

Kiemelten sikeres kutatások

1. Atommagok adatait és átalakulásait leíró adatbázis és számítási eljárások

A hétköznapi emberek többsége hallott már a villamos energia termelésében fontos szerepet játszó atomreaktorokról, vagy a gyógyászatban alkalmazott radioizotópok jelentőségéről. Kevesen tudnak a radioizotópok és a magreakciók iparban vagy a nukleáris asztrofizikában betöltött szerepéről. Még kevesebben tudnak a fenti magfizikai alkalmazások alapjául szolgáló, közel egy évszázadot felölelő tudományos munkákról és az ezen idő alatt kísérletekkel összegyűjtött hatalmas mennyiségű atommag adatról, az adatok megértését és rendszerezését elősegítő elméleti modellek mibenlétéről.

Az utóbbi időben a magfizika támogatása jelentősen csökkent, elsősorban a hétköznapi emberekben kialakult ellenérzés következtében. Ennek a folyamatnak köszönhetően jelentősen lecsökkent a kísérletek száma, amivel párhuzamosan nőtt a kísérleteket pótló elméleti számítások mennyisége és minősége.

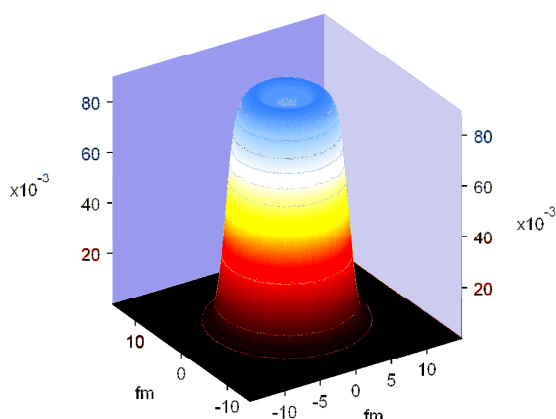
A Nemzetközi Atomenergia Ügynökség (NAÜ) felismerve az adatok és a hozzájuk kapcsolódó ismeretek eltűnésének veszélyét, 1994-ben útjára indította a "Referencia adatkönyvtár az atommag-reakció számolásokhoz és atommagadat értékeléshez" elnevezésű koordinált kutatási projektjét, amelynek feladata az adatok, az adatértékelési eljárások és a számításokhoz szükséges programok összegyűjtése, a programok adatkönyvtárral összehangolt működésének megteremtése és az adatok validálása. A NAÜ munkatársai által koordinált munkában négy kontinens legkiválóbb szakemberei vettek részt. A 15 éves munkájuk eredményét, az összefoglaló magadatokat a szakterület legfontosabb folyóiratában közzé tették [1].

A 107 oldalas publikáció részletes leírást ad a munka során összegyűjtött és validált kb. 9000 mag adatairól, a felhasznált számítási módszerekről. A könyvtár 7 szegmensből áll. A **tömeg** szegmens alapállapotú magadatokat tartalmaz az összes említett atommagra, beleértve háromféle elméleti modellel számított, és a legfrissebb mért magtömegeket is. A **diszkrét atommagszint** könyvtár 117 elemi adatsort tartalmaz mintegy 2500 kísérletileg megvizsgált atommagra. Az adatsorok diszkrét nívókat és ezek bomlási tulajdonságait (elektromágneses és részecske) tartalmazza. A **neutron rezonancia** szegmens az átlagos rezonancia paramétereket foglalja össze. Az **optikai modell** könyvtár 495 paramétersort tartalmaz a mellékelt magmodell programok által önműködően beolvasható formában, amellyel széles energiatartományban írhatók le az atommag-reakciók hatáskeresztmetszetei. A **nívósűrűség** szegmens fenomenologikus modellek paramétereit és mikroszkopikus számítások eredményeit tartalmazza. Ez utóbbi esetben kb. 9000 atommagra. A **gamma** könyvtár fenomenologikus gamma-erősségfüggvények adatait foglalja össze. Végül a **hasadási** könyvtár a hasadási gátak és az ezeknél érvényes nívósűrűségek számítási módszerét írja le.

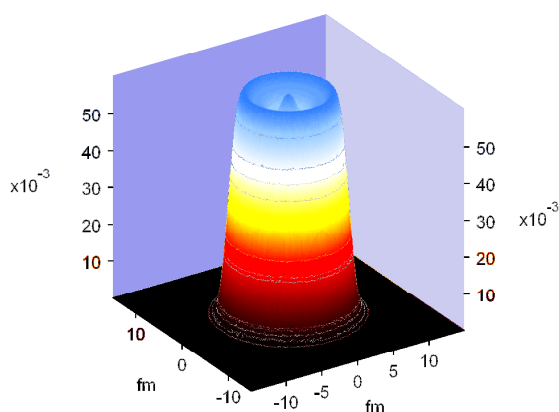
Az adatbázis és az azt leíró cikk a NAÜ honlapján a következő címen érhető el: <http://www-nds.iaea.org/RIPL-3/>

Az adatkönyvtár elkészítéséhez az Izotópkutató Intézet munkatársai különböző magmodell és nukleáris reakciószámítási eljárások kidolgozásával és alkalmazásával járultak hozzá.

