxidáz röntgenkristallográfiával meghatározott térszerkezete a PDB (Protein Data Bank) adatbázis alapján

A hem peroxidázok szerepe az, hogy H_2O_2 mint elektron akceptor felhasználásával, oxidatív reakciókat katalizálnak. A peroxidázok által elektron akceptornak használt szubsztrátok nagyon különbözőek lehetnek az inorganikus ionoktól a nagy molekulatömegű szerves vegyületekig. A reakció mechanizmusa nagyon hasonló mindegyik peroxidáz esetében[20]

Célul tűztük ki a módosított G/Hm (grafit/hemin), G/Hm/Kit. (grafit/hemin/kitozán) elektródok elektrokémiai jellemzését és az amperometriás G/Hm/Kit/HRP/Ga bioszenzor előállítását illetve alkalmazását a hidrogén-peroxid detektálásában.

2. ANYAGOK ÉS MÓDSZEREK

2.1. Anyagok

Grafit rúd (Ringsdorff Németország), Hemin (vas protoporfirin IX) (Fluka), Kitozán (Sigma chemica CO), Tormaperoxidáz (HRP) (Boehringer Németország), Glutáraldehid (Sigma chemica CO), TRIS (trihidroximetilaminometán – $\text{C}_4\text{H}_{11}\text{NO}_3$ ($M=121,1$)) (Sigma chemica CO), Na_2HPO_4 és NaH_2PO_4 (Sigma chemica CO), HCl oldat (Reactivul Bukarest), ecetsav 96% (Reactivul Bukarest), H_2O_2 33% oldat (Merk Németország), desztillált víz.

Öt alapoldat készült a módosított elektródok előállítása és elektrokémiai viselkedésük tanulmányozására:

- 3.25 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$ Hemin (Hm) oldat, 5mM, pH10 TRIS pufferoldatban
- 10,67 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$ Kitozán (Kit) oldat 0.1% -os ecetsavban (HAc)
- 10 $\mu\text{g}/\mu\text{L}$ Tormaperoxidáz (HRP) 5mM, pH8 TRIS pufferoldatban. Sósav adagolásával csökkent a pH értéke.
- 2.5% Glutáraldehid (GA) desztilláltvízes oldat
- H_2O_2 0,1M oldat, desztilláltvízből és megfelelő mennyiségű H_2O_2 33% oldatból.

A megmaradt Hm és Kit oldatokat hűtőszekrényben tároltunk; a HRP és GA oldatokból annyi készült amennyi el lett használva.

2.2. Műszerek és mérési körülmények

A voltammetriás mérésekhez használt műszer egy PGStat 10 (Autolab, Hollandia), az amperometriás mérésekhez használt műszer a PAR volt. A háromelektrodos cellában a munkaelektrod: G/Hm; G/Hm/Kit

illetve G/Hm/Kit/HRP/Ga; a vonatkozáselektrod, $\text{Ag}|\text{AgCl},\text{KCl}_{\text{sat}}$. (Radiometer, Franciaország), a segédelektrod 1 cm^2 felületű Pt volt. A kombinált üvegelektroddal ellátott pH-mérő (Pracitronic, Németország) az oldatok pH értékének mérésére és beállítására szolgált.

Kísérleti körülmények: foszfátos puffer oldat $0,1\text{M}$, pH 7.02, hőmérséklet: $25\pm 2^\circ\text{C}$, argon (Ar) atmoszféra.

2.3. Módszerek

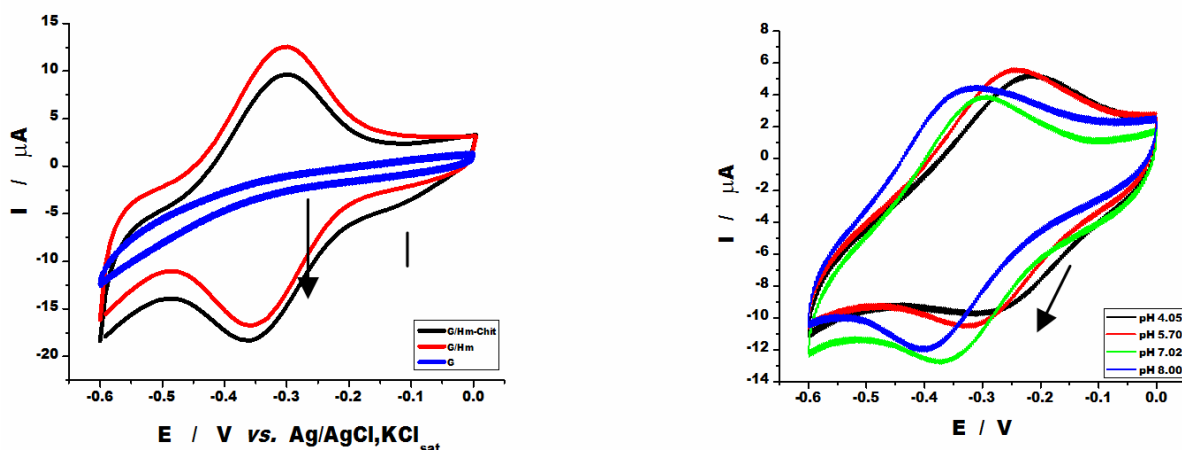
2.3.1. A G/Hm, G/Hm/Kit és G/Hm/Kit/HRP/Ga elektrodok előállítása

A grafit felületének csiszolópapírral (320 illetve P1200C) való megtisztítását 2 perces ultraszonálás követte. pH 7.02 foszfátos pufferoldatban (PB), 0 V kezdeti potenciálán vs. $\text{Ag}/\text{AgCl},\text{KCl}_{\text{sat}}$, 20 mV/s pásztázási sebességgel ciklikus voltamogrammok készültek, a felület tisztaságát bizonyítandó. Mikropipetta segítségével, $5\mu\text{L}$, $3.25\mu\text{g}/\mu\text{L}$ Hm oldat került a grafit felületére és **G/Hm** elektrod keletkezett. A módosított **G/Hm/Kit** elektrod előállítható a Hm rétegre, $5\mu\text{L}$, $10.67\mu\text{g}/\mu\text{L}$ Kit oldat csepegtetésével. Száradás után $5\mu\text{L}$, $10\mu\text{g}/\mu\text{L}$ tormaperoxidáz (HRP) és $5\mu\text{L}$, 2.5% glutaraldehid (Ga) oldat pipettával való adagolásával bioszenzor állítható elő, melynek jelölése: **G/Hm/Kit/HRP/Ga**.

3. MÉRÉSI EREDMÉNYEK

3.1. A G/HM, G/HM/KIT elektrodok elektrokémiai viselkedése

Száradás után, másnap került sor a **G/Hm** és **G/Hm/Kit** elektrodok elektrokémiai viselkedésének tanulmányozására CV módszerrel.

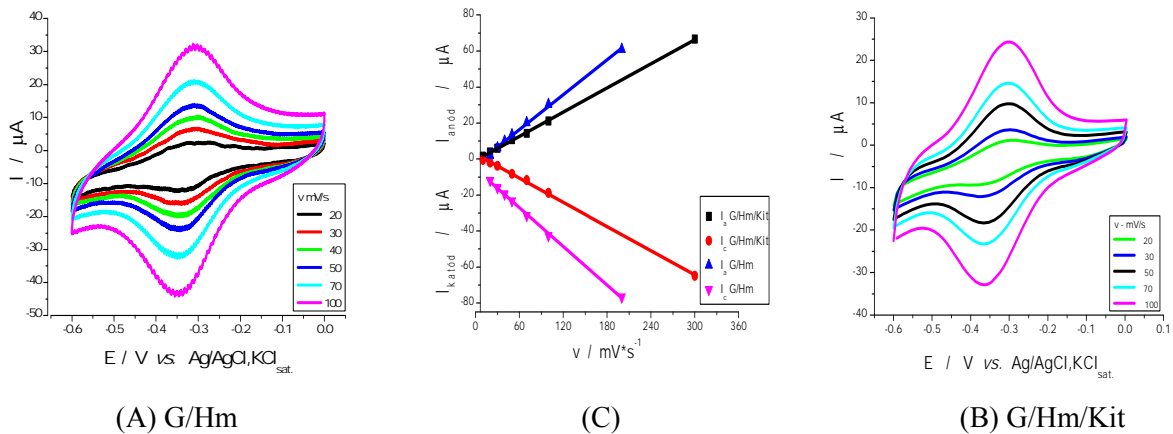


8. ábra

Voltamogrammok a G, G/Hm és G/Hm/Kit elektrodok esetében pH 7.02 (A) illetve a G/Hm elektrodra vonatkoztatva ha pH: 4.02, 5.7, 7.02, 8.02. (B).

Kísérleti körülmények : foszfátos pufferoldat $0,1\text{M}$, kezdeti potenciál 0 V vs. $\text{Ag}/\text{AgCl}/\text{KCl}_{\text{sat}}$, Ar atmoszférában, hőmérséklet $25\pm 2^\circ\text{C}$, ciklikus voltametriaiban (CV), 30 ciklus, pásztázási sebesség 50mV/s (A), 2 ciklus, pásztázási sebesség 20mV/s (B).

Összehasonlítva a G/Hm és G/Hm/Kit voltamogrammjait, látható a katódos áramerősség növekedése illetve az anódos áramerősség csökkenése a kitozán jelenlétében (8 ábra, A). Az E–pH viszonya, a pH: 4-8 tartományban lineáris. $V/\Delta\text{pH}$ eltér (kiseb) mint 0.059 , ami 1H^+ , 1e^- cserére érvényes. Jelen esetben CV: $V/\Delta\text{pH} = -0.041\pm 0.005$, $R=0.962$ / $N=4$; értékeket eredményezett. A szakirodalom említi a Hm és a hozzá hasonló szerkezetű hemoglobin (Hb) esetében hasonló eltéréseket. Mivel 7.02 pH -jú közeg a legalkalmasabb bioszenzorok előállítására és viselkedésük tanulmányozására, a továbbiakban ezen a pH értéken történnek a mérések.



9. ábra

A pásztázási sebesség hatása a G/Hm és G/Hm/Kit elektródok elektrokémiai viselkedésére (A, B) illetve az $I - v$ viszonya a G/Hm és G/Hm/Kit elektródokra vonatkoztatva (C).

Kísérleti körülmények: foszfátos pufferoldat 0,1M, pH 7.02, kezdeti potenciál 0 V vs. Ag/AgCl/KCl_{sat}, 2 ciklus, Ar atmoszférában, hőmérséklet 25±2°C, (CV).

