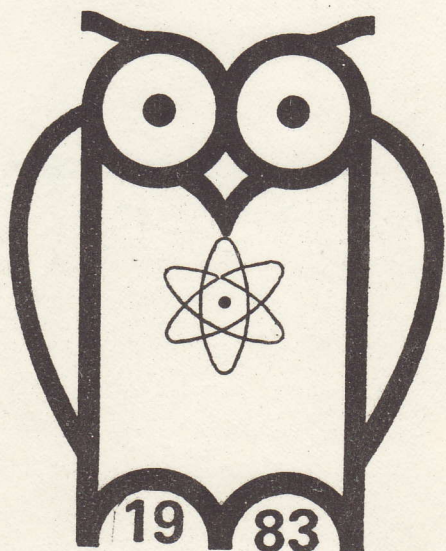


**TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRÖK
XVI. ORSZÁGOS KONFERENCIÁJA
KÉMIAI SZEKCIÓ**



**KOSSUTH LAJOS TUDOMÁNYEGYETEM
DEBRECEN
1983. április 6-8.**

A KÉMIAKUS NEMLINEÁRIS EGYENLETRENDSZEREINEK ÚJ, HATÁSOS
MEGOLDÁSI MÓDSZERE

László Ibolya, Jankó Tamás

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

Vegyipari modellezési feladatok gyakran igénylik nem-lineáris egyenletrendszerek megoldását, például gőz-folyadék egyensúly vagy kémiai egyensúly számításokhoz. Egyenletrendszerek numerikus megoldására számtalan módszert dolgoztak már ki. Általános érvényű algoritmus azonban, amelyik bármely egyenletrendszert bármilyen feltételek mellett megold, nem létezik. Adott típusú feladatok hasonló egyenletrendszerekhez vezetnek, így ezek megoldásához készíthető hatékony algoritmus. Ilyen a dolgozatunkban bemutatott, 1981-ben publikált módszer is, amely általánosan használható a vegyipari modellezésben előforduló feladatok megoldására. Ez az algoritmus egyesíti a két, széles körben elterjedt módszer / a Newton módszer és a gradiens módszer / előnyeit.

Munkánk során először számítástechnikai lehetőségeinkhez igazodva adaptáltuk a cikk alapján az algoritmust. Ezt követően elkészítettük egy adiabatikus kémiai reaktor egyszerű kinetikai, termodinamikai modelljét. A kémiai egyensúly számításához felhasználtuk az általunk készített nemlineáris egyenletrendszer megoldó programot, míg a termodinamikai számításokat az ELTE Kémiai Kibernetikai Laboratóriumban készült fizikai-kémiai tulajdonság-számító eljárásgyűjtemény segítségével végeztük.

OLDÓSZERHATÁS VIZSGÁLATA
A SCHIFF-BÁZISOK AMINC SERÉJÉNÉL

Gulyás Irén

Juhász Gyula Tanárképző Főiskola, Szeged

Az anilingyűrűn szubsztituált N-/2-hidroxi-1-natiliden/-
-anilinek benzil-aminnal lejátszódó amincseréjét vizsgáltuk eta-
nol-benzol oldószerkeletben. A másodrendnek megfelelően számított
sebességi állandók az etanolkoncentráció függvényében jelentősen
nőnek; az etanolban mért érték három nagyságrenddel nagyobb, mint
a benzolban mért érték. Megállapítottuk, hogy a sebességi állandó
és az oldószerkelet összetétele közötti kapcsolat jól leírható
az alábbi egyenlettel:

$$\log k = x_1 \log k_1^* + x_2 \log k_2^* + Bx_1x_2$$

ahol k az oldószerkeletben, k_1^* és k_2^* a tiszta oldószerekben mért
sebességi állandó, x_1 és x_2 az oldószerek móltörtje az elegyben
és B az oldószerkelet összetételétől függő, az oldószerhatást jel-
lemző adat, amely a mérési eredményekből kiszámítható. A vizs-
gált rendszerrel a B érték az etanol aktivitási koefficiensének
lineáris függvénye:

$$B = a + b\chi$$

B és χ között a korreláció igen jó, a korrelációs együttható az
egyes méréssorozatokban 0,999 és 0,997 között változik. Az a és
 b állandók értékét a Schiff-bázis anilingyűrűjén lévő szubszt-
ituens /p-helyzetű H, CH₃, OCH₃, N/C₂H₅/2/ kismértékben befo-
lyásolja / $a = -1,98 \pm 0,27$, $b = 3,86 \pm 0,13$ /. A tapasztalt ol-
dószerhatást az etanol és a reakciópartnerek közötti hidrogén-
kötések kialakulásával értelmeztük.

POLI/BUTÉN-1/ KRISTÁLYOSODÁSÁNAK ÉS OLVADÁSÁNAK KALORIMETRIÁS
ÉS POLÁROPTIKAI VIZSGÁLATA

Lábadi Zoltán

BME Vegyészmérnöki Kar Műanyag és Gumiipari Tanszék

TDK dolgozatom a Műanyag és Gumiipari Tanszéken hosszabb ideje folyó vizsgálatokhoz kapcsolódott, amelyek a poliolefinak kristályosodásával és olvadásával foglalkoztak.

Az irodalomban a poli/butén-1/ módosulatainak keletkezési körülményeiről, rácsszerkezetéről, a kristályosodás és a polimorf átalakulások kinetikájáról található adatok. A vizsgálatokat fénymikroszkóppal, polarizált fényben végeztük.

A PB-1 megvizsgált két módosulatára a szferolitok szerkezet jellemző. Megvizsgáltuk a szferolitok lineáris növekedési sebességét a hőmérséklet függvényében. Az adatok matematikai feldolgozásából a kristályosodás mechanizmusára vonható le következtetés: a PB-1 szferolitjainak növekedése a koherens szekunder göcképződés elméleti modelljével írható le.

Sikerült kimutatni egy szerves szinezék mesterséges göcképző hatását. Ezt adalékolva az ömledékhez az eredeti szferolitok szerkezet helyett az anyag egyedi fibrillákba kristályosodik és a krisztallitok texturája is sokkal finomabb, mint az alappolimerben. Az iparban feldolgozott polimerek termikus és mechanikai előélete befolyásolja a kialakuló morfológiát, ezen keresztül pedig az alkalmazástechnikai tulajdonságokat. Így pl. ömledék állapotban nyíró igénybevételnek kitett PB-1 mintára a cilindritek /hengersizmetrikus agglomerátumok/ jelenléte a jellemző. A cilindrít növekedéséért felalós sorgóc az olvadáspont felett széles hőmérséklet-intervallumban termikus stabil /hasonlóan a polipropilénhez/. Mérsékelt kimelegítések utáni ujrakristályosítás során a cilindrít az eredetivel azonos helyen ujraképződik.

A fentieket kalorimetriás/DSC/ vizsgálatok egészítették ki.

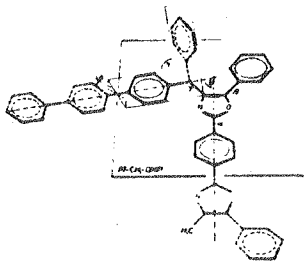
BIFLUORIKUS VEGYÜLETEK TÉRSZERKEZETÉNEK
VIZSGÁLATA KONFORMÁCIÓANALIZISSEL

Bérczi Mihály, Fejes Gábor

Szegedi Orvostudományi Egyetem Orvosi Vegytani
Intézete

A bifluorikus vegyületek, mint igen jó tulajdonságokkal rendelkező lézeranyagok - de mint farmakonjelölt vegyületek is - közismertek. A bennük lejátszódó energiaátadás mechanizmusának meghatározása szempontjából fontos a molekuláris elrendeződésének az ismerete. Ebből a célból elvégeztük az egyik igen sokat vizsgált molekula, a parafenilén-bis [5fenil-4metil (4'paraterfenil) -2oxazol] /PT-CH₂-DMP/ konformációanalízisét. Ezt a viszonylag nagyméretű molekulák paramétereinek gyors kiszámítására is alkalmas Extended Hückel módszerrel végeztük. A számításokhoz standard geometriai adatokat használtunk.

Vizsgálataink azt igazolták, a korábbi feltételezéssel ellentétben, hogy a molekula nem síkbeli elrendeződésű. A stabilis energiaállapot eléréséhez a molekula paraterfenil /PT/ része az ábrán γ -vel jelzett kötés körül /a síkbeli elrendeződéshez képest/ $\pm 90^\circ$ -al elfordulhat. A PT rész a ψ kötés körül 90° -al elfordulva helyezkedik el és ezen egyensúlyi helyzethez képest $\pm 30^\circ$ -os szabad mozgással elfordulhat. Az oxazol gyűrűn elhelyezkedő benzolgyűrű a β kötés körül az oxazol síkjához képest 90° -al elfordulva helyezkedik el, és ezen egyensúlyi helyzethez képest $\pm 60^\circ$ -al szabadon mozoghat. A molekula általunk számított legalacsonyabb energilájú állapotát a következő szögértékekkel jellemezhetjük:
 $\alpha = 0^\circ$; $\beta = 90^\circ$; $\psi = 90^\circ$; $\gamma = 60^\circ$.



D-GLUTAMINSAV TARTALMU ELÁGAZÓ LÁNCU POLIPEPTIDEK
SZINTEZISE ÉS VIZSGÁLATA

Szerző: Mező Gábor IV. éves vegyész hallgató

Témavezetők: Dr.Szekerke Mária és Dr.Hudecz Ferenc

/ ELTE Szerves Kémiai Tanszék /

A gyógyszertervezés új lehetősége jól megválasztott makromolekula - farmakon kombinációk alkalmazása. Így módosítható a gyógyszer felszívódása, eloszlása és biotranszformációja. Makromolekulaként alkalmazható a polilizin alapú, elágazó láncú polipeptidek családja. Az eddigi vizsgálatok szerint az oldallánc végeken elhelyezkedő aminosavak minevége, konfigurációja, töltése és száma befolyásolja mind a polimerek oldatbeli konformációját, mind pedig biológiai tulajdonságait.

Munkám során új, az irodalomban eddig még nem szereplő variánsokat állítottam elő. Lys/Z/-NCA /N-karboxi-anhidrid/ polimerizálásával polilizint készítettem / \overline{DP} =120/. A poly-Lys ϵ -amino csoportjain DL-Ala-NCA felhasználásával alakítottam ki a rövid poly-DL-Ala oldalláncokat tartalmazó polipeptidet /AK/. D-Glu-ból γ -benzilésztert készítettem el. Az aminocsoportot benziloxikarbonil-csoporttal védtem és az α -karboxil csoportot pentaklórifenilészterre alakítottam át /Z-D-Glu/OBzl/-OPCP/. Ezt a származékot kapcsoltam a polipeptid vázhoz /AK/. A dipeptid kialakításához előállítottam a BOC-D-Glu/OBzl/-OPCP-t, amelyhez a BOC védőcsoport eltávolítása után DCC-s módszerrel kapcsoltam a Z-D-Glu/OBzl/-OH-t. A védett dipeptidet aktív észteres módszerrel kapcsoltam a polimerhez /AK/. A védőcsoportokat mindkét esetben HBr/jégeccettel távolítottam el. A célvegyületeket műszeranalitikai módszerekkel sokoldalúan jellemeztem.

AZIDOFORMIÁTOK TERMIKUS CIKLIZÁCIÓJA

Szanyi János

József Attila Tudományegyetem

Szerves Kémiai Tanszék

A heterociklikus szteroidok szintézisét azok a farmakológiai megfigyelések tették indokolttá, amelyek szerint a szteroid váz bizonyos szénatomjaihoz kondenzált szubsztituenek előnyösen változtatják meg az alapvegyület élettani hatását.

A szteránvázhhoz kondenzált heterociklusos rendszerek kiépítésére jó lehetőséget kínál az azidoformiátok termikus reakciója, mivel a nagy energiájú nitrénen keresztül lejátszódó ciklizálási reakció olyan gyűrűanellációjú vegyületek keletkezését teszi lehetővé, amelyek előállítására más úton nem, vagy csak korlátozott mértékben lenne megoldható. Kísérleteink során olyan szteroid azidoformiátok szintézisét valósítottuk meg, amelyek környezetében a legkülönbözőbb szénhidrogén csoportok helyezkednek el. Így lehetőség nyílt arra, hogy a keletkező nagy energiájú nitrén ne csak a könnyen polarizálódó C-H kötéssel, hanem a térbelileg kedvező metilcsoportokkal is reakcióba lépjen.

Az ösztrán, androsztán és pregnánvázas vegyületek néhány származékának klórszénavevésztérét, ennek tovább alakításával azidoformiátját állítottuk elő, majd az ösztránvázas származékok termikus bontását végeztük el. A keletkezett termékeket kromatográfiásan szétválasztottuk. A diszproporcionálódással képződő vegyületeket szintézisükkel bizonyítottuk, a ciklizálással keletkezetteket térkémiai szempontok alapján valószínűsítettük, illetve infravörös spektroszkópiás és NMR vizsgálatok útján azonosítottuk.

13-OXA-KARBACIKLIN INTERMEDIEREK SZINTÉZISE

Dalkó Péter

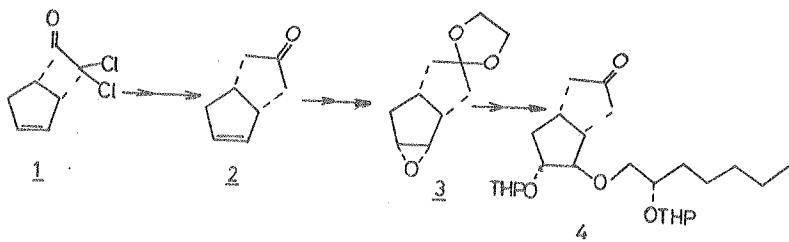
BME Szerves Kémiai Tanszék, 1521 Budapest

A prosztaciklin rendkívül értékes biológiai tulajdonságokkal rendelkezik. Gyógyszerként való elterjedésének azonban legfőbb gátjai: a molekula bomlékonysága, gyors metabolizmusa a szervezetben és komplex hatása.

Ebben a dolgozatban célul tűztük ki egy - várhatóan erős - vérlemezke aggregáció gátló hatással rendelkező stabil molekula intermedierjeinek szintézisét.

Kiindulási vegyületként könnyen beszerezhető racém cisz-3,3-diklór-2-oxo-biciklo /3.2.0./-hept-5-én-t/1/ használtunk, amiből néhány transzformációs lépésen keresztül és a karbonil csoport kelátózásával 2/sikertült eljárást találni a cisz-cisz-6,7-apoxi-3-oxo-biciklo /3.3.0./ -oktán etilénketáljának 3/előállítására. Ez a vegyület a 13. helyzetben heteroatomot tartalmazó karbaciklinek kulcsvegyületének tekinthető.

Az eljárás előnye, hogy sztereoselektív reakcióban képződik a számunkra kedvező cisz epoxid és nem képződik a transz módosulat. A további reakciók során először az alsó láncot építettük ki racém heptándiol segítségével/4/, majd az oxo oxigén védőcsoportjának eltávolításával és a hidroxil csoportok védésével lehetőség nyílt a felső lánc kiépítésére is.



KISÉRLETEK DEZOXI-AMINO CUKROK DEZOXI-AMINO
 CIKLITOLOKKÁ TÖRTÉNŐ ÁTALAKÍTÁSÁRA

Gulyás Gyöngyi V.é. vegyész
 Kossuth Lajos Tudományegyetem, Debrecen

A dezoxi-amino cukrok vizsgálata az antibiotikumkutatás fontos területe, mivel ezen vegyületek az amino-glikozid típusú antibiotikumok építőelemei. A baktériumok egyre nagyobb hányada válik rezisztenssé a fenti szerkezetű antibiotikumokkal szemben is. Ezért az új analogonok előállításának fő iránya a rezisztens köröközők által termelt, és az antibiotikumokat átalakító enzimek támadási helyeinek szubsztitúciója illetve eltávolítása.

Munkánk során kísérleteket végeztünk 3-azido-2,3,6-tridezoxi-hexózoknak aminoglikozid antibiotikum aglikonokká való átalakítására. Erre a célra a közelmúltban közölt Ferrier-féle reakciót használtuk fel.

Igy a metil 3-azido-4-O-benzoil-2,3,6-tridezoxi- β -D-ribohex-5-enopiranozidot acetón-víz elegyben higany/II/kloriddal reagáltatva a transz orientációjú C-4 hidrogén és C-3 azido csoport eliminációjával a 2-benzoiloxi-5-hidroxi-ciklohex-3-enont kaptuk. Ugyanakkor a két említett szubsztituenst cisz relációban tartalmazó metil 3-azido-4-O-benzoil-2,3,6-tridezoxi- α -D-treo-hex-5-enopiranozid azonos reakciója során hasonló eliminációt nem tapasztaltunk és a 2L-2,5/3-3-azido-2-benzoiloxi-5-hidroxi-ciklohexanonhoz jutottunk jó termeléssel.

Az előállított vegyületek szerkezetét ^1H és ^{13}C -NMR, valamint tömegspektrometriás vizsgálatokkal igazoltuk.

2
20-25

9

TECHNOLÓGIAI FOLYAMATOK ELEMZÉSE A GAZDASÁGI ÉS
SZERVEZÉSI TARTALÉKOK FELTÁRÁSÁRA

Bencsik Andrea
Veszprémi Vegyipari Egyetem

A munkának, mint a társadalmi és technikai fejlődés alapvető tényezőjének tudományos igényű elemzése nagy jelentőségű a technológiai folyamatok megfelelő hatékonysága szempontjából. A gazdasági fejlődés intenzív szakaszában különösen fontos a termelő tevékenységben rejlő lehetőségek kiaknázása, szervezéssel. Kutatási munkánkban ezért fordítottuk a figyelmet a tartalékok és veszteségek feltárására.

A dolgozat mondanivalója a következő súlypontokban foglalható össze:

- a technológiai folyamatok elemzésének metodikája
- az elemzések során felhasznált módszerek és technikák
- vizsgálati tapasztalatok

Az elemzési módszer egymástól elhatárolható fázisai a célkitűzés, a helyzetvizsgálat, az elemzés, az alternatívák kidolgozása, és a javaslatok bevezetési feltételeinek vizsgálata.

A kipróbált módszerek közül a műszeres technikák és a speciális elemzési eljárások alkalmazásakor szereztünk kedvező tapasztalatokat.

Az eddig elvégzett üzemi vizsgálataink, elemzéseink során 11-32 % hatékonyság-növekedést értünk el.

ELŐKÉSZÍTŐ VIZSGÁLATOK FERMENTÁCIÓS FOLYAMATOK
ON-LINE DINAMIKUS OPTIMÁLÁSÁHOZ:

ADAPTIV IRÁNYÍTÁSI ALGORITMUSOK

Lovrecz György V.évf. vegyész mérnök hallgató

BUDAPESTI MŰSZAKI EGYETEM

Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

Napjainkban a fermentációs iparok által előállított termékek jelentősége egyre nő, pl. a nagy tömegű egyséjtféherje /SCP/ előállítás valószínűleg megoldást jelentene az egyre növekvő takarmányszükséglet kielégítésében, az antibiotikumok és aminosavak előállításának gyógyszeripari jelentősége pedig jól ismert.

Az alapanyagok és energiahordozók árának növekedése és a konkurrenciára való élesebbé válása miatt szükséges a fermentációs folyamatok optimalizálása. Ez az optimalizálás napjainkban egyre inkább technológiai optimalizálást jelent. E komplex témakör egyik munkahipotézise a folytonos fermentációk on-line optimalizálásának megvalósítása mikroszámítógépek segítségével. Ezen munkahipotézis szerint a fermentációs folyamatváltozók meghatározása, mérése és szabályozása és a fermentációs folyamatot adekvát módon leíró matematikai modell építése után statikus és dinamikus optimalizáló algoritmusokat kell készíteni, majd össze kell kapcsolni a fermentációs berendezést egy on-line működésű számítógéppel.

Dolgozatom az on-line dinamikus optimalizálás és a hozzátartozó matematikai modell építésének témakörét érinti. Megfelelő modellválasztással és az ún. adaptív irányítással elvileg elérhető, hogy a fermentációs folyamat irányítókészülékek optimalizálására, statikus értékkombinációit ne csak a fermentációs folyamat statikus állapotából, hanem dinamikájából is becsülni tudjuk. Ezáltal a kísérletek ideje és vele párhuzamosan a költsége is jelentősen lecsökkenne.

Dolgozatom célja egy olyan algoritmus készítése, amely képes a fermentációs folyamatok on-line dinamikus adaptív irányítására, ill. ennek az algoritmusra épülő programok tesztelése számítástechnikai és fermentációs szempontból egyaránt.

A fermentációs folyamatok adaptív dinamikus optimalizálásának jelenleg még nem teljesen megoldott, sőt ez a problémakör is "fiatal" alig 3-4 esztendő múlva tekinthet vissza.

Dolgozatomban egy kétféle, kétlemlekezős dinamikus modell, az ún. Hammerstein modellt használtam. Ez a modell 13 paramétert tartalmaz, emiatt kell mérésekből becsülni a feladat megoldására. Az algoritmus jelenleg csak 3 paraméteres modell azonosításával képes elvégezni az optimalizáló adaptív irányítást, de a 13 paraméterre is biztató kilátások vannak.

Már az eddigi eredmények is bebizonyították azt, hogy ezzel a módszerrel valóban radikálisan csökkenteni fog a kísérletek ideje, kb. 30-40 órára az eddigi 90-140 óráról.

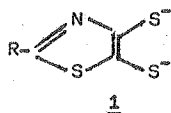
További célkitűzéseim a következők: a program 13 paraméterrel történő sikeres működése után kísérletekkel kívánom igazolni megközelítési módszerem helyességét.

2-ARYL-4,5-DIMERCAPTOTHIAZOLES - A NEW TYPE OF DITHIOLENE
LIGANDS

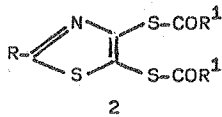
G. RUDOLF, H. U. KIBBEL

Wilhelm-Pieck-Universität Rostock, Sektion Chemie
DDR-2500 Rostock, Buchbinderstr. 9

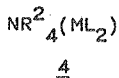
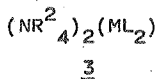
The reaction of sodium cyanodithioformate $\text{NaSC(S)CN} \cdot 3\text{DMF}$ with aromatic aldehydes and aliphatic secondary amines is a simple way to synthesize the disodium salts of 1¹⁾. We found, that acylation of this labile salts yields the stable derivatives 2, which may easily be transformed into the anions 1 by treatment with sodium alcoholates.



R = aryl
R¹ = aryl, alkyl



Reactions of 1 with divalent cations (M = Ni, Pd) in presence of tetraalkylammonium cations lead to coordination compounds 3 (L stands for the anion 1) which are very reactive towards oxidizing agents. In contact with air only complexes 4 with formally trivalent metal ions are obtained. Oxidation by means of iodine gives insoluble compounds 5, which are probably polymeric.



The results of the preparative work as well as the spectroscopic and polarographic measurements are discussed in comparison to the well known chemistry of other dithiolene ligands.

1) H. U. KIBBEL, J. TELLER: DD WP (Reg. Nr. C 07 D 229 566)

FORMATION AND PROPERTIES OF DMF-BROMOTRIMETHYLSILANE
AND DMF-IODOTRIMETHYLSILANE COMPLEXES

R. Wustrack and H. Oehme

Wilhelm-Pieck-University Rostock, DDR-25 Rostock
Buchbinderstraße 9

In recent years iodotrimethylsilane and bromotrimethylsilane have been introduced into organic synthesis as selectively acting agents for the dealkylation of ethers and of carboxylic and phosphonic acid esters. The reaction proceeds through O-silylation of e.g. the ester carbonyl oxygen and nucleophilic splitting of the alkoxy group by the halide anion liberated.

In case of the interaction of carboxylic acid amides with bromotrimethylsilane or iodotrimethylsilane the second step of the mentioned reaction cannot occur and stable carbenium salts are formed, e.g.



The structure of these salts as well as the interaction of these highly electrophilic agents with several types of nucleophiles is subject of the paper. E.g. the dimethylformamide halotrimethylsilane complex proved to be a suitable starting material for the synthesis of aromatic amidines. The amidines are obtained in good yields by subsequent addition of halotrimethylsilane, the aromatic amine and water to DMF. Details of the reactions are given.

OPTIKAILAG AKTIV INDOLO 2,3-a KINOLIZIN SZÁRMAZÉKOK
ELŐÁLLÍTÁSA ÉS OXIDÁCIÓJA

Thaler György,

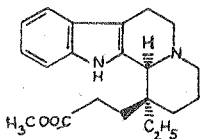
Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémia Tanszék

1111. Budapest, XI. Szt. Celléért tér 4.

A biológiailag aktív indolvázak között kiemelkedő helyet foglalnak el a vinkamin és társalkaloidjai.

Feladatunk a Kőbányai Gyógyszerárnyár által gyártott indolvázak gyógyszerkészítmények közös kulcsintermediéréből, az 1-etil-2,3,4,6,7,12-hexahidroindolo [2,3-a] kinolizin enamból előállított 1-/2-cianoetil/ származékok részletes vizsgálata volt.

A vinkaminszintézisben intermedierként megjelenő /-/-metil-1 α -etil-1,2,3,4,6,7,12,12 β a-oktahidroindolo [2,3-a] kinolizin-1-propionát mellett /1/ megtalálható enantiomerje a /+/-cisz, és diasztereomer racemátja a /+/-transz izomer is az elválasztás anyalugjában.



1

Az anyalugban levő keverék illetve az optikailag tiszta észterek teljes racemizációját, - egyben a közvetlenül nem hasznosítható vegyületek közvetett úton történő újrafelhasználását - sikerrel oldották meg a Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémia Tanszékén.

A mind elméleti mind pedig gyakorlati szempontból érdekes megfigyelés kiterjesztheségét vizsgáltuk az iparilag is realizált reakció körülményei között.



A FLAVONOIDOK UJ TIPUSU ÁTALAKÍTÁSAI

Szegény Zsigmond

Készült a KLTE Szerves Kémiai Tanszékén

A 4-amino-flaván egyszerűbb, esetleg a még ismeretlen 2,4-transz-4-amino-flavánhoz vezető szintézise céljából tanulmányoztuk a flavonoidok redukтив aminálási reakcióit.

I. Leuckart-Walach reakcióval

alacsony hozammal /6.3%/ 2,4-cisz-4-amino-flavánt nyertünk, míg a reakció főiránya egy új vegyülethez, a 2-/2'-hidroxifenil/-4,5-difenil-5H-[1]-benzopirano-[4,3-b]-piridinhez vezetett.

A reakció megvilágosítására ciklohexanonból kiindulva a reakció analógiájára több lépésben, 1-morfolino-ciklohexénon és 1-/2-ciklohexanon/-1,3-difenil-propán-3-onon keresztül előállítottuk a 2,4-difenil-5,6,7,8-tetrahidro-kinolint.

