



XXII. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekció

Debrecen, KLTE

1995. április 10-12.

ALIFÁS KARBONSÁVAK FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELVÁLASZTÁSA ÉS RETENCIÓS ADATAINAK SZÁMÍTÁSA

CSISZÁR HORTENZIA V. évf

Témavezető: Dr. HAJÓS PÉTER

Veszprémi Egyetem, Analitikai Kémia Tanszék, Pf.: 158,
8201 Veszprém

A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfias módszerek egyik dinamikus fejlődő részterülete az ionkromatográfia, amely vizes oldatokból ionos vagy ionizálható komponensek gyors, szelektív elválasztását teszi lehetővé. A kémiai elválasztások szakterületén állandóan jelenlévő igény, hogy az adott analitikai szeparációs módszerekhez, előzetes kémiai ismeretek alapján olyan könnyen áttekinthető számítási rendszer álljon rendelkezésre, amely a retenciós adatok predikcióját teszi lehetővé és ezáltal jelentősen megkönnyíti a módszert rutinszerűen alkalmazók munkáját [1].

Munkánk során alifás mono- és dikarbonsavak (formiát, acetát, propionát, oxalát, malonát, maleinát, fumarát, szukcinát, tartarát), retenciós tulajdonságait vizsgáltuk folyadékkromatográfias rendszerben. Vizsgálatainkhoz különböző eluenseket (alkánszulfonátok, karbonátos puffer, NaOH), pellikuláris szerkezetű ioncserélő megosztó fázist és vezetőképességi detektálást alkalmaztunk. Az eluens és a minta-komponensek megosztási egyensúlyaira vonatkozó elméleti megfontolások alapján retenciós egyenlet vezethető le. Előadásunkban a szeparációs módszer alkalmazhatóságát, az elméleti úton számított és kísérletileg nyert retenciós adatokat és ezen adatok eluens-tulajdonságtól való függését mutatjuk be.

[1]. Hajós P., Révész G., C. Sarzanini, G. Sacchero, E. Mentasti :
J. Chromatography 640 (1993) 15-25.

Elektrokémiai mérések függetlenségvizsgálata és matematikai statisztikai elemzése

Gál Sémer Sándor
doktorandusz, II. év
MISKOLCI EGYETEM
KÉMIAI INTÉZET
FIZIKAI KÉMIAI TANSZÉK

Az analitikai kémia információt termelő rendszer, az információ minőségét a hibája határozza meg. Az analitikai információnak legalább annyira megbízhatónak kell lennie, mint amit a terméktől megkövetelünk. A meghatározás hibáját ismerni és dokumentálni kell a hibafajták szerint, másképp az eredmény nem ad támogatást a döntésekhez melyek céljából készült. Még jelentősebb, hogy megvizsgáljuk alkalmazhatók-e a matematikai statisztika módszerei, mert enélkül a kapott eredmény valószínűségi tartalom nélküli dekoráció. Ahhoz hogy a mérési eredményekre alkalmazhassuk a matematikai statisztikát a következő követelményeknek kell teljesülniük:

1. Stabil mérési folyamat.
2. Független mérési eredmények.
3. A mérések véletlen reprezentációi az előállítható adatok populációjának.

A kidolgozott programcsomag segítségével készített grafikus ábrák és statisztikai számítások ötvözése révén pontos képet alkothatunk a kapott kísérleti adatok milyenségéről. A program különböző ábrázolásmódok (Hisztogramm, Lag-1 ábra, Ellenőrző kártyák ábrázolásai) segítségével kvalitatív képet alkot, míg az átlag, szórás, eloszlás ($X_k \pm 2\sigma$, illetve $X_k \pm 3\sigma$ tartományokban), ellenőrző kártyák adatainak kiszámolásával mennyiségi következtetéseket is levonhatunk.

A kidolgozott programcsomagot először generált adatok alapján teszteltük, majd pH mérések függetlenségét vizsgáltuk. A biztató eredmények után kiterjesztettük vizsgálatainkat az alumínáltlúg vizsgálatával kapott eredményekre is. Potenciometrius és vezetőképességi titrálások mérési adataink függetlenségéről is a program segítségével pontos képet alkothattunk magunknak.

AZ EGER-PATAK SZERVETLEN SZENNYEZŐDÉSEINEK VIZSGÁLATA

Hegyes Éva, Mézes József, IV. évf. mat-kém. szak

Témavezető: *Murányi Zoltán*
EKTF Kémia Tanszék

A talajok, folyami és tavi üledékek környezetünk alapvető összetevői, mivel táplálékforrást nyújtanak az élő szervezetek számára, ugyanakkor az ártalmas anyagok koncentrációjának szabályozásában is részt vesznek. Az üledékekösszetételéből következtetni lehet a környezetben lejárló mállási, bomlási folyamatokra és a különböző emberi tevékenységek okozta szennyeződésekre is.

Munkánk során az Eger-patak szennyezettségét vizsgáltuk, az ott élő növények elemtartalmának meghatározása alapján. A legmegfelelőbbnek a csalánt (*Urtica Dioica*) találtuk. A patak mentén az előfordulása a leggyakoribb és eleműsítése is a legjobb volt. A növény elemtartalma az élőszervezet által felvehető elemtartalmával korrelál, ezért az üledékes talajminták előkészítésénél olyan extrakciót alkalmaztunk, amely lehetőséget nyújt a mobil tartalom meghatározására. Az üledékben lévő fémek ionformáinak meghatározására Ure és munkatársai által kifejlesztett háromlépcsős szekvens extrakciós eljárást alkalmaztunk. Ennek alapja A. M. Ure "Nehézfémek speciációja talajokban és üledékekben" című cikke. Speciáció meghatározása: Az a módszer, amellyel a vizsgálandó anyag atomi illetve molekuláris formáját határozzuk meg.

A különböző kionószerekkel a mobilis és karbonátokhoz, Fe/Mn oxidokhoz, illetve szerves anyagokhoz és szulfidokhoz kötött fémek mennyisége becsülhető meg. Vizsgálataink során Cu, Cr, Mn, Cd, Zn, Fe, Pb ionformáinak meghatározásával foglalkoztunk. A mintákat az Eger-patak mentén gyűjtöttük, egy-egy mintavételi ponton azonos helyről vettük a víz- és iszap-, illetve talaj- és növénymintákat. A mintákra Ure és munkatársai módszerét alkalmaztuk, azonban a negyedik extrakciós lépés helyett totális feltárást végeztünk. Ezen minták eredményeit az extrakció egyes lépései utáni eredményekkel hasonlítottuk össze. Az oldatok fémion-tartalmát ICP-OES módszerrel határoztuk meg.

PEPTIDEK ÉS FEHÉRJÉK CD SPEKTRUMÁNAK KIÉRTÉKELÉSÉRE KIFEJLESZTETT ANALIZÁLÓ PROGRAMRENDSZER

Jákli Imre, vegyész

Témavezető: *dr Perczel András*
ELTE Szerves Kémia Tanszék

Az általam kifejlesztett program több, egymástól függetlenül elkészített BASIC nyelven írt programon alapul, amelyet Tuszny Gábor matematikus segítségével dolgoztak ki a 80-as évek végén. Ezeket a programokat korábban már sikerrel alkalmazták számos probléma megoldására. Sajnos a program szélesebb körben való elterjedését akadályozta, hogy az egyes modulok nem alkottak egységes rendszert és így a mérési adatok feldolgozása igen hosszadalmas és nehézkes volt. A konvex peremfeltételű dekonvolúciós eljárás alkalmazásának megkönnyítésére dolgoztuk ki mostani rendszert, mely készítése során elsődleges célunk volt egy felhasználóbarát programrendszer kialakítása. Miután ez elkészült, témavezetőm javaslatára további modulokat építettem be a programba, amely ezután nyerte el végső formáját.