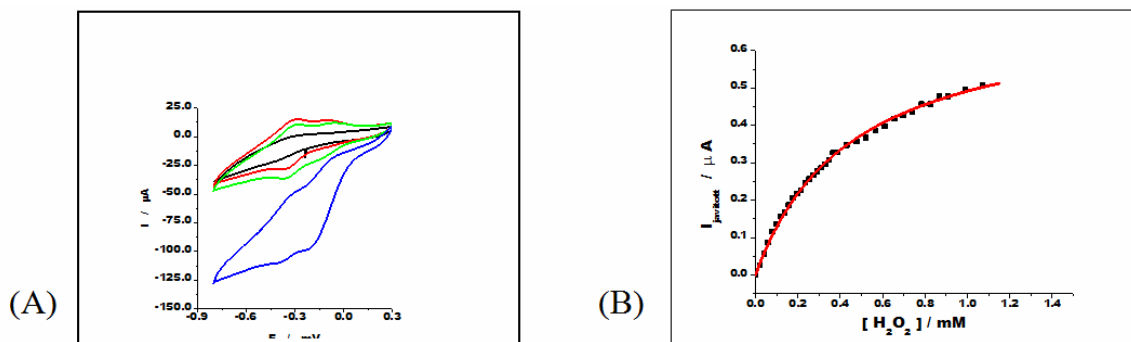
1. táblázat: I vs. v G/Hm és G/Hm/Kit elektródok esetében

Elektród	$\text{Log } I$ vs. $\text{Log } v$	R / n
G / Hm	$\log I_{p,a} = -6.907 + 1.184 \log v$	0.990 / 6
G / Hm/Kit	$\log I_{p,a} = -6.754 + 1.045 \log v$	0.999 / 6

Mivel a $\log I_{p,a}$ vs. $\log v$ linearizálási egyenletben az 1.184 illetve 1.045 meredekségi értékek (1. táblázat) megközelítik az elméleti értéket, 1, elmondható, hogy a hemin az elektród felületén rögzítve található. A pásztázási sebesség függvényében változik az anódos ($E_{p,a}$) illetve katódos ($E_{p,c}$) csúcspotenciál értéke. A módosított G/Hm elektród esetében: $E_{p,a} \sim -314$ mV, $E_{p,c} \sim -343$ mV, míg a G/Hm/Kit elektród esetében: $E_{p,a} \sim -306$ mV, $E_{p,c} \sim -356$ mV körül van. ΔE_p a G/Hm és G/Hm/Kit esetében 100mV/s pásztázási sebességen egyaránt a legnagyobb: 34mV illetve 50mV.

3.2. A hidrogén-peroxid (H_2O_2) elektrokatalízise a módosított G/Hm elektród illetve a g/hm/kit/hrp/ga bioszenzor esetében

A módosított G/Hm elektród használható H_2O_2 (10. ábra A) (illetve NO_2^-) kimutatására, ugyanakkor alkalmas bioszenzorok előállítására.

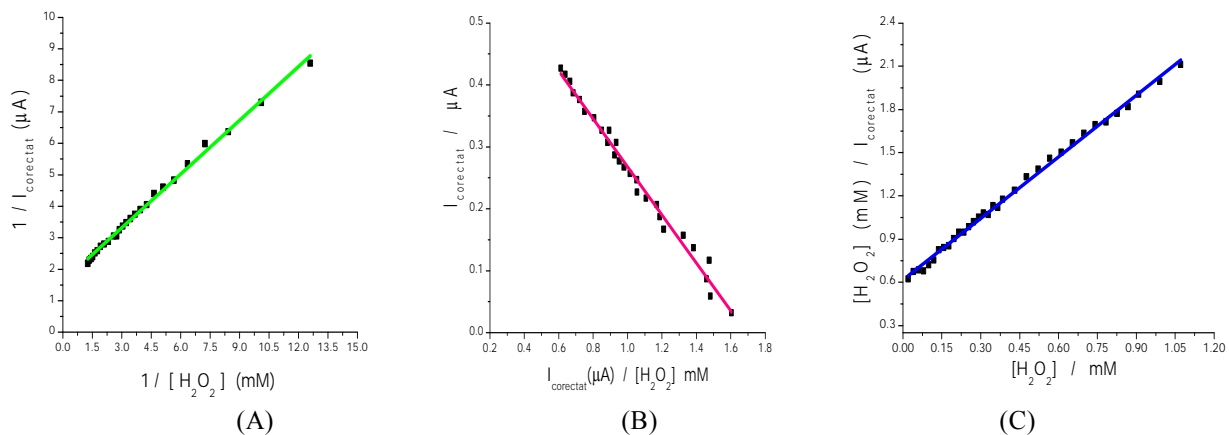


10. ábra

Ciklikus voltamogramok a G és G/Hm elektródok esetében H_2O_2 koncentrációjának függvényében (A) illetve az $I - [H_2O_2]$ viszonya a G/Hm/Kit/HRP/Ga bioszenzorra vonatkoztatva (B).

Kísérleti körülmények: foszfátos pufferoldat 0,1M, kezdeti potenciál 0 V vs. Ag/AgCl/KCl_{sat}, Ar atmoszférában, hőmérséklet 25±2°C, pH 7.02, 2 ciklus, pásztázási sebesség 20mV/s, az adagolt H_2O_2 10⁻²M volt (A); 500 rpm, potenciál -500mV vs. Ag/AgCl/KCl_{sat}. (B)

Esetünkben a biológiai módosító a tormaperoxidáz (HRP). A G/Hm/Kit/HRP/Ga bioszenzor viselkedése H₂O₂ jelenlétében látható a 10. ábrán (B), a kalibrációs görbén mely amperometriás méréstehnikával készült.



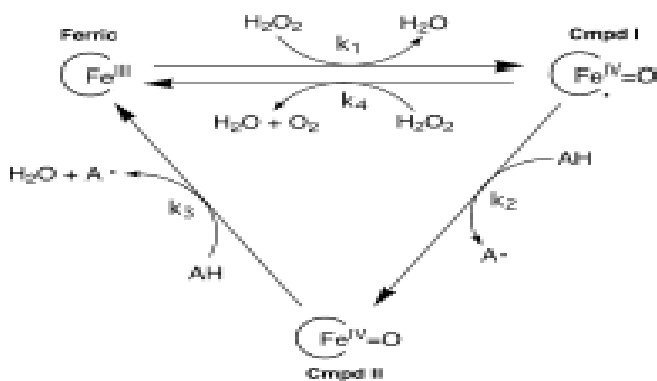
11. ábra

Lineweaver-Burk: $1/I=f(1/[H_2O_2])$ (A), Eadie-Hofstee: $I=f(I/[H_2O_2])$ (B) és Hanes-Woolf: $([H_2O_2]/I)=f([H_2O_2])$ (C) linearizálások a G/Hm/Kit/HRP/Ga bioszenzorra vonatkoztatva, amperometriás mérési módszer alkalmazásakor.

A 11. ábrán látható linearizálásból származó I_{max}, K_M, S, R / n értékek az alábbi, 2. táblázatban találhatók.

2. táblázat: A elektrokinetikus paraméterek értékei a G/Hm/Kit/HRP/Ga bioszenzorra vonatkozóan.

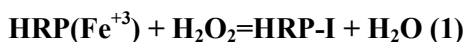
Linearizálás	Elektrokinetikai paraméterek			
	I _{max} / μA	K _M / mM	S=I _{max} /K _M (μA/mM)	R / n
Hyperbola (Origin)	0.71574 ± 0.02285	0.45636 ± 0.03172	1.56837 ± 0.15909	0.99 / 40
Lineweaver-Burk	0.88396 ± 0.13808	0.609678 ± 0.1124	1.44989 ± 0.04076	0.99 / 49
Eadie-Hofstee	0.65582±0.019597	0.38805 ± 0.01426	1.69004 ± 0.112612	0.98 / 27
Hanes-Woolf	0.702524±0.01898	0.433569±0.02557	1.620325 ± 0.05177	0.99 / 34



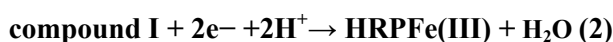
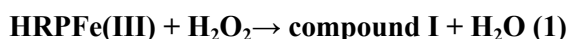
12. ábra.

A H₂O₂ elektrokatalízisének mechanizmusa Hm jelenlétében.

A szakirodalom a H₂O₂, Hm jelenlétében történő elektrokatalízisére a 12. ábrán látható mechanizmust jelöli meg, mely három lépésben történik, két intermedier képződésével. A folyamat hasonlít a HRP jelenlétében történő elektroredukcióhoz, mivel a két anyag HRP és Hm szerkezete igen hasonló.



A három lépésben történő mechanizmus mellett az alábbi, két lépésben történő folyamatot is említ a szakirodalom. [21,22] [23]



3.3. A G/Hm elektród stabilitás

Az élettartam, stabilitás meghatározó az elektród elektrokémiai viselkedésében. A G/Hm elektród esetében a rövidtávú (672s) illetve hosszútávú (18300s) stabilitás megfigyelése során: a katódos áramerősség értéke csökken az idő függvényében. Két óra elteltével a csökkenés 2.017% (0.104 μA), öt óra elteltével pedig 2.735% (0.123 μA), ha a kísérleti körülmények: foszfátos pufferoldat 0,1M, pH 7.02, kezdeti potenciál 0 V vs. Ag/AgCl/KCl-sat, pásztázási sebesség 20mV/s, argon atmoszférában, hőmérséklet 25±2°C. A rövidtávú stabilitás (672s) a pásztázási sebesség 50mV/s. Az elektród tárolása, pufferoldatot tartalmazó közegben, hűtőszekrényben történik, 4°C hőmérsékleten.

4. KÖVETKEZTETÉSEK

- A Hemin szerkezetében jelenlévő Fe(III) könnyen redukálódik Fe(II) - re, reverzibilis folyamatban. Ezért elektrokémiai szempontból aktív anyag, mely igen jól rögzíthető adszorbciónal, polimérbe (Kitozán) való beágyazással, a grafit felületére és módosított elektród állítható elő, gyorsan, egyszerűen, jó reprodukciós képességgel: G/Hm illetve G/Hm/Kit.
- A vizsgálat tárgya: a pH hatása a stabilitás, a hidrogén-peroxid elektrokatalízise (G/Hm) illetve a pásztázási sebesség hatása a G/Hm és G/Hm/Kit elektród viselkedésére. Az E – pH viszonya, a pH: 4-8 tartományban lineáris. $V/\Delta\text{pH} = -0.041 \pm 0.005$, $R = 0.962$ / $N = 4$, eltér (kisebb) mint 0.059, ami 1H⁺, 1e⁻ cseréjére érvényes.
- Az áramerősség lineárisan változik a pásztázási sebességgel mindkét elektród esetében, CV méréstehnika alkalmazásakor. Az elektródok stabilitása jónak mondható.
- G/Hm/Kit/HRP/Ga szerkezetű amperometriás bioszenzor állítható elő, mely a H₂O₂ kimuttására szolgál. A válaszidő 5-10 s. Tárolás 4°C, hűtőszekrényben foszfátos pufferoldattal telített közegben.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetet a kolozsvári „Babeş – Bolyai” Tudományegyetem, kémia és vegyészmérnöki kar, Elektrokémia tanszéke tanárainak, munkatársainak és doktoranduszainak.