Nagy feleslegben alkalmazott ammónium-acetát és 2'-hidroxi-kalikon felhasználásával

flavanonból 2-/2'-hidroxifenil/-4,5-difenil-5H-[1]-benzopirano-[4,3-b]-piridint,

tiaflavanonból a megfelelő benzotiapiranoszármazékot nyertük.

II. Ammónium-acetát jelenlétében nátrium-ciano-hidrobórattal végzett redukтив aminálással

flavanonból 2,4-cisz-4-amino-flavánt, tiaflavanonból 2,4-cisz-4-amino-tiaflavánt nyertünk jó /57.3%, ill. 53.1%/ hozammal.

Ammónium-acetát helyett metil-amint alkalmazva flavanonból, illetve tiaflavanonból előállítottuk az eddig még nem ismert 4-metilamino-flaván.HCl-ot /10%/, illetve a 4-metilamino-tiaflavan.HCl-ot /63.4%/.

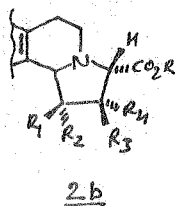
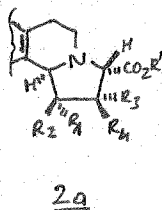
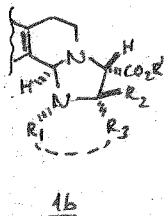
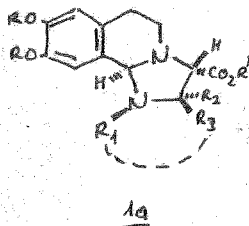
3,3-DIHDRO-6,7-DIALKOXI-IZOKINOLINIUM-ILIDEK CIKLOADDICIÓS
REAKCIÓI

Weber Lutz

BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék 1111 Bp.-Műegyetem rkp.3.

A 3,4-dihidro-6,7-dialkoxi-izokinolinium-ilidek és

C = N ill. C = C kötést tartalmazó dipelarefilek [3+2] típusú cikloaddició reakcióiban egy sor 1a, 1b, ill. 2a, 2b szerkezetű cikloadduktet állítottunk elő. Az adduktok szerkezetét IR, UV-, NMR-spektroszkópiail, esetenként röntgenkristallográfiai vizsgálatokkal határoztuk meg.



A $\pi_5^4 + \pi_5^2$ típusú pályaszimmetria-kontrollált reakciók elméletének megfelelően kvantunkémiai számítások, sztérikus és másodlagos pályakölcsönhatások alapján értelmeztük a reakciók sztereoselektivitási jellegzetességeit, nevezetesen azt a tényt, hogy a dipelarefilek szerkezetétől függően a reakciókban vagy csak egyetlen termék keletkezik, vagy 1a-1b ill. 2a-2b szerkezeti viszonyban álló diasztereomerek keletkeznek.

40-388E

E. 26-18
E-33.

3//

E 16

KÜLÖNLEGES VISELKEDÉSŰ FORMÁLIS KINETIKAI
MODELLREAKCIÓK

Turányi Tamás
Császár Attila

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

Dolgozatunkban vizsgáljuk a zárt rendszerben előforduló csillapítatlan oszcilláció jelenségét. Bemutatjuk, hogy a nyílt rendszerekhez hasonlóan itt is előfordul mind konzervatív, mind határciklusokra vezető oszcilláció. Vizsgálunk egy határciklusra vezető, négykomponensű modellreakciót.

E négykomponensű reakció bővítésével olyan új tulajdonságú modellreakciót állítunk elő, amely indukciós periódus után időleges oszcillációt mutat.

Foglalkozunk egy adott ponthalmazra tartó összetett kémiai reakció előállításával. Ismertetjük az irodalomban fellelt módszereket, majd bemutatunk egy olyan modellreakciót, melynek megoldása nem határciklusra, hanem határhéjra, egy háromdimenziós térbeli alakzathoz tart. Kvalitatív leírását adjuk ezen új kinetikai viselkedésfomának.

Végezetül ismertetjük az általunk kifejlesztett - FORTRAN nyelvű, IBM-3031-es számítógépre - differenciál - egyenlet-rendszer megoldó programot.

2-BUTÉN ÉS IZO-BUTÉN HATÁSÁNAK VIZSGÁLATA
A PROPÁN TERMIKUS BOMLÁSÁBAN

Bozó Éva

JATE, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Szeged, Dóm tér 7.

Szerves vegyületek gázfázisú, termikus bomlása szabad gyökök részvételével lejátszódó láncreakció. A folyamatok sebességét és kinetikai sajátosságait olefinek jelenléte befolyásolja. Ezeknek a lánccvivő gyökökkel való reakcióiban ugyanis más reaktivitású gyökök keletkeznek, megváltoztatják a bomlás gyök-készletének mennyiségét és megoszlását.

Az ilyen jelenségek tanulmányozása végett vizsgáltuk meg a propán termikus bomlását a két olefin szénhidrogén különböző mennyiségű adalékainak jelenlétében. A tapasztalatok értelmezésével az alábbi következtetésekre jutottunk:

Mindkét butén jelentős mértékben inhibálja a propán termikus bomlását. A 2-butén inhibációs hatása nagyobb, mint az i-buténé. Az inhibációt okozó reakciók közül az aktív gyökök olefinre való addíciója kisebb jelentőségű, a bomlásfékezés nagyobb hányadban abból ered, hogy a lánccvivő gyökök olefinről való H-absztrakció révén allil-típusú gyökökbe alakulnak át.

A két olefin inhibációs készsége között lévő (a várttól eltérő) különbség abból ered, hogy az i-butén bomlásában figyelemre méltó gyökkelteni reakciókat mutattunk ki (letörési termékek alapján), ezek a reakciók a vizsgált folyamatban iniciálásnak tekinthetők.

Az elvégzett vizsgálatok alapján sikerült mind az olefinek, mind az együttes bomlások mechanizmusaira kellően megindokolt képet kialakítanunk.

AZ 1-BUTÉN GÁZFÁZISÚ SZELEKTIV OXIDÁCIÓJA $V_2O_5-SnO_2$
KEVERÉKOXID KATALIZÁTOROKON

Hernádi Klára

József Attila Tudományegyetem

Alkalmazott Kémiai Tanszék

Szeged

Az 1-butén katalitikus gázfázisú oxidációját tanulmányoztuk különböző összetételű $V_2O_5-SnO_2$ keverénoxid katalizátorokon, mikrokatalitikus impulzusreaktorban, 523-673 K közötti hőmérsékleten, adott összetételű reakcióelegy alkalmazásával.

A kísérleti munka során vizsgáltuk az oxidkeverék termikus tulajdonságait és az egyes katalizátorok esetén az 1-butén konverzióját és a képződő termékekre vonatkozó szelektivitást. Meghatároztuk, hogy a katalitikus tulajdonságok hogyan függenek a hőmérséklettől és a katalizátor összetételétől.

Az oxidációban acetaldehid, propionsav, metil-etil-keton, butiraldehid képződött nagyobb mennyiségben, s ezek közül kiemelt figyelmet érdemel a mezőgazdasági szempontból igen jelentős propionsav.

Meghatároztuk a propionsav képződés szempontjából optimális katalizátor összetételt és hőmérsékletet; a maximális propionsav termelés V:Sn = 3:1 és 2:1 összetételű keverénoxidokon, 523-598 K hőmérséklettartományban tapasztalható. A propionsav esetén tapasztalt 25-30 %-os szelektivitás meghaladja az irodalomban eddig ismeretes értékeket /3-12 %/.

Néhány részletében elemeztük a reakció mechanizmusát, s megállapítottuk, hogy a katalitikus aktivitás nem hozható összefüggésbe sem az ón-vanadát képződésével, sem a tiszta oxidok jelenlétével. Feltételezhető, hogy a szelektivitásért a V_6O_{13} fázis a felelős, az SnO_2 pedig elősegíti az oxigénnek a termékbe történő beépülését. A V-Sn keverénoxid rendszerek Brønsted savas centrumokat tartalmaznak, s a savasság befolyásolja a katalizátor aktivitását.

ÚJ, CITOKININSZERŰ REGULÁTOROK VIZSGÁLATA

Török Péter

Agrártudományi Egyetem Mg. Kémiai Tanszék, Gödöllő

A szakirodalom szerint a terméshozamok fokozásának és a minőség javításának lehetséges eszközei közé tartoznak a növényi regulátorok. Ezek természetes v. szintetikus hormonok, melyekkel a növényi fejlődés különböző folyamatai befolyásolhatók, szabályozhatók. Előállításuk költség igénye azonban gyakorlati alkalmazásukat eddig hátráltatta. Ezért figyelemreméltó az ÉMV által kifejlesztett két új regulátor /az Sz-11 és Sz-28/, melyek fehérje N szintet, anionfelvételt fokozó, kinetint helyettesítő, citokininszerű és membránaktivitású készítmények.

Munkánkban az új regulátorok eddig még nem tanulmányozott hatásait vizsgáltuk. Ezek a következők:

- csiráztatás laboratóriumi körülmények között /paradicsommag csirázási erélyét és csirázási %-t értékeltük a két szer különböző koncentrációju oldataiban. Ezt követően a csiránövények hajtás- és gyökérhosszuságát, valamint szárazanyag-tömegét mértük./

- dózishatás vizsgálat kistenyészedenyes kísérletben /angolperje vetését követően különböző dózisu Sz-11-es regulátort juttattunk a talaj felszínére. A növények magasságát és zöld tömegét mértük./

Megfigyeléseink szerint a készítmények serkentőleg hatnak a csirázásra és szignifikánsan növelik a hajtások hosszát is. Az eredmények igazolják, hogy a készítmények már kis töménységben is kifejtik kedvező hatásukat talajon keresztül is. Eddigi tapasztalataink alapján az Sz-28-as regulátor jobb hatásfoku s megbízhatóbb, mint az Sz-11.

További munkánkban kisparcellás vizsgálatokat végeztünk, s egyidejűleg mértük a növények leveleinek színanyagtartalmát is.

KECSKEMÉTI BÉBIÉTELEK FEHÉRJE ÉS AMINOSAV
ÖSSZETÉTELÉNEK VIZSGÁLATA

Fizi Rita

Kertészeti Egyetem Tartósítóipari Kar
Konzervtechnológiai Tanszéki Csoport

Ma már természetes, hogy a munkaképes korban levő nők 80%-a dolgozik Magyarországon.

A nők tömeges foglalkoztatása egy új igény megjelenését vonja maga után, a mesterséges csecsemőtáplálást. Éppen ezért fontos, hogy a fő táplálkozások során adott étel mennyisége és összetétele maradéktalanul biztosítsa a csecsemő egészséges fejlődését.

Kísérleti munkám során a kecskeméti üzem által előállított bébiételek összfehérje értékeinek meghatározása mellett hangsúlyozottan az aminosav összetétel vizsgálatával foglalkoztam, valamint a termékeket azon szempontból elemmeztem, hogy mennyiben elégítik ki a csecsemők táplálkozási szükségleteit.

Eredményeimből levonható az a következtetés, hogy a termékek az esszenciális aminosavak zömében rendkívül gazdagok, de ez az aminosav gazdagság a Met rendkívül alacsony értéke miatt csak részben hasznosul.

A fennmaradó mennyiség energiatermelésre fordítódik, vagy kiürül a szervezetből. Ezért megoldást kellene találni arra, hogy a valamennyi termékben limitáló aminosavként szereplő Met mennyiségét akár természetes anyagok kombinációjával, akár szintetikus metionin adagolásával növeljék, vagy a technológiai feldolgozás során a károsodástól nagyobb mértékben óvják. A Met értékének növelése ugyanis a többi értékes esszenciális aminosav jobb hasznosulását eredményezné.

ÖSSZEFÜGGÉSEK A NITROGÉN MŰTRÁGYA MENNYISÉGE ÉS AZ ŐSZI ÁRPA KÉMIAI JELLEMZŐI KÖZÖTT

GERSTMAYER TERÉZ V. ÉVF.

Agrártudományi Egyetem, Keszthely

Kémiai- és biológiai módszerekkel vizsgáltuk a fokozódó N-műtrágya adagok hatását az őszi árpa szemtermésre, fehérje tartalmára, a fehérjék aminosavösszetételére és biológiai értékére, nyersrost, nyerszsír, nyershamu és keményítő tartalmára.

A kapott vizsgálati eredményekből az alábbi következtetéseket lehet levonni:

1/ A növekvő N műtrágya adagok függvényében a termésátlag és a fehérjehozam egy maximumot adó értékig nő, ennél nagyobb adagoknál csökken. A vizsgált fajta és talajviszonyok esetében ez a maximum 80-100 kg összes N, melynek megoszlása 40-60 kg összettel, 20-40 kg fejtrágya tavasszal. A N tartalom szempontjából a 40 kg-os, a minőség szempontjából a 20 kg-os dózis az előnyösebb.

100 kg-nál több N-t az őszi árpa megdőlés nélkül nem bír el, A Camposan alkalmazása kedvezően hat a szemtermésre és a fehérjeprodukciónra is, de a több N felvételére a fehérjefrakcióban megnő a nem fehérje N anyagok aránya, a minőség romlik, az esszenciális aminosavak mennyisége csökken, közülük egyesek limitálónak válnak.

Mivel a B.É. a N növekedésének hatására csökken, mindenképpen szükséges a termesztéstechnológiai paraméterek kidolgozásakor a takarmányértéket is figyelembe venni. Szükség van az optimális N adag meghatározására a takarmánynak felhasznált őszi ápránál, mert a N műtrágyázás hatása a benne levő fehérjék mennyiségére és minőségére nem elhanyagolható.

Témavezető: Dr. Vincze László egyetemi docens



LEVEGŐSZENNYEZETTSÉGI VIZSGÁLATOK

Csathó István

NME VAFK Kazincbarcika, Lenin ut 1.

Az ipar, a mezőgazdaság és a közlekedés levegőt szennyező hatása élő és élettelen környezetünkre egyaránt káros. A helyzet objektív felmérésére általában különleges, nagy érzékenységű eljárásokat kell alkalmazni.

Olyan mérőállomást hoztunk létre intézményünk területén, mely alkalmas kén-dioxid, nitrogén-oxidok és szénhidrogének együttes mennyiségének meghatározására, valamint egy meteorológiai paraméter, a szélirány folyamatos regisztrálására.

További célunk a fontosabb szénhidrogének elkülönített mérésére alkalmas eljárás kidolgozása.

Vizsgálataink érdekesek a mintavétel helyének kiválasztása szempontjából is. Képet adnak Kazincbarcika levegőjének szennyezettségéről.

EGYENSULYI ÉS NMR RELAXÁCIÓS VIZSGÁLATOK Cr/II/-KOMPLEXEK
VIZES OLDATÁBAN

Micskei Károly

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerzetlen és
Analitikai Kémia Tanszék, Debrecen

A kinetikailag labilis Cr/II/-komplexek vizes oldatában végbemenő ligandum és protoncsere folyamatok tanulmányozására jó lehetőséget nyújt a ^1H -NMR spektroszkópia. A vizsgálatok alapfeltétele a rendszerek egyensúlyi állapotainak pontos ismerete.

Az irodalomban található kevés és ellentmondásos adat miatt részletes potenciometriás egyensúlyi vizsgálatokat végeztünk. Meghatároztuk a Cr/II/-ion glicinnel, β -alaninnal, etiléndiaminnal, malonsavval, iminodiacetsavval, nitrilotriecetsavval és EDTA-tal képzett komplexeinek képződési állandóit, és vizsgáltuk a fémion hidrolitikus sajátságát. Más fémkomplexekkel összehasonlítva értelmeztük a kapott egyensúlyi állandókat.

A komplexképződés kinetikáját a Cr/II/-glicin és Cr/II/-malonsav rendszereken tanulmányoztuk. Megállapítottuk, hogy a Cr/II/-mono és diglicinátó komplexek disszociációjuk mértékével arányosan változtatják meg a diamágneses vízprotonok relaxáció sebességét. Ennek oka az, hogy a paramágneses fémion környezetében gyorsan relaxálódó labilis $-\text{NH}_2$ protonok a koordinációs szférából kikerülve a vízzel gyors protoncsere folyamatba lépnek, és a relaxációs hatás a teljes oldószermennyiségre kiterjed. Mivel a relaxáció sebességét a koordinációs szférában maradt vízmolekulák is befolyásolják, ezt a hatást a Cr/II/-malonsav rendszer vizsgálata segítségével vettük figyelembe / nem tartalmaz labilis $-\text{NH}_2$ protonokat /.

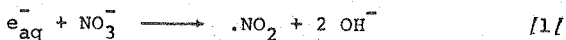
Meghatároztuk a Cr/II/-mono és diglicinátó komplexek képződési és disszociációs sebességi állandók értékeit, amelyek jól értelmezhetőek voltak a Jahn-Teller inverzióval.

CIANID-ION FOTOKÉMIAI REAKCIÓINAK VIZSGÁLATA
ÁTMENETIFÉM-KOMPLEXEK JELENLÉTÉBEN

Zsilák Zoltán

Veszprémi Vegyipari Egyetem, 8201 Veszprém, Pf. 158.

A hidrogén-cianid tömény vizes oldatában ultraibolya fény hatására polimerizációs reakciók játszódnak le. Megfigyelték, hogy átmenetifémek jelenlétében ezek a reakciók már kis cianidkoncentrációnál is végbemennek. Kísérleteink során Cu(I) ionokat tartalmazó oldatokat vizsgáltunk. Mértük a cianidion-koncentrációjának csökkenését a pH, és a megvilágítási idő függvényében. A megfelelő egyensúlyi összefüggések felhasználásával az egyes Cu(I)-cianokomplexek kvantumhasznosítási tényezőinek meghatározására közelítő számításokat végeztünk. Azt kaptuk, hogy a $\text{Cu}(\text{CN})_2^-$ kvantumhasznosítási tényezője 0, a $\text{Cu}(\text{CN})_3^{2-}$ -é a pH-től függően 0-0.3 között változik. Feltételeztük, hogy a reakció során akvatált elektron keletkezik, és ez a reakcióképes részecské döntő szerepet játszik az elsődleges fotokémiai átalakulást követően. Képződésének bizonyítására kísérleteket végeztünk. A $\text{Cu}^+\text{-CN}^-$ -tartalmu oldatainkba megfelelő mennyiségű KNO_3 -ot (10^{-2} mol/l) adtunk. A NO_3^- -ion ugyanis „befogja” az akvatált elektront:



s a $\cdot\text{NO}_2$ további reakcióiban jól detektálható NO_2^- keletkezik:



Kísérleteinket elvégezve a besugárzott reakcióelegyeinkben NO_2^- -t mutattunk ki, melynek mennyisége arányos az elsődleges fotokémiai reakció kvantumhasznosítási tényezőjével.

AZ ÁTMENETIFÉMIONOK GLICIL-HISZTIDINNEL KÉPZETT TÖRZS ÉS
VEGYES LIGANDUMU KOMPLEXEI

Matyuska Ferenc

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és
Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen

A metalloproteinekben jelentős szerepet játszik az imidazol gyűrűt tartalmazó hisztidin. E rendszerek jobb megismerése céljából vizsgáltuk a legegyszerűbb dipeptid a glicil-L-hisztidin Co/II/ , Ni/II/ , Cu/II/ és Zn/II/ ionokkal alkotott komplexeit. A biológiai rendszerekben a fémek koordinációs szférájában általában nem csak egy ligandum fordul elő, ezért méréseinket a vegyes ligandumu komplexekre is kiterjesztettük. B ligandumnak használtunk egyszerű aminosavakat így glicint és az L-hisztidint, valamint dipeptidet: a glicil-glicint.

A glicil-L-hisztidin törzskomplexeire kapott eredmény azt tükrözi, hogy a peptid-NH deprotonálódik és részt vesz a koordinációban. A peptid-NH deprotonálódási állandója $\text{pK}_{\text{MAH}_{-1}}^{\text{MA}}$: 4,15 ; 6,03; 6,72; 7,40; a Cu/II/ , Ni/II/ , Zn/II/ , Co/II/ komplexekben. A főrészcseke $\text{/MAH}_{-1}\text{/}$ mellett keletkeznek még MAH , MA , MA_2 , MA_2H_{-1} összetételű komplexek is minden fémion esetén. Az MA_2 valószínűleg $\text{M/AH}_{-1}\text{/AH}$ alakban fordul elő azaz szintén deprotonálódott peptid-N-t tartalmaz így nem valódi bisz komplex.

Vegyes ligandumu komplexeket tekintve a következő eredményre jutottunk: ha a B ligandum glicin vagy glicil-glicin akkor nem keletkezik számottevő mennyiségű vegyes ligandumu komplex. L-hisztidin esetén a vegyes ligandumu komplex képződés számottevő. A fő részcseke ebben az esetben MABH_{-1} , amely deprotonálódott peptid-N-t tartalmaz. B ligandum felesleget alkalmazva a vegyes komplex keletkezése visszaszorul /Cu/II/ , Zn/II/ / vagy teljesen elhanyagolhatóvá válik /Co/II/ , Ni/II/ /.

KIRÁLIS LIGANDUMOK SZINTÉZISE ÉS ALKALMAZÁSA HOMOGEN
ASZIMMETRIKUS HIDROGÉNEZÉSBEN

Dévald Gyula

Veszprémi Vegyipari Egyetem, Szerves Kémia Tanszék
8200, Veszprém

Az aszimmetrikus homogén katalizisben az enantioszeloaktiv katalizátorok alkalmazásával jelentős költségmegtakarítás érhető el, mivel csak a katalizátor tartalmaz királis vegyületet, melynek mennyisége a keletkező enantiomer mennyiségéhez képest rendkívül kicsi és a termék elvileg 100 %-os optikai tisztasággal nyerhető.

Munkánk során olyan királis ditercier foszfint szintetizáltunk, melyet ródiium(I)-komplexben ligandumként alkalmazva dehidro-aminosavak aszimmetrikus hidrogénezésére használhatunk.

A kereskedelemben is könnyen beszerezhető D-mannitból előállítottuk az 1,4:3,6-dianhidro-mannitot, melynek hidroxilcsoportjait könnyebben szubsztituálható tozil-csoportra cserélve, majd ezen vegyületet alkálifém-foszfiddal reagáltatva sikeresen szintetizáltuk az 1,4:3,6-dianhidro-2,5-bisz(difenil-foszfino)-L-idot.

Az új királis ditercier foszfint ródiium(I)-komplexben ligandumként alkalmazva aktív katalizátort nyertünk, amely az α -acilamino-fahéjsavat 58 %-os, az α -acilamino-fahéjsav-metilésztert 43 %-os optikai hozammal hidrogénezte.

Várható, hogy a kísérleti körülmények finomításával az optikai hozamokat jelentősen növelni lehet.

AKTIVITÁSMÉRÉSI MÓDSZER KIDOLGOZÁSA CIKLODEXTRIN-TRANSZGLÜKOZIDÁZENZIMRE

SZERZŐ: Recseg Katalin V.évf.
TÉMAVEZETŐ: Dr. Bánky Bulcsu tanszéki memök

AZ INTÉZMÉNY NEVE, CÍME: Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Kar
Budapest XI., Műegyetem rkp.3.

Az utóbbi két évtizedben világszerte megnőtt az érdeklődés a ciklo-dextrinek és zárványkomplexeik iránt, és ezzel egyidőben merült fel gyakorlati hasznosíthatóságuk kérdése is. Jelenleg a ciklodextrinek előállításához szükséges enzim /CTG/ fermentleiben történő üzemi, specifikus aktivitás-mérése jelent problémát. Célom egy olyan specifikus enzimaktivitás mérési módszer kidolgozása volt, mely a CTG enzim reverzibilis hatásán alapul: megfelelő szubsztrát koncentráció esetén a ciklodextrin gyűrű az enzimes reakcióelegyben felnyílik és a lineáris dextrin molekulához kapcsolódik az alkalmazott szubsztrát: esetenben valamilyen színes glükózid származék. A beépült glükózid mennyisége közvetlenül, vagy enzimes gyűrűvisszazárás, vagy savas hidrolízis után spektrofotometriás uton mérhető. A beépült glükózid mennyisége arányos az enzim aktivitásával.

Kísérletemben béta-ciklodextrin polimerhabot, Sepharose- 6B gélhez kapcsolt alfa-ciklodextrin és szűrőpapírra rögzített alfa-ciklodextrint használtam fel. A mérésekhez affinkromatográfiásan tisztított CTG enzimet és az alábbi rendelkezésemre álló glükózid származékokat alkalmaztam:

- N-etil-izatin-béta-D-glükózid-tioszemikarbazon
- 4-NO₂-benzaldehyd-/4-béta-D-glükózil/-tioszemikarbazon
- o-NO₂-fenil-béta-D-glükopiranozid
- 3,6-di-/beta-D-glükopiranozil-amin/-akridin
- p-NO₂-fenilbeta-D-glükopiranozid

Mérési eredményeim alapján a könnyen, gyorsan kezelhető szűrő-papírra rögzített alfa-ciklodextrint és a megfelelő oldhatóságu, fotometriásan jól detektálható p-NO₂-fenil-béta-D-glükopiranozidot találtam alkalmasnak a CTG enzim aktivitásmérésének felhasználásához.

FOSZFORSAV-ÉSZTEREK MENNYISÉGI MEGHATÁROZÁSA
COULOMBMETRIÁS MÓDSZERREL

Biró Imre
Zalka Máté Katonai Műszaki Főiskola
Budapest

Az irodalmi adatok alapján röviden összefoglaltuk az idegmérgek hatásmechanizmusát és az idegmérgek mennyiségi meghatározását a kolineszteráz bénításának mérésével.

Kidolgoztunk egy coulombmetriás titrálási módszert és recepturát a foszforsav-észter típusú idegmérgek mennyiségi meghatározására. A kolineszteráz enzim elbontja az acetilkolin-kloridot, a felszabaduló ecetsavat titráltuk. Idegmérgek jelenlétében csökken az enzim aktivitása, csökken az ecetsav mennyisége is. A csökkenés mértékéből határoztuk meg az idegmérgek mennyiségét. A mérések reprodukálhatóságát ellenőriztük adott aktivitású mérőoldattal és emberi vérrel. Az eredményeket összehasonlítottuk a katonai gyakorlatban jelenleg alkalmazott klasszikus analitikai módszer eredményeivel.

Elemeztük a módszer alkalmazásának lehetőségeit és előnyeit a mobil, tábori laboratóriumban.

INTENZIV KATIONCSERÉLŐ GYANTÁK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ANALITIKAI
ALKALMAZÁSA ALKÁLI IONOK $(\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Rb}^+)$ GYORS
ELEMZÉSÉRE

Horváth Ottó

Veszprémi Vegyipari Egyetem, 8201 Veszprém, Pf. 158.

Az ioncsere-kromatográfiás eljárásokban lényeges fejlesztési lehetőséget jelent a gyors ionátadást biztosító intenzív ioncsereelő anyagok kialakítása és alkalmazása. Ezek az anyagok kedvező kinetikai sajátosságuk révén nagyságrendekkel lerövidítik az elemzési időt és kedvező elválasztási jellemzőket biztosítanak.