Illusztrációként két látványos ábrát mutatunk be, amelyek az ólom atommagjában a neutronok, illetve a protonok sűrűségeloszlását mutatják be. Az ábrák az adatbázisból egyszerűen letölthető adatok felhasználásával készültek.



A Pb-208 atommag neutronsűrűsége a mag középpontjától mért távolság függvényében

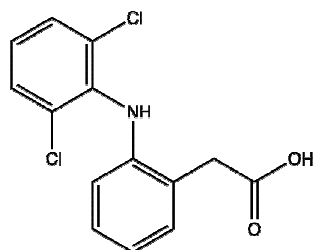


A Pb-208 atommag protonszűrűsége a mag középpontjától mért távolság függvényében

- [1] Capote, R., M. Herman, P. Oblozinsky, P.C. Young, S. Goriely, T. Belgya, A.V. Ignatyuk, A.J. Koning, S. Hilaire, V.A. Plujko, M. Avrigeanu, O. Bersillon, M.B. Chadwick, T. Fukahori, Z.G. Ge, Y.L. Han, S. Kailas, J. Kopecky, V.M. Maslov, G. Reffo, M. Sin, E.S. Soukhovitskii, and P. Talou, *RIPL - Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations*. Nuclear Data Sheets, **110**(12), 3107-3213 (2009).

2. Szennyvízkezelés nagyenergiájú sugárzással

A bioaktív vegyületek, például gyógyszermolekulák, illetve azok metabolitjai a szennyvíztisztítóban alkalmazott hagyományos módszerekkel (mechanikai elválasztás, biológiai kezelés) nem bonthatók le teljesen. Ezek a vegyületek a tisztított szennyvízzel, ugyan csak nyomnyi mennyiségben, mégis az élővizetekbe kerülnek, ahol jelenlétük és bizonyos esetekben a hatásuk is kimutatható. Az ionizáló sugárzásos kezelés alkalmas a szennyező molekulák lebontására. A szennyvíztisztítókból kifolyó víz utókezelésével lebonthatók a benne maradt nem kívánatos szerves anyagok, egyúttal az élővizetekbe bocsájtandó víz fertőtlenítése is megtörténik, kiváltva ezzel a jelenleg alkalmazott klórozást.

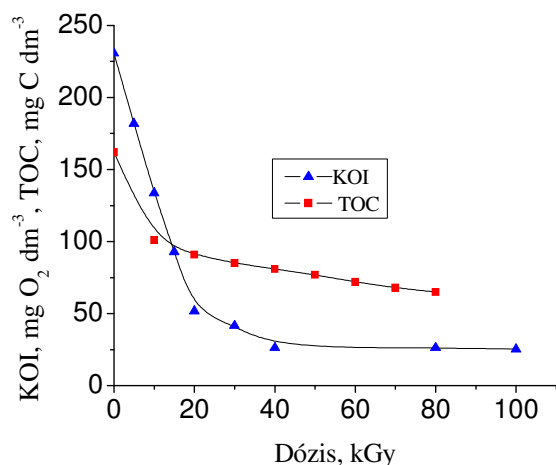


Diklofenák (DCF)

Az egyik leggyakrabban alkalmazott gyulladásgátló, fájdalomcsillapító molekula a diklofenák sugárzásos úton, gyorsított elektronokkal (EB), illetve gammasugárzással nagy hatékonysággal bontható le. A vizes oldat besugárzásakor a vízből keletkező nagyon reaktív köztitermékek a hidratált elektron (e_{aq}^-) és a hidroxilgyök

($\bullet OH$) reagál a vízben oldott diclofenák-kal. Kisebb dózisoknál a $\bullet OH$ addíciónál valamelyik aromás gyűrűre, 2,6-diklór-anilin és quinon típusú vegyületek keletkezése közben, a e_{aq}^- a klóratomot tartalmazó gyűrűre addíciónál. Már kis dózisu besugárzásakor elkezdődik a kiinduló molekulák lebomlása, majd a dózis további növelésével, oxigén jelenlétében a molekulák és elsődleges bomlástermékeik teljes lebontása (mineralizáció) is bekövetkezik. Az 1. ábrán látható, hogy a teljes szerves széntartalom (TOC) már néhány kGy elnyelt dózis

hatására csökken, azaz már kis dózissal elkezdődik a teljes lebontás. A TOC és a kémiai oxigénigény (KOI) jelentős csökkenése azonban csak mintegy 40 kGy elnyelt dózis hatására következik be.