IRODALOMJAGYZÉK

- [1] A. Víg, "Bioszenzorfejlesztés L-aszcorbinsav és aflatoxin M₁ mérésére", 2011, Ph.D. fokozati dolgozat, Debreceni Egyetem
- [2] I.E.Tothill, "Biosensors developments and potential applications in the agricultural diagnosis sector", Comp. and Electron. in Agricult 30, 2001, 205-218 [3] J. Wang, "Amperometric biosensors for clinical and therapeutic drug monitoring: a review", J.Pharmaceutical Biomed. Anal. 19, 1999, 47-53
- [4] S. J. Updike, G. P. Hicks, "Enzyme electrode", Nature, 1967, 214 (5092) 986

- [5] Katsunobu Yamamoto, Haisheng Zeng, Yi Shen, Md Mahiuddin Ahmed, Takeshi Kato, "Evaluation of an amperometric glucose biosensor based on a tuhenium complex mediator of low redox potential", *Talanta* 66, **2005**, 1175-1180
- [6] C. La Rosa, F. Pariente, L. Hernandez, E. Lorenzo, "Amperometric flow-through biosensor for determination of pesticides", *Anal. Chim. Acta* 308, **1995**, 129-136
- [7] J. Wang, "Electrochemical Glucose Biosensors", *Chem. Rev.* (**2008**), 108, 814-825
- [8] S. Zhang, G. Wright, Y. Yang, "Materials and techniques for electrochemical biosensor design and construction", *Biosens. Bioel.* 15, **2000**, 273-282
- [9] Ming. Kong, Xi Guang Chen, Ke Xing, Hyun Jin Park "Antimicrobial properties of chitosan and mode of action: A state of the art review", *International Journal of Food Microbiology*, **2010**, 144, 51–63.
- [10] NEUROtiker, "Schematic drawing of the enzymatic synthesis of Chitosan", **2008**, Wikipédia.
- [11] K. Komlai, "Kitozán-zselatin hibrid filmek előállítása és tulajdonságai", **2010**, Szakdolgozat
- [12] Á. Jaksó, "Kitozán filmek térhálósítása ionos és nemionos molekulákkal", **2010**, Budapest.
- [13] J. Berger, et al., "Structure and interactions in covalently and ionically crosslinked chitosan hydrogels for biomedical applications", *European Journal of Pharmaceutics and Bio-pharmaceutics* 57, **2004**, 19-34.
- [14] <http://www.greenpharmacy.info>. [Online] [Hivatkozva: 2010. december 12.]
- [15] K. Dénesné Rácz, "Porfírvázias vas(III)-komplekek bromátos oxidációjának vizsgálata", ELTE TTK, Budapest, **2008**
- [16] Dr. O.-A. Neumüller, "Römpp Vegyészeti Lexikon", Műszaki Könyvkiadó, Budapest, **1982**, 408-412.
- [17] G. Pál docens, "Bevezetés a biokémiába" – ELTE, **2012**
- [18] Protein Data Bank: www.rcsb.org/pdb/
- [19] L. Smeller "A fehérjék konformációs és dinamikai tulajdonságai. Új eredmények nagy nyomással kombinált infravörös és fluoreszcencia spektroszkópiai módszerekkel, Budapest, **2006-2007**
- [20] K. Szigeti, "A Ca²⁺ szerepe a tormaperoxidáz enzim aktív szerkezetében", Budapest, **2008**
- [21] Li Y., D.C. Goodwin, *Biochem. Biophys. Res. Comm.*, **2004**, 318, 970.
- [22] J.A. Laszlo, D.L. Compton, *J. Mol. Cat. B. Enzy.*, **2002**, 18, 109.
- [23] Qin Xu, Chun Mao, Ni-Na Liu, Jun-Jie Zhu, Jian Sheng, "Direct electrochemistry of horseradish peroxidase based on biocompatible carboxymethyl chitosan-gold nanoparticle nanocomposite", *Biosensors and Bioelectronics* 22 (**2006**) 768–773.
- [24] G.L. Turdean, I.C. Popescu, A. Curulli, G. Palleschi, "Iron(III) protoporphyrin IX-single-wall carbon nanotubes modified electrodes for hydrogen peroxide and nitrite detection", *Electrochimica Acta*, **2006**
- [25] W.S. Wan Ngah, S. Ab Ghani, A. Kamari, "Adsorption behavior of Fe(II) and Fe(III) ions on chitosan and cross-linked chitosan beads", *Bioresource Technology*, **2005**, 96, 443-450.
- [26] J. Chen, U. Wollenberger, F. Lisdat, B. Ge, F.W. Scheller, "Superoxide sensor based on hemin modified electrode", *Sensors and Actuators*, **2000**, B 70, 115-120.
- [27] C.P. Baron, H.J. Andersen, "Myoglobin-Induced Lipid Oxidation", **2002**, *J. Agric. And Food Chem.*, 50, 3887-3897.

Hozzájárulások a gázvezetékeknél használt polietilén mikrobiológiai rongálódásának tanulmányozásához

Contribution to Study of Microbiological Degradation of Polyethylene from the Gas Pipelines

Contribuții la studiul degradării microbiologice a polietilenei utilizate la realizarea țevelor de distribuție a gazelor naturale

LINGVAY Mónika¹, SZATMÁRI Ilona², BUTOI Nicoleta³, MARINESCU Virgil³

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár, Arany János u. 11 sz.,
www.chem.ubbcluj.ro; monika_lingvay@yahoo.com

²Orbán Balázs Gimnázium, Székelykeresztúr, www.obg.ro; szatmari@obg.ro

³INC DIE ICPE-CA, Bucureşti, Splaiul Unirii, nr. 313; www.icpe-ca.ro; office@icpe-ca.ro

ABSTRACT

The degradation of polyethylene of the gas pipelines due to molds from soil was evaluated with specific microbiological methods, optical microscopy and thermal analysis (TG, DTG, DTA). Our studies showed that moulds have a destructive effect on the high density polyethylene samples. The thermal analysis methods showed that the PE samples' oxygen affinity increase under the influence of mold, with which it produces solid peroxides.

Keywords: PE gas pipeline, mold, microbiological degradation, thermal analysis, peroxides.

ÖSSZEFOGLALÓ

A gázvezetékeknél használt polietilén mikrobiológiai rongálódásait vizsgáltuk specifikus mikrobiológiai módszerekkel, optikus mikroszkópiával és termikus analízissel (TG, DTG, DTA). Vizsgálataink kimutatták, hogy a megvizsgált próbák anyaga nagysűrűségű PE, melyen a penészgombák által okozott rongálódások kimutathatók. A termikus analízis módszereivel megállapítottuk, hogy a penészgombák hatására, a megvizsgált PE próbák oxigénnel szembeni affinitása megnő, mellyel szilárd halmazállapotú peroxidokat képeznek.

Kulcsszavak: PE gázcső, penészgombák, mikrobiológiai rongálódások, termikus analízis, peroxidok.

1. BEVEZETŐ

Az utóbbi évtizedekben egyre több polietilént (PE) használnak a talajba fektetett városi hálózatok kivitelezésénél (gázcsövek, vízcsövek, energiakábelek védőköpenye stb.). Mindezek mechanikai (talajmozgások, rezgések stb.), vegyi (a talaj nedvessége, sótartalma, petróleumszármazékok stb.) és mikrobiológiai (a talajban jelenlevő baktériumok, penészgombák stb.) hatásoknak vannak kitéve [6], [10].

A nagy moltömegű PE mikrobiológiai stresszel szembeni ellenállóképesége aránylag nagy. Ahhoz, hogy a PE mikrobiológiailag rongálódhasson, első lépésként le kell, hogy bomoljon kisebb moltömegű termékekre. Ez az első lépés főleg a sejteken kívüli enzimek hatásának tulajdonítható, de végbemehet a környezeti tényezők hatására is (nedvesség, oxigén jelenléte, ionizáló és nem ionizáló sugárzások stb.). Két elvi rongálódási mechanizmust mutattak ki a PE-nél: hidro-biorongálódás (ami főleg a keményítő jelenlétében megy végbe) és oxo-biorongálódás (oxidáló tényezők hatására) [1].

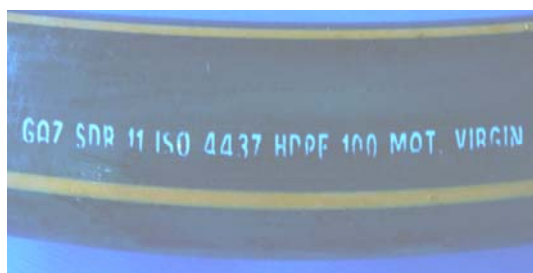
A PE mikrobiológiai rongálódásait többen tanulmányozták [1, 6-9, 13] és arra az egyhangú következtetésre jutottak, hogy a rongálódások méretét az adott PE jellemzői (molekulatömeg, keresztkötések száma, stb.) és a környezeti tényezők határozzák meg. J. Gaunt, F. Mao és S.K. Ong [4], [5], [11] tanulmányozták a PE petróleumszármazékok által okozott rongálódásait.

Ezekre való tekintettel, *dolgozatunk célja* tanulmányozni a gázcsövek gyártásánál használt PE rongálódásait a talajban élő penészgombák jelenlétében.

2. KÍSÉRLETI RÉSZ

2.1. Anyag és módszer

Kísérleteinket az 1. ábrán bemutatott gázcsőből készített, lemez és forgács alakú próbákon végeztük. A próbákat szabványos mikrobiológiai procedúra szerint [14], [15] tettük ki a penészgombák hatásának ($30 \pm 2^\circ\text{C}$ és állandó relatív nedvességtartalom $\text{RH} = 90 \pm 2\%$) – mind tápkarbond nem tartalmazó ([12] – **A** módszer) Czapek Dox táptalajon (2g NaNO_3 ; 0.7g KH_2PO_4 ; 0.3g K_2HPO_4 ; 0.5g KCl ; 0.5g $\text{MgSO}_4 \times 7\text{H}_2\text{O}$; 0.01g FeSO_4 ; 20g agar-agar; 1000 mL desztillált víz), mind karbond (szacharóz – 30g/L) tartalmazó ([12] – **B** módszer) Czapek Dox táptalajon. Az alkalmazott inokulum, a szabványokban polimerekre javasolt penészgombákat tartalmazott: *Aspergillus niger*, *Penicillium funiculosum*, *Paecilomyces varioti*, *Trichoderma viride*, *Chaetomium globosum*, *Aspergillus terreus*, *Penicillium ochrochloron* és *Scopulariopsis brevicaulis* [14], [15].