Munkánk során eljárást dolgoztunk ki erősen savas, intenzív kationcsereelő előállítására sztírol-divinil-benzol felületi szulfonálásával. E gyantatípust hatékonysága mellett nagy szerkezeti stabilitás is jellemzi. Meghatároztuk a gyanták kapacitását és vízfelvételi tulajdonságait.

Az előállított kationcsereelőket ion-kromatográfiás viselkedését alkáli ionok elválasztásán tanulmányoztuk. Megvizsgáltuk az ioncsere-kapacitás, a polimer térhálóság, az eluens koncentráció és az áramlási sebesség hatását az ion-kromatográfiás jellemzőkre. A vizsgált paraméterek együttes hatásának ismeretében megállapítottuk az ion-kromatográfiás módszer optimális körülményeit.

A kialakított intenzív kationcsereelőket előnyös analitikai alkalmazását nagytisztaságú atomerőművi vizminta és humán vérérszérum alkáli ion tartalmának gyors analizisével szemléltettük.

TEJELŐ TEHENEK VÉRPLAZMA- ÉS MÁJLIPIDJEINEK ALAKULÁSA
AZ ELLÉS KÖRÜLI IDŐSZAKBAN

MESITS JÁNOS V. évf.
Agrártudományi Egyetem, Keszthely
Keszthelyi Mezőgazdaságtudományi Kar

Kísérleteinket 10 db Holsteinfriz magyartarka kereszteléséből származó F₁-es tehénnel végeztük. A vizsgált tehenek "V.jugularis"-ából vérmintát, illetve a májból biopsziás tüvel májmintát vettünk a várható ellés előtt 3, 2, 1 hónappal, az ellés havában, majd az ellést követő 1, 2. hónapban.

A vérplazmából meghatároztuk az összlipid-, a koleszterol- és a szabad zsírsav-tartalmat, valamint a biopsziás májmintából az összlipid tartalmat. --- A vérplazma és májlipidek extrahálása után megállapítottuk azok zsírsav-összetételét.

Témavezető: Dr. Husvéth Ferenc egyetemi adjunktus
a mezőgazdasági tudományok
kandidátusa

E 32

A TI /IV/ -KELÁT HATÁSA AZ ANACYSTIS NIDULANS
/SYNECHOCOCCUS-AN PPC 6301/ FOTOSZINTÉZISÉRE

Kiss Ferenc

Bessenyei György Tanárképző Főiskola Kémia Tanszék
Nyíregyháza, Sóstói u. 31/b.

Kísérletünkben tanulmányoztuk a Ti /IV/-kelát hatását a Synechococcus-AN PPC 6301 kékalga fotoszintézisére. Az algákat steril laboratóriumi körülmények között, 37 °C-on, $3,6 \times 10^4$ w/cm². fluorescens fény megvilágítása mellett 5% CO₂-ot tartalmazó steril levegő buborékoltatásával üvegedényben neveltük.

Megállapítottuk, hogy 1 ppm Ti /IV/-kelát hatására megnő az "a-klorofill", az allofikocianin, fikocianin tartalom és a fotoszintetikus oxigén fejlődés, valamint a Calvin-ciklus fruktóz-difoszfát-foszfátáz enzimének aktivitása.

Feltételezhető, hogy ezek a jellegzetes változások szoros kapcsolatban vannak a sejt specifikus redoxi folyamataival.

2. rész
Részlet ismételtől
az előzőből.
Részlet ismételtől.

40 6-PI
CPI-68904

6-PI

A DyI_3 PÁROLGÁSÁNAK ÉS GÁZFÁZISU DIMERIZÁCIÓS
REAKCIÓJÁNAK MAGASHŐMÉRSÉKLETŰ TÖMEGSPEKTROMETRIÁS
VIZSGÁLATA

Ajtony Zsolt - Bencze László

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

A $DyI_3/sz/$ egyensúlyi gőzösszetételének hőmérséklet-függését vizsgáltuk Knudsen-effúziós tömegspektrometriás módszerrel. Meghatároztuk a gőzből keletkező ionok tömegspektrumát, az ionok megjelenési energiáját és termokémiai adatait. A DyI_3^+ ionok fragmensei mellett jól mérhető intenzitásban a dimer $Dy_2I_6^+$ ionok fragmensei is detektálhatók voltak. Az ionáramintenzitások hőmérsékletfüggéséből meghatároztuk a monomer és dimer diszpróziom-jodidok legfontosabb termokémiai adatait. A nyert szublimációs hők:

$$\begin{aligned} \Delta H_{s,298}(DyI_3) &= 2929 \pm 12 \text{ kJ/mól}, \Delta H_{s,298}(Dy_2I_6) = \\ &= 365 \pm 16 \text{ kJ/mól}. \text{ Az atomizációs hők: } \Delta H_{atom}(DyI_3) = \\ &= 972 \pm 30 \text{ kJ/mól}, \Delta H_{atom}(Dy_2I_6) = 2020 \pm 40 \text{ kJ/mól}. \end{aligned}$$

A dimerizációs entalpiaváltozása $\Delta H_{r,298} = -225 \pm 12 \text{ kJ/mól}$,
a Dy_2I_6 képződéshője pedig $\Delta H_{k,298}(Dy_2I_6)_g = -826 \text{ kJ/mól}$.

A tömegspektrométer kalibrációjával a mért ionáramokat nyomásokká számoltuk át és a gázfázisú dimerizációs reakció egyensúlyi állandójának hőmérsékletfüggéséből a reakció termodinamikai adataira következtettünk.

A VIZ N- ILLETŐLEG I-BUTILALKOHOL KÜLÖNBÖZŐ SAVAKKAL
KÉPZETT HOMOGEN RENDSZEREINEK ÖSSZETÉTELE

Kisfaludi Andrea

ELTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Ismeretes, hogy a karbonsavak homológ sorainak kis szén-
atomszámú tagjai "vizzel nem elegyedő" alkoholokkal, elsősor-
ban butanolokkal alkotott észterek formájában mérhetőek leg-
kedvezőbben. Utóbbi észterek a klasszikus irodalom szerint
vizmentes körülmények között készíthetők. Ugyanakkor a gya-
korlati feladatok zöme, vízes oldatok karbonsavtartalmának
analízise.

A tapasztalat szerint, ásványi savak és ecetsav hatásá-
ra a n-butanol és az i-butanol egyaránt, a kézi-
könyvekben megtalálható mennyiségi viszonyokat jóval megha-
ladó mértékben elegyedik a vizzel.

Fentiek alapján vizsgálataim a n-butanol és i-butanol
vizzel való elegyedésére vonatkoztak cc H_2SO_4 , HCl , H_3PO_4 ,
 HNO_3 és jégacet hatására.

Kísérleteim során analitikai pontossággal mért alkohol
és víz elegyét, az adott savval, homogén oldat keletkezéséig
titráltam. Vizsgálataim eredményeit a homogén oldat mólkon-
centrációjával jellemeztem.

Eddigi eredményeim szerint úgy tűnik, hogy a homogén
oldat keletkezése:

- az alkohol -koncentrációjától független,
-szerkezetétől függő
- a víz és a sav mólarányai tekintetében
- a sav minőségétől és erősségétől függő
- adott koncentrációviszonyok mellett
- a sav minőségére jellemző számadat.

ÖSSZEFÜGGÉS A SZOLVATÁCIÓTÓL SZÁRMAZÓ BELSŐ NYOMÁS ÉS
AZ ELEKTROLITOLDATOK VISZKOZITÁSA KÖZÖTT

Baranyai András

Ötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

A dolgozatban alkáli-halogenidék 0-5 mol koncentrációju vizes oldatának viszkozitását taglaljuk. Kvantitatíve igazoljuk, hogy az egyes elektrolitok viszkozitásának a koncentrációval való sajátos változása legnagyobb részben a töltés-dielektrikum kölcsönhatás eredményeképpen létrejövő belső nyomás növekedésének köszönhető. Ennek igazolására a ponderomotoros erő konkrét alakjának a felhasználásával kiszámoltuk az egyes ionok környezetében uralkodó nyomást, mint a hely függvényét, majd átlagoltuk ezt az egész folyadékmennyiségre. /Az átlagnyomás ebben az esetben a koncentráción kívül csak az ionok sugarától függ./ Az így kapott értékeket a tiszta víz kísérletileg meghatározott $\eta = f(\rho)$ függvényébe helyettesítve kaptuk meg a $\eta = f(c)$ összefüggést, amely a kísérleti adatokkal összevetve jó egyezést mutat.

Ugyanezen módszert felhasználva átlagnyomást, ill. ebből "mikroviszkózitást" számoltunk az iont körülvevő hidrátszférára. Ezen "mikroviszkózításokat" azután az empirikus Walden-szorzatba helyettesítettük az ott szereplő, adott hőmérséklet-hez tartozó, tiszta víz viszkozitásának helyére. A kapott eredmények alapján feltételezzük, hogy a Walden-összefüggés általánosabb fizikai tartalommal bír, és - az eddigi nézetekkel szemben - a Stokes-törvény szerinti ionvándorlást cáfolja.

6-P4

A UNIFAC - MÓDSZER ALKALMAZÁSA EXTRAHÁLÓSZEREK
KIVÁLASZTÁSÁRA

Farkas Andrea

Veszprémi Vegyipari Egyetem, Veszprém, Schönherz Z.u. 10.

Vizsgálatunk célja azoknak az oldószereknek a meghatározása volt, amelyekkel az 1-propanol illetve a 2-butanon hig vizes oldatokból kiextrahálható. Az extrahálószerként szóbjövő anyagok szelektivitását és kapacitását a UNIFAC aktivitási koefficiens-becslő csoportadalék-módszerrel becsültük. A számított kapacitás-sorrend 1-propanolra: alkoholok > észterek > éterek > klórozott szénhidrogének > aromás szénhidrogének > alifás szénhidrogének; 2-butanonra: klórozott szénhidrogének > ketonok > aromás szénhidrogének > észterek > alkoholok > éterek > alifás szénhidrogének.

A legnagyobb becsült kapacitású extrahenseket kiválasztva terner folyadék-folyadék és gőz-folyadék egyensúlyi számításokat végeztünk a UNIFAC alkalmazásával. A számított értékek jól egyeztek a mért adatokkal, kielégítő pontossággal tudtuk előre jelezni az azeotróp összetételeket.

A fázisegyensúlyi számításokat is figyelembe véve az 1-propanol extrahálószerének az 1-oktanol, a 2-butanon extrahensének a 4-metil-2-pentanon javasolható.

VÍZMENTES EMULZIÓK STABILITÁSI ÉS REOLÓGIAI TULAJDONSÁGAI

Ábrahám Imre

József Attila Tudományegyetem Kolloidkémiai Tanszéke
Szeged, Aradi vértanúk tere 1.

A vízmentes vagy olaj az olajban (o/o) típusú emulzióknál két egymással nem elegyedő szerves folyadék mint diszperziós közeg és diszperz rész alkotják az emulziót. Ilyen típusú emulziókat alkalmaznak gyógyszerek, kozmetikumok, növényvédőszeres formálásánál, mélyfűrési öblítőszapok előállításánál.

Az általunk előállított vízmentes emulziók apoláris komponense paraffinolaj, poláris komponense etilén-glikol, illetve glicerin volt. Az emulziók stabilizálásához nemionos tenzideket - TWEEN-60 és TEGIN M - használtunk. Az emulziók stabilitását gravitációs és ultracentrifugális erőterben bekövetkező fázis elkülönülés sebességével jellemeztük. Az emulziók reológiai paramétereit rotációs viszkoziméterrel határoztuk meg.

Vizsgáltuk a tenzid minőségének, relatív mennyiségének, a fázisarányának és a hőmérsékletnek az emulziók tulajdonságaira gyakorolt hatását.

Megállapításaink közül kiemeljük, hogy TWEEN-60-nal poláris közegű, míg TEGIN M-mel apoláris közegű o/o emulziók stabilizálhatók. Az emulziók reológiai sajátosságait elsődlegesen az emulziók jellege határozza meg. Azonos jelleg esetén a legfontosabb reológiai jellemzők - Bingham-féle folyáshatár és plasztikus viszkozitás - széles intervallumban változtathatók a fázisok relatív mennyiségével.

A DIFFUZIÓ Néhány problémája

Nyíri Balázs

BME - Vegyészmérnöki Kar, Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A dolgozatban a diffúzió néhány olyan tulajdonságával foglalkoztunk, amelyek disszipatív és mechanikai erők együttes jelenlétére utalnak.

Eredményeink: Különleges esetektől eltekintve nincs olyan diffúziós folyamat, amelyben ne lépnének föl mechanikai erők, feszültségek. Tehát, a konfigurációs kémiai-potenciál is energia. Az általánosított Fick-törvény keresztgyűthetői - melyek felbonthatók egy dinamikai és egy sztatikai részre - a megfelelő koncentrációk szerinti hatványsorának nulladfokú tagja nulla.

A termostatikai kölcsönhatásokat az előbbi "sztatikai rész" teljesen leírja, így a "dinamikai rész" csak az áramok kölcsönhatásából adódhat.

A fentiek a következő állításokra készítetnek bennünket:

- A diffúzió hajtóerői komponensszelektív mechanikai erőkterek.
- Disszipációt a komponensek egymáshoz viszonyított mozgásakor fellépő surlódás okoz.
- Figyelembe kell venni a komponensek impulzusainak megváltozásából származó tehetetlenségi erőket.

Ezek alapján: A hőmérsékletszer entrópiaprodukció valóban energiadisszipáció. A Fick-törvény levezethető. A hatás-ellenhatás elve alapján az Onsager-i szimmetriareláció axióma bizonyítható. A diffúzióknak állításaink alapján olyan egyenletekhez jutunk, amelyek véges sebességgel terjedő megoldással bírnak.

A DIFFUZIÓEGYÜTHATÓ EGY GYORS MÉRÉSI MÓDSZERE

Nyíri Balázs

BME - Vegyészmérnöki Kar, Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A Fick-egyenletnek a geometriai hasonlóságon kívül egyetlen hasonlósági kritériuma van, ezért bevezethető egy redukált-idő. Az egyenletet eképpen normálva geometriailag hasonló esetekre, hasonló peremfeltételek mellett általánosan megoldhatjuk. Ez utóbbi tény az alapja módszerünknek, amelyet membránon keresztül lezajló diffúzióra dolgoztunk ki.

A membrán egyik oldalán létrehozuk a vizsgálandó szerves gáz vagy gőz koncentrációjának egy időbeli impulzusát / σ -függvényt /, és az idő függvényében mérjük a tuloldalt kilépő anyagáramot, a válaszfüggvényt. Az amplitudónormált válaszfüggvény tetszőleges időheni mérete /esetünkben félértékszélessége/ a diffúzióegyüthetőséggel fordítva, a membrán vastagságának négyzetével egyenesen arányos. Az arányossági tényezőt az egyenlet megoldásából redukált-idő egységekben kiszámítottuk. Tárgyaltuk a módszer kivitelezésének elvi módzatait és vizsgáltuk a válaszfüggvény stabilitását a bemenő jel kis perturbációival szemben.

A méréshez egy lángionizációs detektorral ellátott, H_2 -vívógáz rendszerrel alakítottunk ki. Mérési módszerünk a diffúzióegyüthetőségek méréséhez általában szükséges 1-10 óra időt 20-100 percre csökkentí. Így alkalmas rutinszerű sorozatmérésekre is.

A módszer /elsősorban numerikus nehézségek árán/ általánosítható tetszőleges alakú mintára, különféle beadagolásmérés elrendezés mellett.

VIZBEN OLDOTT RADIOAKTIV IZOTÓPOK ADSZORPCIÓJA
AKTIVSZÉNEEN

Bagi László

Zalka Máté Katonai Műszaki Főiskola

Budapest

Irodalmi adatok alapján röviden összefoglaltuk az ion-adszorpció alapjait porusos adszorbenseken.

Vizsgáltuk különböző porusszerkezetű aktívzeneken a radioaktív jód adszorpcióját különböző koncentrációjú KI oldatból, különböző hőmérsékleten. Kidolgoztunk egy folyamatos méréstechnikát. I-131 izotóppal jelzett, 0,1, 0,01, 0,001 mol/dm³ koncentrációjú, 20 cm³ KI oldatot cirkuláltattunk egy perisztaltikus pumpával 1-1 g. aktívzenén és egy üreges szcintillációs kristályon át. Folyamatosan mértük az oldat számlálási sebességét 30 másodpercenként az adszorpció egyensúly beállásáig. A méréseket 25, 35, és 45 °C-on végeztük el.

A mérési adatokból meghatároztuk, hogy a folyamat melyik adszorpció törvénnyel írható le, kiszámítottuk az adszorpció izotermák állandóit és az aktiválási energiát. Következtetéseket vontunk le a felület tulajdonságaira és az adszorpció sajátosságaira. A számításokhoz programokat dolgoztunk ki a PTK 1096 programozható tudományos kalkulátorra.

AZ AKTIVSZÉN ELŐKEZELÉSÉNEK HATÁSA
A VIZBEN OLDOTT RADIOAKTIV IZÓTOPOK
ADSORPCIÓJÁRA

Fülöp László Pataki István

Zalka Máté Katonai Műszaki Főiskola
Budapest

Irodalmi adatok alapján röviden összefoglaltuk az ion-adszorpció alapjait pórussos adszorbenseken.

Vizsgáltuk különböző pórusszerkezetű aktívzeneken, különböző előkezelés után a radioaktív jódszórpcióját. Az előkezelés: mosás különböző koncentrációjú sósav és nátriumhidroxid oldattal, oxidáló és redukáló szerekkel.

Kidolgoztunk egy folyamatos mérés technikát. A I-131 izótoppal jelzett $0,01 \text{ mol/dm}^3$ koncentrációjú, 20 cm^3 KI oldatot cirkuláltattuk egy perisztaltikus pumpával 1-1 g. aktívzenén és egy üreges kristályon át. Folyamatosan mértük az oldat számolási sebességét 30 másodpercenként az egyensúly beállításáig.

A mérési adatokból megállapítottuk, hogy a folyamat melyik adszorpció törvénnyel írható le, kiszámítottuk az adszorpció izotermák állandóit. Következtetéseket vontunk le a felület tulajdonságaira és az adszorpció sajátosságokra.

A számításokhoz programokat dolgoztunk ki a PTK-1096 programozható tudományos kalkulátorra.

6P10-6P24 ty.

A melléklet. rendeltől való.
Küldetésben van bel.
A P. Kulcsy Hely. rendelt.

6080
1-3. sz. rendelt.

6-P10

JELZETT CIKLOOKTAPEPTIDEK SZINTÉZISE

Vassné Lakatos Ágnes és Vass János
ELTE Szerves Kémia Tanszék

A fehérjék másodlagos szerkezetének kialakulásában fontos szerep jut a reverse turn néven ismert szerkezeti elemeknek.

Korábbi vizsgálatok alapján alkalmas a β -turn konformáció modellezésére az I. ciklooktapeptid. El-
lentétben a fehérjékkel, amelyekben a
Pro-Gly-Gly-Pro I. másodlagos szerkezet igen kis hányada
Pro-Gly-Gly-Pro lehet csak β -turn, ennél a vegyületnél
szinte tisztán tanulmányozható. Ha ^{13}C -
NMR-rel vizsgáljuk a vegyületet, igen

hasznos egyes helyekre NMR aktív magok beépítése. Ezek a hozzájuk közelálló C atomok jelait felhasítják, ami segíti a hozzárendelési problémák megoldásában. A csatolási állandókból következtetéseket vonhatunk le a térbeli viszonyokra is. Kétféle jelzett peptidet szintetizáltunk, az egyikben az $-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}_2-^{13}\text{CO}-$, a másikban pedig a $^{15}\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CO}-^{15}\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CO}-$ diglicinszekvencia kapcsolja össze a prolinrészeket. Az izotópot tartalmazó anyagok kis mennyisége és nehéz hozzáférhetősége miatt igen körültekintően kellett dolgozni. A szintézisben olyan lépéseket kellett választani, amelyek az izotópot tartalmazó anyagra vonatkozóan járnak nagy termeléssel. Kiindulási anyagként ^{15}N glicint, ill. karbonilban jelzett ^{13}C ecetsavat használtunk. A modellvegyületek ^{13}C -NMR vizsgálata folyamatban van.

POTENCIÁLISAN IMMUNMODULÁTOR PEPTIDEK SZINTÉZISE

Pálvölgyi R. /V. vegyész/ Témavezető: Dr. Szekerke M.
 ELTE TTK Szerves Kémiai Tsz., Bp. VIII. Múzeum krt. 6.

Előzmények: Széleskörű vizsgálatok kimutatták, hogy a Levamisol /dl-2,3,5,6-tetrahidro-6-fenil-imidazo/2,1-b/tiazol/ szabályozza a sejtközvetített immunreakciókat. Ez a vegyület a klinikai gyakorlatban is alkalmazott immunmodulátor. Analógok és aktív metabolitok vizsgálata alapján az immunstimuláló hatás kialakulásának feltétele az imidazol gyűrű, valamint a tiazol gyűrű felnyílásával keletkező tiol-csoport jelenléte a molekulában. A Levamisol - egyéb hatásai mellett - befolyásolja a T-sejtek cAMP/cGMP szintjét.

Irodalmi adatok szerint az N-formil-peptidek ugyancsak az immunmodulátor vegyületek közé sorolhatók, mert a leukociták kemotaktikus migrációját váltják ki, míg az N-Boc-peptidek ezzel ellentétes hatásúak.

Célkitűzések: Levamisolhoz hasonló szerkezetű, peptid típusú kemotaktikus, immunmodulátor vegyületek szintézise. A For-Met-His-Phe-OMe peptid és a H-Cys/Trt/-His-OMe peptid tartalmazzák a Levamisol aktív molekularészeit és térbeli elrendeződésük is közelítőleg azonos. A Boc-Met-His-Phe-OMe peptid feltehetően a formil-analóg antagonistája.

Szintézisút: A H-Cys/Trt/-His-OMe-t a Boc-Cys/Trt/-OTcp és a H-His-OMe kapcsolásával, a tripeptideket pedig a megfelelően védett aminosavak lépésenkénti kapcsolásával az N-terminális felé haladva állítottuk elő.

Tervezett biológiai vizsgálatok: Kemotaxis vizsgálat és cAMP/cGMP szint vizsgálat.

6-PL2

L-ASZPARTIL-L-FENIL-ALANIN-METIL-ÉSZTER-HIDROKLORID
ELŐÁLLÍTÁSA

Készítette: GYAPAY KORNÉL

Készült: Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai
Technológia Tanszékén 1982-ben

A szintetikus édesítőszernek jelentősége napjainkban egyre inkább nő. Az újabb kutatások testazonos anyagokból felépülő vegyületek felé irányulnak. Munkánk célja is ilyen dipeptid előállítása volt.

A kísérleti munka során a megfelelő aminosavakból kiindulva vizsgáltuk az L-aszpartil-fenil-alanin-metil-észter-hidroklorid és az L-aszpartil-fenil-glicin-metil-észter-hidroklorid gazdaságos előállítási lehetőségeit.

A tiszta, L-L konfigurációjú sztereoiszomer szintéziséhez szükséges optikailag aktív aminosavakat részben diasztereomer sóképzéssel, részben indukált kristályosítással történő rezolválással nyertük.

A célvegyületeket az optikailag aktív aminosavak védésével nyert komponensekből egymást követő kondenzációs, telítési és hidrolizist eredményező reakciókkal kaptuk.

A fenil-alanin származék az anyagköltségeket és a regenerálási lehetőségeket figyelembe véve gazdaságosan előállítható.

6-F13

13-EPI-ANDROSZTÉN SZÁRMAZÉKOK

Molnár Katalin

JATE, Szerves Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 8.

A 17-ketoszteroidok totálszintézisének melléktermékei a 13-epi-17-ketoszteroidok. Ezek felhasználására most kezdődnek vizsgálatok.

A laboratóriumban korábban elkészített androsztén vázas amino-alkoholok viszonylag jó antiaritmiás hatást mutattak, ezért terveztük a potenciálisan ilyen hatású 13-epi-androsztén vázas amino-alkoholok, aminok készítését.

Először előállítottuk a kiindulási anyagul szolgáló 13-epi-androszt-5-én-3 β -ol-17-ont.

A 13-epi-17-ketoszteroidot β -hidroxietilaminnal kondenzáltatva a megfelelő Schiff-bázist, ennek nátrium-bórhidrides redukciója a 17-es szénatomon egymással sztereoisomer amino-alkoholok keverékét eredményezte.

Az amino-alkohol izomerek konfigurációját a 13-epi-17-hidroxiszármazékok konfigurációjára alapján adtuk meg. A 13-epi-oximok p-toluolszulfonsav-kloriddal kiváltott Beckman-átrendeződésével D-homolaktámhoz jutottunk.

6-Fl4

1-/4'-HIDROXI-3'-METOXI-BENZIL/-7-HIDROXI-6-METOXI-IZOKINOLIN
/KRISZTADIN/ SZINTÉZISE REISSERT VEGYÜLET FELHASZNÁLÁSÁVAL

Kovács Lajos

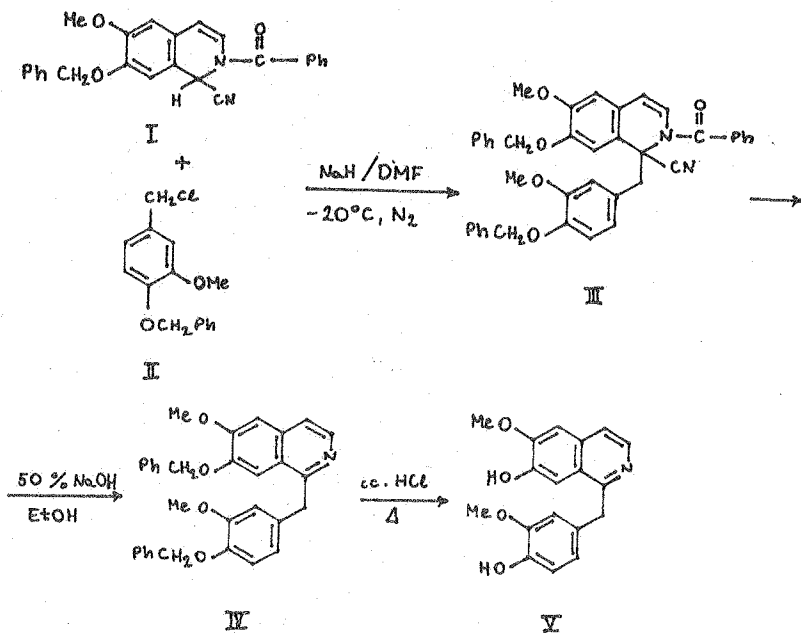
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék,
4010 Debrecen

Japán kutatók 1982-ben számoltak be egy új alkaloid, a krisztadin /V/ izolálásáról az Erythrina crista-galli növényből, ill. szerkezetének meghatározásáról.