A jelenlegi program már egy integrált adatfeldolgozó rendszert tartalmaz, ami azt jelenti, hogy a két legkorszerűbb (Jobin Yvon VI ill. a Jasco 720-as) CD spektrográf által mért adatokat közvetlenül képes beolvasni, mely során a spektrum egy spektrumkönyvtárba kerül. A kiértékelés két különböző módon történhet: a konvex peremfeltételű dekonvolúciós eljárással (CCA) vagy a lineáris kombináció (Lincomb) módszerével. A lineáris kombinációhoz elengedhetetlenül fontos referencia spektrumok összeállítása a spektrumkönyvtárból történik. Mivel bizonyos referencia spektrumokat nem mérhetünk meg kielégítő pontossággal, lehetőséget biztosítottunk arra, hogy egy spektrumot összeállíthassunk gauss görbék vagy már ismert másodlagos szerkezeti elemekre jellemző spektrumok módosításával. A pszeudo multiaszkos megvalósítás következtében az iteráció folyamatát grafikusan nyomon követhetjük. A görbefeletbontás eredményét menüből választhatóan szöveges vagy grafikus formában is megtekinthetjük. A színes megjelenítés igen szemléletes és áttekinthetővé tette az adatok utólagos analizisét. Az eredmények jóságát a standard deviáció mellett a mátrixokra kiszámított Pearson korrelációs koefficienseken keresztül is vizsgálhatjuk. Valamint a program tartalmaz egy teszt adatsort előállító modult, ami a konvex peremfeltételű algoritmus ellenőrzésére szolgál.

A program megírásakor Borland C++ fejlesztői környezetet választottam, amely PC-n a DOS operációs rendszerben legkorszerűbbnek tekinthető. A C programnyelv alkalmazását indokolta az, hogy manapság ez tekinthető az egyik legelterjedtebb programnyelvnak, mely rugalmassága mellett biztosította operációs rendszeről való minimális függőséget, tehát ezzel a program hordozhatóvá vált. Ezek mellett jelentős sebességnövekedést is tapasztaltunk: pl. a CCA algoritmus négyszeres sebességgel futott. Terveink között szerepel - a fentiek alapján - a PC-s változat UNIX operációs rendszer alá történő adaptálása. Az RISC-6000 számítógépek nagyobb számolási kapacitásával lehetővé válna nagyobb adatsorok analizise is. Ezzel együtt az XWindows környezet még kényelmesebbé tenné a kiértékelést.

A fűszerpaprika aromaprofiljának változása az érlelés során, az aromaprofil fajtajellemzői

Kocsis Nándor okleveles mérnök
Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem
Élelmiszeripari Kar, Élelmiszerkémiai Tanszék
Konzulensek: Harkay Tamásné dr.
dr. Korány Kornél

A dolgozat témáját a fűszerpaprika feldolgozásának egyik fontos fázisának, az utóérlelési szakasznak a vizsgálata alkotja, az érés folyamatának nyomonkövetésén, az aromaanyagok alakulásának meghatározásán keresztül. Munkám során az alábbi feladatokat oldottam meg:

- mintaelőkészítési eljárás kidolgozása az illó komponensek kinyerésére,
- az optimális elválasztást biztosító gázkromatográfias körülmények megkeresése,
- a lehetőség szerinti maximális számú alkotó azonosítása,
- a komponensek mennyiségi változásának nyomonkövetése az utóérés során,
- aromaprofil-meghatározáson alapuló fajtaazonosító eljárás kidolgozása.

A mintaelőkészítési eljárás kidolgozásakor extrakciós és vízgőzdesztillációs módszereket hasonlítottam össze. Vizsgálataim szerint a paprika illatkomponenseinek kinyerésére a vízgőzdesztillációs módszer alkalmasabb. A mintaelőkészítéssel egyidőben megfelelő gázkromatográfias módszert is kidolgoztam a legkedvezőbb elválasztást eredményező paraméterek megkeresésével. Ez a munka a szeparációt végző oszlop hőmérsékletének programozásán túl, a "cool on column" injektor rendszer optimalizálását is jelentette.

Az édes és csípős paprikában azonosított vegyületek 3 fő csoportra oszthatók. A közös (25), a csak az édes paprikára jellemző (7) és a csak a csípős paprikában található komponensekre (4). Az alkotók közül azok, amelyek az összterület egészéből 1 %-nál nagyobb mértékben részesednek, a karakter kialakításában vélhetően nagyobb, esetleg kulcsszerepet játszanak. Minden általam vizsgált paprikamintában a legnagyobb mennyiségben előforduló komponens a transz-kariofillén, a linalool, ill. egy eddig még azonosítatlan komponens volt. Úgy gondolom ezért, hogy ezeket az alkotókat természetes belső standardként kezelve, a többi azonosított anyag mennyiségét (első lépésben csúcsterületét) rájuk vonatkoztatva és a fajták közti összevetést lehetővé tévő formára hozva olyan relatív mérőszámokhoz juthatunk, amelyek mentesek mind a mintaelőkészítés, mind a kromatografálás hibáitól és csak a fajtára, a minőségre és a termőhelyre jellemzők.

Az azonosítási feladatok elvégzése után, az érlelés során bekövetkező mennyiségi változások alakulásáról is objektív képet nyerhettem egy relatív mérés segítségével, amely a legjobbnak ítélt (a komponensek száma és mennyisége maximális) minta alkotóit önkényesen 100 egységnek (%) veszi és a többi kromatogramot ezzel a felvétellel mint kalibrációval kiértékeli.

ÚJ MÓDSZER A TRANSZFORMÁTOROLAJOK NEDVESSÉGTARTALMÁNAK MEGHATÁROZÁSÁRA

KÓRÉH ORSOLYA, V. vegyész

Eötvös Lóránd Tudományegyetem
Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék
Témavezető: Dr. Borossay József

A szigetelőolajok elektromos paraméterei jelentős mértékben függenek az adott olaj nedvességtartalmától, így ennek pontos, kvantitatív mérése a nagyfeszültségű szigetelőtechnikában alapvető feladat. A víz csökkenti az olaj átütési szilárdságát és a transzformátorban található papírszigetelés bomlására utal.

A víztartalom mérésére különböző módszereket fejlesztettek ki. Ennek első csoportját a titrálós módszer alkotja, a Karl Fischer eljárás. Alkalmazását azonban korlátozza az a tény, hogy a transzformátorolajokban az elektromos kisülések és hőhatások következtében telítetlen vegyületek képződnek. A Karl Fischer oldat ezekkel is reagál, így többletfogyást eredményez.

A második csoportot a dielektromos állandó mérésén alapuló szenzoros mérések képezik. Ezeknek hátránya, hogy változást mérnek, folyamatos monitoringra alkalmasak, nem különböző, egyedi olajok nedvességtartalmának mérésére.

A bevezetendő új módszer kémiai reakciót használ fel a víztartalom meghatározására. A mérés elve: az olajhoz adagolt hidrid reagál annak víztartalmával, és a reakció során hidrogén gáz szabadul fel. Ennek mennyiségét gázkromatográfiásan mértem.

A kísérleti munka során több kérdés merült fel:

- hogyan történjen a gázfelszabadítás
- kvantitatív-e a reakció
- a hidrid csak a vízzel reagál-e?

A gázfelszabadítást, standard módszer szerint, négy különféle hidriddel végeztem: LiAlH_4 , CaH_2 , NaH és NaBH_4 .

A H_2 fejlődését vizsgáltam a kevertetés idejének függvényében. Ez telítési görbét eredményezett. Az egyensúlyi érték kb. 10 perc után állt be.