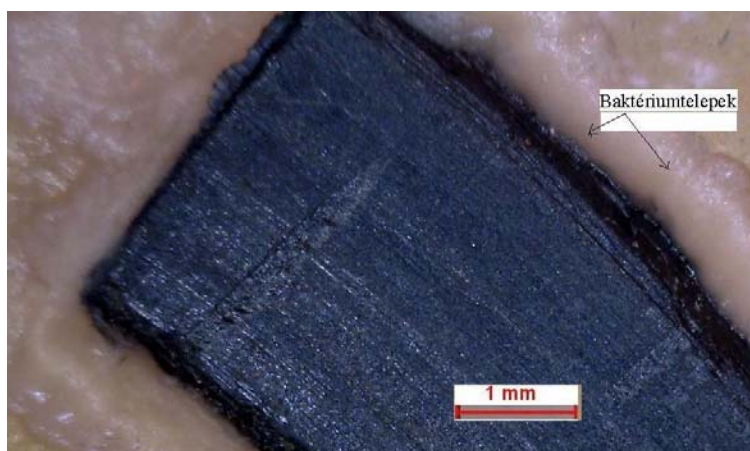


1. ábra
A megvizsgált gázcső

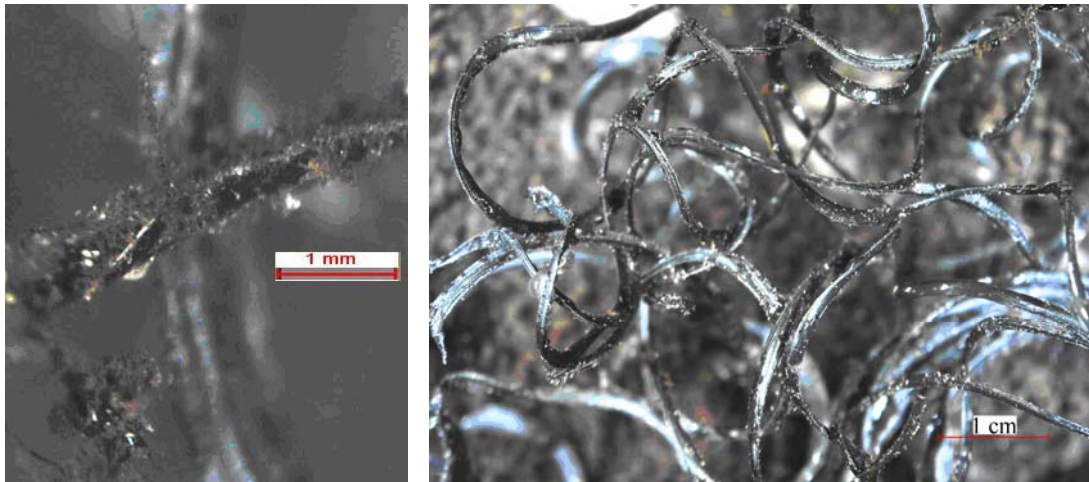
A mikrobiológiai kezelés előtt és után, a PE próbákat a termikus analízis módszereivel (TG-DTA-DSC) [2] vizsgáltuk meg. A felhasznált berendezés: STA 409PC (Netzsch Gerätebau GMBH – Németország) és a hozzátartozó specializált softwer. A próbák melegítési sebessége $2,5 \text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ volt. Melegítés közben, a próbákhoz 20 mL/perc oxigén volt adagolva.

2.2. Kísérleti eredmények

Az 1. ábrán bemutatott gázcsőből készített próbákon 3 napi mikrobiológiai kezelés után baktériumtelepek jelentek meg (főleg a lemezpróbák szélén) – 2. ábra. 14 napi kezelés után a forgácspróbákon főleg *Aspergillus niger* és *Aspergillus terreus* telepek fejlődtek ki (3. ábra), viszont a lemezpróbákon már 7 napi kezelés után (4. ábra) fehér, hálós *Penicillium sp.* és barnás *Paecilomyces sp.* telepek jelentek meg. A próbák penészgombák általi fedettségi osztályozása az 1. táblázatban van megadva.

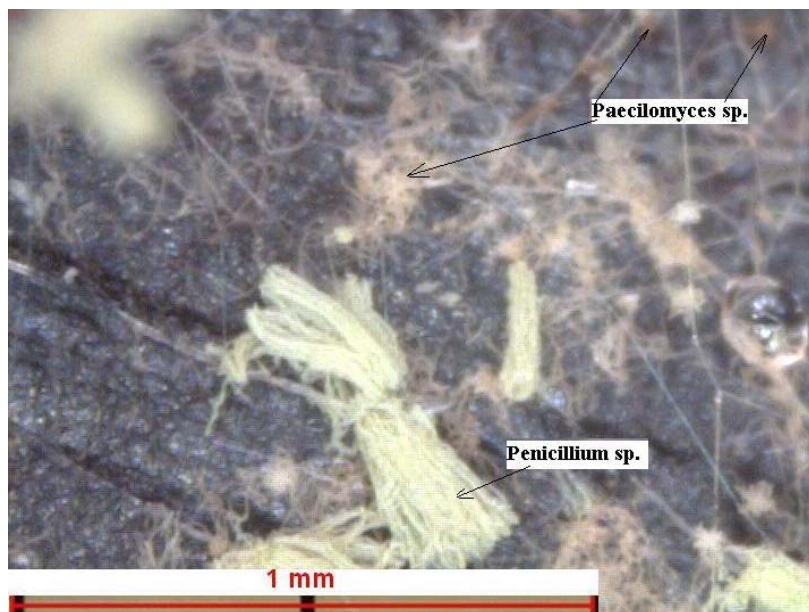


2. ábra
Baktériumtelepek – 3 napi „B” kezelés után



3. ábra

Aspergillus niger és *Aspergillus terreus* telepek 14 napi „A módszeres” kezelés után



4. ábra

Hálós *Penicillium sp.* és *Paecilomyces sp.* telepek (7 napi kezelés – B módszer).

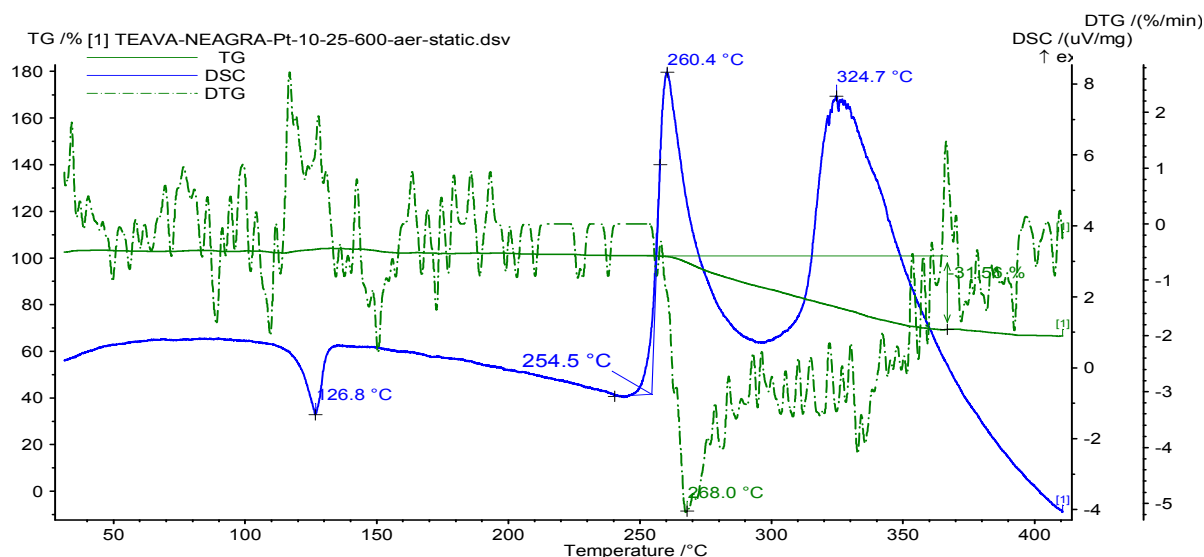
1. Táblázat. A megvizsgált PE gázcső próbák penészgombák általi fedettsége 14 napos kezelés után, valamint a PE penészgombákkal szembeni ellenállóképességének az osztályozása [14], [15].

A gázcső PE próba formája	(A) Módszer: Osztályzatok: 0÷3	(B) Módszer: Osztályzatok: 0÷5
forgács	1÷2	5
lemez	0÷1	3÷4

Az 1. Táblázatban alkalmazott osztályzatok a [14], [15] szerint: 0 = nincsenek penészgomba-telepek (tökéletes ellenállóképesség); 1 – csak mikroszkóppal látható penészgomba-telepek; 2 – szabad szemmel látható penészgomba telepek, a felület 1÷25%-án; 3 – szabad szemmel látható penészgomba telepek, a felület 26÷50%-án; 4 – szabad szemmel látható penészgomba-telepek, a felület 51÷75%-án; 5 – szabad szemmel látható penészgomba-telepek, a felület több mint 75%-án.

A 2., 3. és 4. ábrákból, valamint az 1. Táblázatból megállapítható, hogy a gázcsövek gyártásánál használt PE penészgombákkal szembeni ellenállóképessége korlátozott, sőt, a mechanikailag feldolgozott/rongált felületeken és a tápkarbont tartalmazó közegekben (szacharóz - de lehet keményítő is [1], [7], [12]) az ellenállóképesség kimondottan gyenge (5 osztályzat).

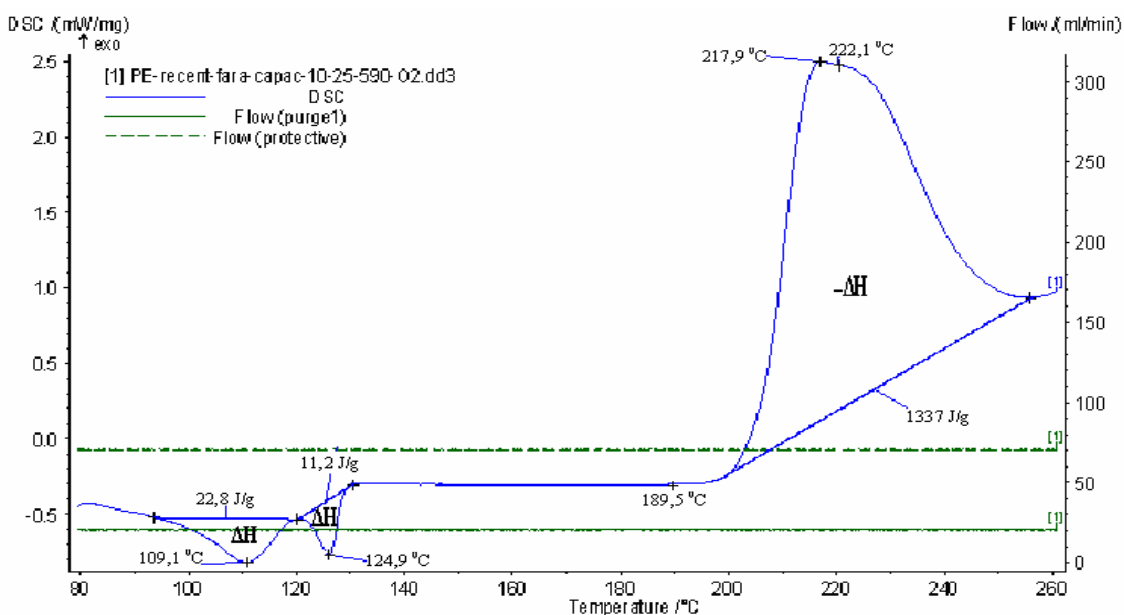
A mikrobiológiai kezelésnek nem alávetett gázcső PE próba termikus diagramja az 5. ábrán látható. A DSC diagramból megállapítható, hogy a próba anyaga egy homogén szerkezetű (csak egy komponens/frakciót tartalmaz), nagy molekulatömegű PE (nagy sűrűségű PE), melynek az olvadáspontja $T_{olv}=126,8^{\circ}\text{C}$. Folyamatos melegítés folyamán $T_k=254,5^{\circ}\text{C}$ -on egy tömegnövekedéssel járó, exoterm oxidációs reakció indul be (szilárd halmazállapotú peroxidok képződnek [3]), melynek sebessége $T_{max1}=260,4^{\circ}\text{C}$ -on maximális. Ez a reakció meghatározza a PE stabilitását. Ezt követi egy második tömegnövekedéssel járó, exoterm folyamat, melynek sebessége $T_{max2}=324,7^{\circ}\text{C}$ -on maximális. Tovább melegítve, a PE gyakorlatilag elég, miközben gáz halmazállapotú égéstermékek keletkeznek, tömegcsökkentést eredményezve.