Célul tűztük ki az alkaloid szerkezetbizonyító totálszintézisét Reissert vegyület felhasználásával. Izovanillinből a módosított Pomeranz-Fritsch gyűrűzárási reakcióval a megfelelően szubsztituált izokinolint állítottuk elő, melynek Reissert vegyületét /I/ a szokásos módon nyertük. Másrészt vanillinből az irodalomban ismert úton a megfelelően szubsztituált benzil-kloridhoz jutottunk /II/. A Reissert-vegyületből a szokásos módon aniont készítettünk, melynek a benzil-kloriddal lejátszódó reakciója C₁-szubsztituált Reissert-vegyülethez /III/ vezetett. Ezen termék hidrolízise és a benzil védő csoportok eltávolítása krisztadint /V/ eredményezett. A szintézis során nyert új vegyületek /III,IV/ ill. a végtermék /V/ szerkezetét elemanalizissal, valamint spektrumadatokkal igazoltuk.

A szintetizált vegyület és a természetes alkaloid megfelelő spektrumadatai jól egyeznek.

6-PL4



Me = metil

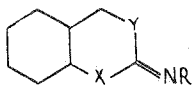
Ph = fenil

KONDEZÁLTVÁZAS HETEROCIKLUSOS VEGYÜLETEK KONFORMÁCIÓS
VIZSGÁLATA $^1\text{H-NMR-REL}$

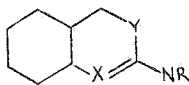
Szalma Sándor

József Attila Tudományegyetem
Szerves Kémiai Tanszéke

A kondenzáltvázás heterociklusos vegyületek szintézisével és konformációs vizsgálatával Bernáth és munkatársai már évek óta foglalkoznak. Munkám során kondenzáltvázás cisz- és transz-1,3-oxazinok és tiazinok térszerkezetét, konformációs viszonyait vizsgáltam.



X: NH, N-CH₃
Y: O, S
R: Ar, Me, Et



X: N
Y: O, S
R: Me

$^1\text{H-NMR}$ spektrumokból megállapítható, hogy a transz-izomerek esetén a gyűrűkapcsolódás diekvatoriális. A cisz-izomereknél két lehetséges konformer írható fel: a heteroatom axiális és a heterogyűrű metilén-szénatomja ekvatoriális (N-inside), ill. fordítva, a heteroatom ekvatoriális és a metilén-szén axiális térállású (N-outside). Korábbi vizsgálatokkal egyezően azt tapasztaltuk, hogyha X = NH, akkor az N-inside konformáció a stabilabb. Az X = N-CH₃ vegyületeknél azonban - mivel így az X csoport konformációs energiája nagyobb lett mint a metiléné - a másik, az N-outside konformáció a domináns.

Dinamikus NMR vizsgálatokat végeztünk az egyes konformációk stabilitása és az e vegyületeknél elképzelhető tautomer viszonyok tisztázására.

ANDROSZTÁNVÁZAS POLYADÉKKRISTÁLYOK SZINTÉZISE
ÉS TULAJDONSÁGAINAK VIZSGÁLATA

Tóth Edit

József Attila Tudományegyetem Természettu-
dományi Kar
Szeged, Aradi Vértanúk tere 1.

A több ezer eddig leírt termotróp koleszterikus folyadék-kristály között mindezekig nem ismertek androsztán vázas származékok. A munka során az androszt-5-én-3**beta**, 17**beta**-diol-4'-alkiloxi-benzoésztereit készítettük el. A benzoészterek szintézisét para-hidroxi-benzaldehid alkilezésével, majd az azt követő oxidációval hajtottuk végre. A karbonsavakat tionil-kloriddal savkloridokká alakítottuk és az androszt-5-én-3**beta**-ol-2o-onból nátrium-tetrahidrido-boráttal nyert androszt-5-én-3**beta**, 17**beta**-diolt ezzel acileztük.

Az acilezés során nagy mennyiségben képződő karbonsav-anhidridek való elválasztás nagy nehézségbe ütközött. Az elválasztást fizikai és kémiai módszerek kombinációjával oldottuk meg és a kapott tiszta diészterek igen figyelemre méltó enantiomer koleszterikus folyadék-kristályos tulajdonságokkal rendelkeztek.

A vizsgálatok bizonyították, hogy a folyadék-kristályos tulajdonságok megjelenéséhez nem szükséges a korábban esszenciálisnak tekintett C-20 aszimmetriacentrum jelenléte.

6-FL7

A KALIFORNIAI PAJZSTETŰ /QUADRASPIDIOTUS PERNICIOSUS,
COMSTOCK/ 3-METILÉN-7-METIL-7-OKTÉN-1-IL PROPIONÁT
FEROMONKOMPONENSÉNEK SZINTÉZISE

Készítette: Bata Imre

Budapesti Műszaki Egyetem, 1111. Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A kaliforniai pajzstetű igen elterjedt rovarkártevő. Az ellene való védekezésnek egy új lehetőségét kínálja a feromonkémia alapuló növényvédelem.

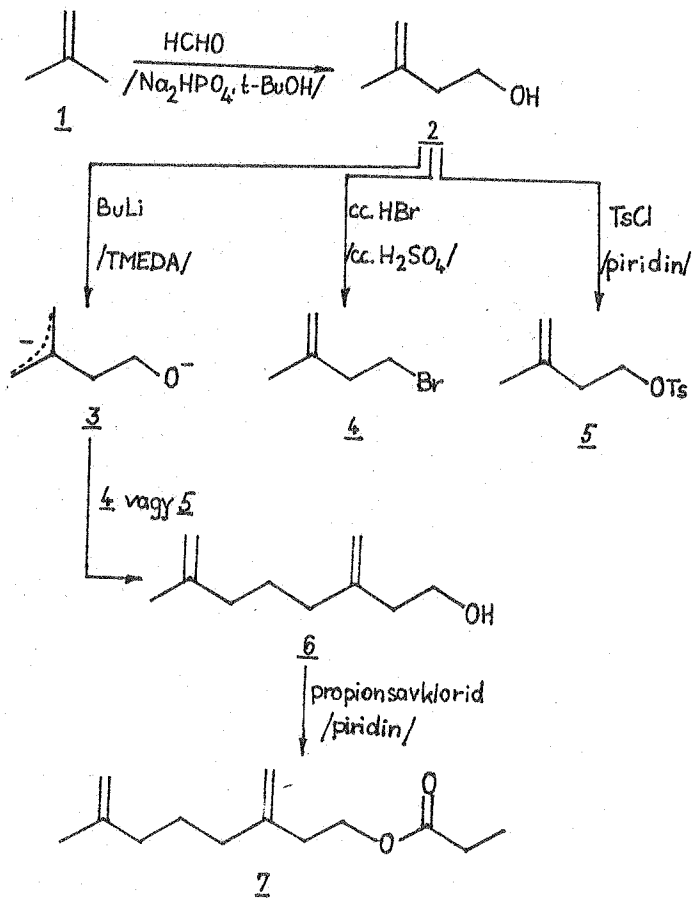
A kutatások eredményei szerint a kaliforniai pajzstetű szexferomona két komponensből áll, melyek együttesen, de külön-külön is csalogató hatással vannak a rovar him egyedeire. Munkánk célja a feromon 60%-t alkotó komponens, a 3-metilén-7-metil-7-oktén-1-il propionát új, egyszerű és gazdaságos előállítása volt.

Az észter típusú célvegyület (1) a megfelelő alkohol (6) acilezésével könnyen előállítható. Az alkoholt - kihasználva szimmetrikus felépítését - két azonos szerkezetű intermedier összekapcsolásával nyertük. Az intermediereket közös alapvegyületből, a 3-metil-3-butén-1-ol-ből (2) készítettük, melyet izobutilénből állítottunk elő. A (2) alkoholt egyrészt butil-litiummal dianionná (3) alakítottuk, másrészt az alkoholos hidroxilt jó távozó csoportokra, tozilátra (5) és bromidra (4) cseréltük.

A dianiont a brómvegyülettel (4) kapcsolva 58%-os, míg a toziláttal reagáltatva 65%-os termeléssel jutottunk a (6) alkoholhoz. Ebből propionsavkloriddal alakítottuk ki végterméket (7).

A feromonkomponens azonosítása $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$, IR és MS-vizsgálattal történt, a termék tisztaságát gázkromatográfiával ellenőriztük. A szintetizált termék biológiai hatásának vizsgálatát az EGYT Gyógyszervegyészeti gyár vezeti.

6-P17



A KALIFORNIAI PAJZSTETŰ FEROMONKOMPONENSÉNEK

/ 3,7-dimetil-2/Z/,7-oktadien-1-il-propionát/

RACIONÁLIS SZINTÉZISE

SZERZŐ NEVE: Poppe László V.évf.

TÉMAVEZETŐ: Dr. Novák Lajos docens

AZ INTÉZMÉNY NEVE, CÍME: Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Kar
Budapest XI., Műegyetem rkp. 3.

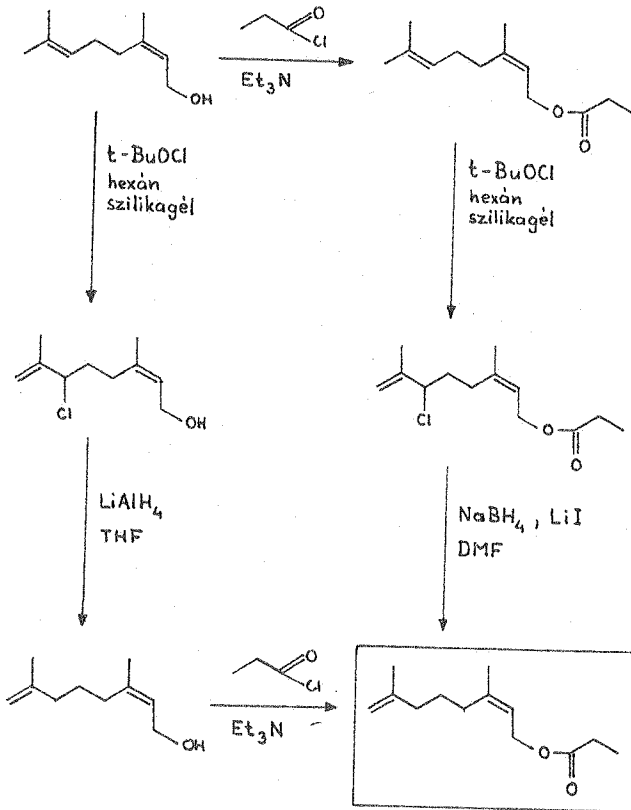
Munkában a kaliforniai pajzstetű /*Quadraspidiotus perniciosus*/ szex-feromonkomponensének, a 3,7-dimetil-2/Z/,7-oktadien-1-il-propionát-nak nerolból/ 3,7-dimetil-2/Z/,6-oktadien-1-ol/ megvalósított racionális szintézisét írom le.

A kaliforniai pajzstetű elterjedt és nagy károkat okozó gyümölcskártevő. Feromonja két komponensből áll, a 7-metil-3-metilén-7-okten-1-il-propionát és a 3,7-dimetil-2/Z/,7-oktadien-1-il-propionát 3 : 2 arányú keveréke. A két komponens mindegyike önmagában is hatásos. Az EGYT gyárral együttműködve célunk volt a feromonkomponensek ipari-lag is hasznosítható szintézisét megvalósítani.

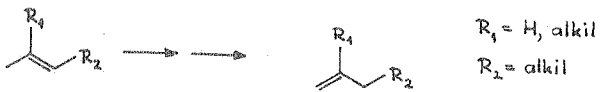
Az általunk leírt szintézis lényege a nerol 6-os helyzetű kettőskötésének kivitele a lánc végére. Ezt a 6-os kettőskötésre történő t-BuOCl addícióval valósítottuk meg, ekkor 6-klór-2/Z/,7-oktadienil származékok keletkeznek. A 6-os klór redukcióját a megfelelő alkoholnál LiAlH_4 -del, a propionilezett származéknál NaBH_4 -del hajtottuk végre. A redukció, ill. a redukciót követő propionilezés után a végtermék 3,7-dimetil-2/Z/,7-oktadien-1-il-propionáthoz jutottunk.

A szintetikus előállított termék biológiai vizsgálatai folyamatban vannak.

A szintézis során alkalmazott kettőskötés izomerizációs módszer általánosítható, ha a molekula nem tartalmaz redukcióra érzékeny részeket.



Általánosítása:

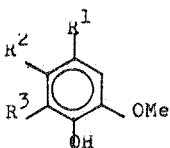


FENOLSZÁRMAZÉKOK OXIDÁCIÓJA TALLIUM/III/-SÓKKAL

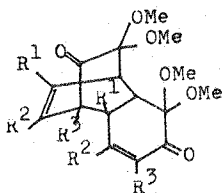
Vass Judit

Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Kara
Budapest, XI. Műegyetem rkp. 3.

Munkánk során az 1970-ben izolált asaton /2a/ előállítására végeztünk kísérleteket. A tervezett szintézis kulcslépése egy megfelelően szubsztituált fenolszármazék /1a/ tallium/III/-nitráttal végzett oxidációja volt, mely nem várt érdekes irányban játszódott le. Ezért e reakciót modellvegyületeken /1b-g/ részletesen tanulmányoztuk. Kísérleteink bizonyították, hogy a folyamatot elindító szén-tallium kötés kialakulásának helyét a para-helyzetű szubsztituens elektroneltolódási effektusa szabja meg. A modellvegyületek célszerű megválasztásával /1a-c/ sikerült tisztáznunk a reakcióban képződő 1,4-kinonok kialakulásának mechanizmusát. Az 1d-i fenolok oxidációjakor keletkező bonyolult szerkezetű dimerek /2d-i/ felépítését spektroszkópiai uton tisztáztuk /IR, $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ /.



1a-i



2a, 2d-i

- a: $\text{R}^1 = \text{CH}_2 - \text{CH} = \text{CH}_2$, $\text{R}^2 = \text{H}$, $\text{R}^3 = \text{OMe}$
 b: $\text{R}^1 = \text{Pr}$, $\text{R}^2 = \text{H}$, $\text{R}^3 = \text{OMe}$
 c: $\text{R}^1 = \text{R}^2 = \text{H}$, $\text{R}^3 = \text{OMe}$
 d: $\text{R}^1 = \text{R}^2 = \text{R}^3 = \text{H}$
 e: $\text{R}^2 = \text{CH/OMe/2}$, $\text{R}^1 = \text{R}^3 = \text{H}$
 f: $\text{R}^1 = \text{CCOMe}$, $\text{R}^2 = \text{H}$, $\text{R}^3 = \text{OMe}$

- g: $\text{R}^2 = \text{COOMe}$, $\text{R}^1 = \text{R}^3 = \text{H}$
 h: $\text{R}^2 = \text{COOt-Bu}$,
 $\text{R}^1 = \text{R}^3 = \text{H}$
 i: $\text{R}^2 = \text{COO-/-/-mentil}$
 $\text{R}^1 = \text{R}^3 = \text{H}$

1,2,4-TRIAZOLT TARTALMAZÓ SZÉNHIRÁTSZÁRMÁZÉKOK SZINTÉZISE
ÉS SZERKEZETVIZSGÁLATA

Készítette: Szűcs Sándor V.é. vegyész

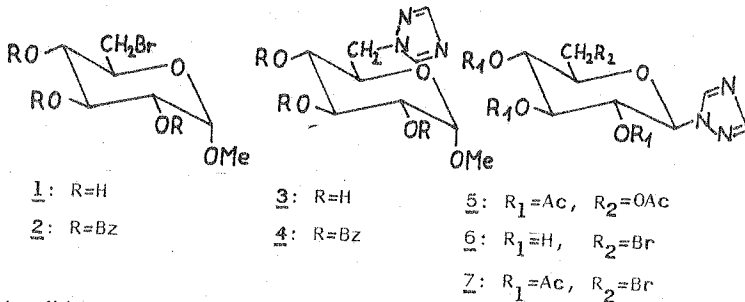
Témavezető: Dr. Fügedi Péter

KLTE Biokémiai Tanszék, Debrecen, Egyetem tér 1.

Az 1,2,4-triazol származékai között számos biológiailag aktív vegyület található. A triazol szénhidrátszármazékai iránt a virazol antivirális hatásának felismerése után nőtt meg az érdeklődés.

A Biokémiai Tanszéken 1,2,4-triazol tartalmú szénhidrát-származékok szintézise terén folyó munka részeként új nukleozid típusú szénhidrátszármazékokat, valamint az eddig ismeretlen 6-dezoxi-6-triazolil-glükóz származékait állítottuk elő.

Az (1,2) brómszármazékok 1,2,4-triazollal végzett nukleofil szubsztitúciója a 6-dezoxi-6-(1,2,4-triazol-1-il) származékokat (3,4) adta főtermékként, a triazolgyűrű csak N-1-en alkileződött.



A 3 további átalakításával a szénhidrát részen különbözőképpen szubsztituált származékokhoz (R= acetyl, benzoyl, metil, palmitoil) jutottunk.

Penta-O-acetyl-β-D-glükopiranoz és 1,2,4-triazol savkatalizált fúziós reakciójával előállítottuk a nukleozid típusú 5-t, valamint a megfelelő α származékot. Az 5 Zemplén-dezacetilálásával kapott 6, Ph₃P-CBr₄-dal történő reakciójával, majd az ezt követő acetilálásával jutottunk a 6-bróm-6-dezoxi származékhoz (7).

ZÁRVÁNYKOMPLEXKÉPZŐDÉS HATÁSA FARMAKONOK
FELSZÍVÓDÁSÁRA

Járai Gábor - Pethő Árpád

Eötvös Lóránd Tudományegyetem, Budapest, VIII. Muzeum krt. 6-8.

A glükopiranoz-egységekből felépülő koszoru alaku ciklodextrinek vizes oldatokban hidrofób kölcsönhatás révén igen sokféle molekulával képeznek zárványkomplexet. Munkánkban β -ciklodextrin hatását vizsgáltuk különböző farmakonok szemipermeábilis membránon keresztüli diffúziójára. Kísérleti berendezésünkkel a bélfal leegyszerűsített modelljét valószínűsítettük meg.

A kiválasztott farmakonok komplexének stabilitását turbidimetriás mérésekkel vizsgáltuk. A zárványkomplekképződés az oldékonyság növelése révén egyrészt gyorsítja a diffúziót, másrészt a jelentős méretnövekedés által lassítja azt. Vizsgálatainkból kitűnt, hogy e hatások annál erősebbek, minél stabilabb a keletkező komplex, és minél nagyobb a komplexképző szer feleslege. Kedvező esetben várható, hogy ciklodextrin hatására a farmakon lényegesen hamarabb jelenik meg a vérben és a vérszintje sokkal egyenletesebb lesz, tovább megmarad.

A diffúzió lassítás mechanizmusának kiderítése céljából megvizsgáltuk "üres" ciklodextrin molekulák diffúzióját is. Azt találtuk, hogy a ciklodextrin lényegesen lassabban diffundál keresztül a membránon, mint a szabad farmakon molekulák. Feltételezésünk szerint tehát a diffúzió lassítását a ciklodextrin egyrészt a szabad farmakon koncentráció csökkenése, másrészt - feleslegben adva - a jelentős méretnövekedés révén okozza.

A FENOTIAZIN- ÉS BUTIROFENON SZÁRMAZÉKOK HATÁSA A BÉTA-
-ADRENERG RECEPTOROKHOZ KAPCSOLT MEMBRÁNFUNKCIÓKRA.

Gálfi Márta

SZOTE Ideg-Elmegyógyászati Klinika

Szeged, Korányi fasor 15.

Davoren és Sutherland vizsgálatai igazolták, hogy a magvas madár vörösvérsejtek β -adrenerg receptorral rendelkeznek, és alkalmasak a noradrenalin /NA/ aktivált iontranszport és a NA szenzitív cAMP képződés szimultán vizsgálatára intakt sejteken. Kísérleteinkben intakt pulyka vörösvérsejteken, in vitro tanulmányoztuk a katekolamin érzékeny K^+ -felvétel mértékét, és a cAMP szintek változásait. A K^+ -felvételt a K^+ radiokémiai nyomjelzőjével a ^{86}Rb -izotóp alkalmazásával, a sejtek cAMP tartalmát protein-binding módszerrel határoztuk meg. A receptor aktiválását NA-nal, gátlását propranolollal végeztük. Az aktív transzportot ouabainnal bénítottuk. A pszichiátriai gyakorlatban széles körben alkalmazott fenotiazin és butirofenon származékok feltételezett hatásmechanizmusa is a receptor érzékenység befolyásolásával értelmezhető, ezért in vitro kísérletekben tanulmányoztuk ezen drogok /Haloperidol, Hibernál, Teperin, Melipramin/ hatásait, a NA érzékeny cAMP képződésére és a ^{86}Rb inkorporációjára. Megállapítottuk, hogy az alkalmazott pszichotróp szerek /neuro- és thimoleptikumok/ 5×10^{-5} M-os koncentrációban szignifikánsan csökkentik mind a NA érzékeny ^{86}Rb felvételt, mind pedig a NA indukált cAMP képződését.

Témavezetők: Dr. Szentistványi István egyetemi adjunktus
Dr. Rimanóczy Ágnes tudományos munkatárs

REACTIONS OF N-HETEROARYLFORMAMIDE OXIMES WITH N,N-DIMETHYLFORMAMIDE DIMETHYL ACETAL. THE SYNTHESIS OF 2-/5'-N,N-DIMETHYLAMINO-1' ,2' ,4'- Δ^2 -OKSADIAZOLINYL-4' /-AZINE N-OXIDES.

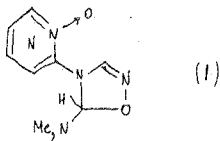
Andrej Gartner

Department of Chemistry and Chemical Technology, E.Kardelj University of Ljubljana, 61000 Ljubljana, Yugoslavia

It was found recently, that N-heteroarylformamide oximes can be converted into N-heteroarylcyanoamines, N-heteroaryl-N-methyl cyanoamines, N-heteroarylcyanoimines and 2-substituted-s-triazolo/1,5-x/azines, dependent on the reaction conditions and the structure of heteroaromatic part of the molecule.

In this communication we would like to report on the transformation of N-heteroarylformamide oximes in the presence of N,N-dimethylformamide dimethyl acetal into 2-/5'-N,N-dimethylamino-1' ,2' ,4'- Δ^2 -oxadiazolyl-4' /-azine N-oxides /I/ as an intermediate in the above mentioned transformations.

A reaction mechanism for the formation of this intermediate and some transformations will be presented.



SYNTHESIS OF SOME OXAZOLO/4,5-d/PYRIDINE DERIVATIVES

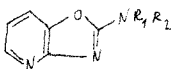
Simona Podergajs

Department of Chemistry and Chemical Technology, E.Kardelj
University of Ljubljana, 61000 Ljubljana, Yugoslavia

2-Amino-3-hydroxypyridine /I/ was converted with *N,N*-dimethylformamide dimethyl acetal into the corresponding 2-/*N,N*-dimethylaminomethyleneamino/-3-hydroxypyridine which was further transformed with hydroxypyridine. The latter could be cyclized by treatment with *N,N*-dimethylformamide acetal into substituted 2-aminooxazolo/4,5-d/pyridine /II/.



(I)



(II)

Felületkezelt inhibitorpigmentek fizikai tulajdonságainak és
korrózióvédőképességének vizsgálata

Angyalffy Éva

Veszprémi Vegyipari Egyetem

Veszprém, Schönherz Z. u. 10. 8200.

A festékiparban is előtérbe került az energiatakarékos technológiák alkalmazása. A festékgyártás során a legenergiaigényesebb művelet a poláris felületű pigment diszpergálása apoláris kötőanyagban. Alapozófestékekben gyakran alkalmazzák a kromát pigmenteket korrózióvédő pigmentként. A bevonatból könnyen kioldódó kromátok azonban az egészségre és környezetre káros vegyületek. A bedörzsölés energiaigénye valamint a pigment oldódása előnyösen befolyásolható a pigment felületkezelésével.

Munkánk során különböző mértékben felületkezelt stroncium-, illetve cink-kromát fizikai tulajdonságait vizsgáltuk. Meghatároztuk a pigment üledéktérfogatát alifás és aromás oldószerben, és oldódását ionmentes vízben.

A felületkezelt kromátok korrózióvédőképességét, vagyis a pigmentek inhibitorhatásfokát az elektródimpedancia frekvenciafüggésének analízisén alapuló módszerrel vizsgáltuk.

A felületkezelt pigmentekből festékeket készítettünk és ezeket gyorsított korróziós vizsgálatoknak vetettük alá.

A kapott eredményekből megállapítottuk a felületkezelés optimális mértékét.

Felületkezelt inhibitorpigmentek korrózióvédképességének vizsgálata

Varga Tamás

Veszprémi Vegyipari Egyetem

8200. Veszprém, Schönherz Z. u. 10.

A felületkezeléssel módosított pigmentek között különleges helyet foglalnak el azok, amelyek fémfelületek korrózióvédelmére szolgáló alapozófestékekben mint inhibitorpigmentek kerülnek felhasználásra. Ezen pigmentek legjellegzetesebb képviselői a különböző kromátok, amelyek víz hatására kromát ionokat juttatnak oldatba. Két ellentétes hatás érvényesül, amely pigmentnek a védőhatása a legnagyobb, ott a legrövidebb a védőhatás élettartama. Ahhoz, hogy ez a két hatás a legkedvezőbb eredményt adja, a pigment oldódási sebességét kell megváltoztatni.

Munkánk során különböző mértékben felületkezelt stroncium-, illetve cink-kromát korrózióvédképességet vizsgáltuk. Meghatároztuk a felületkezelt pigmentek inhibitorhatásfokát a tömegváltozás mérésével, valamint széles potenciáltartományban végzett polarizációs vizsgálatokból. A kapott eredményekből kitűnik, hogy a felületkezelőszer koncentrációjának függvényében az inhibitorhatásfoknak maximuma van.

Ólommérgezési lehetőségek kiküszöbölése az
ólomüvegek előállításánál.

Témavezető: Dr.Kocsis Géza egy.adjunktus
Készítő: Máté Éva III. évf. vm.hallgató

Ólomüveg gyártásával kapcsolatban igen súlyos gondokat jelentő problémák; a PbO veszélyezteteti mind az emberi szervezetet, mind a környezetet.

A jelen technológiákban elsősorban a nyersanyagok porzása, valamint az olvadékból a PbO párolgása okoz gondot technológiai és egészségvédelmi szempontból. Ennek elkerülésére vizsgáltuk az ólomüveg keverékek granulálásának lehetőségeit, valamint az olvadékból illanó PbO-tartalom változását.

Részletesen ismertetjük a granuláló berendezéseket, a granulátumok vizsgálatait /a granulátum szemcseeloszlásának változását a koptató hatás függvényében; a granulátum és a porkeverék tömeggyarapodását 50 % relatív nedvességtartalmú térben az idő függvényében; a porkeverékből és a granulátumból laboratóriumi körülmények között olvasztott üveg tulajdonságait, az üveg PbO tartalmának változását a granulátum adagolás hatására; az ólomüveg párolgásából bekövetkező veszteségek alakulását konstans hőmérsékleten/.

Arra a következtetésre jutottunk, hogy meghatározott kémiai összetételű üveg olvasztási technológiájánál nehezen érhető el az illanási veszteség csökkentése, egyszerű beavatkozásokkal, vagy olvasztási eljárás módosításával.