A gázfelszabadítást szilárd halmazállapotú hidriddel, olajos szuszpenzióval és oldattal végeztem. E két utóbbi módszer megfelelnek bizonyult.

Új kalibrálási eljárás pH - metriás titrálásokhoz

Kukovecz Ákos, III. éves vegyész hallgató

Témavezető: *Dr. Labádi Imre, Dr. Horváth István*
JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A pH - metria széles körben használt, egyszerű és pontos módszer, mellyel lehetséges a komplexképződési egyensúlyok vizsgálata, pK és log β értékek meghatározása is. Ez esetben a mérések pontosságához szükséges a mérőberendezés gyakori (napenkénti vagy kísérletenkénti) kalibrálása. A jelenleg használt eljárások megbízhatóak a pH 2.5 - 11.3 -as tartományban, ahol az üvegelektrod közelítőleg nernst-i választ ad, s a kalibráló és a tesztdat közel azonos összetétele is megvalósítható.

A pH=2-nél savasabb ill. a pH=11-nél lúgosabb oldatokban azonban egyrészt az üvegelektrod is eltérést mutat a Nernst egyenlettől, másrészt a kalibráló és a tesztdat azonos összetétele sem valószínűsíthető meg. Az ismert kalibrálási módszerek alkalmazása savas és lúgos tartományban a kísérleti hibánál nagyobb eltéréseket eredményez a meghatározott pK vagy log β értékekben. Vizsgálataink során egy új kalibrálási eljárást dolgoztunk ki.

Az általunk javasolt módszer független az elektródválasz - függvény alakjától, mindössze annak reprodukálhatóságát, valamint a kalibráló és a tesztdat közel azonos összetételét tételezi fel. A módszer során erős savat titrálunk erős bázissal, az E (mV) vs. V(lúg) (ml) titrálási görbét spline függvénnyel írjuk le, s azt felhasználjuk a mérendő oldat titrálásakor a Bjerrum - féle képződési függvény kiszámítására.

Az eljárás megvalósítására elkészült a Potenciometria nevű, egérvezérelt, felhasználóbarát program, amely pH - metriás mérések teljes értékelését teszi lehetővé a nyers adatsortól a log β - ig. Ezenfelül méréseket végeztünk mind a már elfogadott eljárások, mind az új módszer megbízhatóságának vizsgálatára.

A FESTŐBUZÉR LUCIDINTARTALMÁNAK MEGHATÁROZÁSA

Margi Lilla V. biológia-kémia

Témavezető: *Dr. Szókán Gyula*

ELTE Szerves Kémiai Tanszék

A festőbuzér (*Rubia tinctorum*) kivonatának elemzése a múlt században kezdődött. Addig elsősorban vörös festéknek használták, később alkalmazása elterjedt a népi gyógyászatban is, vesekőoldó képessége miatt. A *Rubia* nemzetségbe tartozó növényekben sokféle vegyület található (antrakinon- és naftokinon-hidroxiidok valamint -glikozidok; peptidok stb), melyeket a növény legnagyobb mennyiségben a gyökerében állít elő. Ezek között több, gyógyászatilag hasznosítható (pl. peptidok \rightarrow antitumor hatás; ruberitrinsav \rightarrow vesekőoldó képesség) vegyületet találtak, de emellett a növények tartalmaznak mérgező anyagokat is (pl. genotoxikusokat és rákkeltőket, ilyen a lucidin és a lucidin-primverozid). Ezért fontos az egyes komponensek izolálása a növényből.

Kísérleteket végeztem komponensek, elsősorban néhány antrakinon-hidroxiid frakcionálására és izolálására természetes gyökérörleményből és gyökérfermentumból.

A különböző extrakciós módszerek segítségével a kivont komponensek tisztítását kromatográfiai eljárásokkal végeztük, és olyan HPLC-körülményeket optimaltunk, mellyel az analízis elvégezhető. Méréseket végeztem a minták lucidin- és alizarintartalmának meghatározására és más standardok felhasználásával minőségi méréseket végeztem.

Tokoferol folyadékkromatográfiás mérése UV detektálással

Mester Zoltán okleveles mérnök
Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem
Élelmiszeripari Kar Élelmiszerkémiai Tsz.
Konzulens: Amtmann Mária tud. mts.

Napjainkban a tokoferol, vagyis az E vitamin az érdeklődés homlokterébe került. Ez az antioxidáns hatású vegyület ugyanis a gyökös mechanizmusú reakciókban gyökfogóként szerepel.

Míndezen hatásai miatt fontos lenne ellenőrizni a táplálékkal bejutó E vitamin mennyiségét, ez azonban táblázati adatokból való számítással igen pontatlan, mert az élelmiszerek tokoferol-tartalma jelentős szezonális ingadozást mutat. A pontos értékeket tehát, amelyek táplálkozásélettani kísérleteknél elengedhetetlenek, csak méréssel lehet megállapítani.

Célkitűzés

Munkám célja volt, hogy a kromatográfiás módszer kidolgozásán túl a módszert a helyes laboratóriumi gyakorlat (HLGY) követelményei szerint validáljam, vagyis bizonyítsam, hogy az eljárás lehetőséget nyújt élelmiszermintákból, az azokban előforduló szennyező anyagok mellett a kívánt komponens megfelelő érzékenységu mérésére.

Eredmények

A módszert paprikamag olajának tokoferoltartalom-mérésére dolgoztam ki. A folyadékkromatográfiás meghatározás normál fázisú (poláros) oszlopon történt, ezen ugyanis az olajos mintákban előforduló, a meghatározást leginkább zavaró zsírszerű anyagok minimális retencióval, a tokoferolt nem zavarva jutnak át. A használt eluens 98,7:1,3 arányú hexán-izopropanol összetételű volt.

A validálás eredményei szerint a kromatográfiás eljárás szórása 3,23%. A kalibráció helyességét független forrásból származó ismert minta mérésével ellenőriztem. A mennyiségi mérés linearitási tartománya a $\mu\text{g/ml}$ koncentrációtartomány egészére kiterjed. A paprikamagból készült kivonat esetében csúcstisztaság-vizsgálattal ellenőriztem, hogy a retenció idő alapján tokoferolnak azonosított csúcs elválasztása megfelelő-e. A csúcstisztaság ellenőrzése két választott hullámhosszon mért fényelnyelés aránya alapján történt.

KÉN-HEXAFLUORID PLAZMAKÉMIAI REAKCIÓINAK TANULMÁNYOZÁSA GÁZKROMATOGRÁF-TÖMEGSPEKTROMÉTER KAPCSOLT RENDSZERREL

Molnár Gábor, IV. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Torkos Kornél
ELTE Általános és Szevetlen Kémiai Tanszék

A kén-hexafluoridot az ipar ill. kutatás számos területén használják (pl. villamosipar, félvezetőipar, környezetvédelem), és az alkalmazások nagy része kapcsolatos valamilyen plazmajelenséggel.

A jelen munka célja a kén-hexafluorid plazmakémiai reakcióinak és ezen belül is elsősorban a plazmában keletkező bomlástermékeknek a vizsgálata volt. A plazmában lejátszódó reakciók mechanizmusáról kialakult elképzelések még semmiképp sem tekinthetők tisztázottnak. Ez részben annak is tulajdonítható, hogy a jelenséget elsősorban fizikai szemszögből vizsgálták, és az alkalmazott kémiai-analitikai módszerek gyakran nem a legmegfelelőbbek voltak. Így a fő célkitűzésünk a bomlástermékek analízisére egy megfelelő módszer kidolgozása volt.