5. ábra

A mikrobiológiai kezelésnek nem alávetett gázcső PE próba termikus diagramja

A 14 napos mikrobiológiai kezelésnek (B módszer) alávetett gázcső PE próba termikus diagramja a 6. ábrán látható. A DSC diagramból megállapítható, hogy a próba heterogén szerkezetű, két komponenst tartalmaz, melyeknek az olvadáspontjai $T_{olv1}=109,1^{\circ}\text{C}$ és $T_{olv2}=124,9^{\circ}\text{C}$. Tehát, a mikrobiológiai kezelés folyamán, a nagy PE molekula ($T_{olv}=126,8^{\circ}\text{C}$) lebomlott két – egy aránylag nagy molekulatömegű ($T_{olv2}=124,9^{\circ}\text{C}$) és egy aránylag kis molekulatömegű ($T_{olv1}=109,1^{\circ}\text{C}$) komponensre.



6. ábra

A mikrobiológiai kezelésnek (B módszer) alávetett gázcső PE próba termikus diagramja

Az 5. és a 6 ábra összehasonlításából kitűnik, hogy az első termooxidációs folyamatra jellemző hőmérsékletértékek (az oxidáció kezdete $T_k = 189,5^\circ\text{C}$ és az első oxidációs maximum $T_{max1} = 217,9^\circ\text{C}$) sokkal alacsonyabbak mint a mikrobiológiailag nem kezelt PE esetében ($\Delta T_k = 254,5 - 189,5 = 65^\circ\text{C}$, illetve $\Delta T_{max1} = 260,4 - 217,9 = 42,5^\circ\text{C}$). Ez azt jelenti, hogy a mikrobiológiailag kezelt PE oxigénnel szembeni affinitása (oxidálhatósága) sokkal nagyobb, mint a mikrobiológiailag nem kezelté. Mindez megegyezik, és összhangban van M. Borghei és társai által leírtakkal [1].

3. KÖVETKEZTETÉSEK

Szabványosított mikrobiológiai meghatározásainkból megállapítható, hogy a gázvezetékeknél használt polietilén penészgombákkal szembeni ellenállóképessége korlátozott, sőt, tápkarbont tartalmazó talajokban (szacharóz - de lehet keményítő is) az ellenállóképesség kimondottan gyenge.

A termikus analízissel elvégzett meghatározásainkból megállapítható, hogy a gázvezetékeknél használt polietilén homogén szerkezetű és nagy molekulatömegű (nagsűrűségű) PE ($T_{olv} = 126,8^\circ\text{C}$), amelynek a szerkezete a penészgombák hatására (14 napos kezelés B módszerrel) heterogénné válik (két különböző olvadáspontú – $109,1^\circ\text{C}$ és $124,9^\circ\text{C}$ – frakció jelenik meg), és az oxigénnel szembeni affinitása (oxidálhatósága) számottevően megnő.

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] M. BORGHEI, A. KARBASSI, S. KHORAMNEJADIAN, A. OROMIEHIE, A. H. JAVID, Microbial biodegradable potato starch based low density polyethylene, *African Journal of Biotechnology* 2010, Vol. 9(26), pp. 4075-4080.
- [2] P. BUDRUGEAC, A. COMĂNESCU, I. LINGVAY, Investigations by Thermal Analysis Methods Concerning the Degradations of Polyethylene Insulations from the Underground Metallic Pipes, *URB-CORR 2007*, Cluj-Napoca – Romania, June 20 – 23, 2007, pp.133-137
- [3] P. BUDRUGEAC, I. LINGVAY, ALINA COMĂNESCU, O. CIOGESCU, Characterization of cables insulating materials by the thermal analysis methods . 1 – Polyethylene structural changes during manufacturing medium tension cable process, *Analele Universității din Oradea – fascicula Chimie*, 2008, Vol. XV, pp.119-122.
- [4] J. GAUNT, F. MAO, S.K. ONG, Performance of plastic pipes and pipe gaskets in hydrocarbon contamination field experience and laboratory studies, *AWWA ACE Conference*, June 11 – 14, 2006, San Antonio, TX.
- [5] J. GAUNT, S.K. ONG, Water utility experience with plastic pipes and gaskets in hydrocarbon-contaminated soils, *ACE'05*, June, 2005, San Francisco, CA.
- [6] RAVI S. GORUR, A Novel Approach for Prioritizing Maintenance of Underground Cables, Final Project Report, Power Systems Engineering Research Center, Arizona State University, (October 2006), PSERC Publication 06-40.
- [7] KIRAN KUMARI, R. C AANAD, NEERU NARULA, *Microbial degradation of polyethylene (PE)*, The South Pacific Journal of Natural Science 2009 Vol. 27 No. 1 pp. 66-70
- [8] S. LABUZEK, B. NOWAK, Biodegradation of an aged composite of polyethylene with a synthetic polyester - *Polymery*, 2006, 51(1), pp. 27-32.
- [9] S. LABUZEK, B. NOWAK, J. PAJAK, Synthetic modified polyethylene polymers and their biodegradation, *Biotechnologia*, 2003, vol. 4, pp. 110-123.
- [10] I. LINGVAY, Good and Bad Practices in Corrosion Risk Management of Gas Distribution Networks, *Proceedings book of URB-CORR 2008*, Băile Felix, Romania, June 25 – 27, 2008, pp.59-70.
- [11] F. MAO, J. GAUNT, AND S.K. ONG, Permeation of petroleum-based aromatic compounds through polyethylene pipes under simulated field conditions, *AWWA ACE Conference*, June 11 – 14, 2006, San Antonio, TX.
- [12] NANDA SONIL, SMITI SNIGDHA SAHU, JAYANTHI ABRAHAM, Studies on the biodegradation of natural and synthetic polyethylene by Pseudomonas spp, *J. Appl. Sci. Environ. Manage.* June 2010, Vol. 14 (2), pp. 57-60.
- [13] J. PAJAK, B. NOWAK, S.LABUZEK, Biodegradation of polyethylene film in the presence of fungi and in soil, *Biotechnologia*, 2003, vol. 4, pp. 214-227.
- [14] *** IEC 68-2-10 (1988) *Basic Environmental Testing Procedures. Part 2: Tests – Test J and guidance: Mould growth.*
- [15] *** SR EN ISO846/2000- *Materiale plastice – Evaluarea acțiunii microorganismelor*

Amfoter karakterű vegyületek a rezolválásban

Compounds with Amphoteric Character in the Resolution Processes

Metode de rezolvare a compușilor cu caracter amfoter

PÁLOVICS Emese¹, SZELECZKI Zsolt², FAIGL Ferenc², FOGASSY Elemér²

¹ MTA Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport,

² BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, H-1111 Budapest, Budafoki út 8,

ABSTRACT

We had systematized the typical resolutions in which compounds having amphoteric character take part either racemic compound or resolving agent. In the overwhelming majority of cases, the fractionated crystallisation of diastereomers effectuated from water or from aqueous solutions brings about enantiomeric enrichment with good yield and enantiomeric excess. The resolving agents having amphoteric character can be regenerated economically as well as the presented methods of chiral-chiral recognition applying compounds with amphoteric character can render help to interpret these interactions.

ÖSSZEFOGLALÁS:

Munkánk során rendszereztük azokat a jellegzetes rezolválásokat, melyekben az amfoter karakterű vegyületek vesznek részt racémként illetve rezolválóagensként. Az esetek túlnyomó többségében a diasztereomerek frakcionált kristályosítása vizes, vagy vizet tartalmazó oldószerből történhet, jó termeléssel és enantiomertisztsággal eredményezik a tiszta enantiomereket. Az amfoter karakterű rezolválóagens gazdaságosan regenerálható, valamint a királis-királis felismerés alkalmazásának az amfoter vegyületek részvételével bemutatott módszerei ezeknek a kölcsönhatásoknak az értelmezésében is segítséget nyújthatnak.

Kulcsszavak: Rezolválás, amfoter karakter, enantiomer-keverékek, enantiomer-tisztság, rezolválhatóság.

A királis-királis kölcsönhatások megfigyelése, ezek következményeinek elméleti és gyakorlati alkalmazásának egyszerűbb modellje a molekuláris kölcsönhatások lehetnek. Ezek sorában mind a kutatás, mind az ipar területén a szintézisek során keletkező racém vegyületek enantiomerjeinek az elválasztása igen sok jól hasznosítható felismerést eredményezett. Az enantiomerek elválasztásának, előállításának jelenleg is a legegyszerűbb módszere a diasztereomerek előállításán és elválasztásán alapul. A legtöbb ilyen elválasztás a savbázis reakciók alkalmazásával kapott diasztereomer sók frakcionált kristályosításával történik [1]. Ilyenkor úgy járunk el, hogy a racém savat egy alkalmas királis bázissal a megfelelő oldószerben reagáltatjuk, melyből a keletkezett diasztereomer sók közül az egyik rosszabbul oldódik, ez kikristályosodik, tehát szűréssel ezek elválaszthatóak egymástól. Így a racém vegyület két enantiomerjét diasztereomer sójukként elkülönítik, majd ezekből elbontással nyerik az enantiomereket. Értelemszerűen, amikor a racém bázist királis savval reagáltatják akkor is az előzőek szerint járnak el [2].