Javaslatot teszünk az emberi munkaerő kiküszöbölésére, robotok alkalmazásának bevezetésével. Ismertetjük ezeket a robotokat az ipari manipulátorokat.

TIMFÖLDHIDRÁT FLUIDIZÁCIÓS TULAJDONSÁGAINAK
VIZSGÁLATA

Készítette: Bubonyi Erzsébet
VESZPRÉMI VEGYIPARI EGYETEM
Veszprém, Schönherz Z.u.ló. 8201

Napjainkban a különböző vegyipari folyamatok megvalósításánál egyre nagyobb jelentőségű a fluidizációs eljárás. Laboratóriumi méretű 49 mm átmérőjű fluidizációs berendezésben üzemi timföldhidrátot fluidizáltattam. 100-200-300 g száraz timföldhidrát bemérésnél mértem a rétegmagasság változását az idő függvényében különböző lineáris áramlási sebességeknél /0,012-0,15 cm/s intervallumban/. A kapott adatokból meghatároztam a minimális fluicizációs sebességet /0,040 - 0,042 cm/s/ és a réteg fellazulására jellemző szabadtérfoogat tényezőt.

Vizsgáltam a rétegben lévő timföldhidrát szemcseméret szerinti osztályozódását, ugyanis az eredeti szemcseméret-eloszlás jelentősen változik. A réteg alján nagy mértékű durvulás következik be, a réteg tetején pedig az apróbb szemcsék helyezkednek el.

A szemcseméret-eloszlás és gyakorisági görbék értékelésével meghatároztam az átlagos szemcseátmérő különbségeket és a szemcsezám-hányadosokat, amely görbékből az osztályozás szempontjából optimális sebességintervallum határozható meg.

DEKONTAMINÁLHATÓSÁG VIZSGÁLATA KÜLÖNBÖZŐ BEVONATOKON

Varga Kálmán és Vigchert Ferenc

Veszprémi Vegyipari Egyetem Radiokémia Tanszék, Veszprém, Pf.158.

A radioaktív izotópokkal dolgozó munkahelyeken - elsősorban az atomerőművekben - a berendezések és a helyiségek felületére normál üzemmenet esetén is kerülhet sugárzó anyag, a felületek kontaminálódhatnak.

A különböző bevonatokon a radionuklidok megkötődése eltérő, így a sugármentesítés, a radioaktív szennyezés eltávolítása vagy csökkentése különböző hatásfokkal végezhető el. A hatásfokot dekontaminációs faktorial jellemezzük.

A dekontaminációs faktor meghatározására alkalmazott eljárások főbb paramétereit táblázatban foglaltuk össze. Kísérleti munkánkban különböző bevonatokon adszorpciós és beszárítási módszerrel ^{131}I , ^{60}Co és ^{60}Co - ^{137}Cs elegyének alkalmazásával határoztuk meg a dekontaminációs faktorokat.

Dolgozatunkban az alkalmazott módszerek összehasonlítása mellett a kapott eredményeket grafikusán értékeljük.

A STUDY OF POWER CONSUMPTION, GAS HOLDUP AND
INTERFACIAL AREA IN TWO AND THREE-PHASE SYSTEMS
IN STIRRED TANK AND BUBBLE COLUMN

Egidič CAPUDER

Department of Chemistry and Chemical Technology Kardelj
University, Ljubljana

Gas holdup, interfacial area and power consumption were studied with gas - liquid and gas - liquid - solid systems in stirred tank and bubble column as function of operating variables. Experiments were carried out at conditions of high gas velocities important for practical application. The experimental results were compared to the correlations which are valid for the gas - liquid system. A good agreement was obtained between predicted and experimental results in two - phase systems. The power consumption in the three - phase systems can also be predicted approximately with the dimensionless equation which was obtained for two - phase systems. However, there are large deviations from the experimental data if the two - phase equations are used for prediction of interfacial area and gas holdup in the presence of large concentrations of solids. Both, gas holdup and interfacial area decrease with increasing solid concentration.

KÜLÖNBÖZŐ MÓDON ELŐÁLLITOTT HEMATIT MINTÁK
REDUKÁLHATÓSÁGÁNAK ÖSSZEHASONLÍTÓ VIZSGÁLATA

Tüdös A., Kisfaludi G.

ELTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A vas-oxidok H_2 -nel való redukciójával az utóbbi években számos közlemény foglalkozott.

Lemaitre és munkatársai 1982-ben megjelent cikkükben eltérő szemese méretű Fe_2O_3 minták redukálhatóságát vizsgálva azt találták, hogy a redukálhatóság a szemese méret növekedésével csökken. Mintáikat $FeSO_4$ hőbontásával állították elő és 600-900°C közötti hőmérsékleten végzett hőkezeléssel érték el a különböző szemese méreteket. E munkának hibája az, hogy az eltérő előkezelési hőmérséklettel a minták hibahelyszerkezetét is befolyásolták, és ezt figyelmen kívül hagyták.

A mintákat ún. permethőbontással ill. tégelyes technikával állítottuk elő 500, ill. 800°C-on. Mindkét módszernél vizes $Fe/NO_3/3$ oldat cseppjeinek pillanatszerű megszáradása és a kivált só hőbontása megy végbe, de lényeges különbség van az alkalmazott cseppméretben. A szemese méret eloszlását pásztázó elektronmikroszkóppal határoztuk meg.

A redukálhatóságot két gázkromatográfiás módszerrel vizsgáltuk. Az egyiknél 500°C-on H_2 impulzusokat alkalmaztunk és a H_2 fogyásból következtettünk a konverzióra. A másik módszer hőmérsékletprogramozott redukció /TPR/ volt, H_2 áramban 100 és 450°C között, ahol a képződő vizet detektáltuk.

Mindkét mérésorozat eredményei azt igazolták, hogy a redukálhatóságot mind a szemese méret, mind az előállítási hőmérséklet növelése csökkenti. Az észlelt effektus nagysága összemérhető, iránya megfelel várakozásainknak.

A TITÁN PASSZIVÁLÓDÁSI SAJÁTSÁGAINAK VIZSGÁLATA KÉNHI-DROGÉNT ÉS KLORIDIONOKAT TARTALMAZÓ VIZES ELEKTROLITOLDATOKBAN

Lukács Zoltán

József Attila Tudományegyetem Természettudományi Kar
Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

A titánt és ötvözeteit passziválódási sajátságukból adódó korrózióállóságuk folytán egyre elterjedtabben alkalmazzák a gyakorlatban szerkezeti anyagként kénhidrogént és kloridionokat tartalmazó közegekben is. /pl. a kőolajiparban/

Sok munka foglalkozik a titán korróziós sajátságaival különböző savanyu oldatokban, azonban a kénhidrogén és a kloridionok hatását a titán korróziósebességére ill. a felületén kialakuló passziváló film sajátságaira még nem tisztázták.

Kísérleteim során a titán aktív-passzív átmenetének paramétereit vizsgáltam kvázi-potenciosztatikus módszerrel, különböző aniontartalmu és pH-ju, kénhidrogén-mentes ill. kénhidrogénnel telített közegekben, valamint a korróziósebesség összefüggését a kénhidrogén-koncentrációval, stacionárius galvanosztikus valamint tömegvesztés-méréseken és az oldatba ment titán mennyiségének a meghatározásán alapuló módszerekkel.

A kísérleti eredmények azt mutatták, hogy a kénhidrogén a különböző közegekben az aktív-passzív átmenet paramétereit nem befolyásolta. Erősen savanyu /l. mól/dm³ koncentrációju/ kénsavoldatban elsősorban a katódos részfolyamatra gyakorolt hatása által megnöveli a korróziósebességet.

**ÚJ VIZSGÁLATI MÓDSZER KORSZERŰ PAPIRIPARI RAGASZTÁSI
TECHNOLÓGIÁHOZ**

Ponty Magdolna, Badár Éva

Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Új és egyszerű vizsgálati módszert dolgoztunk ki az ömledékragasztók /hotmeltok/ alkalmazástechnikai tulajdonságainak jellemzésére. Erre vonatkozó szabványvizsgálatok nincsenek, sőt ilyesfajta egyszerű módszert vagy készüléket sem találunk leírva az irodalomban.

A módszer lényege: jól definiált mennyiségű és hőmérsékletű ragasztócsappal különböző ragasztókötésekett állítottunk elő a ragasztó felhordásától számított t_H holt idő múlva. Az összeragasztott próbatesteket t_K kötési idő múlva szétfejtettük és mértük a szétfejtéshez szükséges erőt.

A különböző szétfejtési erő-idő függvények vizsgálata alkalmas:

- különböző ömledékragasztók alkalmazástechnikai tulajdonságainak /nyitott idő, iniciais kötési sebesség, ragacsosság/ számszerű értékelésére.
- különböző szubsztrátumok ragaszthatóságának összehasonlítására
- teljes ipari ragasztási technológiai folyamatok modellezésére és vizsgálatára.

A pályázatban két konkrét technológiai folyamaton mutatunk be a módszer adta vizsgálati lehetőségeket. A Dunaujvárosi Papírgyárban paraffinozott hullámdobozok ragasztására dolgoztunk ki az adott technológiai feltételeknek megfelelő optimális paramétereket. A Kiskunhalasi Papírgyárban a kombidoboz gyártásánál felhasználásra kerülő papírral kasirozott alufólia és a polipretilénnel bevont papír ragaszthatóságát vizsgáltuk, és az üzemi kísérletek a javaslatainkat igazolták.

PAPIROK SZILIKONOS BEVONÁSA VIZES EMULZIÓKKAL

Batha Judit

Budapesti Műszaki Egyetem; Budapest, XI. Műegyetem rkp. 3.

Tudományos diákköri dolgozatom célja import szilikon bevonatu papirok helyettesítése hazai alappapirok és import szilikon termékek ill. féltermékek alkalmazásával. Ezek a papirok ragacsos anyagok - elsősorban bitumen - csomagolóanyagaként kerülnek felhasználásra.

Kísérleti munkánk első részében szilikonos bevonásra javasolt hazai előállítású, zárt szerkezetű papirokat vontunk be vizes szilikonemulzió és katalizátor elegyével laboratóriumi körülmények között. Az ily módon és a félüzemi módszerrel előállított papirok tulajdonságait laboratóriumi és üzemi körülmények között vizsgáltuk. Munkánk második részében import szilikon félterméket emulgeáltunk vízben és meghatároztuk a termék filmképző tulajdonságait. A térhálósítást mindkét esetben hőkezeléssel végeztük.

Gazdaságossági számítást végeztünk, melyben összehasonlítottuk a jelenleg felhasznált import szilikonpapirok és a dolgozatom készítése során előállított szilikonnal bevont papirok anyagköltségét.

Kísérleti munkánk eredményeként megállapítható, hogy a különböző gyártmányú szilikonemulziók és megfelelő katalizátorok alkalmazásával jó minőségű szilikonfilm alakítható ki zárt szerkezetű papirokon. A laboratóriumi ill. a félüzemi körülmények között bevont papirok tulajdonságai megközelítik az import papírét. A minősítés alapjául a tapadóerő szolgált. Kísérleti munkánk során sikerült olyan szilikonos papírt előállítani, mely megközelíti az import papír tulajdonságait bitumen csomagolásakor.

Lineáris szilikon polimer féltermék és megfelelő emulgeálószer, katalizátor alkalmazásával sikerült stabil szilikonemulziót előállítani, melyből jó minőségű filmet alakítottunk ki hazai alappapíron. A gazdaságossági számítás közelebbi adatai alapján látható, hogy érdemes ezzel a szilikonemulzióval a továbbiakban is foglalkozni.

TENZIDALAPANYAG ELŐÁLLÍTÁSA TECHNIKAI SZEKUNDER ZSIRALKOHOL-
ELEGY ES BENZOL REAKCIÓJAVAL

Rivó Endre

Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Technológia Tanszék
1111. Budapest, Műegyetem rkp. 3

Munkám célja az olcsón hozzáférhető Baskirov-alkonol felhasználhatóságának vizsgálata benzol Friedel-Crafts-alkilezésében /az esetleges ipari alkalmazhatóság figyelembevételével/ tetergens alapanyagul szolgáló alkil-benzol előállításához.

Mivel a Baskirov-alkohol bonyolult összetételű, ezért 2-oktanol modellvegyülettel határoztam meg a benzol alumínium-kloriddal katalizált alkilezésének közepetőlleg optimális paramétereit. Ezek ismeretében Baskirov-alkonollal ill. frakcióival alkilezve állítottam elő alkilbenzolokat. Vizsgáltam továbbá a fenti reakcióban a kénsav és a polifoszforsav katalitikus hatását is. A polifoszforsav-katalizációs reakcióelegy feldolgozására új módszert dolgoztam ki.

Kísérleteim alapján megállapítható, hogy a benzol Baskirov-alkohollal ill. frakcióival történő alkilezésének katalizálására az alumínium-klorid és a polifoszforsav a legalkalmasabb, a kénsavval csak rossz termelések érhetők el.

Mind az alumínium-klorid, mind a polifoszforsav jelenlétében közepesnél jobb a termelés, minimális mennyiségű melléktermék. Az ipari alkalmazhatóságot a két eljárást összehasonlító gazdasági számításnak kell majd eldöntenie.

ELEKTROKINETIKAI PARAMÉTEREK MEGHATÁROZÁSA NEMLINEÁRIS
PARAMÉTERBECSLÉSEL

László Ibolya, Jankó Tamás
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest

A fémek anódos oldódásának polarizációs görbéje többváltozós, többparaméteres nemlineáris függvénykapcsolattal írható le. Feladatunk volt e függvény helyességének és paramétereinek meghatározása különböző elektródok és elektrolitok esetén. Korábban ezt grafikus módszerrel oldották meg. A számítógépek elterjedésével lehetővé vált a numerikus nemlineáris paraméterbecslés. A rendelkezésünkre álló algoritmusok felhasználásával készítettünk egy olyan nemlineáris paraméterbecslő programot, amely megfelelő kezdeti becslések esetén alkalmas a polarizációs görbe paramétereinek és azok megbízhatóságának meghatározására.

Munkánk során Cd és Cu esetében végeztünk számításokat. Bebizonyosodott, hogy az alkalmazott elektrolitokban a Cd esetében az összefüggés nem alkalmazható. Cu elektród esetén viszont a nemlineáris paraméterbecsléssel kapott eredmények összevethetők az irodalmi adatokkal.

HF-NÁTRIXELEMEK TRANSZFERÁLHATÓSÁGÁNAK VIZSGÁLATA CNDO/2
SZEMIEMPIRIKUS KVANTUMKÉMIAI MÓDSZERRELLOVAS Sándor[†]József Attila Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai
Tanszék, Szeged, Rerrich Béla tér

Nagy /cél-/molekulák Fock-mátrixát fel lehet építeni kis /minta-/molekulák konvergált Fock-mátrix elemeiből feltéve, hogy a célmolekula és a mintamolekulák ugyanazon fragmensekből vagy funkciós csoportokból állnak. Az ilyen elven működő transzferencia módszert korábban ab inició szinten alkalmazták¹, ami erősen korlátozta a használhatóságát a nagy számítógépidő szükséglet miatt. Ujabbán ezért alkalmaznak szemiempirikus módszereket² a transzferencia elvének igazolására ill. ezen alapuló szimulációs MO módszer kidolgozására. Jelen munkánk célja az volt, hogy d-pályákat is tartalmazó molekuláknál megvizsgáljuk a Fock-mátrix transzferencia lehetőségét.

Számításaink szerint általában igen jó egyezéseket kaptunk a megfelelő Fock-mátrix elemekre különböző molekulák azonos fragmenseinél ill. funkciós csoportjainál, ami bizonyítja kölcsönös transzferálhatóságukat. Eljárásunkat és eredményeinket zárt héju szilícium vegyületek /szilánok, szilanolok és sziloxánok/ homológ sorozatain³ illusztráljuk. A triszilán molekula esetében a direkt számítások eredményeivel való összevetéssel azt is bemutatjuk, hogy milyen hatása van az eredményekre az iterációnak, a nemiteratív megoldásból kiindulva.

1. Eilers, J.E., D.R. Whitman: J. Amer. Chem. Soc, 95, 2067 /1973/
2. Bán, M.I., I. Bálint, M. Révész: Acta Phys. Chem. 25, 313 /1979/
3. Lovas, S., I. Bálint, M.I. Bán: Acta Chim. Hung. /közlésre elfog./

[†]Jelenlegi cím: MTA Szegedi Biológiai Központja "B" Izotóp
Laboratórium, Szeged

RÖVIDTÁVU TERMELÉSIRÁNYÍTÓ PROGRAM KIDOLGOZÁSA
SIMULA NYELVEN

Tóthné Verasztó Andrea

BME Vegyészmérnöki Kar, Budapest, XI. Műgyetem 3.

Egyik gyógyszergyárunk alapanyaggyártó üzemének tanulmányozása után célul tűztem ki egy rövidtávú termelésstervező program kidolgozását.

Munkámat egy számomra új programnyelv, a SIMULA el-sajátításával kezdtem. Ez a nyelv jól használható a cé-lul kitűzött gyártásütemezés megvalósításához. Átnéztem a feladathoz illeszkedő, megjelent irodalmi munkákat.

Az elkészült program négy fő részből áll:

1. A vizsgált üzem modelljének felállítása, a gyártási rend meghatározása.
2. Az egyedüli gyárthatóság vizsgálata. Egy-egy gyártá-son belül a technológiák lehetséges legkésőbbi indi-tási időpontjának kiszámítása azzal a feltételezés-sel, hogy az üzemben csak az éppen számított gyártás folyik, és valamennyi készülék rendelkezésre áll.
3. Az együttes gyárthatóság vizsgálata. Az előző rész-ben kiszámított technológiai időket a szükséges erő-forrásokhoz rendeli. Megvizsgálja, hogy van-e olyan időszak, melyben valamelyik erőforrás tervezett ter-helése nagyobb a lehetségesnél.
4. Gyártásütemezés. Ütemezési konfliktusok feloldása. Amennyiben az előző két pont számításai nem zárják ki a terv teljesíthetőségét, akkor különböző stratégiák sze-rint sor kerül a gyártásütemezésre.

TDK munkám során az első három feladatot vittem szá-mítógépre, a gyártásütemezést a dolgozat beadása után oldottam meg.

PROGRAMOK KÉSZÍTÉSE
ÖSSZETETT VEGETÁRI FOLYAMATOK SZÁMITÁSI RENDSZERÉHEZ

Meszéna Zsolt

BME Vegyészmérnöki Kar, Budapest Műegyetem rkp. 3.

E dolgozat alapjául szolgáló Tudományos Diákköri munkám egy már meglévő flowsheeting programrendszer továbbfejlesztésébe való bekapcsolódás, bedolgozás volt. Az említett programrendszert a BME Vegyészmérnöki Kar Matematika Tanszékén témavezetőm, Jedlovsky Pál készítette SIMULA 67 programnyelven.

Dolgozatom két konkrét feladat megoldásáról ad számot. Az első a /CHEMSIM nevű/ flowsheeting program 2. változata input adatrendszerének ellenőrzésére írt ellenőrző program. A másik feladat egy olyan programváltozat kifejlesztése volt, amellyel azonos jellegű, egy művelet elvégzésére sorbakapcsolt készüléksor modellezhető, de az input adatokat csak a bruttó folyamatra adjuk meg - mintha csak egy készülékkel dolgoznánk. Így a bevitt adatok mennyisége csökken, a bruttó folyamatot a program bontja lépésekre: generálja az egyes egységeket, kezdőértéket ad, és /az anyakészüléket kifűzve/ bekapcsolja azokat a folyamatba.

Ebben a programváltozatban a probléma szervezési része van megoldva, az egységekben végbemenő anyagátadást számoló eljárás hiányában komplett modellezésre /még/ nem képes.

A programokat az MTA CDC 3300-as számítógépén készítettem SIMULA programnyelven.

HASONLÓ ALAPVÁZU SZERVES VEGYÜLETEK SZERKEZETÉNEK
SZÁMÍTÓGÉPES ÖSSZEHASONLITÁSA GRÁFELMÉLETI MÓDSZEREKKEL

Pallagi János - Páldi István

Budapesti Műszaki Egyetem Vegyész-mérnöki Kar
Budapest, XI., Műgyetem rakpart 3.

Munkánk során a Randic¹ és Wilkins által kidolgozott szerkezetösszehasonlítási módszer számítógépes programját készítettük el.

Az eljárás azon alapul, hogy a szerves vegyületekből képzett gráfok tulajdonságainak összehasonlításával azok kémiai és biokémiai hatásának hasonlóságairól is következtetések vonhatók le. A vizsgált gráftulajdonság a különböző hosszúságú utak száma, az összehasonlítás alapja pedig az előfordulási értékek vektorainak távolsága.

Egy adott vegyületcsoportnál a távolságértékek alapján meghatározhatjuk a várhatóan azonos biológiai hatásúakat.

A program elkészítése után ismert hatású gombaölőszerek adatainak felhasználásával teszteltük az eljárást és megállapítottuk, hogy ezekre a vegyületekre a módszer által felépített hasonlósági sorrend jó egyezést mutat a kísérleti értékek alapján kapott sorrenddel. A későbbiekben a program a szükséges átalakítások után a Számítástechnikai Koordinációs Intézet hatóanyagtervezési moduljának részévé vált.

1 = Randic and Wilkins: Graph Theoretical Approach to
Recognition of Structural Similarity
in Molecules.
Chem. Inf. Comp. Sci.
1979. 19 /1/ 31 - 7.

A GLIOXÁL KONFORMERJEINEK NORMÁLKOORDINÁTA ANALIZISE

Zagyva Adél

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék
4010 Debrecen, Egyetem tér 1.

A QCPE-339 program segítségével normálkoordináta analízist végeztünk a glioxál s-transz- és s-cisz-konformerjeire. Célunk e két konformer síkban történő normálrezgéseinek összehasonlító vizsgálata volt.

A geometriai paramétereket és az F erőállandó mátrixokat az irodalomból vettük. Vizsgáltuk a geometria, az atomtömeg és az erőállandók változásának hatását a normálfrekvenciákra, a normálrezgési módokra és a potenciális energia belső koordináták szerinti megoszlására.

Eredményeink - további vizsgálatok elvégzésével - lehetőséget adnak α -dikarbonil vegyületek rezgési sajátosságainak jobb megértéséhez.

DIGITALIZATION OF INFRARED SPECTRA ON A PDP 11/34
MINICOMPUTER

Anton Kovač

University Edvard Kardelj, Ljubljana
Faculty of Natural Sciences and Technology

The scope of work was to use a minicomputer to process IR spectra. It was necessary to develop, gather and complete the software for the following work with IR spectra:

- digitalization
- conversion and normalization of the digitized values
- graphical display of spectra on the video-terminal
- completion of spectra with different data
- calculation of peaks in an individual spectrum
- editing a list of peaks, chemical names and formulae in the Wiswesser Linear Notation /WLN/ of the compounds, of which we have taken the IR spectra
- creation of an inverted file for fast retrieval of spectra, when positions of peaks are known.

A minicomputer Digital PDP 11/34 with the memory configuration of 128k was used. A home-made digitizer, based on a x-y recorder Honeywell 530, was used for the digitalization of spectra.

IR spectra were stored as a set of points in a 650-dimensional measuring space.

250 IR spectra were digitized from the collection Hummel/Scholl: Atlas of Polymer and Plastics Analysis, C.H.V. Muenchen 1973. On these spectra the software for the work with IR spectra was tested. An inverted file was created, which can be used with the search algorithm of the Chemical Information System KISIK; therefore it can be used in everyday analytical work. The data-bank of digitized IR spectra which was generated with the described hardware and software is a data-base on which further work is expected.

A PROGRAMOZHATÓ TUDOMÁNYOS
KALKULÁTOROK ALKALMAZÁSA
A KÉMIA OKTATÁSBAN

Novák László, Váradi Tibor
Zalka Máté Katonai Műszaki Főiskola
Budapest

Áttekintettük a vegyivédelmi hallgatók számítás-technikai oktatásának rendszerét és a programozható tudományos kalkulátorok alkalmazásának lehetőségeit az alapozó természettudományi tantárgyak oktatásában.

Programokat készítettünk a PTK-1096 kalkulátorhoz a fizikai kémiai mérések értékelése köréből. Pl.: a relatív molekulatömeg meghatározása a forráspont-emelkedés és fagyáspont-csökkenés mérése alapján, a viszkozitás, a sebességi állandó és az aktiválási energia kiszámítása a mérési adatok alapján, az Arrhenius-, Clausius-Clapeyron és a Van't Hoff egyenletek megoldása, az adszorpciós izotermák állandóinak meghatározása stb.

Programonként megadtuk az elméleti alapokat, a felhasználói utasítást, valamint a gépi program algoritmusát és listáját.

A PROGRAMOZHATÓ TUDOMÁNYOS KALKULÁTOROK
ALKALMAZÁSA A VEGYJ- ÉS SUGÁRHELYZET
ÉRTÉKELESBEN

Váradi Tibor, Novák László
Zalka Máté Katonai Műszaki Főiskola
Budapest

Áttekintettük a vegyivédelmi hallgatók számítás-technikai oktatásának rendszerét és a programozható tudományos kalkulátorok alkalmazásának lehetőségét a szaktantárgyak oktatásában.

Programokat készítettünk a PTK-1096 kalkulátorhoz a vegyi- és sugárhelyzet értékelése köréből. Pl.: a mérgező anyagok illékonyságának és maradóságának kiszámítása, a mérgező felhő terjedésének és hígulásának kiszámítása, a sugárzó anyaggal szennyezett terep leküzdésekor elszennvedhető sugáranyag kiszámítása stb.

Programonként megadtuk az elméleti alapokat, a felhasználói utasítást, valamint a gépi program algoritmusát és listáját.

258

7P1-7P02

7-P1

A FORDITOTTFÁZISU FOLYADEKKROMATOGRÁFIÁS PUFFERKÉNT HASZNÁLTOS FOSZFÁTION PROTONÁLÓDÁSÁNAK VIZSGÁLATA METANOL-VIZ ELEGYEKBEN

Leitold Adrien

Veszprémi Vegyipari Egyetem, Veszprém

A fordítottfázisú folyadékkromatográfiás vizsgálatokban gyakran használnak foszforsav-foszfát puffert, az eluens kivánt pH-értékének beállítására. A pontos pH-érték beállításához szükséges a foszfátion protonálódási állandóinak ismerete metanol-viz elegyekben. Ilyen adat az irodalomban nem található.

A mérésorozat célja megállapítani, hogy a metanoltartalom függvényében hogyan változnak a foszfátion protonálódási állandói. Különböző metanoltartalommal foszforsav és karbonátmentes kálium-hidroxid oldatsorozatot készítettünk. A foszforsavat inert nitrogén atmoszférában potenciometrikusan titráltuk kálium-hidroxiddal, mérve a látszólagos pH értéket. A látszólagos pH-t Bates szerint korrigáltuk, és az így kapott titrálószer fogyás-pH értékpárokából Albert-Serjeant módszerével határoztuk meg a protonálódási állandók értékeit.