Erre a feladatra egy gázkromatográf-tömegspektrométer kapcsoláson alapuló eljárást fejlesztettünk ki, amellyel a különféle nyomszennyezők kvantitatív meghatározása is lehetővé vált.

Ezen hatékony módszer birtokában lehetőség nyílt arra, hogy egy speciális modellberendezésben végzett plazmakísérletek során keletkező termékek analízisét elvégezzük. Az egyes termékek koncentrációit a betáplált energia függvényében vizsgáltuk, amiből a reakciómechanizmusra lehetett bizonyos következtetéseket levonni.

Gyakorlati vonatkozása is volt a munkának, hiszen vizsgáltuk kén-hexafluorid szigetelésű nagyfeszültségű kapcsolóberendezések szigetelési állapotát is a villamosipar számára

FUMAGILLIN MEGHATÁROZÁSA BIOLÓGIAI MÁTRIXBÓL

Romvári Zsuzsanna IV. biológusmérnök
Budapesti Műszaki Egyetem, Vegyészmérnöki Kar, Általános és
Analitikai Kémia Tanszék

Témavezető: Dr. Fekete Jenő
Konzulens : Szepesi Ildikó

A dolgozat témája a fumagillin nevű antibiotikum meghatározása biológiai mátrixokban.

A fumagillin az *Aspergillus fumigatus* gombafaj által termelt antibiotikum. Jelenleg az állatorvosi gyakorlatban használják halak és méhek protozoák okozta betegségeinek kezelésére. A fumagillin a táplálékláncon keresztül az emberi szervezetbe is bejuthat, halszervekből történő meghatározására azonban az irodalomban nem találtam leírást.

Munkám során validált fordított fázisú folyadékkromatográfiás módszert dolgoztam ki fumagillin meghatározására halszervekből.

A dolgozatban ismertetem a mintaelőkészítési módszert, amely alkalmazásával a fumagillint a halszervekből kinyertem. Ennek első lépése volt az antibiotikum acetónitriles kinyerése a biológiai mátrixokból. A minták tisztítása, illetve dúsítása Sep-pak-C₁₈ mintatisztító és dúsító kolonnán történt.

A kidolgozott analitikai eljárást alkalmaztam fumagillinnel kezelt pisztrángok izomszövetében történő gyógyszermaradvány meghatározására.

A kidolgozott módszer viszonylag gyors, így nagy számú minta elemzését teszi lehetővé. Alkalmazásával a fumagillin farmakokinetikai, gyógyszerhatástani és reziduum-vizsgálatai elvégezhetők.

NEM TERMÉSZETES AMINOSAVAK ENANTIOMERJEINEK HPLC-s ELVÁLASZTÁSA FORDÍTOTT FÁZISÚ OSZLOPON

TÖRÖK GABRIELLA V.évf. vegyész szakos hallgató
Témavezető: Dr. Péter Antal docens
József-Attila Tudományegyetem
Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A gyógyszerkutatás egyik feladata, hogy az adott gyógyszer mellékhatásait kiküszöbölje. Ezen célból kiterjedt vizsgálatokat folytatnak a kábító fájdalomcsillapítók körében. Így irányult a figyelem a receptorszelektív opioid peptidekre. Ezen peptidek szintézise során gyakran használnak nem természetes aromás racém, vagy optikailag tiszta aminosavakat, ez utóbbiak azonban racemizálódhatnak. Az egy vagy több aszimmetriacentrummal rendelkező diasztereomer peptidek biológiai hatása nagymértékben különbözhet, mivel lehetnek agonista vagy antagonisták szerek. Ezért fontos olyan kromatográfiás módszerek kifejlesztése, amelyek alkalmasak racém aminosavak elválasztására és optikailag tiszta termékek azonosítására.

Ezen munkánkban tetrahydroizokinolin és tetralin vázas, nem természetes aminosavak enantiomerjeinek elválasztását, valamint a Tyr-D Ala-Atc-Glu-Ile-Ile-Gly-NH₂ peptid konfigurációjának bizonyítását végeztük. A vizsgált aminosavak: D-és L-1,2,3,4-tetrahydroizokinolin-3-karbonsav (Tic), D,L-1,2,3,4-tetrahydro-4-metilizokinolin-3-karbonsav (β-Me-Tic), D-és L-1,2,3,4-tetrahydro-7-hidroxiizokinolin-3-karbonsav (OHTic), D,L-2-aminotetralin-2-karbonsav (Atc), D,L-6-hidroxi-2-aminotetralin-2-karbonsav (Hat) és D,L-6-metoxi-2-aminotetralin-2-karbonsav (MAtc). Képeztük ezen vegyületek 1-fluor-2,4-dinitrofenil-5-L-alaninamid (FDAA), valamint 2,3,4,6-tetra-O-acetil-β-D-glükopiranozil izotiocianát (GITC) származékait oszlop előtti derivatizálást alkalmazva. Az elválasztást szerves oldószer (MeOH, AcCN)-puffer (NaOAc, KH₂PO₄, TFA) eluensrendszerben, izokratikus körülmények között végeztük. A konfiguráció bizonyításához enzimatis bontást alkalmaztunk.

SZERVES KÉMIA

DIOLOK DEHIDRATÁLÁSA HETEROPOLISAVAK JELENLÉTÉBEN
HOMOGÉN ÉS HETEROGÉN KÖRÜLMÉNYEK KÖZÖTT

Beregszászi Tímea, V. évf. vegyész

Témavezető: *Török Béla, Molnár Árpád*
JATE, Szerves Kémiai Tanszék

Tanulmányoztuk diolok átalakulásait irodalmi leírás alapján szintetizált $H_4[SiMo_{12}O_{40}]$ és $H_3[PW_{12}O_{40}]$ jelenlétében. A vizsgálatokat homogén fázisban a termékek kidesztillálásával (150 °C) illetve SiO_2 hordozóra felvitt heteropolisav jelenlétében átáramlásos reaktorban (200 °C) végeztük. A termékek azonosítását GC-MS módszerrel, a termékösszetételt gázkromatográfias analízissel valósítottuk meg. Spektroszkópiás módszerekkel (IR, UV-VIS, ESR) jellemeztük a $H_4[SiMo_{12}O_{40}]$ -t és vizsgáltuk a dehidratálási reakció közben végbement szerkezetváltozásokat.

Az 1,2-diolok jellemző átalakulása a megfelelő oxovegyületek szelektív képződésével járó pinakolátrendeződés. Sztereoiszomer 2,3-butándiolok tanulmányozásával a katalizátortól ill. a vegyület térszerkezetétől függően jelentős szelektivitáskülönbségeket (hidridanion- ill. metilanion-vándorlás) figyeltünk meg.

Hasonlóképpen szelektív az 1,4- és 1,5-diolok reakciója is, amelyek ciklodehidratációval a megfelelő gyűrűs éterre (szubsztituált tetrahidrofurán és tetrahidropirán) alakulnak. Sztereoiszomer 2,5-hexándiolok vizsgálatával tanulmányoztuk e reakció sztereokémiáját és megállapítottuk, hogy a gyűrűzáródás sztereoszzelektív módon, intramolekuláris S_N2 szubsztitúció révén játszódik le.

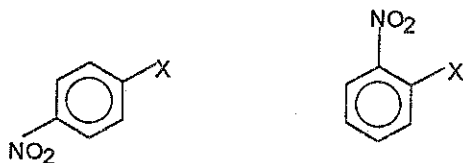
A fentiekkel szemben az 1,3-diolok komplex termékelegyet adnak. A jellemző folyamatok 1,2-elimináció (diénképződés) és fragmentáció. Az 1,2-diolokra jellemző oxovegyületeképződés csak a 2,4-pentándiol és a 3-metil-2,4-pentándiol esetén válik jelentős reakcióvá. A termékösszetétel összehasonlító vizsgálata alapján az oxovegyületeképződés kétszeres 1,2-anionoid-vándorlással megy végbe.