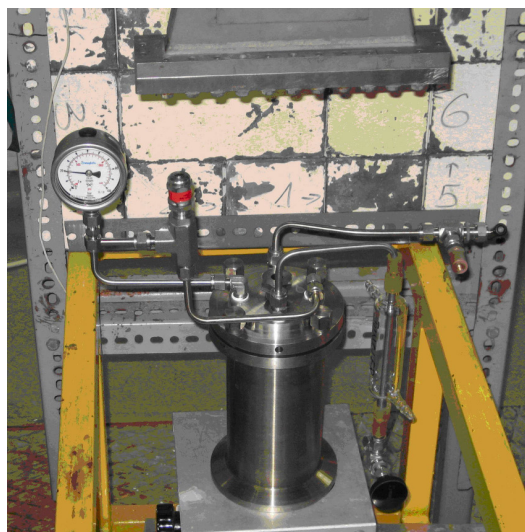


1. ábra

A kémiai oxigénigény (KOI) és a teljes szerves széntartalom (TOC) változása az elnyelt dózissal, levegővel telített, 0,5 mmol dm⁻³ diklofenák oldatban.

A szennyvíztisztítóknál a biológiai kezelés után ~1 kGy elnyelt dózis elegendő ahhoz, hogy a µg dm⁻³ koncentrációjú DCF-et lebontsák és egyúttal a fertőtlenítsék a szennyvizet.

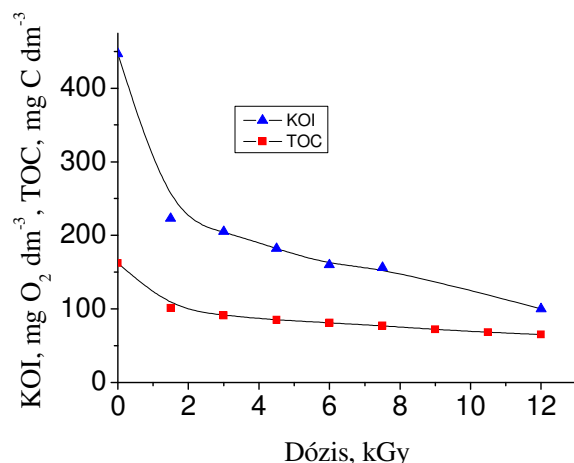
Nagy kihívást jelentenek a környezetvédelem szempontjából azok a szerves vegyületek nagy koncentrációban tartalmazó szennyvizek, amelyek gyógyszergyárakban egyes technológiai lépésekben keletkeznek. Az ilyen szennyvizet elkülönítve kezelik és jelenleg többnyire égetéssel ártalmatlanítják, ami egyrészt nagy energia felhasználása, másrészt az esetleges levegő szennyeződés miatt sem fenntartható megoldás. A sugárzásos kezeléskor a szerves anyagok nagy koncentrációja miatt igen nagy dózissal lenne szükség, ezért az önmagában nem lenne gazdaságos. A nedves oxidáció, ugyancsak hatékony eljárás az erősen toxikus vegyületek lebontására, ennek során viszont nagy hőmérséklet (200-300 °C) és nagy nyomású levegő vagy oxigén (>20 bar), továbbá különleges szerkezeti anyagú készülékek alkalmazása szükséges. Ez utóbbi eljárást félüzemi, folyamatos üzemű berendezésben sikeresen alkalmazták nagy koncentrációjú, toxikus gyógyszergyári szennyvizek kezelésére. Monolit katalizátorral a folyamat sebessége még növelhető, a katalitikus eljárást szabadalmaztatták is.



2. ábra.

A besugárzásos oxidációhoz használt autokláv - fedelén a Ti ablakkal a LINAC elektronsugárzója alatt

A kutatók a két módszert, a nedves oxidációt és az ionizáló sugárzás kombinálták a nagy szervesanyag tartalmú szennyvizek szervesanyag tartalmának lebontására. A 2. ábra a saválló acélból készült, nagy nyomású reaktort mutatja, melynek felül titánlemez ablaka van, amely az elektronsugarakat átengedi. Fölötte az elektrongyorsító kilépő ablaka helyezkedik el, a kilépő elektronok a titánablakon keresztül a reaktorban lévő szennyvízbe jutnak. Az előzőekben leírt módon hidroxilgyökök keletkeznek az oldatban, azaz a gyökkeltés nem termikus, hanem besugárzásos módon történik. A túlnyomásos oxigén és az elektron besugárzással keltett gyökök együttes hatékonysága jelentős mértékben megnő, ahogy azt fenol oldat oxidációjának példáján a 3. ábra mutatja.



3. ábra

A teljes szerves széntartalom (TOC) és a kémiai oxigénigény (KOI) változása az idővel (elnyelt dózis 0-12 kGy) 20 bar oxigénnel, 1,0 mmol dm⁻³ fenolát oldatban.