Végül a metanoltartalom függvényében ábráztuk a fenti módon kapott K_1 , K_2 protonálódási állandó értékeit.

EMISSZIÓS SZINKÉPANALITIKÁBAN HASZNÁLTATOS KÜLÖNBÖZŐ SZÉN-
SEGÉDELEKTRODOK VIZSGÁLATA IZOTÓPOS NYOMJELZÉSSEL

Borbély Dezső

Veszprémi Vegyipari Egyetem Radiokémia Tanszék, Veszprém, Pf.158.

Az emissziós szinképelemzés megbízhatóságát döntően befolyásolhatja a minta párolgása, lecsapódása. E folyamatok radioaktív izotópos nyomjelzéssel is vizsgálhatók. A cseppentéses /Scheibe-Rivas/ módszer nyomjelzésére ^{51}Cr izotópot használtunk. Váltóáramú ivgerjesztést alkalmazva vizsgáltuk: a hordozó /H/ és ellenelektrod /E/ anyagának, a hordozóelektrod polaritásának /P/ és a minta nátriumtartalmának /N/ a párolgásra, kondenzációra gyakorolt hatását. Az aktivitásméréseken kívül autoradiográfiával megállapítottuk az ellenelektrodokon a ^{51}Cr eloszlását. Eredményeinket matematikai statisztikai úton értékeltük ki. A következő paraméterek a feltüntetett sorrendben szignifikánsan /99%/ befolyásolják a vizsgált folyamatokat.

Elektrodok anyaga	Mintához adagolt nátrium	Hordozóelektrodok relatív aktivitáscsökkenése $ \Delta I/I_0 $ alapján	Ellenelektrodok relatív aktivitása $I_e/ \Delta I $ alapján
a szignifikáns paraméterek sorrendje			
SU grafit	0	H>>P>HP	P>>E>EP
SW szén			
SU grafit	0,16 mg/ml	H>P>HP	P>>H \approx EP
SW szén			

Például a HP interakció azt jelenti, hogy a H és P hatása többé kevésbé nem független egymástól. E módszer segítségével kiválasztható a legkisebb elemési hibát biztosító paraméteregyüttes /pozitív polaritás, grafit elektrod-pár, nátrium hozzáadásával/.

ALKÁLIFÉMEK LÁNGFOTOMETRIÁS ANALIZISÉNEK PROBLÉMÁI.
SZÁMÍTÓGÉPI PROGRAMOK A MÉRÜGÖRBÉK KIÉRTÉKELÉSÉRE

Bentzik Zsuzsanna és Jekő József

JATE, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged

A lángfotometriás szinképelemzési módszer alkalmazásánál az anyag molekulái a láng hőmérsékletén energiát vesznek fel és kialakul néhány egyensúly, mint pl. a termodiszociáció, gerjesztés, ionizáció, stb. A lángfotometriával meghatározható elemek között az alkálifémek ionizációs energiája viszonylag alacsony. Ha egy meghatározandó alkálifém oldatához egy alacsonyabb ionizációs energiájú másik alkálifém oldatát adjuk, ez utóbbi fog ionizálódni, és az előbbi főként atomos állapotban lesz a lángban; ennek következtében emissziója növekedni fog. Hasonló a hatás, ha nagyobb ionizációs energiájú alkálifémet adunk jelentősen nagyobb koncentrációban a vizsgált alkálifém oldatához. Ezt a hatást tanulmányoztuk K--Cs, K--Li, K--Na, Na--Li és Na--K elempár esetében. A második alkálifém jelenléte a meghatározandó alkálifém kalibrációs görbéjének alakját is megváltoztatja. Addíciós kiértékelő eljárás esetén ez befolyásolja a módszer pontosságát. Vizsgálataink célja az addíciós eljárás pontosságának megjavítása volt a mérőgörbe linearizálásával. Erre a célra olyan számítógépi programot szerkesztettünk, amely figyelembe veszi a görbültséget és meghatározza a görbe meredekségét az ismeretlen koncentrációnál.

A PIROLUZIT ÉS A MANGANIT EGYMÁS MELLETTI
KVANTITATIV MEGHATÁROZÁSA

Vargáné Milota Katalin
V. éves vegyészhallgató
JATE Ásványtani, Geokémiai
és Kőzettani Tanszék

A hazai mangánérc-vagyon kiaknázása szempontjából fontos, hogy gyors és viszonylag pontos módszer álljon rendelkezésre az érctelepek ásványi összetételének meghatározására.

A dolgozat célja: jó közelítő mennyiségi eredményeket adó röntgen-diffraktometriás eljárás kidolgozása a különböző mangánoxidok mennyiségi viszonyainak meghatározására. Ennek érdekében munkám során két fontos, nagy tisztaságu ásványt, a piroluzitot és a manganitot vizsgáltam. Meghatároztam a kiindulási oxidok Mn és aktív oxigén tartalmát /hagyományos kémiai analizissel/, majd az ásványokat Al_2O_3 -dal higitva négy különböző koncentráció-sorozatot készítettem. A kiindulási anyagok és az egyes minták röntgen-diffraktogramja, infravörös spektruma és termikus viselkedése alapján olyan kalibrációs görbéket készítettem, melyek segítségével a gyakorlat számára elfogadható pontossággal megadható bármilyen ismeretlen mintában a mangánoxidok aránya.

A módszert továbbfejlesztve, az egyéb ásványi elegyrészeket /agragásványok, pirit, karbonátok, stb./ is figyelembe véve alkalmazható lenne természetes mangánérc előfordulásokat /pl.: Urkut/ ásványos összetételének kvantitativ meghatározására.

TÖBBKOMPONENSŰ ELEGYEK MENNYISÉGI ELEMZÉSE
SZÁMITÓGÉP-SPEKTROMÉTER RENDSZERREL

Horváth Tibor

Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Kémia Tanszék

1521 Budapest

Számítógépi programot dolgoztunk ki többkomponensű ele-
gyek összetételének meghatározására a tiszta anyagok, vala-
mint az elegy teljes ultraibolya szinképének felhasználásá-
val. A szinképeket Zeiss Specord UV-VIS spektrométerrel vet-
tük fel, amelyet Robotron gyártmányú KSR-4100 típusú számi-
tógéppel vezéreltünk.

A gépi nyelven készített interaktív adatelőállító prog-
ram automatikus hullámhosszléptetés mellett 2048 akkumulált
adatpont előállítását teszi lehetővé. A digitális felbontás
 $2,5 \cdot 10^{-7}$.

Az adatfeldolgozást off-line végeztük. Az Algol nyelven
készített program módot ad a szinképek utólagos hullámhossz-
illesztésére is.

Valamennyi szinképadat felhasználása teljesebb informá-
ciót ad a szinképről, mint a hagyományos, analitikai hullám-
hosszak alkalmazásán alapuló módszer. Méréseink szerint tel-
jes ultraibolya szinképek felhasználásával a túlnyomó kon-
centrációban jelenlévő komponens mellett a néhány tized szá-
zalékos koncentrációjú komponensek is elfogadható hibával
határozhatók meg.

Vizsgálatainkat orto-, meta-, para-xilolt és benzolt
tartalmazó elegyekkel végeztük.

SZÍNEZŐ VIZSGÁLATOK A MAGYAR NÉPI KELMEFESTÉS HAGYOMÁNYAINAK TERÜLETÉN

Szendrői Júlia

Budapesti Műszaki Egyetem, Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Munkánk célja a múzeumi textiliák színezékeinek meghatározására egy egyszerű, gyors és megbízható módszer kidolgozása volt. Ezzel a múzeumi szakemberek, restaurátorok munkájához szeretnénk segítséget nyújtani, amennyiben a színezék ismerete egyrészt a textillelet származási helyének, illetve kormeghatározásának szempontjából, másrészt pedig a textília restaurálása, tisztítása, konzerválása tekintetében fontos.

A szóhajóhető analitikai módszerek közül a vékonyréteg-kromatográfiát választottuk, mivel a módszer viszonylag gyors, egyszerű berendezést igényel, és rendkívül kis minta elegendő hozzá, ami múzeumi textiliák esetében igen fontos.

A kromatográfiás színezékazonosításhoz szükség van a színezés reprodukálására is egy referencia sorozat összeállítása céljából. Ezért összegyűjtöttünk mintegy 30-féle Magyarországon termő, a magyar népi kelmefestésben használt növényi színezőanyagot, és ezek felhasználásával gyapjúszövetet színeztünk.

Kromatográfiás színezékanalízissel a Magyar Néprajzi Múzeum által rendelkezésünkre bocsátott régi textiliák színezékeit azonosítottuk. A megvizsgált két nagy terület dél-alföldi szarhímzések és erdélyi festékes szőttesek gyűjteménye volt. Összesen 21 tárgyról vettünk mintegy 72 mintát, és a textiliák színezékeit a kb. 130-féle referencia anyaggal összehasonlítva határoztuk meg. A színezékek többségét sikerült azonosítani.

Az analízis eredményeiből megállapíthattuk, hogy a textiliák egy részének színezésére import színezékeket használhattak. A kék szálakon kizárólag indigót, a pirosakon kosenilt és festőbuzért találtunk. Csupán a sárgára, barnára való színezéskor alkalmazták a ház körül is fellelhető festőnövényeket /festőrezeda, sárgafa, borsos keserűfű/.

FOLYADÉKKRISTÁLYOK ALKALMAZÁSA GÁZKROMATOGRÁFIÁBAN

Molnár Béla

BME Általános Analitikai Kémiai Tanszék
Budapest Gellért tér.

Munkánk célja hosszú szénláncú Tl-zsirsav sók alkalmazása megosztófolyadékként gázkromatográfiában, különböző helyen telítetlen acetátok, alkoholok és krizanténsav észterek elválasztására.

Az irodalomban számos közlemény található, amelyben az ilyen jellegű vegyületek elválasztását folyadékkristályok alkalmazásával oldották meg. A Tl-zsirsav sók előnyét abban látjuk a többi folyadékkristállyal szemben, hogy változtatható a szénlánc hossza, telítet illetve telítetlen jellege, ezáltal változik a folyadékkristályos állapot hőmérsékletének intervalluma. Gyakorlati munkánk során megvizsgáltuk a Tl-zsirsav sók termikus stabilitását és megállapítottuk, hogy termikus stabilitásuk jó, és kromatográfiás alkalmazásuk során nem szenvednek bomlást.

A 10-undecénkarbonsav Tl-sóval nedvesített oszlopon megvizsgáltuk az oszlop hatékonyságát és szelektivitását, meghatároztuk az elválasztási körülmények optimumát, valamint megállapítottuk az optimális működési paramétereket egyes geometriai izomerek elválasztására.

Kísérleti munkánk alapján megállapítható, hogy az oszlop optimális működési tartománya a szilárd-mezomorf átmenet hőmérséklete fölött 10-15 Celsius fokkal található.

Miután behatóan megvizsgáltuk a tallium-zsirsav sók alkalmazhatóságát, mint stacioner fázis, néhány a gyakorlat számára fontos elválasztást oldottunk meg, például egyes geometriai izomerek, acetátok, alkoholok, krizanténsav észterek elválasztását.

NÉHÁNY SPEKTROSKÓPIAILAG FONTOS ALAPANYAG HATÁSÁNAK
VIZSGÁLATA AZ EGYENÁRAMU IV HŐMÉRSÉKLETÉRE

Készítette: Pocsai Sándor

Témavezető: Dr. Papp Lajos

Készült: Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és
Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen

Munkám során az egyenáramu iv hőmérsékletét határoztuk meg különböző spektroszkópiailal alapanyag jelenlétében.

A hőmérsékletet a Zn 307,6 nm és 328,2 nm hullámhosszu vonalpárja alapján a "kétvonalas" módszerrel határoztuk meg. Méréseink kezdetén különböző Zn tartalmu mintasorozatot állítottunk össze abból a célból, hogy kiválasszuk a vizsgált hőmérséklettartományban jól mérhető Zn vonalfeketedést eredményező mintát. Az 5,0 % Zn tartalom volt a legmegfelelőbb. Az alapanyaghatás vizsgálatára az alábbi szintetikus mátrix modell rendszereket állítottuk össze:

1. 95 % szinképszénpor + 5 % Zn
2. 50 % NaCl + 45 % szinképszénpor + 5 % Zn
3. 33 % NaCl + 33 % SiO₂ + 29 % szinképszénpor + 5 % Zn
4. 25 % NaCl + 25 % SiO₂ + 25 % Al₂O₃ + 20% szinképszénpor +
+ 5 % Zn

Méréseink eredményei azt mutatták, hogy amikor csak szénpor volt jelen, akkor volt a legmagasabb a hőmérséklet az iv plazmában, s 50 % NaCl esetén mértük a legalacsonyabb hőmérsékletet. Ez az alkálifémek alacsony forráspontjával és ionizációs potenciáljával magyarázható, s amíg el nem párolog, addig ez határozza meg az iv hőmérsékletet. A harmadik esetben a NaCl és SiO₂ közötti frakcionált desztilláció volt tapasztalható a feszültség és áramerősség adatok alapján, azaz névkv forráspont szerint desztillálódtak ki a rendszerből az elemek. A negyedik esetben vegyületképződésre lehet következtetni mind a szinképsávosságot, mind az iv égésiidejének függvényében mért potenciálja alapján. A keletkező vegyület - mely várhatóan nátrium-alumínium-szilikát - stabilizálja az iv feszültséget, ez tehát felhasználható az iv hőmérséklet stabilizálására.

RITKAFÖLDFÉMEK MEGHATÁROZÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI ATOM-
 ABSZORPCIÓS ÉS ELEKTROTERMİKUS EMISSZIÓS MÓDSZERREL

Készítette: Major Sándor

Témavezető: Dr. Papp Lajos

Készült: Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és
 Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen

A ritkaföldfémek atomspektroszkópiai sajátosságai az alkáliföldfémekéhez hasonlítanak, azaz alacsony ionizációs potenciálok. Ugyanakkor a ritkaföldfémek rendkívül termósztabil oxidokat képeznek. Ezek alapján olyan atomspektroszkópiai módszer alkalmazására van szükség, amely alacsony gerjesztési potenciált biztosít, ugyanakkor az oxidok nagymértékű bomlását eredményezi.

Ezért célszerűnek látszik az elektrotermikus atomspektroszkópiai módszerek alkalmazása, melyeknél a gerjesztési hőmérséklet a klasszikus gerjesztések hőmérsékletéhez képest alacsony/kb. 3000 K/. Ez elegendő a ritkaföldfémek atomizációjához ill. gerjesztéséhez; s a 3000 K hőmérsékletű szén, s az ebből keletkező CO biztosítja az oxidok fémmé történő redukcióját. Fontos továbbá, hogy a klasszikus emissziós ill. a lángtechnikás atomabszorpciós technikához viszonyítva az atomok 3-4 nagyságrenddel hosszabb ideig tartózkodnak a rendszerben, s így az azoktól származó analitikai jel kedvező növekedést mutat.

Vizsgálataink során összehasonlítottuk a lángtechnikás-atomabszorpciós és atomemissziós; valamint az elektrotermikus atomemissziós módszereket általunk optimált paraméterek esetén. Ezért levegő - C_2H_2 és $N_2O - C_2H_2$ lángban, valamint a tanszéken készített elektrotermikus berendezéssel vizsgáltuk a lantanoidákat abszorpcióban és emisszióban egyaránt. Dolgozatomban ismertetem a levegő- C_2H_2 láng alkalmazási lehetőségeit, a $N_2O - C_2H_2$ lángban a szabad ill. gerjesztett atomok koncentrációit különböző lángmagasságoknál, s bemutatom az eddigi elektrotermikus emissziós vizsgálataink eredményeit.

ÚJ NAGY NYOMÁSÚ FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELJÁRÁS AMINOGLIKOZID TÍPUSU ANTIBIOTIKUMOK ELVÁLASZTÁSÁRA

Deák Magdolna

KLTE Biokémia Tanszék, Debrecen Egyetem tér 1.

Az aminoglikozid típusú antibiotikumok között számos nagy hatású, a gyógyászatban már jelenleg is alkalmazott készítmény található. Ezen antibiotikumokat fermentációval állítják elő, melynek során általában számos rokon szerkezetű vegyület képződik, melyek szerkezeti eltérése csekély, hatásukban azonban lényeges különbség lehet.

Célunk volt egy olyan általános nagy nyomású folyadékkromatográfiás eljárás kidolgozása, mellyel aminoglikozid antibiotikumok fermentleve ill. a kész termék ellenőrizhető.

Korábban próbálkozások történtek ionpár kromatográfiás módszerrel az elválasztásra, kevés eredménnyel. Számos származékképzési lehetőség közül a DNFB-lal történő N-dinitrofenil származék képzését találtuk kromatográfiás szempontból legalkalmasabbnak. Az első sikeres kísérletek normál fázisú elválasztással történtek $\text{CHCl}_3:\text{THF}:\text{H}_2\text{O}$ összetételű eluenssel. A származékképződés során keletkező melléktermékek azonban az elválasztást hosszadalmassá teszik, ezért fordított fázisú módszert fázisú módszert fejlesztettünk ki $\text{CH}_3\text{CN}:\text{H}_2\text{O}:\text{CH}_3\text{COOH}$ összetételű eluenssel. Ez a módszer alkalmas bármilyen aminoglikozid típusú antibiotikum kromatografálására. Fermentleiből való meghatározás lehetősége most van folyamatban.

A fent említett származékképzés egy másik fontos problémát is megold: a detektálás kérdését. Az aminoglikozid típusú antibiotikumok származékképzés nélkül fotometriásan nem határozhatóak meg, refraktív index detektorral történő meghatározásuk pedig olyan magas koncentrációt igényelne, ami az analitikai folyadékkromatográfiás kolonnákon nem használható. A dinitro-fenil származék jól detektálható, a detektálás olyan hullámhosszon történik, ahol az eluens esetleges szennyeződése nem zavar.

MÉRGEZŐ HARCANYAGOK KIMUTATÁSA
VÉKONYRÉTEG-KROMATOGRÁFIÁVAL

Szabó Tibor
Zalka Máté Katonai Műszaki Főiskola
Budapest

Irodalmi adatok alapján röviden összefoglaltuk a vékonyréteg-kromatográfia alapjait és felhasználásának lehetőségeit a mérgező harcanyagok kimutatásában.

Tökéletesítettük az ingerlő- és a hólyaghuzó mérgező harcanyagok kimutatásának a mobil tábori laboratóriumban jelenleg alkalmazott recepturáját, lényegesen lerövidítettük a kimutatáshoz szükséges időt.

A VRK módszert kiterjesztettük a foszforsav-észter típusú idegmérgek kimutatására, meghatároztuk a megfelelő futtatószer elegyet, a megfelelő előhívó reagenst, a hőmérséklet hatását az előhívás körülményeire és a jellemző R_f értékeket.

Elemeztük a VRK módszer alkalmazásának lehetőségeit tábori viszonyok között, mobil, tábori laboratóriumban.

Alkáli földfém ionok /Ca, Mg, Sr/ gyors elválasztása
felületileg szulfonált kationcserélőn, Zn tartalmu
eluensekkel

Vancsura Péter /V. évf./
Veszprémi Vegyipari Egyetem
Analitikai Kémia Tanszék

Témavezető: Dr. Hajós Péter

A felületileg kialakított ioncserélő anyagokat alkalmazó ionkromatográfia a korszerű analitikai elválasztási módszerek egy új lehetősége.

Az ion-kromatográfias elválasztások jelenleg ismert előnye /rövid elemzési idő, gyors, nagy hatékonyságú elválasztás, az érzékeny, univerzális detektálás/ ellenére az alkáli földfém ionok elemzését számos tényező korlátozza.

Munkánk céljaul tüztük ki megvizsgálni annak lehetőségét, hogy a hagyományos savas eluensek hatása különböző koncentrációjú Zn-só segítségével hogyan befolyásolható előnyösen. Megállapítottuk, hogy a Zn-tartalmu salétromsavas eluensek nagymértékben csökkentik a Ca, Mg, Sr ionok retenciós idejét. Meghatároztuk azt a Zn-koncentráció és Zn/H mólarány optimális értéket, melyek mellett a rövid elemzési idő megfelelő felbontással párosul.

Ily módon, az optimális eluenskombináció segítségével az alkáli földfém ionok /Ca, Mg, Sr/ jó felbontású, gyors elemzésére nyílt lehetőség.

Sikeres modellkísérleteink alapján természetes eredetű dolomit minta Ca-Mg tartalmának vizsgálatát végeztük el.

AZ N-ELLÁTÁS HATÁSA AZ ÁRPA HELMINTHOSPORIUMOS LEVÉLPOL-
TOSSÁGÁRA

Ádám Attila

Agrártudományi Egyetem, Gödöllő

Kísérleteimet üvegházban és fitotronban növekvő $\text{NO}_3\text{-N}$ és $\text{NH}_4\text{-N}$ tartalmu Hoagland-Snyder tápoldaton felnevelt árpanövények mesterséges fertőzésével végeztem, vizsgálva a természetes növényi rezisztenciát a lézióátmérő és léziószám alapján. Az árpa-Helminthosporium sativum Pam., King és Bakke gazdaparazita kapcsolatban megállapítottam, hogy a növekvő $\text{NO}_3\text{-N}$ és $\text{NH}_4\text{-N}$ ellátás hatására egyaránt szignifikánsan jó a növény kórokozóval szembeni természetes rezisztenciája. A betegségellenállóság szempontjából kedvezőbb volt az $\text{NO}_3\text{-N}$ ellátás viszont a növény fejlődése szempontjából az $\text{NH}_4\text{-N}$ ellátás volt a jobb hatású. A különböző N-formák és mennyiségek hatását a növény fiziológiai állapotára a nitrogén-, klorofill-, Ca-, Mg-, K- és aminosavtartalom meghatározásával vizsgáltam. Megállapítottam, hogy a természetes növényi rezisztencia fokozódása együtt járt a klorofill-, a N-, a szárazanyag- és az aminosavtartalom növekedésével. Ezzel párhuzamosan a K/Mg + Ca arány növekedett. Mindez a növényi szövetek juvenilitásának a fokozódását jelenti, amely az ún. levélnekroízist okozó fakultatív paraziták esetében a betegség csökkenéséhez vezet.

TAVASZI ÁRPA LOMBTRÁGYÁZÁSA

Gyenes Tibor

Agrártudományi Egyetem
Gödöllő

Hazánk tavaszi árpa fajtaválasztékában még nem különültek el a söripari és takarmányozási célú fajták, holott a két-irányú felhasználás eltérő követelményeket támaszt, elsősorban a fehérjetartalomban.

A növénytermesztők főképp agrokémiai beavatkozásokkal tudják megváltoztatni a fehérjetartalmat. Ennek egyik lehetséges módszere a nitrogén levéltrágyázás.

1980-ban tenyészedényes kísérletet állítottunk be a GATE Növényneveléstani Tanszék Kísérleti telepén, melynek keretében vizsgáltuk 3 tavaszi árpa - Mv 43; Rapid; Trumf - nitrogén táplálkozását optimális ökológiai feltételek mellett.

A talajba juttatott, valamint a levéltrágyaként különböző időben kipermetezett nitrogén műtrágyák ¹⁵N stabil izotóppal jelzett vegyületek voltak. Így pontos képet kaptunk az N-felvétel ütemére és beépülésére vonatkozóan, valamint nagy biztonsággal megállapíthattuk a kijuttatott műtrágya hasznosulását is.

Mindhárom fajtánál a virágzáskor permetezett karbamid hatását találtuk leginkább fehérjenövlőnek.

ŐSZI BUZA ÉS TAVASZI ÁRPA GYOMNÖVÉNYEINEK TÁPANYAGFELVÉTELE

Léhoczki Éva
Agrártudományi Egyetem
Gödöllő

A gyomnövények sokféleképpen károsítanak: elfoglalják a termesztett növény helyét, csökkentik a talaj víz- és tápanyagkészletét, betegségek és kártevők gazdanövényei lehetnek stb. Átlagosan 9-10 %-kal csökkenthetik a gabonafélék terméshez-
mát.

Vizsgálataink során arra a kérdésre kerestük a választ, hogy hogyan, illetve milyen mértékben hasznosítják a gyomnövények a talaj tápanyagkészletét, különös tekintettel a nitrogénre.

Gödöllőn, középkötött barna erdőtalajon őszi búza és tavaszi árpa fajtákkal beállított, mikroparcellás műtrágyázási kísérletben nyílt lehetőségünk a gyomok begyűjtésére. Ezeket a parcellákat növényvédőszerrel nem kezeltük.

Mindkét gabonában közel 20 gyomfaj fordult elő, a leggyakoribbak: *Stellaria media*, *Lamium* sp., *Bilderdykia convolvulus*, *Echinocloa crus-galli*, *Chenopodium* sp., *Amaranthus* sp. voltak.

Kétféle N-műtrágya - ammóniumnitrát és karbamid - 90 kg/ha és 120 kg/ha mennyiségben, valamint P- és K-műtrágya került kiszórásra. Az alkalmazott nitrogénműtrágyák egy része stabil nitrogénizotóppal jelzett volt, ahol ezeket alkalmaztuk, ott vizsgálható volt a műtrágyanitrogén gyomnövényekbe való beépülése is.

ŐSZI BUZAFAJTÁK N-MÜTRÁGYÁZÁSÁNAK VIZSGÁLATA
STABIL NITROGÉN-IZOTÓPPAL

Pethes József

Agrártudományi Egyetem
Gödöllő

Négyféle őszi búzafajtával /Mironovszkaja 808; Talent; Száva; Novosadska 2/ vizsgáltuk a tenyészedőben megosztott N-mütrágya hasznosulását gödöllői barna erdőtalajon mikroparcellás kísérletben.

A fejtrágyát három időpontban juttattuk ki, bokrosodáskor, kalászoláskor és virágzás után hat nappal abból a célból, hogy megállapítsuk, melyik az az időpont a három közül, amikor a kiadagolt - jelzett - mütrágyákból a legtöbb épül be a szembe.

Ennek alapján a bokrosodáskor kiadott fejtrágya esetében a ¹⁵N-először a vegetatív részekben halmozódott fel nagyobb mértékben és innen transzlokálódott át veszteséggel - fajtánként eltérő - a szembe:

- a kalászoláskor és virágzás után hat nappal kiadott mütrágya a szemet telítette jobban ¹⁵N-nel, a felvételében vizszaesés nem volt tapasztalható.

A bokrosodáskori kezeléshez képest e két utóbbi kezelés eredménye szignifikáns eltérést mutatott.

Megvizsgáltuk a szárazanyag-képződés és N, P, K-tartalom változásait is a tenyészedőben, különös tekintettel a szemre. Így a fajtákról is kaptunk egy összehasonlítást.

Azonos termesztési körülmények között az összes szárazanyag-termésben és szemtermésben a "Mironovszkaja 808", a %-os N-tartalomban az "N. Rana 2" került az első helyre.

Az N-mütrágya hasznosulása, szemtermésbe való beépülése a vizsgált fajták szárazanyag-képződésével mutat szoros összefüggést. A növekvő mütrágyaárak mellett fontos tudnunk, hogy a kiadagolt mütrágyát mikor tudja a növény a leghatékonyabban felhasználni.