Aromás kénvegyületek VUV fotoelektron spektroszkópiás vizsgálata

Csonka István, V. vegyész

Témavezető: Szepes László
ELTE, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

Tudományos diákköri tevékenységem során egy 6 vegyületből álló sorozatot állítottam elő és vizsgáltam ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiával. A vegyület család az alábbi általános képlettel jellemezhető:



ahol X lehet S-Me (tioanizol-származék), SO-Me (szulfoxid-származék) és SO₂-Me (szulfon-származék). Az anyagokat a megfelelő nitro-klór-benzolból állítottam elő ismert módszerekkel. Azonosításuk infravörös és tömegspektroszkópia segítségével, valamint olvadáspont alapján történt, a tisztaságot gázkromatográfiásan ellenőriztem.

Ezeknek az anyagoknak UPS felvétele az irodalomban nem ismeretes, ezen túlmenően alkalmasak a kén-oxigén nemkötő kölcsönhatások tanulmányozására is, amelynek gondolatát Kapovits István egyetemi tanár vetette fel.

A spektrumok kis energiájú részén jelentkező sávok a kén magányos elektronpár(ok), a benzolgyűrű pi-rendszere, valamint az ezek kölcsönhatásából származó MO-k ionizációjához rendelhetők. Ugyanitt jelentkeznek a NO₂-csoporton lokalizált pályák is.

A spektrumokon jól megfigyelhető a NO₂-csoport mintegy 0.6 eV-os stabilizáló hatása.

Az o-nitro-szulfoxid spektrumában a p-nitro-szulfoxid spektrumához képest a nitro csoport oxigénjei magányos párhoz rendelhető sáv stabilizálódása észlelhető, míg a többi sáv a spektrum alacsony energiájú részén destabilizálódik. Ezt magyarázhatja a kén betöltetlen d pályái és az oxigén magányos párok közötti d_π-p_π kölcsönhatás.

Bizonyos spektrális jellegzetességekből a molekulák térszerkezetére is lehet következtetni.

A tioanizolról elektrondiffrakciós és fotoelektron-spektroszkópiás vizsgálatokkal kimutatták, hogy gázfázisban két konformere létezik; az egyikben a Me-csoport a gyűrű benzolgyűrű síkjában a másikban arra merőlegesen helyezkedik el. Hőmérsékletfüggő UPS-sel a két konformer egyensúlyát jellemző paramétereket is meghatározták.

Elektrondiffrakciós mérésekből arra következtettek, hogy az orto-nitro-tioanizolban az egyik konformer túlnyomó súllyal van jelen, mégpedig az, amelyben a Me-csoport a gyűrű síkjában helyezkedik el (Hargittai; *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2* 1987 83(11) 2112-2121).

Vizsgálataim során kísérletet tettem egy adott hőmérsékleten a konformerek arányának meghatározására. Az eredményekből kitűnik, hogy az orto- helyzetű nitro-csoport stabilizálja a planáris konformert, míg a para- helyzetű nitro-csoport nem befolyásolja a konformerek arányát.

SZTEREIDOK AROMÁS SCHIFF-BÁZISAINAK CIKLIZÁLÁSI REAKCIÓI

Frank Éva, V.évf. vegyész

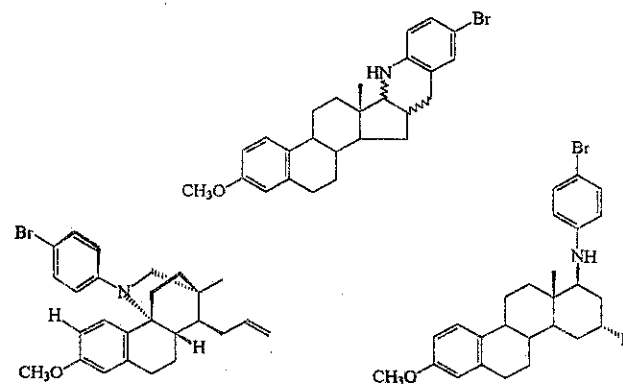
Témavezetők: Dr. Schneider Gyula
Dr. Wölfling János

JATE Szerves Kémiai Tanszék

A nitrogéntartalmú szteroid heterociklusok számos képviselője farmakológiai jelentőséggel bír, egyesek hatásosan alkalmazhatók a klinikai halálból történő újraélesztésre, ún. lazareid tulajdonságú vegyületek.

Eljárást dolgoztunk ki a 16,17-szeko-13 α -formil-3-metoxi-ösztion fragmens előállítására, mely aromás aminokkal könnyen képez aldimineket. Ez utóbbiak *in situ* körülmények között Diels-Alder cikloaddícióban vesznek részt és heterociklusos szteroidokká alakulnak. A Lewis-sav katalizálta cikloaddíció mellett egy halogéntartalmú származékhoz vezető Prins-típusú átalakulást is megfigyeltünk. A reakciók kemo-, régió- és sztereoselektivitása az alkalmazott amin és a katalizátorként használt Lewis-sav függvénye.

Para-bróm-anilinnel végrehajtott kísérleteink során három új terméket sikerült tisztán izolálnunk, melyek szerkezetét bizonyítottuk.



A ciklizációs reakciók több sztereokémiai problémát vetnek fel, melyek megoldása ¹H- és ¹³C-NMR technikával történik.

Az előállított vegyületek farmakológiai vizsgálatát a Schering AG (Berlin-Bergkamen) végzi.

Egy alternatív módszer fehérjék térszerkezetének linearizált összehasonlítására.

TDK dolgozat 1995.

Készítette: Hudáky Péter, V. éves, vegyész

ELTE TTK Szerves Kémia Tanszék

Témavezető: dr. Perczel András

Széves Kémia Alszekció

Fehérjék 3 dimenziós szerkezetének tipizálása egy olyan feladat amely ma nem oldható meg egyértelműen. Ez a probléma hasonló az általánosan ismert alakfelismerés feladatköréhez. Számos ígéretes próbálkozást ismerünk az irodalomból fehérjék másodlagos szerkezetének leírására, azonban egyik sem tekinthető egy végleges, minden igényt kielégítő, objektív megoldásnak. A munka amelybe bekapcsolódom egy új, a fehérjék másodlagos szerkezetét az eddigieknél teljesebben leíró módszer kifejlesztése. Az általam elvégzett feladat egy olyan programcsomag megírása volt amely a korábban kifejlesztett algoritmust egy felhasználóbarát környezetben alkalmassá teszi fehérjék térszerkezetének vizsgálatára.

Az új módszer lényege, hogy az eddigiektől eltérően nem röntgenkristallográfiai adatok feldolgozásán alapul, hanem a fehérjéket felépítő peptidok *ab-initio* modellezésére épül.

A program neve ACAP (Amino acid Conformational Analyses of Proteins). A programot pascal nyelven írtam, IBM PC és ezzel kompatibilis számítógépeken futtatható. A grafikus lehetőségek miatt szükséges az EGA vagy ennél jobb monitor és nem elengedhetetlen, de hasznos egy egér használata is.

Angol nyelvű kezelési útmutatókészült hozzá, amiben minden a program használatára vonatkozó tanács és utasítás megtalálható. A kezelési útmutató tartalmaz példákat a program használatára vonatkozóan valamint az esetleges hibüzenetek jelentésére is magyarázatot ad.

Az általam készített programcsomag lehetővé teszi, hogy fehérjecsatládok gerinc-konformációit egyidejűleg tanulmányozhassuk. A módszert alkalmaztam fehérjecsatládok térszerkezetének összehasonlítására ahol az aminosavsorrend alacsony homológiája ellenére a molekula bizonyos részeitek térszerkezete erős rokonságot mutat.