Ha a racém vegyület amfoter karakterű, pl. aminosav, akkor általában az enantiomerek elválasztása előtt az egyik funkciós csoportot átmenetileg védeni kell, pl. aminosavak esetében ilyenkor acilezéssel savat, észteressítéssel bázist állítanak elő, elvégzik a rezolválást, majd a védőcsoportot, esetünkben hidrolízissal eltávolítják. Ilyenkor az eredeti racém vegyület enantiomerjeinek az előállítására a rezolválás reakciólépésein túl további két lépéssel bővül, és értelemszerűen ez növeli az enantiomer elválasztás munkát, készülék és anyagigényét, illetve rontja a rezolválás eredményét is, így jelentősen növeli a költségeket ahhoz képest, hogy közvetlenül a racém amfoter vegyület enantiomerjét választjuk el. Miután az amfoter karakterű racém vegyületek közvetlen rezolválására mind a szakirodalomban, mind a saját munkáinkban jellegzetes példákat találtunk megkíséreltük az ilyen típusú eljárásokat rendszerezni, ill. néhány saját példánkkal az eddigi ismeretekhez hozzájárulni. A felsorolt példáinkkal nem törekedtünk a teljességre, inkább csak bizonyítani kívánjuk, hogy az utóbbi évszázadban többen is eredményesen éltek ezzel a lehetőséggel. A példáinkat két csoportra

osztottuk, melyek közül az első a racém amfoter karakterű vegyületek reszolválási lehetőségeit mutatja be királis bázisokkal, ill. királis savakkal, mint reszolválóágensekkel. A másik csoportban viszont olyan példákat sorolunk fel, melyeknél a reszolválóágensek amfoter karakterű vegyületek enantiomerjei, melyekkel racém bázisokat, ill. racém savakat reszolváltak.

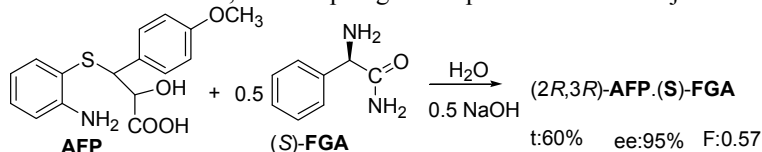
1. PÉLDÁK SZABAD ÁLLAPOTÚ AMFOTER KARAKTERŰ VEGYÜLETEK RESZOLVÁLÁSÁRA

reszolváló ágens

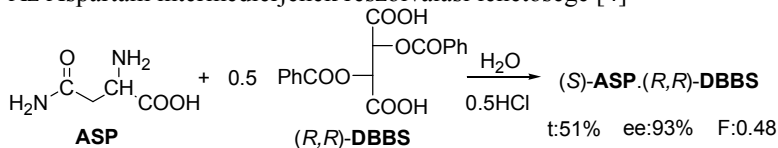
Bázikus karakterű reszolválóágens, amely szintén amfoter karakterű vegyület származéka [3]

példák

Az AFP a Diltiazem, a FGA pedig az Ampicillin intermedierje

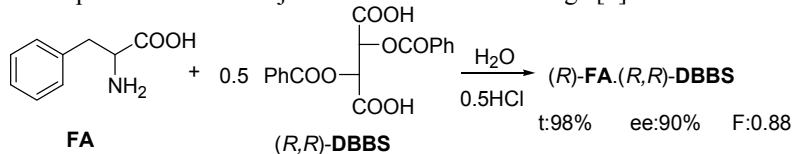


Az Aspartam intermedierjének reszolválási lehetősége [4]

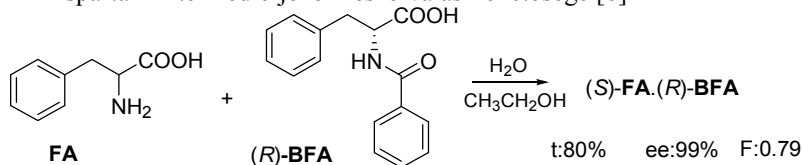


Az Aspartam intermedierjének reszolválási lehetősége [5]

savas karakterű reszolválóágens



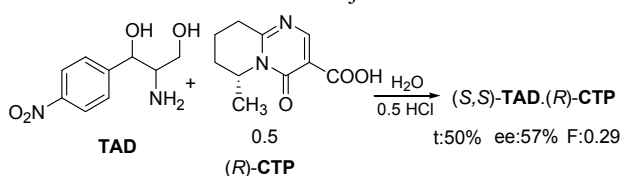
Az Aspartam intermedierjének reszolválási lehetősége [6]



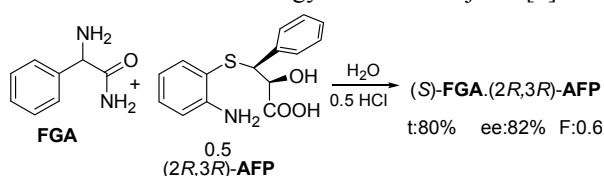
2. RACÉM VEGYÜLETEK RESZOLVÁLÁSA SZABAD ÁLLAPOTÚ AMFOTER KARAKTERŰ RESZOLVÁLÓÁGENSEKKEL

2.1 Bázikus karakterű racém vegyületek reszolválása szabad állapotú amfoter karakterű reszolválóággenssel

A Chlorocid intermedierjének reszolválása a Probon intermedierjével

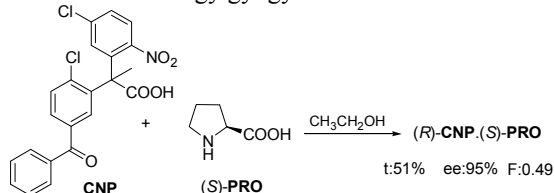


Az Ampicillin intermedier (FG) reszolválása a Diltiazem intermedier egyik enantiomerjével [3]

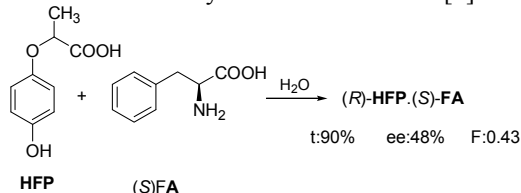


2.2. Savas karakterű racém vegyületek reszolválása szabad állapotú amfoter karakterű reszolválóággenssel

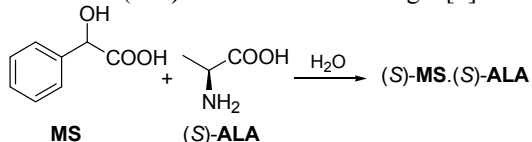
A CNP egy gyógyszer intermedier



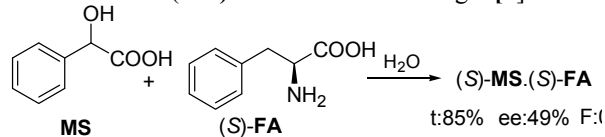
A HFP növényvédőszer intermedier[5]



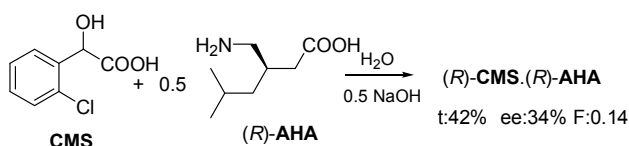
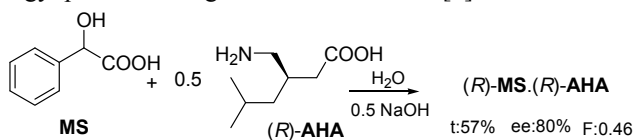
A mandulasav (MS) rezolválási lehetőségei [7]



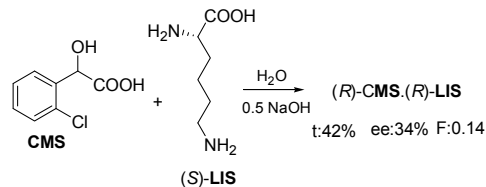
A mandulasav (MS) rezolválási lehetőségei [7]



Egy ipari technológia melléktermékével [8]

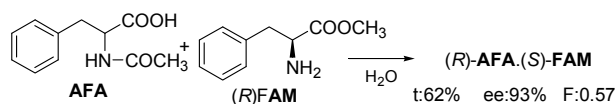
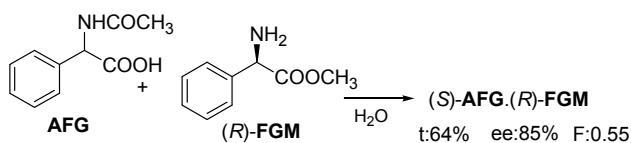


[9]



3. RESZOLVÁLÁSOK, MELYBEN MIND A RACÉM VEGYÜLET, MIND PEDIG A RESZOLVÁLÓÁGENS AMFOTER KARAKTERŰ VEGYÜLET SZÁRMAZÉKA

Aminosavak származékai



Összegezve a bemutatott példákat, úgy véljük, hogy egyre nagyobb számú eredményes rezolválásról számol be a szakirodalom, melyek közvetlenül amfoter karakterű vegyületeket rezolválnak, vagy amfoter karakterű rezolválóágensokat használnak. Bízunk benne, hogy a bemutatott példák jól érzékeltetik az amfoter karakterű vegyületek esetében a királis-királis felismerés lehetőségeit és gyakorlati előnyeit. Az 1970-es évektől évről évre több ilyen példát írnak le.

Az eredmények értékelésénél azt is figyelembe kell venni, hogy az amfoter vegyületek közvetlen rezolválási műveletei során megtakaríthatunk két reakciólépést a savas vagy bázikus frakció erősítését, majd a származékok elbontását. Értelemszerűen választhatjuk a Pasteur, a Pope és Peachy, ill. a Marckwald féle felismeréseket a megfelelő diasztereomerek frakcionált kristályosításakor. Figyelemreméltó, hogy a bemutatott példák túlnyomó részében (16-ból 14 esetben) a diasztereomerek frakcionált kristályosítása vizes, vagy vizet tartalmazó oldószerből történhet. A diasztereomerekből elkülönített enantiomerek tisztasága magas. Ugyancsak említésre méltó, hogy a rezolválás eredménye, az F faktor is sok esetben jó (10 esetben az $F \sim 0,5$). Csoportunk kísérleti tapasztalatai (14 esetben) alapján úgy véljük, hogy a diasztereomerek elbontását követően az elválasztott enantiomer (keverék) és a rezolválóágens jól elkülöníthető egymástól is. Szükség esetén az amfoter karakterű rezolválóágens gazdaságosan reagáltatható.

Végül úgy véljük, hogy a királis-királis felismerés alkalmazásának az amfoter vegyületek részvételével bemutatott módszerei ezeknek a kölcsönhatásoknak az értelmezésében is segítséget nyújthatnak.

Megállapíthatjuk, hogy az amfoter karakterű vegyületek rezolválhatóak mind szabad állapotban mind pedig savas illetve bázikus karakterű származékká alakítva, ugyanakkor ezen vegyületek enantiomerjei alkalmassak különböző savas illetve bázikus karakterű racém vegyületek elválasztására is. Amellett, hogy az enantiomerek biztos rezolválóágensnek bizonyulnak a rokon molekulászerkezetű racém vegyületek elválasztásánál, ezek nem toxikusak, és alkalmazásukkal nem terheljük sem az élő szervezeteket sem pedig a környezetünket.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetet mondanak az OTKA (T 75236) által nyújtott támogatásért.

IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] a). Jaques, J.; Wilen, S.H.; Collet, A.: *Enantiomers racemates and resolution* Wiley-Interscience, N.Y. 1881.
b). Sheldon, R.A.: *Chirotechnology*, Marcel Dekker Inc. N.Y (1993).
c). Kozma, D.: *Optical resolutions via diastereomeric salt transactions*, CRC Press London (2002).
- [2] a). Fogassy, E.; Nógrádi, M.; Pálovics, E.; Schindler, J. *Synthesis*, 10, 1555, (2005).
b). Fogassy, E.; Nógrádi, M.; Kozma, D.; Egri, G.; Pálovics, E.; Kiss, V. *Org. Biomol. Chem*, 16, 3011, (2006).
c). Faigl, F.; Fogassy E.; Nogradi M.; Pálovics E.; Schindler, J.; *Tetrahedron:Asymmetry* 4, 519, (2008).
- [3] Aracs J., Berki K., Fogassy E., Gizur T., Harsányi K., Tőke L., Ács M., Mártonfyné Jászay Zs.: HU Pat.204774 (1989)
- [4] R. Soós, E. Fogassy, J. Gressay, A. Erdélyi, Hu Pat. 165115, (1974)
- [5] F. Faigl, E. Fogassy, M. Ács, HU Pat 193200 (1984)
- [6] F. Faigl, E. Fogassy, M. Ács, HU pat 193199 (1984)
- [7] E. Fogassy, E. Pálovics, Zs. Szeleczky, Hu Pat. P1200227 (2012).
- [8] J. Bálint, M. Csatáriné Nagy, Z. Dombrády, E. Fogassy, A. Gajáry, C. Suba, PCT Patent No. 03/000636, (2001)
- [9] E. Pálovics, J. Schindler, F. Faigl, E. Fogassy, *Compreh. Chir.*, ISBN: 9780080951676, Vol. 8, (2012), pp-91-97.

A gépgyártási technológiák számítógépes fejlesztése

The Development of Computer Technologies in Machine Building

Dezvoltarea informatică a tehnologiilor în construcții de mașini

SZÉL Sándor, SZÁLLASI [Dzița] Mirela

Nagyvárad Egyetem

ABSTRACT

Based on the characteristics of Manufacturing Engineering we have analyzed those elements which make the operative planning and the process control difficult during the manufacturing process.

In the first part of the development we have created a component-level production time calculation algorithm, which in the production phase with the help of the development given partial sums, in connection with the production element, it will give almost at on-line speed the actual parts' production time and suggested starting time, without the need of the time-consuming calculations at the operational level

Regarding the production control it is important the computer handling of the product structure. Starting from this point of view we have developed a database structure for the products' structural build as well as created a query program which is competitive on an international level due to its simplicity and speed. These improvements support the computer-aided manufacturing processes as well as the development of an operative control system with recalculations where/when necessary. This solution can be applied for any discreet technology (machinery, light industry, food industry, electrical appliances, etc.) but we can achieve a serious advantage in the case of multi-operation or the series production of products with multiple parts.

ÖSSZEFOGLALÓ

A gépgyártási technológiák sajátosságaiból kiindulva elemeztük azokat az elemeket, amelyek a gyártási folyamatok keretében megnehezítik az operatív szintű tervezést, a folyamatok vezérlését.

A fejlesztés első részében megalkottunk egy alkatrész-szintű gyártási idő számítási algoritmust, amely a tervezésnél megadott bizonyos részösszegek segítségével, a gyártási szakaszban, a gyártási tétel függvényében szinte on-line gyorsasággal megadja az alkatrész gyártási idejét, javasolt kezdési időpontját, anélkül hogy szükség lenne a műveleti szintű időigényes számításokra.

A gyártásvezérlés szempontjából fontos a termékszerkezet (felépítési struktúra) számítógépes kezelhetősége. Ebből a szempontból kiindulva kifejlesztettünk egy adatbázis struktúrát a termékek szerkezeti felépítésére, valamint megalkottunk egy lekérdező programot, amelynek egyszerűsége és sebessége nemzetközi szinten is versenyképes.

Ezek a fejlesztések lehetővé teszik a gyártási folyamatok számítógépes támogatását, akár egy operatív szintű kontroll-rendszer kifejlesztését, szükség szerinti újraszámításokkal.

A megoldást alkalmazhatjuk bármely diszkrét technológia esetére (gépipar, könnyűipar, élelmiszeripar, villamos gépek, stb.), különös előnyt a sok művelettel rendelkező, vagy sok alkatrészből álló termékek sorozatgyártásánál érünk el.

1. BEVEZETŐ

A gépgyártási technológiák két fontos célkitűzése a hatékonyság és a minimális gyártási idő. Ezen elemek fontossága még nagyobb a sorozatgyártás esetében.

A technológia tervezésénél mindig egy gyártási tételt (darabszámot) vesznek figyelembe, amit később más tétellekkel, újabb megrendeléseknél nem tudnak betartani. Ezért zavar keletkezik a gépek és munkacsoportok leterhelésében, megszakítások és holtidők jelennek meg a műveletek között, kiegészítő idővesztések jelennek meg az újabb szerszámok és eszközök cseréjével. Ugyanakkor a műveletek közötti tétel megváltásával, hatékonyatlanná válik a műveletek közötti szállítás és raktározás. Újra kéne számítani a műveletek közötti tételre, az új időbeni beosztást, de ez a gépgyártás esetében (nagy számú alkatrészek és műveletek)

nagyon időigényes. Egy új megrendelő esetében nehezen tudjuk megbecsülni a végleges gyártási időt, habár ismertek az újraszámítási módszerek.

2. A FEJLESZTÉS CÉLJA

Az említett rendellenességek kezelésére kidolgoztunk a gyártási ciklus kiszámítására egy új számítási modellt, amely elemei (adatai) nem függenek a gyártási tétel nagyságától, és rögzíthetők (memorálhatók) már a technológia tervezési fokozatában alkatrész szinten. A gyártási fokozatban az újraszámítás egy új tételnek megfelelően, a tétel hozzáadásával azonnal (nagy időspórolással) megoldható, mivel nem szükséges a számításokat műveleti szintre levinni. Számítógépes alkalmazás esetében, szinte on-line eredményeket kaphatunk.

Továbbá, támogatván a számítógépes gyártási termelésirányítást, a sorozatgyártás számára kidolgozunk egy struktúrát a termékek egy faszerkezetű adatbázisába való memorálására, valamint egy nagysebességű algoritmust a faszerkezetű adatbázis lekérdezésére, amely az alkatrész szintű komponenseket darabszám szerint bontja le a gép strukturális felépítésének megfelelően. Ez a módszer a megrendelés üzembe helyezésére is alkalmas, automatikusan kiszámítván a szükséges alkatrész darabszámokat, összeköthető a munkalapok listázásával, valamint a szükséges nyersanyagok és más kellékek raktári iránti igénylési lapjaival. A nagy sebességű algoritmusok nemzetközi szintű fejlesztések.

3. A MEGVALÓSÍTÁS

Minden alkatrésze ismertek a belső műveleteknek megfelelő előkészületi idő, gyártási egységidő, a szállítási idő, a munkagép és szerszámtípus, stb. A technológia tervezésénél ezekből az információkból alkatrész szinten rögzíthetők úgynevezett részösszegek, amelyek nem függenek a tétel nagyságától. Ezek segítségével később a gyártási folyamatok keretében, bármely megrendelés estén a rendelési tétel megadásával azonnal kiszámítható a gyártási össz-idő, a műveletekre való lebontás nélkül, amely nagy időnyerességet jelent.

A ciklusszámítási módszer biztosítja a műveletek közötti holtidők minimalizálását, a gépek és munkacsoportok terhelésének növelését, csökkenti a megszakítások számát, a megfelelő ideiglenes szerszám cserét. Ugyanakkor a folyamatban lévő műveletek közötti tételek nagyságát is szabályozzuk, csökkennek a raktározási költségek.

A kutatásban megadjuk a faszerkezetű termékszerkezet felépítését, valamint a lebontási algoritmust a megrendelési termékkód szerint. A módszer a megrendelés üzembehelyezési műveletein kívül (anyag és munkalapok, darabszám kiszámítás, gép és munkacsoport, stb. megnevezés), használható más számítások automatizálására is, gép és munkacsoport terhelések, művelet szintű termelési ütemezés stb. fejlesztésére.

3.1. Az alkatrészsintű gyártási idő kiszámítása

Jelölések:

L - a gyártási tétel (darabszám)

EI_i – az i művelet előkészítési ideje

SZI_i – az i művelet utáni szállítási és várakozási idő

FI_i – az i művelet feldolgozási egységideje (1 darab)

FI_n – az n művelet, az alkatrész utolsó művelete feldolgozási egységideje

C₁ – az első részösszeg alkatrész szinten

C₂ – a második részösszeg alkatrész szinten

C₃ – az egymásba szerelendő alkatrészek időeltolódása

I – az L darab alkatrész gyártásának őszideje

LH_{j-1} – a j-1 szintű alkatrész leghamarabbi kezdési ideje a j szintű kapcsolódó alkatrészek függvényében.

Ezek szerint alkatrész szinten kiszámíthatjuk és memorálhatjuk a következő értékeket:

$$C_1 = \sum_{i=1}^n (EI_i + SZI_i + FI_i)$$

$$C_2 = FI_n + \sum_{i=2}^n (FI_{i-1} - FI_i)$$

$$FI_{i-1} > FI_i$$

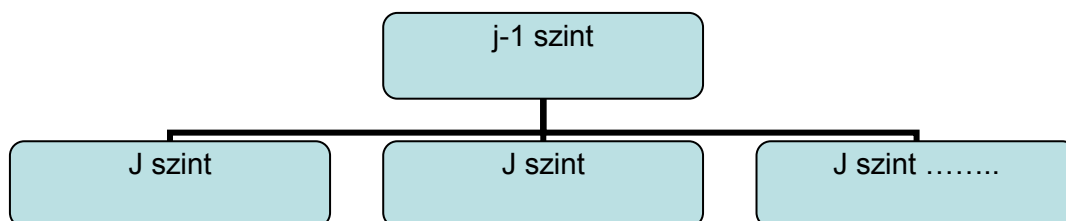
$$C_3 = (FI_{n,j} * j \text{ szintű strukturális darabszám} - FI_{1,j-1})$$