SÁRGARÉPA ALAPU HŐKEZELT TERMÉKEK KAROTINTARTALMÁNAK VIZSGÁLATA

Katona Marianna

Kertészeti Egyetem Tartósítóiipari Kar
Élelmiszerkémiai Tanszéki Csoport, Konzervipari-
- technológiai Tanszék

1./ A hámozott, a szeletelt, a felöntőleves és a sterilizált répa karotintartalmát mértem. A mintákat a Kecskeméti Konzervgyár sárgarépa félkészterméket gyártó vonaláról vettem.

A sterilizált répából mintát vettem, hűvös és sötét ill. meleg és világos helyen tároltam. 8. ill. 16 nap eltelté után megmértem a karotin csökkenést.

Minden mérésnél azonos módszert alkalmaztam: egy hideg extrakciós, benzol elúciós oszlopkromatográfiás módszert. Megállapítottam, hogy a feldolgozás során a sterilizálás alatt következik be a legnagyobb arányú /37 %-os/ karotin csökkenés. Magas a veszteség /6%/ a szeletelés után, mivel a karotinok nagyobb felületen érintkeznek a levegő oxigénjével. Ezért szükséges, hogy minél rövidebb legyen a szeleteléstől a sterilizálásig tartó átfutási idő.

2./ Karotinoidok hőérzékenységet vizsgáltam különböző hőmérsékleten, különböző hőntartási idővel.

3./ Néhány sárgarépa alapú hőkezelt késztermék karotintartalmát mértem, amelynek alapján kiszámoltam, hogy termékenként mennyit kell fogyasztani, hogy a javasolt napi karotinmennyiséget fedezzük.

A BÖRGYÁRI BŐRKAPARÉK ZSIRADÉK KÉMIAI ANALIZISE

SZABÓ JUDIT

Agrártudományi Egyetem Keszthely
Keszthelyi Mezőgazdaságtudományi Kar
Keszthelyi Deák F.u.16.

A bőrgyárak és a vágóhidak területén nagymennyiségű bőrkaparék zsiradék halmozódik fel, ami takarmányozás céljára felhasználható lenne. Ezeknek az anyagoknak a kémiai analizisét végeztem el.

A vizsgálatokat az MSZ. 6830 sz. szabvány szerint végeztem el.

Vizsgálati eredmények:

A minta víztartalma 60 % körül, szárazanyag nagy részét a trigliceridek alkotják. A bőrgyári bőrkaparék zsirásával az összes zsírsav százalékában: mirisztinsav: 1,76 %, palmitinsav? 26,58 %, palmitoleinsav; 4,45 %, margarinsav 1,1 %, sztearinsav 10,02 %, oleinsav; 46,5 %, linolsav 2,51 %, linolénsav; 1,67 %, arachininsav ; 0,28 %.

A fehérje tartalom 3 % körül, a nyerszsír tartalom 37 % vdt. Anorganikus szennyeződés 1-3 %, ásványianyag tartalom az előírásoknak megfelel.

A bőrgyári bőrkaparék takarmány célú felhasználásának legnagyobb problémája a magas víztartalom mellett a magas peroxidszám jelentette, mely a szabvány szerint 25, helyett 190 -202 között mozgott.

A kaparékszír takarmányozási értékének vizsgálata értelmében Tetra-B hushibrid csirkékkel történt az etetési kísérlet.

A nevelő csirkétápra 3, illetve 6 %-ot kevertünk.

Megállapítható, hogy a zsiradék hozzáadásával az emészthető nyersfehérje tartalom csökken, míg a keményítő érték a hozzáadással fokozatosan nő.

Nyersen takarmányként használni nem lehet, jelenlegi energia-árak mellett takarmányzsírra átalakítani nem érdemes. 101

MOCSÁRI NÖVÉNYEK FÉMAKKUMULÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA KOMMUNÁLIS SZENNYVIZZEL TERHELT TERÜLETEN

Prenner Katalin

Agrártudományi Egyetem, Keszthely

A különböző vízfolyások és állóvizek nehézfémekkel történő szennyezése nagyon jelentős változásokat okozhat az ott élő szervezetek körében. Az ilyen területeken található növények egy része képes lehet a fémek bizonyos mértékű kumulációjára, így környezetvédelmi szempontból is figyelmet érdemelnek.

A keszthely-fenékpusztai lápon folyó szennyvittisztítás elve a lápi tőzegtalaj szorpciós képességének és a rajta kialakult mocsári vegetáció fajainak fémakkumulációs képességének felhasználásával a kommunális szennyviz tulajdonképpeni 3. /biológiai/ fokozatu tisztítása.

Vizsgálataink célja az volt, hogy az egyes fémek szintjén /Cu, Zn, Mn, Fe, Co, Ni, Cd és Pb/ a vegetáció domináns fajában mérve tájékozódhassunk a zöld felületek fémakkumulációs kapacitásáról. Megállapítottuk, hogy a Zn, Co, Cd, Ni és Pb tartalom magasabb volt, mint a szennyvizzel nem terhelt vegetációból származó minták esetén.

Továbbiakban a fémek felvételének periodicitására kívánunk választ adni a vegetáció különböző időszakai alatt vett minták vizsgálata alapján.

PENÉSZGOMBÁK BIODEGRADÁLÓ HATÁSÁNAK
VIZSGÁLATA MŰANYAG TERMÉKEKEN

Novák Csaba

BME Mezőgazdasági Tanszék

A biodegradálható műanyag termékek /mezőgazdasági talajtakaró fóliák, szaporító konténer, stb./ előállításának célja, hogy felhasználás után a talajba kerülő műanyag az ott lévő mikroorganizmusok hatására lebontódjék és annak bomlástermékei vissza-kerüljenek az anyagok természetes körforgásának folyamatába.

A BME Vegyészmérnöki Karának Mezőgazdasági Kémiai Technológiai Tanszékén a tartós műanyagok korrózióvédelme mellett a mikroorganizmusok által lebontható termékek előállításával kapcsolatban is folynak kutatások. Ezen munkához tartoznak azok a polietilén termékek, amelyek biodegradálhatóságának vizsgálata volt kutatási munkánk tárgya.

Tanulmányoztuk a biodegradálható műanyagtermékek alkalmazásának és a polimer-rendszerbe bedolgozott töltőanyagok, adalékok felhasználásának gazdasági és gyakorlati lehetőségeit.

Kutatómunkánk során biodegradálható anyagokkal töltött PE talajtakaró fóliákat vizsgáltunk, melyek különböző mennyiségű és szemcseméretű mezőgazdasági hulladék töltőanyagokat tartalmaztak.

A biodegradációt ismert penészgombák spóraszuszpenziójával és földszuszpenziós fertőzéssel vizsgáltuk. A penészgombák szaporodását tenyésztéses módszerekkel, valamint a szaporodásnál felhasznált oxigén mennyiségének mérésével követtük. Mértük a fóliák tömegcsökkenését. Utóbbit földbeásási kísérletsorozatokkal is elvégeztük. Az anyagok strukturális változását felületifény-, és elektronmikroszkóppal vizsgáltuk.

A vizsgált kísérletek alapján egyértelműen kiválaszthatók azok a termékek, amelyeken legnagyobb volt a biológiai károsodás mértéke és ezért alkalmasak mezőgazdasági talajtakaró fólia előállítására.

CITOKININEK BIÓÁLLÍTÁSA HIDROLIZISSAL

Tókeá Gábor

EME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

A citokininnek a legkésőbb felfedezett (1955), serkentő hatású növényi hormonok, az auxinok és a gibberellinek után a harmadik nagy hormoncsoportot alkotják. /A negyedik csoportba sorolhatóak a gátló és egyéb hatású anyagok./ A citokininnek olyan purinvázis vegyületek, melyek kis koncentrációban is fokozott, de szabályozott sejtosztódást váltanak ki, és késleltetik a növényi szövetek öregedését, a klorofill leépülését. Több növény esetében bizonyították termésnövelő hatását is, így felhasználása gazdasági - élelmezési - szempontból a jövőben nagy jelentőségű lehet, főleg más szerekkel kombinálva. A felhasználást és az ezt kutató kísérleteket egyelőre megnehezíti a vegyületek magas ára, valamint, hogy elsősorban Nyugatról szerezhetőek be.

A kísérletek során citokinin hatású vegyületeket próbáltunk meg előállítani hidrolízis útján nukleinsavakból, ill. ezt tartalmazó anyagokból, mint pl. búzacsira, élesztő, baktérium, - ezenkívül szennyviziszapok hidrolízisével próbálkoztunk. Az aktivitás megállapítására Letham retoklevél-tesztjét használtuk néhány egyszerűsítő változtatással. Megállapítottuk, hogy NaCl a tesztre zavaró hatással van, de az eljárás ebben az esetben is használható.

A munka során DNS, RNS, sütőélesztő, búzacsira, valamint különböző baktériumok hidrolízisével citokinin aktivitású oldatokat sikerült nyerni. RNS, élesztő és *E. cereus* hidrolizátumaiból kintint lehetett kimutatni VRK-val, s az emlitett anyagok összesen 5 helyen adtak jellegzetes foltokat. E (feltehetően) citokininnek aktivitásának ellenőrzése, esetleg azonosításuk még további feladat lehet. Szennyviziszapok hidrolizátumai - különösen butanolos kirázatok - szintén aktivitást mutattak, konkrét citokinineket azonban egyelőre nem sikerült kimutatni. Maga az aktivitás ténye azonban biztató: ebben az irányban is érdemes további kísérleteket folytatni.

4722-4P32

2065

2

7-P22

VAS-KLORID REDOX-RENDSZER FOTOKÉMIAI VIZSGÁLATA

Keszthelyi Tamás

Veszprémi Vegyipari Egyetem

Veszprém Schönherz Zoltán u 12

A vas/III/-klorid sósavas, vizes oldatban fény hatására /254 nm/ oxidálódik, vas/III/-klorid és hidrogén keletkezik. A folyamatot különböző Fe/II/ és Cl^- koncentrációknál /0.1-1.0 moldm⁻³ FeCl_2 és 0.05-1.0 moldm⁻³ HCl/ vizsgáltuk. Azt találtuk, hogy a fotolízis során az Fe/III/ koncentráció az időben nem lineárisan változik, és a reakció kvantumhasznosítási tényezője erősen függ mind az Fe^{2+} , mind a szabad Cl^- koncentrációtól. E nemlinearitás részben a növekvő koncentrációju Fe^{3+} belső szűrőhatásával magyarázható, de ez nem indokolja teljes mértékben a görbe meredekségének csökkenését. Fel kell tehát tételeznünk, hogy termikus reakció is lejátszódik a rendszerben, és a kvantumhasznosítási tényezőt Φ ezek figyelembevételével kell számítani. A Φ koncentrációfüggéséből arra következtettünk, hogy az oldatban jelenlevő különbözőféle komplex részecskék eltérő mértékben fotoaktívak, tehát egyedi kvantumhasznosítási tényezőket Φ_i tulajdoníthatunk nekik.

Munkánk során a kísérleti eredményekből meghatároztuk a részecskék egyedi kvantumhasznosítási tényezőjét. Ezekből a tényezőkből számolva a teljes kvantumhasznosítási tényezőt, jó egyezést kaptunk Φ koncentrációfüggésére a komplex egyensúly eltolódásával összhangban. A dolgozatban tárgyaljuk a rendszer matematikai modelljét és az eredmények számítógépes feldolgozását.

o-HIDROXIANILOK HOMOGENKATALITIKUS OXIDATIV GYÜRÜZÁRÓDÁSI
REAKCIÓINK VIZSGÁLATA

Vörös József

Veszprémi Vegyipari Egyetem, Veszprém

Munkánk során különböző o-hidroxi-anilokat állítottunk elő és vizsgáltuk homogénkatalitikus oxidációjukat CuCl/piridin/O₂-rendszerben.

Ezzel a módszerrel jó hozammal lehet előállítani 2-szubsztituált benzoxazolokat Schiff-bázisokból.

Ezt követően N-benzilidén-o-hidroxi-anilin homogén-katalitikus oxidációjának kinetikáját vizsgáltuk. Különböző réz(I)-klorid koncentrációk, oxigén parciális nyomás és szubsztrátum koncentrációknál az oxigén felvétel sebességeinek mérésével meghatároztuk az egyes komponensek részrendjét és a következő sebességi egyenletet találtuk:

$$\text{reakciósebesség} = k_2 [\text{CuCl}] [\text{O}_2]$$

A kinetikai és kiegészítő vizsgálatok alapján tárgyaljuk a katalitikus reakció mechanizmusát.

TÖBBKOMPONENSŰ OXIDKATALIZÁTOROK FELÜLETI
ÖSSZETÉTELÉNEK VIZSGÁLATA KÉMIAI MÓDSZEREKKEL

Balogh Anna

ELTE Szerzetlen és Anal. K. T.

A többkomponensű oxidkatalizátorok akkor tekinthetők jól definiált szerkezetű rendszernek, ha a kémiai összetétel mellett ismertek a morfológiai sajátságok, a fázisszerkezet /szilárd oldat vagy kristallitkeverék/ és a felületi sajátságok. Az ilyen rendszereknél igen gyakori, hogy a felületi összetétel valamely komponens feloldulása /szegregáció/ miatt eltér a főtömegbeli összetételtől. Az adszorpciós és katalitikus sajátságok értelmezése szempontjából pedig a felületi összetétel ismerete nyilvánvalóan szükséges. Vizsgálatára költséges nagyműszeres módszereket /Auger-elektrospektr., SIMS, ESCA, UPS, XPS/ alkalmaznak.

Egyszerű analitikai módszerek alkalmazásával megvizsgáltuk, hogy a többkomponensű oxidrendszer egymás utáni kicsiny savrészletekkel való részleges feloldása során az oldatban észlelt koncentrációváltozásokból lehet-e következtetni a felületi összetételre.

Méréseinket különböző összetételű és fázisszerkezetű ZnO-MgO mintákon végeztük. A Zn-t analizáltuk spektrofotometrián, metiltimolkékkel. Részletesen jellemeztük a módszert /lineáritás, reprodukálhatóság, zavaró hatások/. Oldódásvizsgálatainkat a tiszta komponensekkel, mechanikai keverékekkel, szilárdoldat és kristallitkeverékes típusú mintákkal és impregnálással előállított réteges felületi összetételű modellanyagokkal végezve megállapítottuk, hogy a módszer / e rendszerben/ alkalmas a felületi összetétel gyors és egyszerű tesztelésére. Eredményeinket nagyműszeres mérési adatokkal összevetve is értékeltük.

ZEOLITVÁZRA ÉPÍTETT RÉZKOMPLEXEK KATALITIKUS AKTIVITÁSÁNAK
ÖSSZEHASONLÍTÓ VIZSGÁLATA

Lehotai Klára

JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
6701 Szeged, Pf. 440.

Vizsgáltuk az Y-típusú zeolitvázra épített Cu^{2+} aq, valamint az előbbi etilén-diamin, α, α' -dipiridil, σ -fenantrolin, imidazol és amin komplexének katalitikus aktivitását a hidrogén-peroxid bomlási reakcióban. Meghatároztuk a bomlássebesség pH-tól, hőmérséklettől, hidrogén-peroxid koncentrációtól, katalizátor mennyiségétől, valamint a ligandum- Cu^{2+} aránytól való függését. A lépcsőzetes komplex stabilizációs és a ligandum protonálódási állandóinak ismeretében kiszámítottuk a részecskeeloszlás pH-tól valamint a ligandum koncentrációjától való függését. Ezt összevetettük a mért kinetikai adatokkal.

OH- és HO_2 -gyök specifikus inhibitorok alkalmazásával vizsgáltuk, hogy a bomlás során számolni kell-e a fenti gyökök megjelenésével.

Hasonló típusú vizsgálatokat végeztünk a Cu^{2+} -etiléndiamin és -imidazol komplexeivel katalizált homogén közegű hidrogén-peroxid bomlásra is.

A fenti eredmények egymással való összevetése és az irodalomban található analógiák alapján munkahipotézisként mechanizmust ajánlunk a katalizált bomlás leírására. Rámutatunk a homogén és a heterogén bomlás kinetikájának azonos és eltérő vonásaira.

AZ ETIL-IZOPROPIL-DIIMID ÉS AZ ETIL-2-BUTIL-DIIMID TERMIKUS
BOMLÁSÁNAK SEBESSÉGI ÁLLANDÓJA

Málik Katalin

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék,
József Attila Tudományegyetem, Szeged

Munkánk célja az etil-izopropil-diimid és az etil-2-butyl-diimid primer bomlási lépése sebességi állandójának meghatározása volt. A tiszta bomlás során rövid lánc fellépésével kell számolnunk, melynek visszaszorítására a méréseket nagy feleslegű propilén jelenlétében végeztük. A nitrogén képződésének és az azoalkán eltűnésének sebessége alapján számított sebességi állandók a következők:

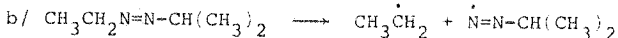
$$\log(k_1/s^{-1}) = (15,7 \pm 0,2) - (197,0 \pm 2,4) \text{ kJ mol}^{-1}/2,3.RT$$

/etil-izopropil-diimid/

$$\log(k_1/s^{-1}) = (15,4 \pm 0,4) - (194,7 \pm 3,6) \text{ kJ mol}^{-1}/2,3.RT$$

/etil-2-butyl-diimid/

A megfelelő vegyületek, gyökök standard képződési entalpiájának irodalmi adataiból kiszámítottuk az alábbi reakciók Arrhenius-féle aktiválási energiáját. Mindkét esetben az (a) mechanizmus alapján számított érték közelítette meg jobban a kísérletileg meghatározott Arrhenius-féle aktiválási energiát. Ez a tény arra mutat, hogy a nagyobb gyök lehasadása a valószínűbb.



VINIL GYÖK REAKCIÓINAK VIZSGÁLATA

Németi Ibolya

Szeged, József Attila Tudományegyetem, Általános és
Fizikai Kémiai Tanszék

Munkánk során a vinil gyökök diszproporcionálódási és kombinálódási reakcióinak sebességi állandóinak hányadosát határoztuk meg.

A vinil gyököket azoizopropán és akrolein gázfázisú termikus bontásával állítottuk elő. A hőbontás eredményeként vinil és izopropil gyökök képződtek. A reakciókat 473 és 553K közötti hőmérsékleteken végeztük. A reakciótermékeket gázkromatográffal analizáltuk. A négy levezetett sebességi egyenlet alapján a megfelelő termékarányokat ábrázolva, grafikusán határoztuk meg a következő értékeket.

$$\Delta(\bar{v}, v) = 0,55 ; \quad \Delta(v, iP) = 0,715 ; \quad \Delta(iP, v) = 0,29$$

Ahol a $\Delta(v, v)$ a vinil és vinil gyökök, a $\Delta(iP, v)$ az izopropil és vinil gyökök, a $\Delta(v, iP)$ a vinil és izopropil gyökök közti diszproporcionálódási és kombinálódási reakciók sebességi állandóinak hányadosa. A zárójelben először szereplő gyök hasit le hidrogént a diszproporcionálódási reakcióban.

Mérési eredményeink összhangban vannak a diszproporcionálódási és kombinálódási reakciók sebességi állandójának viszonyát leíró empirikus összefüggéssel.¹

1, R.S. Konar: Int. J. Chem. Kinet. 2 418. / 1970/

SZERVES VEGYÜLETEK ÁTALAKULÁSÁNAK SZTEREOKÉMIAJA FÉMEKEN;
1,2-DIMETIL-CIKLOPROPÁN IZOMEREK HIDROGENOLIZISE FÉMEKEN

Pálinkó István

József Attila Tudományegyetem
Szerves Kémiai Tanszék

A gyűrűs szénhidrogének hidrogenolizise sztereokémiájának vizsgálata alapvető fontosságú e reakciók mechanizmusának jobb megismerése céljából. Habár sokan foglalkoztak e reakció-mechanizmusok vizsgálatával, azok sztereokémiai aspektusa úgy tűnik tisztázatlan.

A cisz-1,2-dimetil-ciklopropán hidrogenolizisét vizsgáltuk, a H_2 parciális nyomás függvényében, Pt/SiO₂, Ni/SiO₂ és Rh/SiO₂ katalizátorokon. A méréseket cirkulációs reaktorban végeztük, a termékanalízis gázkromatográfiásan történt. Döntően két terméket kaptunk; nagy mennyiségű i-pentánt és kisebb mennyiségben n-pentánt.

A kezdeti sebesség-idő görbék Pt/SiO₂ és Rh/SiO₂ katalizátorok esetén maximummal rendelkeztek, míg Ni/SiO₂ katalizátornál monoton görbét kaptunk.

A kapott eredményeket értékelve és a korábbi, a transz izomer bomlási sebességére vonatkozó mérésekkel összevetve, következtethettünk a hidrogenolízis mechanizmusára és sztereokémiájára a különböző katalizátorokon és a sebességmeghatározó lépés természetére.

RUTIN STABILITÁSÁNAK KINETIKAI VIZSGÁLATA
VIZES LUGOLDATBAN

Szűcs Ambrus

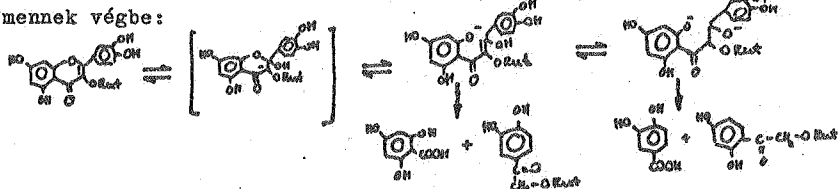
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Debrecen 10.

A flavonoidok a természetben főleg glükozidjaik formájában találhatók, amelyek többféle farmakológiai és biológiai hatással rendelkeznek. Legjelentősebb a P-vitamin hatás, ilyen hatású flavonidglükozid a rutin.

A farmakológiai vizsgálatoknál a rutint hig lúgos oldatában használják, azonban ilyen körülmények között a rutin stabilitását nem vizsgálták. Ez tette szükségessé a rutin viselkedésének, stabilitásának vizsgálatát vizes lugoldatban.

A rutin vizes lugoldatban való viselkedését UV-spektroszkópiai módszerrel tanulmányoztuk. A kinetikai méréseket 400 nm hullámhosszon és $1 \cdot 10^{-2}$ - $1 \cdot 10^{-1}$ mól/dm³ kezdeti hidroxidion koncentrációnál 30°C hőmérsékleten végeztük, s a kísérleteinket úgy szerveztük meg, hogy az egyes reakciólépések pseudo-elsőrendűek legyenek / c_{rutin} < c_{hidroxid} /.

A látszólagos sebességi állandókat a kezdeti hidroxidion koncentráció függvényében vizsgálva lineáris összefüggéseket állapítottunk meg, amely alapján a rutin és a kromon vizes lugoldatban lejátszódó reakciója közötti analógiára következtettünk. Ez alapján vizes hig lugoldatban valószínűleg a következő fontosabb reakciók mennek végbe:



A rutin vizes hig lugoldatban, tehát nem stabil, először egy gyűrűfelnyílási reakció, majd az így keletkezett β -dikarbonil vegyület hasadása játszódik le, amely során benzofenon-, szalicilsav-, illetve benzoészav-származékok keletkeznek. Feltehetően a rutin biológiai hatásáért ezek a vegyületek is felelősek.

A TIOCIANÁT-POLIMER FOTOELEKTROKÉMIAI SAJÁTSÁGAINAK
VIZSGÁLATA

Ökrös Margit

Kossuth Lajos Tudományegyetem Fizikai-Kémiai Tanszék
Debrecen

A fényenergia kémiai energiává történő átalakítására és tárolására legígéretesebbnek a víz szenzibilizált fotolízise látszik. Munkánk célja a fényérzékeny tiocianát-polimer

- /SCN/_x - tulajdonságainak vizsgálata és a víz fotolízisének szenzibilizálására alkalmas származékának előállítás.

A polimert NH₄SCN vizes oldatának jódos oxidációjával állítottuk elő, összetétele és IR-spektruma alapján azonosítottuk. Mivel az irodalomban nem találtunk adatokat a /SCN/_x alapvető fizikai és kémiai tulajdonságairól, ezért tanulmányoztuk oldhatóságát és reakcióját savakkal és fémionokkal. Megállapítottuk, hogy a polimer vízben, híg savakban és lúgokban nem, tömény savakban és lúgokban, valamint néhány szerves oldószerben /pl. acetonban/ kismértékben oldódik. Kénsav hatására, a kénsav koncentrációjától függően elszíneződik, és ezzel párhuzamosan H₂S szabadul fel. A /SCN/_x vizes diszperziója redukálja az Ag/I/- és Cu/II/ionokat, és a reakció során CO₂ is fejlődik.

Az /SCN/_x vizes diszperziójába merített platinaelektród potenciálja az oldat pH-jától függően 30-100 mV-tal lett pozitívabb intenzív látható fénnel történt besugárzás hatására. Araldit műgyanta segítségével megfelelő szilárdságú és vastagságú /SCN/_x-réteggel bevont platinaelektrodot készítenünk. A polimerréteg ellenállása KCl-oldatban 10⁴ ohm.cm volt. Az elektrod potenciálja kb. 30 mV-tal volt pozitívabb, mint a platinaelektrodé, ez az érték azonban megvilágítás hatására nem változott.

A Rh/II/-FOSZFINKOMPLEXEK KATALITIKUS HIDROGÉNEZŐ SAJÁTSÁGAI

Köszegi Erzsébet

Kossuth Lajos Tudományegyetem Fizikai Kémiai

Tanszék, Debrecen

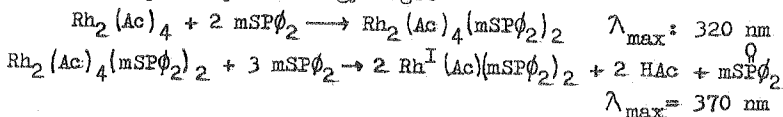
A ródium/II/-acetát- $\text{Rh}_2(\text{Ac})_4$ /-vizes és metanolos oldatban reakcióba lép a meta-szulfofenil-difenil-foszfinnal $\text{mSP}\phi_2$ /.

Spektrofotometriás vizsgálatok szerint metanolos oldatban a következő reakció játszódik le:

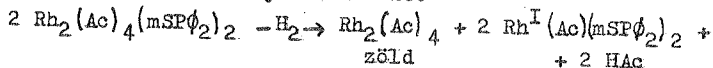


Vizes oldatban különböző $[\text{P}]/[\text{Rh}]$ molarányok esetén a spektrumokon $\lambda = 320$ és $\lambda = 370$ nm-en található abszorpciós sáv. A kisebb λ -n $[\text{P}]/[\text{Rh}] = 1$ arányig az elnyelés növekszik, annél nagyobb foszfinkoncentrációk alkalmazásakor csökken. A $\lambda = 370$ nm-es sáv csak $[\text{P}]/[\text{Rh}] > 1$ esetében jelenik meg.