Vicinális szteroid amino-alkoholok készítése és vizsgálata

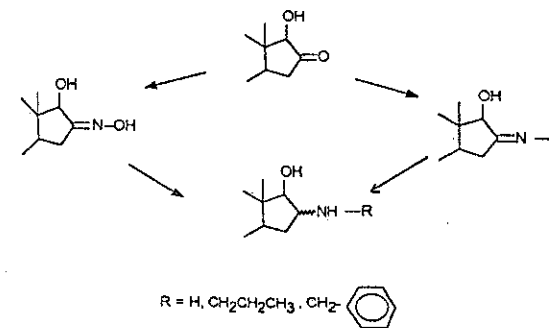
Kander Zoltán V. éves vegyészhallgató
Témavezető: Dr. Vincze Irén

JATE Szerves Kémia Tanszék

Szteroidok vicinális amino-alkohol származékai közül az A- és D-gyűrű származékai ismeretesek. A királis szteránvázon két vicinális szubsztituens négy sztereoizomer képződését teszi lehetővé, ezért az említett származékok szintézise minden esetben többlépéses. Az egyes lépéseknek szterszelektíveknek kell lenniök ahhoz, hogy végülis tiszta térizomerek képződjenek.

16-Keto-17-hidroxi-szteroidok kiindulási anyagul szolgálhatnak 16-amino-17-hidroxi-származékok előállításához. Ismert azonban, hogy ezek kezelése nátrium-bórhidriddel redukció helyett a D-gyűrű hasadásához, szeko-aldehid-nitril képződéséhez vezet.

A laboratóriumban korábban a ketoximokra kidolgozott redukciós módszert próbáltuk alkalmazni α -hidroxi-ketoximok redukciójára. A másik lehetőség α -hidroxi-azometinek redukciója. Mindkét esetben két amino-alkohol izomer képződhet, ahol a nitrogént hordozó szénatom az új királis centrum.



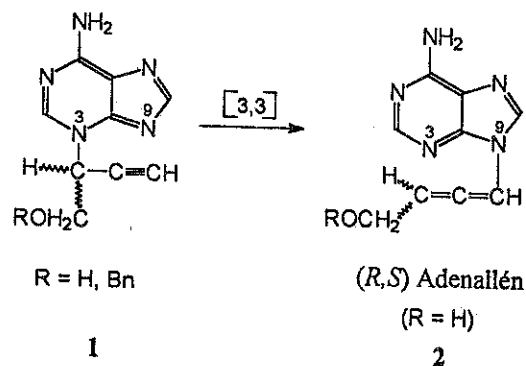
A termékeket N,O-diacil-származékokká alakítva ¹H NMR spektroszkópiával kívánjuk vizsgálni, illetve gyűrűképzési reakciójuk egyúttal elválasztási módszerül is szolgálhat a *cis*- és *transz*-amino-hidrineket illetően.

Az adenallén szigmatróp átrendeződéssel történő előállíthatóságának vizsgálata

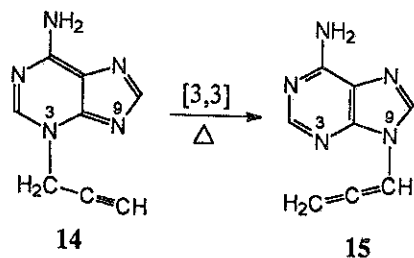
Kiss Gábor V. vegyész hallgató
Témavezető: Dr. Kovács Lajos

KLTE, Szerves Kémiai Tanszék

Munkánk során célul tűztük ki annak vizsgálatát, hogy a centrális kiralityással rendelkező N^3 -[(1-hidroxi-metil)-2-propinil]-adenin (1; R=H), illetve ennek védett származékának (1; R = Bn) (*R*)- és (*S*)-enantiomerjéből N^9 -ról N^3 -re történő [3,3]-rendű szigmatróp átrendeződés segítségével elő lehet-e állítani megfelelő sztereoselektivitással az axiálisan királis adenallén [N^9 -(4-hidroxi-1,2-butadienil)-adenin] (2; R = H), ill. a védett származékának (2; R=Bn) (*R*)- és (*S*)-enantiomerjét.



A [3,3]-rendű szigmatróp átrendeződés véghezvitelének lehetőségét az N^3 -propargil-adenin (14) mint modellvegyület segítségével vizsgáltuk.



A modellvegyület esetében szisztematikus kísérletek segítségével sikerült bizonyítanunk a szigmatróp átrendeződés végbemenetét.

N-(P-METOXI-FENIL)-CSOPORT REAKCIÓJA CÉRIUM-AMMÓNIUM-NITRÁTTAL

Le Thanh Giang IV. évf., BME

Konzulens: Dr. Fetter József docens
BME, Szerves Kémia Tanszék

Tanulmányoztuk a 8, 12, és 13a N-(p-metoxi-fenil)-származékok anomális viselkedését cérium-ammonium-nitrát oxidatív de-(p-metoxi-fenil)-ezési reakcióikban.

A témaválasztást indokolta, hogy korábban 13a de-(p-metoxi-fenil)-ezési reakciója eredményeként nem tudták a 14a-t izolálni. A reakcióelegyből csak 15a-t nyerték ki [1.2].

A problémát először a preparatív szempontból jól kezelhető 8-cal és termékeivel tanulmányoztuk. A 8-cal végzett vizsgálatok alapján egyértelműen bebizonyosodott, hogy a reakció során a belőle keletkező kinoniminium intermedier még az adott erősen savas körülmények között is hosszabb idejéig stabilis. A feldolgozás során bomlik el kinonra és de-(p-metoxi-fenil)-ezett 16-ra. Amennyiben a 16 hozamát kisózással akarjuk növelni, az intermedier a kloridion hatására klór-hidroxi-fenil-származék (17a) képződése közben stabilizálódik.

E felismerés eredményeként preparatív jelentőséggel bíró eljárást dolgoztunk ki N-(3-klór-4-hidroxi-fenil)-azetidion származékok szintézisére.

Az előbbi megállapításokat 12-vel és 13a-val végzett kísérletek eredményei igazolják azzal az eltéréssel, hogy 12 és 13a esetében a kinoniminium intermedier és a tetrazol csoport intramolekuláris reakciója Czuppon által feltételezett F típusú intermediereket is eredményezheti.

Czuppon feltételezését erősítik azok a tapasztalatok, hogy 12 és 13a reakciójában diazometános feldolgozás esetén csak 12 reakcióelegyből tudunk de-(p-metoxi-fenil)-ezett származékot (21) izolálni 26%-ban. Ez az eredmény a 12-ből keletkező F típusú 5 tagú gyűrűt tartalmazó intermedier kisebb stabilitásával értelmezhető. Ennek megfelelően a feldolgozásnál nátrium-kloridos kisózást alkalmazva 12 reakciójában 52%-ban ill. 13a reakciójában csak 36%-ban nyertük a D típusú intermedierből levezethető klór-hidroxi-fenil-származékokat 19a-t ill. 15a-t.

A F típusú intermedier létezésére közvetlen bizonyítékot nem tudunk szerezni.

Munkánk eredményei 1994-ben közleményben jelentek meg: Tetrahedron 50, (14), 4185-4200, (1994).