Ha a C_1, C_2, C_3 részösszegeket memoráljuk a technológiai előkészítés szintjén alkatrészenként, a gyártás beindításánál hozzáadva az L gyártási tételt (darabszámot), alkatrész szinten kiszámítható a gyártási össz idő, valamint a legkorábbi kezdési idő :

$$I = C_1 + (L - 1) * C_2$$

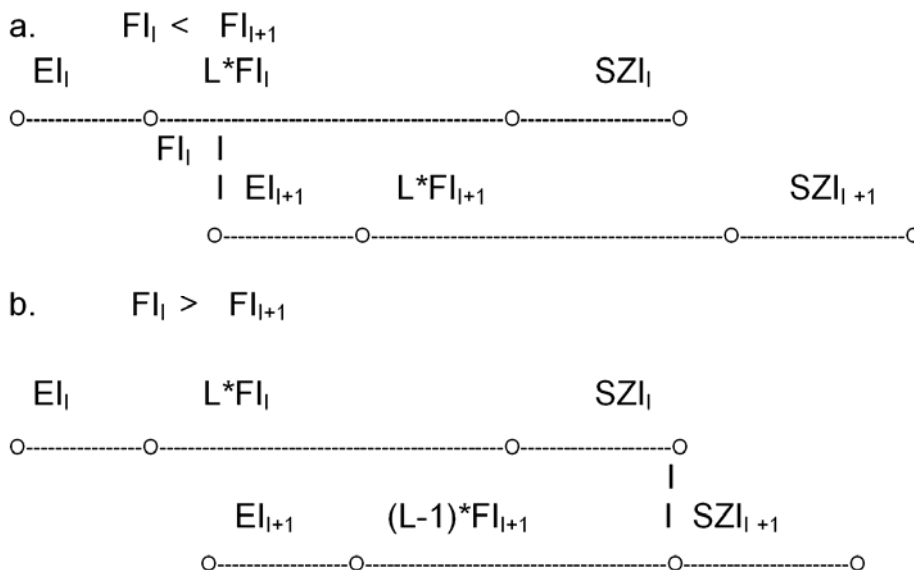
$$LH_{j-1} = \max_{r \in j} (LH_j + IV_j) \quad J > 1, \text{ r a j-1 szinthez kötődő alkatrészek halmaza}$$

$$IV_j = C_{1,j} + (L_j - 1) * (C_{2,j} - C_{3,j-1})$$



A gyártási fázisban már alkatrész szinten kiszámítható az I gyártási össz idő az ismert L darabszámra, valamint a legkorábbi kezdési idő alkatrészenként, végül megkapjuk a megrendelt termék gyártási idejét. Egy számítógépre implementált technológia esetében, utólag kiszámíthatók a leterhelési adatok munkahelyenként, egy következő fázisban a túlterhelések elemzésekor módosíthatók a kezdési időpontok (késleltetés, vagy kapacitás növelés, stb.). Nem lévén szükség a művelet szintű számításokra (a számítások alkatrész szinten történnek), a gyártási fázisban nagy a számítási idő megtakarítás, a termelésirányítás valós időben kivitelezhető pontos számításokkal a fenti képletek alapján.

A várakozási idők minimalizálása érdekében a megoldások figyelembe veszik azt a nemzetközi tapasztalatot, miszerint ha egy hosszabb idejű művelet után egy rövidebb idejű művelet következik, a következő művelet elkezdését eltolják, hogy az L darabszámú tétel gyártását folytonos időben biztosítsák. Példaképpen mutassuk be a két esetet:



Hasonlóképpen cselekszünk az alkatrész első művelete és az ehhez kapcsolódó következő szintű alkatrész utolsó művelete között. (lásd a C_3 képletét).

Megemlítjük, hogy a termékek felépítését egy faszerkezetű adatbázis segítségével a következő alpontokban tárgyaljuk, megadván az adatbázis lekérdezésére szükséges programot is.

3.2. A faszerkezetű adatbázis szerkezete (struktúrája)

A struktúra felépítése:

STR.DBF

SOSSZETETT N 13

SOSSZETEVO N 13

SSZINTMENY N 10.3

SFELBONTAS C 1 (Igen, Nem)

Egy példa a relációs adatbázis leírására:

1								0 SZINT
2		3		4		5		1 SZINT
6	7	8	9	10	11	12	13	2 SZINT

SOSSZETETT	SOSSZETEVO	SSZINTMENYISEG	SFELBONTAS
1	2	2	I
1	3	3	I
1	4	2	I
1	5	4	I
2	6	2	N
2	7	3	N
3	8	2	N
3	9	3	N
4	10	2	N
4	11	3	N
5	12	2	N
5	13	3	N

A struktúra adattár lekérdezési módja lehet random típusú az SOSZETETT kulcs szerint, valamint szekvenciális az SOSSZETETT + SOSSZETEVO szerint.

3.3. A faszerkezetű adatbázis lekérdezése

A lekérdezés szempontjából egy, a rendeléseket tartalmazó file-ból indulunk ki, amely tartalmazza a termékek kódját és a gyártandó mennyiségeket:

RENDELES.DBF

RTERMEKKOD N 13

RMENYISÉG N 9.3

A lekérdezés eredményeképpen leírunk egy kimenő file-t

KIMENET.DBF

KOSSZETEVO N 13

KMENYISEG N 9.3

KSZINT N 4

KSZINTMENY N 10.3

KFELBONTAS C 1 (Igen, Nem)

KOSSZETETT N 13

Az 1. számú mellékletben megadjuk a lekérdezési algoritmust működőképes program formájában. A nagysebességű algoritmus vetekszik a legmodernebb nemzetközi megoldásokkal, különösképpen egyszerűsége és nagy sebessége teszi versenyképessé.

A szekvenciálisan olvasott RENDELÉS file minden R-OSSZETEVO kódjának megfelelően, random kulccsal belépünk a STR struktúra file-ba, majd szekvenciálisan olvasva tovább a STR file-t mindaddig amíg a SOSSZETETT = RTERMEKKOD, a fa összes ágaival – amelyek megfelelnek a fenti feltételnek és amelyeknek van felbontása, (SFELBONTÁS="I") –, feltöltünk egy verem-memóriát, kiszámoljuk a komponensenkénti rendelésnek megfelelő mennyiséget (mindaddig amíg az SFELBONTÁS ≠ "N"). Ezek után sor kerül a verem kiolvasására és a KIMENET file írására mindaddig, míg minden verem adatot feldolgozunk. Pár gyakorlati tesztelésben elégségesnek bizonyult egy 400 mélységű verem.

A KIMENET file minden bejegyzése szerint az alkatrész (komponens) kóddal és a K-MENYISÉG-el (mint L gyártási tétellel) ha visszatérünk a 3.1 pontban leírt algoritmushoz, egy memorált technológia segítségével, amely tartalmazza a C1, C2, C3, részösszegeket, operatív módon bármely gyártási időszakra újraszámíthatjuk nagy sebességgel az alkatrészek kezdési időpontját, valamint a termékek gyártásának időtartamát.

1. Számú melléklet, program a faszerkezetű adatbázis lekérdezéséhez

```

CLOSE ALL
CLEAR
SET TALK OFF
WW=' '
DO WHILE WW#'I'.AND.WW#'N'
@4,4 SAY ' faszerkezetű adatbázis lekérdezés(I/N):' GET WW PICT 'X'
READ
ENDDO
IF WW='I'
MOSSZETETT=0
MMENYISEG=0
MSZINT=0
POSSZETETT=0
P=1
F=0
I=1
DECLARE SPT(400)
DECLARE VOSSZETEVO(400)
DECLARE VMENYISEG(400)
DECLARE VFELBONTAS(400)
DECLARE VSZINT(400)
DECLARE VSTERIL(400)
DECLARE VOSSZETETT(400)
DECLARE VSZINTMENY(400)

DO WHILE I<401
VOSSZETEVO(I)=0
SPT(I)=0
VFELBONTAS(I)='N'
VSZINT(I)=0
VSTERIL(I)=' '
VOSSZETETT(I)=0
VSZINTMENY(I)=0
I=I+1
ENDDO
USE KIMENET EXCLUSIVE
ZAP
USE RENDELES ORDER RTERMEKKOD IN 1
USE STR ORDER STR IN 2
USE KIMENET IN 3
SELE 1
DO WHILE .NOT.EOF()
WPT=0
NRCP=0
NRPT=0
MOSSZETETT=RTERMEKKOD

```

```

MMENYISEG=RMENYISEG
MSZINT=0
P=1
VSZINT(P)=MSZINT
VFELBONTAS(P)='I'
VSTERIL(P)='I'
POSSZETETT=1
F=0
    DO WHILE P>0
        SELE 2
        SET EXACT OFF
        SEEK STR(MOSSZETETT,13)
        IF .NOT.FOUND().and.VSZINT(p)#0
            @ 4,4 SAY 'OSSZETETT HIANYZIK A STRUKTURABOL : '+STR(MOSSZETETT,13)+
STR(WPT,13)
            WAIT ' '
            VFELBONTAS(P)='N'
            P=0
        ELSE
            DO WHILE STR(SOSSZETETT,13)=STR(MOSSZETETT,13).AND..NOT.EOF()
                P=P+1
                SPT(P)=NRPT
                VOSSZETEVO(P)=SOSSZETEVO
                VMENYISEG(P)=SSZINTMENY * MMENYISEG
                VSZINTMENY(P)=SSZINTMENY
                VSZINT(P)=MSZINT+1
                VFELBONTAS(P)=SFELBONTAS
                VOSSZETETT(P)=A->RTERMEKKOD
                VSTERIL(P)='N'
                SKIP
            ENDDO
            VSTERIL(POSSZETETT)='I'
            F=0
            DO WHILE P>0.AND.F=0
                IF VFELBONTAS(P)='I'.AND.VSTERIL(P)='N'
                    WPT=SPT(P)
                    MOSSZETETT=VOSSZETEVO(P)
                    MMENYISEG=VMENYISEG(P)
                    MSZINT=VSZINT(P)
                    POSSZETETT=P
                    F=1
                ELSE
                    SELE 3
                    APPEND BLANK
                    REPLACE KOSSZETEVO WITH VOSSZETEVO(P)
                    REPLACE KMENYISEG WITH VMENYISEG(P)
                    REPLACE KSZINT WITH VSZINT(P)
                    REPLACE KFELBONTAS WITH VFELBONTAS(P)
                    REPLACE KSZINTMENY WITH VSZINTMENY(P)
                    REPLACE KOSSZETETT WITH VOSSZETETT(P)
                    P=P-1
                ENDIF
            ENDDO
        ENDIF
    ENDDO
    SELE 1
    SKIP
ENDDO
ENDIF
CLOSE ALL
CLEAR
RETURN

```

4. A kutatás továbbvitelének a lehetősége

A megoldást alkalmazhatjuk bármely diszkrét technológia esetére (gépipar, könnyűipar, élelmiszeripar, villamos gépek, stb.), különös előnyt a sok művelettel rendelkező, vagy sok alkatrészből álló termékek sorozatgyártásánál érünk el.

A megvalósítást támogatta az MTA DOMUS 2013 évi kutatási programja.

Könyvészet

- [1] Szél Alexandru – Soluții de modelare performante privind fabricația asistată de calculator în ramura construcțiilor de mașini- INFOTEC ' 88 București pag.150-153.
- [2] ORACLE-ORDO Kézikönyv - Compagnie Internationale pour l'Informatique-1973
- [3] Ladislau Németi – Metode euristice de ordonantare a fabricației – Editura Dacia Cluj 1977.