Ezek alapján és a molarány görbékben található töréspontok $[\text{P}]/[\text{Rh}] = 1$ és $[\text{P}]/[\text{Rh}] = 2,5$ /-szerint az alábbi kétlépeses komplexképződés megy végbe



$\text{Rh}_2(\text{Ac})_4$ és $\text{mSP}\phi_2$ $[\text{P}]/[\text{Rh}] = 1$ arányu vizes oldata katalizálja krotonsav hidrogénezését 313K-en. A reakció során az oldat színe kékesliláról zöldre változott. Feltételezhető, hogy a következő reakció játszódik le:



A zöld szín megjelenése így a $\text{Rh}_2(\text{Ac})_4$ képződésével magyarázható.

Ezek alapján feltételezhető, hogy a fenti reakcióban a Rh/II/-foszfinkomplexből képződő Rh/I/-komplex katalizálja a hidrogénezési reakciót.

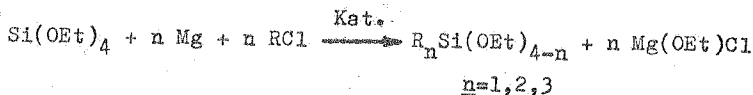
OLDÓSZERMENTES EGYLÉPCSŐS KATALITIKUS MAGNÉZIUMORGANIKUS
SZINTÉZIS TANULMÁNYOZÁSA BUTIL-ETOXI-SZILÁNOK ELŐÁLLÍTÁSÁRA

Morvai László

BME Szervetlen Kémiai Tanszék
1111 Budapest, Gellért tér 4.

Az alkil-alkoxi-szilánok gyakorlati jelentőségét elsősorban az adja, hogy - más szerves szilánszármazékokkal együtt - a szilíciumorganikus polimerek (szilikonok) gyártásának nélkülözhetetlen alapanyagai.

A BME Szervetlen Kémiai Tanszékén dolgozták ki¹ a címben szereplő szintézisutat, melynek kiindulási anyaga tetra-etoxi-szilán, olcsó kereskedelmi termék:



Munkánk során a módszert n-butil-etoxi-szilánok előállításán² keresztül tanulmányoztuk.

A reakciókörülmények vizsgálata után a termékeket azonosítottuk, a szilíciumtartalmú vegyületeket tisztán kinyertük és néhány fizikai-kémiai állandó segítségével jellemeztük. A gázkromatográfiás analízis során meghatároztuk a n-butil-etoxi-szilánok retenciós-indexeit. Kvantitatív gázkromatográfiával kimértük az n különböző értékeivel jellemzett termékek arányát a reakcióelegyekben. Eloszlási diagramot³ szerkesztettünk, mely az egyes szilánok kitermelését a reakciópartnerek arányának függvényében tünteti fel.

IRODALOM

1. Nagy J.: *Periodica Polytechnica Ch.*, 2, 241 (1958); Nagy J., Pálóssy K.: *Periodica Polytechnica Ch.*, 6, 35 (1962); Nagy J., Gábor T.: *Periodica Polytechnica Ch.*, 6, 149 (1962).
2. Nagy J., Ambrus L., Gábor T., Kolonits P.: 6th Int. Symp. Organosilicon Compds., Abstract of Papers, Budapest, 1981, p. 191.
3. Fuoss, R.M.: *J. Amer. Chem. Soc.*, 63, 2305 (1941).

HETERICIKLUSOS TIOLOK RÉZ KOMPLEXEINEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA

Kovács István

Veszprémi Vegyipari Egyetem, Szerves Kémia Tanszék, Veszprém
Pf. 158

A 2-merkaptó-benzotiazol (MBT) átmenetifém-komplexei a HNCS (tioamid) csoportja révén különleges spektrális és mágneses viselkedést mutatnak. Ezek közül a Cu(II)-komplexelek tulajdonságai tisztázottak legkevésbé.

Előállítottuk a hasonló koordinációs lehetőségű 2-merkaptó-benzimidazol (MBI) és a 2-merkaptó-benzoxazol (MBO) réz-komplexeit CuCl_2 , CuSO_4 , $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, CuBr_2 és $\text{Cu}(\text{NH}_3)_2$ sókkal, alkoholos és vizes oldatban. A nyert komplexek színe, összetétele változó, de egyaránt oldhatatlanok konvencionális oldószerekben.

Infravörös spektroszkópiai vizsgálatokkal a HNCS-csoport kevert vegyértékrezgéseinek (1500 , 1360 , 1260 és 670 cm^{-1}) változásai alapján feltételezzük, hogy az MBI-komplexekben C (Cu-N-) kötés alakul ki, míg az MBO komplexeiben a karboxilát komplexekhez hasonló $\frac{\text{C}}{\text{N}-\text{C}-\text{S}} \text{M}^{\oplus}$ típusú a kötés. A Cu-atomok kötéshelyének pontos megállapítására kémiai vizsgálatokat is végeztünk.

A réz oxidációs fokát a változó összetételű komplexekben mágneses szuszceptibilitás méréssel határoztuk meg.

[1] S.Banerji, R.E.Byrne, S.E.Livingstone; Trans.Met.Chem.,
7, 5-10 (1982).

2,3-DIMETIL-1,3-BUTADIÉN ÉS TETRAKARBONYL-KOBALT-HIDRID
REAKCIÓTERMÉKEINEK VIZSGÁLATA

Kucsera Sándor

Vegyipari Egyetem Veszprém, Pf. 158

Butadién-1,3 és $\text{HCo}(\text{CO})_4$ reakciójának első lépését 1,4-addíciónak megfelelően képzelik el annak ellenére, hogy a hidrogénezett termékben a butén-1 nagyobb részarányban található, mint ahogyan az egy utólagos gyors izomerizációt feltételezve a termodinamikai egyensúlyi összetételből következik.

GC, MS, IR és $^1\text{H-NMR}$ vizsgálatokkal a 2,3-dimetil-butadién-1,3 példáján kimutattuk, majd a dién: $\text{HCo}(\text{CO})_4$ molarány és a koncentráció függvényében 1,2-addícióval levezethető hidrogénezett, vagy 1,4-addícióval levezethető karbonilezett főtermék képződik.

Kísérleti eredményeink alapján megkíséreltük valószínűsíteni azt az elképzelést, miszerint minden termék közös intermedieren keresztül képződik.

HAKOACETILÉNEK ÉS OKTAKARBONIL-DIKOBALT REAKCIÓTERMÉKEINEK
ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA

Dudás Péter
Veszprémi Vegyipari Egyetem
Veszprém
Schönherz Z. u. 10.

Acetilének fém-karbonilokkal szemben mutatott reakciókészségét a C_2 - egység szubsztituensei nemcsak mennyiségileg, hanem minőségileg is nagymértékben befolyásolják. E szélesebb problémakör tanulmányozásához kapcsolódva megvizsgáltuk mono-haloacetilének és $Co_2(CO)_8$ reakcióját. A VRK-s vizsgálatok 6-8 anyag jelenlétét mutatták, de az anyag 90-95%-a három sávban összpontosult. Az először euálódó anyag a $(\mu_2-R^1C_2R^2)$ $Co_2(CO)_6$ komplex volt. Ennek szerkezetét IR-spektruma Co-analízis alapján igazoltuk. A másik két anyag a VRK-s elválasztás közben elbomlott, ezért frakcionált kristályosítással választottuk szét. Azonosításuk IR- és tömegspektruma alapján történt. A két vegyület nagy valószínűséggel a (μ_2-CO) $(\mu_2-C_2R^1R^2)Co_2(CO)_6$ és a $(\mu_2-C_2R^1R^2)_2Co_2(CO)_6$ komplex. Az általánosan előállított halovinilidén komplexek képződése a C_2 -egység poláros szubsztituensei fém-karbonil hatására bekövetkező 1,2-vándorlásának újabb példája. Korábban csak három rendszer esetében figyelték meg.

A KALCIUM(II)-IMINODIACETSÁV ÉS AZ EURÓPIUM(II)-IMINODIACETSÁV
RENDSZEREK ÖSSZEHASONLÍTÓ VIZSGÁLATA

Bihari Katalin III. éves matematika-kémia szakos hallgató

Kossuth Lajos Tudományegyetem, Debrecen

Témavezető: Dr. Laurenczy Gábor tudományos segédmunkatárs

A lantanoid elemek terjedő ipari felhasználása mellett szélesedik kutatási célokra történő alkalmazásuk is. Egyre fontosabb szerephez jutnak a biológiai vizsgálatoknál, mint pl. NMR shift reagensek, vagy mint a Ca^{2+} -ionok kötési helyeinek, koordinációjának meghatározását szolgáló próbák.

A biológiai rendszerekben a Ca^{2+} -iont helyettesítő és fizikai módszerekkel (ESR, NMR, fotometriák, stb.) jól vizsgálható lantanoid ionok és a koordinációban résztvevő O és N donoratomokat is tartalmazó csoportok egyensúlyi viszonyainak ismerete feltétlenül szükséges. Vizsgálatainkhoz a korábbiaktól eltérően nem ritkaföldfém(III)-ionokat választottunk, hanem az Eu^{2+} -ion alkalmazásának lehetőségeit vizsgáltuk. Az O és N donoratomot is tartalmazó iminodiacetát (IMDA) ligandumot igen nagy feleslegben (70-150-szeres) alkalmaztuk, az európium(II) komplexek stabilitási állandóit közvetlen potenciometriás titrálással határoztuk meg az eddig alkalmazott polarográfiás módszerek helyett. A vizsgált rendszerekből meghatározható ML és ML_2 típusú kalcium(II)-komplexek ($\log K_1=2,08$ és $\log K_2=0,31$), valamint az európium(II)-imda komplexek ($\log K_1=1,95$ és $\log K_2=1,30$) stabilitási állandóinak összehasonlításából látható, hogy az európium(II)-ion bizonyos esetekben jól alkalmazható kalcium próbaként biológiai rendszerekben.

AZ ITTRIUM(III)-, AZ ERBIUM(III)-IONOK ÉS A PROTONÁLT EDTA
LIGANDUMOK KÖZÖTTI REAKCIÓ SEBESSÉGÉNEK MEGHATÁROZÁSA EGY-
SZERŰ FOTOMETRIÁS MÓDSZERREL

Cziáky Zoltán és Sotkó Gyula III. éves vegyész hallgatók.
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Debrecen
Témavezető: Dr. Lauroczy Gábor tudományos segédmunkatárs

A cérium(III)-etiléndiamin-tetraacetát komplex és az erbi-
um(III), valamint ittrium(III)-ionok közötti kicserélődési re-
akció vizsgálatából bizonyos koncentrációviszonyok mellett
meghatározható a protonált edta és a kicserélő fémionok között
lejátszódó közvetlen reakció sebességi állandója is. A fenti
cserereakció végbemehet asszociatív úton, a kicserélő fémion
közvetlen támadásával a komplexen és a komplex proton katali-
zált disszociációjával is. A protonált komplex disszociációja-
kor képződő különböző protonáltságú edta ligandumok reakciója
a kicserélő fémionokkal úgy vizsgálható, hogy a kicserélt cé-
rium(III)-iont is feleslegben alkalmazzuk. A szabad edta ugyan-
is párhuzamosan reagál a kicserélő fémionnal és a cérium(III)-
ionnal (ahol Ceedta komplex képződik) a fémionok koncentráció-
inak és vízcsere sebességeinek arányában ($k_M^{-H_2O} \cdot [M] / k_{Ce}^{-H_2O} \cdot [Ce]$).
A fenti cserereakció során változtatva a Ce^{3+} , az Y^{3+} ,
illetve az Er^{3+} -ionok koncentrációját, a H_2edta^{3-} és H_2edta^{2-}
részecskék és az Y^{3+} és Er^{3+} -ionok közötti reakciók sebességi
állandói kiszámíthatók. Így igen gyors, egyébként csak speciá-
lis módszerrel (pl. stopped flow, relaxációs módszerek, stb.)
vizsgálható reakciók tanulmányozhatók hagyományos technikával.
A meghatározott sebességi állandókat táblázatban mutatjuk be.

	$k_M^{HY} (M^{-1}s^{-1})$	$k_M^{H_2Y} (M^{-1}s^{-1})$
Er^{3+}	$2,0 \cdot 10^8$	$2,1 \cdot 10^6$
Y^{3+}	$7,4 \cdot 10^7$	$1,8 \cdot 10^5$

AZ N-ACETIL-L-CISZTEIN ÉS AZ N-ACETIL-D-PENICILLAMIN Ni/II/
ÉS Pd/II/ KOMPLEXEI

Kónya Gábor

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és
Analitikai Kémiai Tanszék, Debrecen

A peptideket felépítő aminosavak oldalláncaiban található donoratomok helyzete és minősége jelentősen befolyásolja a ligandumok koordinációs kémiai viselkedését. Ez a hatás a terminális aminos csoport távollétében jobban érvényesül.

Munkám során a merkapto csoportot tartalmazó N-acetil-L-cisztein /NAC/ és N-acetil-D-penicillamin /NAP/ Ni/II/ és Pd/II/ komplexeit vizsgáltam. Kísérleti módszerek: pH-metria, spektrofotometria és kalorimetria.

A Ni-NAP rendszer különböző molarányoknál felvett titrálási görbéi alapján feltehetőleg az MA_2 részecske képződése a meghatározó, de - a közbelső pH-tartományban - többmagvu komplex képződését is figyelembe kell venni. Az amidcsoport deprotonálódása a vizsgált pH-tartományban nem következik be, s ezt a kalorimetriás mérés is megerősíti.

A Ni-NAC rendszerben az egyensúlyi számítások nem egyértelműek, jelentős a többmagvu komplexek képződése. A spektrofotometria is hasonló eredményre vezet: a moláris abszorbancia a koncentráció függvénye.

Pd/II/ jelenlétében a peptidek amidcsoportjának deprotonálódása általában könnyebben lejátszódik. A Pd/II/ - NAC rendszer pH=10 körül hidroxokomplexet feltételezve irható le, a deprotonálódás nem valószínű. A NAP kevésbé hajlamos többmagvu komplex képzésére, mint a NAC, de pH=10-ig a peptid-N nem vesz részt a koordinációban.

Eredményeim szerint az egyéb donoratomokkal kelátképző helyzetben lévő SH-csoport jelenléte gátolja a peptid-amid koordinációjának lehetőségét.

Ti/III/ KOMPLEXEK pH-METRIÁS EGYENSULYI VIZSGÁLATA
VIZES OLDATOKBAN

Pócsi István

KLTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Tanszékünkön kiterjedten tanulmányozzák a különböző paramágneses fémionok vizes oldatában lejátszódó ligandum - illetve víz - és protoncsere folyamatokat. E témához kapcsolódva célul tűztük ki néhány Ti^{3+} komplex vizes oldatának egyensúlyi vizsgálatát .

Alkalmos eljárást dolgoztunk ki a pH-metriás mérések által megkövetelt minőségű Ti^{3+} törzsoldat előállítására, valamint az oldat savtartalmának és Ti^{3+} koncentrációjának meghatározására.

Tanulmányoztuk a Ti^{3+} hidrolizisét. A vizsgálatokat szokatlanul kicsiny pH értékeknél végeztük, a titrálások során a diffúziós potenciál változását az elektródrendszer kalibrációjával vettük figyelembe.

A Ti^{3+} - malonsav rendszeren végzett vizsgálataink alapján megállapítható, hogy az egyensúlyi sajátságok csak MA_n típusu komplexek képződésével nem értelmezhetők, a rendszer egzakt leírásához többmagvú komplexek kialakulását is fel kell tételeznünk. Megállapítottuk, hogy a $Ti/mal/^{+}$ összetételű komplex már viszonylag kicsiny pH értékeknél is gyakorlatilag teljes mértékben képződik, így stabilitási állandója pH-metriás mérések alapján csak bizonytalanul határozható meg.

A Ti^{3+} - glicin rendszeren végzett vizsgálataink igazolták, hogy a Ti^{3+} - malonsav és - glicin rendszerek egyensúlyi szempontból hasonló sajátságokat mutatnak. Az utóbbi rendszer esetében a hidrolizis és csapadékleválás elkerülése érdekében a ligandumfelesleget alkalmaztunk.

A CONTRIBUTION TO THE APPLICABILITY OF SULPHIDE SENSED
 "ALL SOLID STATE" SELECTIVE ELECTRODES

Author: V.M.Jovanović

Chair for Analytical Chemistry, Faculty of Technology
 and Metallurgy, University of Beograd (Yugoslavia)

Mentor: M.S.Jovanović

Chair for Analytical Chemistry, Faculty of Technology
 and Metallurgy, University of Beograd (Yugoslavia)

In order to make Yugoslav users of ion-selective electrodes free of buying foreign-made ones, a multi-purpose GPE 201.801 selective electrode has been developed in the institution mentioned above. Being similar to Ružička-type of "all solid state" universal Selectrode, the difference is in hydrophobized graphite matrix sensor powders to be rubbed in, and in the contact material between the matrix and the cable.

Investigated were different sulphur-saturated sensors for Ag^+ as primary ions (a) Ag_2S , b) $\text{CuS}/\text{Ag}_2\text{S}$, c) $\text{PbS}/\text{Ag}_2\text{S}$, and d) $\text{CdS}/\text{Ag}_2\text{S}$), and the behaviour of GPE electrodes activated with these sensors was compared with ion-selective electrodes of Radiometer production: 1. F 1212 S sensed with Ag_2S crystal - silver contacted and 2. F 3000 sensed with $\text{CuS}/\text{Ag}_2\text{S}$ rubbed-in powder - carbon contacted. It appeared that only Ag_2S and $\text{CuS}/\text{Ag}_2\text{S}$ sensed electrodes behaved as silver-selective ones giving Nernstian slopes on the E/pM graph in silver ions solution of concentrations from 10^{-1} to practically 10^{-7} mol/dm³. The values for standard potentials extrapolated to $p\text{Ag} = 0$, were computed from the expressions of either Sato or Buck and Shepard and compared with the experimental results for both, Radiometr and GPE ion-selective electrodes. Although any of Ružička-type selective electrode regardless of the nature of contact between the matrix and the cable, is carbon-contacted relating to the rubbed-in sensor powder, standard potentials of these electrodes showed to be very close to silver-contacted electrodes: Ag_2S crystal F 1212 S as well as pure metallic silver electrode. The electrodes activated with $\text{CuS}/\text{Ag}_2\text{S}$ rubbed-in powder behaved as silver-selective ones not only in direct potentiometry, but also in the case of any potentiometric titrations where either metallic silver or Ag_2S sensor of any kind, can be used as the indicator electrode.

Author: E. Egić

Oil and Fat Technology Department, Institute of Meat, Milk, Oil and Fat and Fruit and Vegetable Technology, Faculty of Technology, University of Novi Sad

Supervisor: Dj. Karlović, I. Jankoviš

Oil and Fat Technology Department, Institute of Meat, Milk, Oil and Fat and Fruit and Vegetable Technology, Faculty of Technology, University of Novi Sad

In the scope of this work, the directed interesterification of sunflowerseed oil, as well as of mixtures: sunflowerseed oil - hard fraction of palm oil and sunflowerseed oil - coconut oil was performed.

The results have shown that it is possible to change the triglyceride composition of sunflowerseed oil, as well as of the above mentioned mixtures using high activity alkali catalyst (Na - K alloy). In that way, fat of high essential fatty acids content can be obtained, which is convenient for the production of so-called High Pufa margarin.

The reactant mixture was periodically cooled down, during the process of interesterification, using a time-programmer and system of thermostats, as to increase the crystallization rate of triglycerides having higher melting point.

The changes of the physical characteristics during interesterification, were followed by determining the dropping point and the flow of fat hardening.

The triglyceride composition was determined by TLC, on plates impregnated with Ag ions. Reflexive fluorescent spectrophotometry was used for the determination of the ratio of some triglycerides, separated according to the degree of unsaturation.

CONTRIBUTION TO THE INVESTIGATION OF ORIGIN INFLUENCE ON
PROPERTIES OF CATALYST FOR FISCHER-TROPSCH SYNTHESIS, Fe/WgO TYPE

Autor: Z.A.Teleki

Laboratory of Physical Chemistry and Catalysis,
Institute for Petrochemistry, Gas, Oil and Chemical
Engineering, Faculty of Technology, University in N.Sad

Mentor: E.E.Kiss

Laboratory of Physical Chemistry and Catalysis,
Institute for Petrochemistry, Gas, Oil and Chemical
Engineering, Faculty of Technology, University in N.Sad

Three catalysts for Fischer-Tropsch synthesis, Fe/WgO type, with approximate iron content of 10 wt % were investigated. The difference between prepared samples was in support precursor origin and mode of active component deposition on the support.

By means of X-ray diffraction and low-temperature nitrogen adsorption it was evident that depending on sample origin, physico-chemical properties of the catalyst significantly differed. That encountered in different distribution of active component on the support as well as different surface area. Ensued differences in physico-chemical properties influenced catalytic behaviour of the samples what was noticed by comparing their catalytic activity.

INVESTIGATION OF THE EFFICIENCY OF SOME ORGANIC
MATTERS IN THE COURSE OF SEPARATION FOR THE
SYSTEM MINERAL OIL-WATER

Author : Mirjana Djurdjević

Faculty of Technology, Institute of Petrochemistry,
Gas, Oil and Chemical Engineering, Novi Sad

Mentors: S.Sokolović and D.Nikolić

Faculty of Technology, Institute of Petrochemistry,
Gas, Oil and Chemical Engineering, Novi Sad

This paper reviews the results of investigations devoted to the efficiency of some organic matters in the course of purification of waste waters which contain oil and its derivatives. Therefore a simple filtration equipment has been designed involving variable parameters (height, diameter of contact material, waste water flow).

For the particular coalescence material at $L/D=\text{const.}$ and $Q=\text{const.}$, mean static time of waste water withhold, period of saturation, effect of oil derivatives on the expected efficiency have been measured. Concentration of oil and its derivatives in water has been determined by IR technique before and after treatment on the proposed filtration equipment. Efficiency calculated in percentage values is in the range of 53-90% of the separated oil and its derivatives from the waste waters.

BROMINATION OF DIIMIDAZO/1,2-b;2',1'-f)PYRIDAZINE.
A REINTERPRETATION.

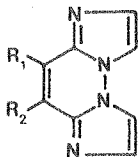
Author: Branko Huč
Supervisor: Branko Stanovnik

Department of Chemistry and Chemical Technology, E.Kardelj
University of Ljubljana, 61000 Ljubljana, Yugoslavia

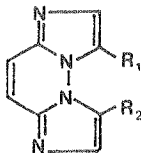
It has been reported in the literature (M.Watanabe et al., Synthesis 1977, 76) that bromination of diimidazo/1,2-b;2',1'-f)pyridazine (Ia) with N-bromosuccinimide is taking place at position 4 to give Ib, and that further bromination is taking place again in pyridazine nucleus at position 5 to give 4,5-dibromo compound Ic.

Since there are no other examples, known in the literature, in which electrophilic substitution is taking place in the pyridazine nucleus, it seems that the reinterpretation of the results reported is justified.

We found on the basis of careful analysis of ^1H NMR spectra obtained in different solvents, pseudocontact complexes with $\text{Eu}(\text{fod})_3$ and deuterium exchange reactions, that bromination is taking place in the imidazole part of the molecule, next to the bridgehead nitrogen atom, to give 1-bromo- (IIa) and 1,8-dibromodiimidazo/1,2-b;2',1'-f)pyridazine (IIb).



- I a) $\text{R}_1 = \text{R}_2 = \text{H}$
 b) $\text{R}_1 = \text{Br}, \text{R}_2 = \text{H}$
 c) $\text{R}_1 = \text{R}_2 = \text{Br}$



- II a) $\text{R}_1 = \text{Br}, \text{R}_2 = \text{H}$
 b) $\text{R}_1 = \text{R}_2 = \text{Br}$

THE EFFECT OF DEGREE OF CROSSLINKING
OF POLYETHYLENE ON ITS PROPERTIES

Author: B. Srdić

Institute for Petrochemistry, Gas, Oil and Chemical Engineering, Faculty of Technology, University of Novi Sad

Mentor: Z. Petrović

Institute for Petrochemistry, Gas, Oil and Chemical Engineering, Faculty of Technology, University of Novi Sad

Improvement of mechanical, electrical and thermal properties of polyethylene can be achieved by crosslinking. In this way the application range can be increased. The aim of this work was to find out the effect of degree of crosslinking on the properties of polyethylene.

Different degrees of crosslinking obtained by varying time and temperature of crosslinking with dicumylperoxide, were measured by swelling in xylene.

The results have shown that with the increase of degree of crosslinking tensile strength and elastic recovery increase, while elongation at break decreases. Dielectric strength and permittivity were not affected by degree of crosslinking in the range of examination.

REACTIONS OF N-HETEROARYLFORMAMIDE OXIMES AND
N-HETEROARYLACETAMIDE OXIMES. SYNTHESIS OF N-METHYL-
CYANOAMINOAZINES AND 2-METHYL-s-TRIAZOLO[1,5-x]AZINES.

Author: Anton Štimac

Supervisor: Branko Stanovnik

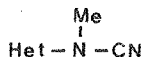
Department of Chemistry and Chemical Technology, E.Kardelj
University of Ljubljana, 61000 Ljubljana, Yugoslavia

N-Heteroarylformamide oximes (Ia) were converted with N,N-dimethylformamide acetal and some other reagents into N-heteroaryl-N-methylcyanoamino compounds (II) as the main products. In some instances N-heteroarylcyaanoamino compounds (III) and cyanoimino compounds (IV) were also formed. On the other hand, N-heteroarylacetamide oximes (Ib) were cyclized under the same reaction conditions into 2-methyl-s-triazolo[1,5-x]azines (IV). The structures of the compounds were determined by NMR, MS and IR spectra and by elemental analysis for C, H, and N.



I a) R = H

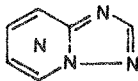
b) R = Me



II



III



IV

Some other transformations will be described.

GC/MS STUDY OF PYRAZINE FORMATION MECHANISM
IN ALDOSE AND AMINO ACID MODEL SYSTEM

Author: Aleksandra V. Vujkov
Organic Chemistry Dept., Faculty of Technology,
Novi Sad University, Novi Sad

Mentor: Božidar Lj. Milić
Organic Chemistry Dept., Faculty of Technology,
Novi Sad University, Novi Sad

Model systems containing D(+)-glucose and aminopropionic acid isomers, 2-aminopropionic and 3-aminopropionic acid, respectively, were reacted in alkaline water solution of pH 9.0, at 371K for the reaction period of 3.6×10^3 s, to investigate pyrazine formation mechanism.

Nineteen pyrazines were positively identified in a CH_2Cl_2 extract of dark brown reaction mixtures by gas chromatography analyses, and the structure of each identified compound was confirmed by direct comparison of their mass spectral and gas chromatographic data with those of authentic samples and with spectra given in the literature.

The principal constituents, from many other unidentified flavour compounds in GC spectra of the heated reaction mixtures, were nitrogen-containing heterocycles, different alkyl-substituted pyrazines.

Based on the gas chromatography - mass spectrometry (GC/MS) analyses, and fragmentation pathways of molecular ion of each of determined compounds, it is possible to presuppose the mechanism of pyrazine formations in the examined model systems.