Új savérzékeny molekulák előállítása a szilárd

fázisú peptidszintézisekhez

Molnár József V. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Hegyes Péter tudományos munkatárs

József Attila Tudományegyetem Természettudományi Kar
Szerves Kémia Tanszék

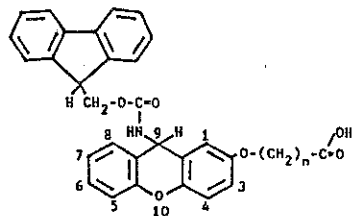
A szilárd fázisú peptidszintézisekben általánosan alkalmazott az aminocsoportok védelmére a Fmoc-stratégia (Fmoc: 9-flourenilmetoxi-karbonil védőcsoport). E technika számos előnnyel rendelkezik más eljárásokkal (pl. BOC) szemben, többek között enyhébb reakciókörülmények mellett is tisztább végterméket eredményez, továbbá lehetőséget biztosít savérzékeny peptidszármazékok szintézisére is. A módszer különösen alkalmas C-terminális karboxil, ill. savamid csoport kiépítésére, amelyeket egyéb eljárásokkal igen nehezen oldhatnánk meg.

A Fmoc-kémiában széleskörű alkalmazást nyertek az ún. 'handle'-k, azaz olyan molekulák, amelyek kiegyenlítik a gyöngypolimer alapú gyanta szterikus gátolt helyein található reaktív csoportok reagálási valószínűségét, így téve elkerülhetővé a hibás szekvenciák létrejöttét. Mostanáig számos polimert és 'handle'-t használtak fel, de jelenleg is nagy kereslet mutatkozik növelt savérzékenységű 'handle'-k iránt.

Félempirikus kvantumkémiai számítások szerint a xanténszármazékok körében is érdemes ilyen kapcsolóelemeket keresni, amelyek alkalmasak arra, hogy a kész peptidet annak sérülése nélkül leválaszthassuk a hordozóról. Számos xantén alapú molekulánál jó korrelációt találtak a vegyület elméletileg számított és tapasztalt savérzékenysége között.

Az elméleti adatok tanulsága szerint a savérzékenység a megfelelő helyzetű szénlánc meghosszabbításával általában fokozható. A már korábban ismert két 2-hidroxi-xanthidrol alapú 'handle' (n=1 és n=4) jelentette a kiindulási alapot a hosszabb szénláncú (n=5) származék előállításához. A célvegyület szintézisét hétlépéses reakcióúton valósítottuk meg. Az új 'handle' savérzékenységének tesztelését egy tetrapeptid (Fmoc-Leu-Ala-Gly-Val-NH₂) lehasítása révén hasonlítottuk össze, szilárd fázisként MBHA (p-metil-benzhidrilamin) vázat használva.

A továbbiakban a sorozatból még hiányzó n=2,3 szerkezetű vegyületeket és aromás oldalláncú származékokat szeretnénk előállítani és kipróbálni.



2-(9-Fmoc-aminoxantén-2-oxi)-ecetsav /n=1/

5-(9-Fmoc-aminoxantén-2-oxi)-valeriánsav /n=4/

6-(9-Fmoc-aminoxantén-2-oxi)-kapronsav /n=5/

Jelpeptid konjugátumok szintézise és jellemzése

Nagy Ildikó, V. évf. biológia-kémia

Témavezetők: Dr. Hudecz Ferenc és Dr. Mező Gábor
MTA Peptidkémiai Kutatócsoport
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Az élő sejtben számos fehérje tartalmaz olyan peptidszakaszt, amely jelzésként működve meghatározza a bioszintézissel keletkező protein sorsát (pl. lokalizációját, transzportját). A legismertebb és legáltalánosabban elterjedt szignál a Lys-Asp-Glu-Leu tetrapeptid, melynek sejten belüli receptora, valamint működésének mechanizmusa nagy vonalakban már ismert, bár magát a receptort még nem lokalizálták.

Feladatomban olyan, a fenti szignálszekvenciát, valamint In-ionokat tartalmazó konjugátumok szintézise volt, melyek segítségével elektronmikroszkópos vizsgálatok során a receptor pontos elhelyezkedése meghatározható az In-ionok elektronszóró sajátja révén.

A vizsgálatokhoz szükséges szignálpeptidet (Lys-Asp-Glu-Leu), illetve annak módosított változatát (Cys-Lys-Asp-Glu-Leu) szilárd fázisú peptidszintézissel, BOC-stratégiával állítottam elő, Merrifield-gyantán. A peptidek gyantáról történő lehasítását TMSOTf-tioanizol/TFA-módszerrel, illetve HF-dal végeztem. Az alkalmazott hasítási eljárásoktól függően kaptam meg az átmenetileg védett Lys-Asp(OChx)-Glu(OChx)-Leu és a szabad Cys-Lys-Asp-Glu-Leu peptidet. Az oligopeptideket HPLC-vel tisztítottam, a tiszta termékeket analitikai HPLC-vel, aminosav analízissel és tömegspektroszkópiai mérésrel jellemeztem.

A kész peptideket polilizin gerincű elágazó láncú polimerekhez kapcsoltam. A konjugálás az átmenetileg védett tetrapeptid esetében BOP/HOBt-módszerrel, a szabad pentapeptidnél pedig heterobifunkciós kapcsolóreagens (SPDP) segítségével, diszulfidhíd kialakításával történt. Az első esetben a konjugációt a ciklohexil-csoportok HF-dal történő hasítása követte.

A szintézis utolsó lépése a kelátor sajátosságú DTPAA-dal előzőleg módosított polimerek In-komplexeinek az előállítása volt.

Az elkészült konjugátumok biológiai vizsgálata jelenleg folyamatban van.

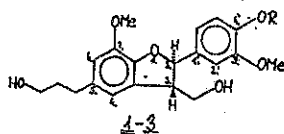
A munka egy részét a Művelődési és Köznevelési és Közoktatási Minisztérium támogatta.

A TRACHELOSPERMUM ASIATICUM NEOLIGNAN GLÜKOZID
KOMPONENSÉNEK SZERKEZETIGAZOLÓ SZINTÉZISE

Ötvös Erika, V. évf. vegyész-kémia tanár

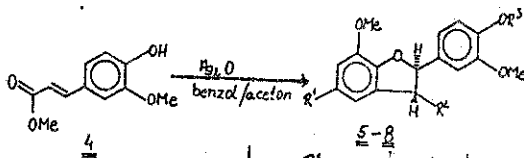
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék, Debrecen

Abe és Yamauchi 1986-ban a *Trachelospermum asiaticum* metanolos extraktumából a balraforgató cedrusin-7-metiléterének 4'-O- β -D-glükózidját (1) különítették el, melynek szerkezetét spektroszkópiai módszerek (MS, NMR) és lebontási reakciók segítségével igazolták.



	R
1	β -D-Gl
	H
10/MS	β -D-Gl(OMe) ₄

A címben jelölt vegyület szerkezetbizonyító szintézisét vanillinból kiindulva valósítottam meg. Malonészter szintézissel a ferulasav metilészterét (4) állítottam elő, melyből Ag₂O-dal kiváltott gyökös dimerizációval jutottam a megfelelő szubsztitúciójú 2,3-dihidro-2-aryl benzofurán származékhoz (5). E vegyület megfelelő funkciós csoportjai öt lépésben (5 → 6 → 7 → 8 → 3 → 1) alakítottam ki.



