

A doktori értekezés tézisei

1. A 3–7 szénatomot tartalmazó 1,2– és α,ω –diolok nehézvízes oldatainak kisszögű neutronszórását vizsgáltam széles koncentráció és hőmérséklet tartományban. A mérési eredményekből meghatározott Ornstein–Zernike korrelációs hosszak és a kisszögű szórási görbék jellege alapján megállapítottam, hogy az 5–7 szénatomot tartalmazó diolok aggregátumokat képeznek.
2. Az 1,2–diolok tömény oldatainak ($x_{\text{diol}} > 0,10$) kisszögű neutronszórási képein, szemben az α,ω –diolok oldataival, diffrakációs csúcs jelenik meg, ami hosszabb távú rend kialakulására utal. Meghatároztam a periodicitásra jellemző távolságot a koncentráció és hőmérséklet függvényében. Megállapítottam, hogy a koncentráció növelésével ez a távolság csökken, ami a diol rétegek közötti vízréteg vastagságának csökkenésével értelmezhető. A diffrakációs csúcs helyzete hőmérsékletfüggetlen, maximuma a hőmérséklet emelkedésével csökken, ami az aggregátum fokozatos szétesését jelzi.
3. Az előreszórási intenzitásból kiszámítottam a Kirkwood–Buff integrálokat. Megállapítottam, hogy a diol–diol vonzó kölcsönhatás az 1,2–diolok nehézvízes oldataiban erősebb, mint az azonos szénatomszámú α,ω –diolok oldataiban. A kis koncentrációk tartományában ($x_{\text{diol}} < 0,10$) a vonzó diol–diol kölcsönhatás a molekula szénhidrogénláncának hosszával valamint – a hidrofób kölcsönhatásra jellemző módon – a hőmérséklet emelkedésével nő.

4. A dimetiletilén–karbamid (DMEU) és a dimetilpropilén–karbamid (DMPU) nehézvízes oldatainak kisszőgű neutronszőrési gőrbői alapján meghatároztam a szőró részecskék girációs sugarát. Ennek alapján arra a következtetésre jutottam, hogy mindkét oldatban oldott anyagból álló molekula–párok alakulnak ki a vizsgált koncentráció tartományban (0,005 – 0,05 móltőrt). A DMEU-DMEU molekula–párok stabilabbak, mint a DMPU–DMPU molekula–párok.

5. Az előreszőrési intenzitás értékekből meghatároztam a dimetiletilén–karbamid és a dimetilpropilén–karbamid nehézvízes oldataiban a másodík ozmotikus viriál egyűtthathókat. Azt találtam, hogy – szemben a tetrametil-karbamidra kapott korábbi eredményekkel – a viriál egyűtthathó értéke hőmérséklet független, ami a kölcsőnhadás nem–hidrofób jellegére utal.

6. A dimetiletilén–karbamid és dimetilpropilén–karbamid nehézvízes oldatainak sűrűségmérésí adataiból számított másodík térfogati viriál egyűtthathók értékei azt mutatják, hogy a dimetilpropilén–karbamid molekulák erősebb szerkezetépítő hatást fejtenek ki a molekula környezetében levő vízre, mint a dimetiletilén–karbamid molekulák.