	R ¹	R ²	R ³
5	(E)-CH=CH-CO ₂ Me	-CO ₂ Me	-H
6	(E)-CH=CH-CO ₂ Me	-CO ₂ Me	-H
7	CH ₂ -CH ₂ -CO ₂ Me	-CO ₂ Me	-Ac
8	CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -OH	-CO ₂ H	-H

A szintézis kritikus lépése a (±)-7-O-metil-cedrusin (2) szelektív glükózilezés és a reakcióban keletkező diasztereomerek szétválasztása. Glükózil-donorként acetobrom-glükózt alkalmazva, acetonos oldatban, lúg jelenlétében sikerült a molekulában lévő alkoholos hidroxilcsoportok mellett a fenolos hidroxilcsoporton a kötést kialakítani. Az így kapott 4'- β -D-glükopiranozil-tetraacetáttól Zemplén szerinti elszapannosítással a 7-O-metil-cedrusin-4'- β -D-glükopiranozidot és diasztereomerjét állítottam elő. A szintetikus termékem természetes anyaggal történő összehasonlítása, finomszerkezetének (pl.: C-2 és C-3 királiscentrumok abszolút konfigurációjának meghatározása) felderítése folyamatban van.

Témavezető: Maglóczkiné Dr. Menyhárt Márta
Dr. Antus Sándor

3-Metil-benzoxazonon hidrolízisének vizsgálata mikrohullámú
energiaközléssel

Rácz Tímea
Veszprémi Egyetem V. évf.

Kémiai szintézisek mikrohullámú sugárzás általi aktiválásának az az eredménye, hogy a hagyományos fűtéshez viszonyítva bizonyos reakciók rendkívül gyorsak, a reakciótermékek pedig igen tiszták lesznek.

1986 óta több kutatócsoport - köztük A.K.Bose és munkatársai - is vizsgálták a mikrohullám gyorsító hatását különféle reakciótipusok esetén. A.K.Bose csoportja kidolgozott egy általuk „MORE chemistry„ (Microwave-induced Organic Reaction Enhancement) névvel jelölt technológiát, melynek a lényege az, hogy nyitott reakcióedényben, mikrohullámú sugárzás hatására rendkívül jól hevülő, (azaz poláros, nagy dielektromos állandójú) oldószerben vizsgálnak több, egymástól eltérő szerves kémiai reakciót. Az általános tapasztalatuk az volt, hogy az általuk vizsgált reakciók rendkívül gyorsan (néhány perc alatt) lejátzódtak és a hozamok elérték - néhány esetben meghaladták - a termikus hőközléssel megvalósítottakét.

Munkájuk nyomán indítottuk el azt a kísérlet sorozatot, melynek első modellreakciója a 3-metil-benzoxazonon hidrolízise volt. Azt tapasztaltuk, hogy N,N-dimetil-acetamid:víz (25:1) oldószerkegységben, ekvimoláris kálium-hidroxid jelenlétében a hidrolízis reakcióideje 5 perc. Annak eldöntésére, hogy ez a rendkívüli reakciósebesség a mikrohullám speciális hatásának, vagy az energiaközlés speciális módjának köszönhető-e, párhuzamos méréseket végeztünk - enyhébb körülmények között - mikrohullámú és termikus energiaközléssel. Méréseink eredményei alapján azt a következtetést vontuk le, hogy a reakciósebesség növekedésének oka inkább az extrém gyors szuperhevülés, mint a mikrohullám speciális hatása.

Témavezető: Dr Vass András
tud. osztályvezető
MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézet

(3*RS*,4*RS*)-[(2*RS*)-3-Acetil-tiazolidin-2-il]-3-ftálimido-1-(4-metoxi-fenil)-azetidín-2-on váratlan oxidatív gyűrűtranszformációja

Sápi Attila, IV. évf.

Témavezető: dr. Bertha Ferenc

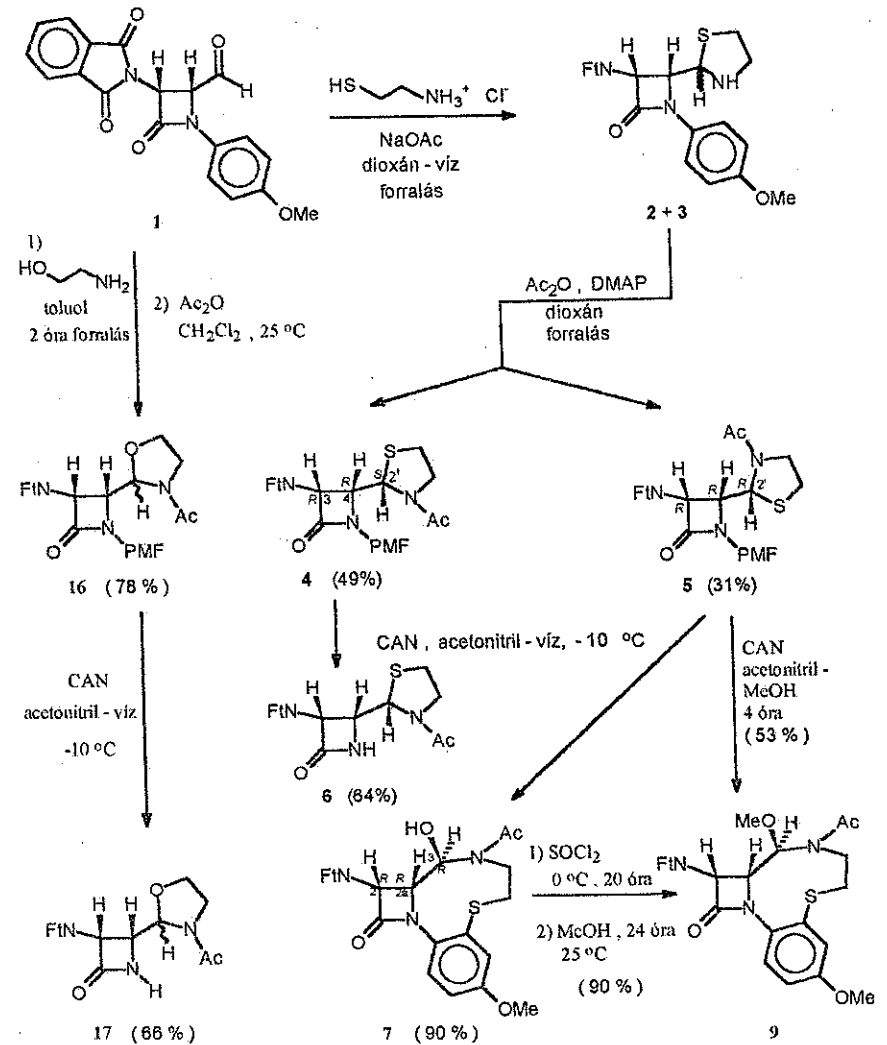
Szerves Kémia Tanszék

A béta-laktámok szintézise, származékainak előállítása és átalakítása során a (2*RS*,4*RS*)-3-ftálimido-1-(4-metoxi-fenil)-4-oxo-azetidín-2-karbaldehidből (1) kiindulva előállítottuk a 4-(3-acetil-tiazolidin-2-il)-3-ftálimido-1-(4-metoxi-fenil)-azetidón-2-on két diasztereomerjét (2, 3). A laktám nitrogén 4-metoxi-fenil védőcsoportját az irodalomban ismert módon cérium(IV)-diammónium-hexanitratos (CAN) kezeléssel próbáltuk eltávolítani. A kezelés a várakozásoknak megfelelő eredményt szolgáltatva a (3*RS*,4*RS*,2'*SR*) izomernél (4), tehát a védőcsoport eltávozott (6). Ezzel ellentétben a (3*RS*,4*RS*,2'*RS*) izomer (5) nem várt oxidatív gyűrűtranszformációt mutatott (7). A kapott (7) vegyület szerkezetét MS, IR, NMR spektrum és röntgen-diffrakciós vizsgálat segítségével sikerült igazolni.

A 7 vegyületet a megfelelő *O*-metil származékká (9) alakítottuk, amelyet az 5 vegyületből közvetlenül is előállítottunk.

A 4 és 5 vegyületekkel analóg oxazolidin-izomerek elegye 16 cérium(IV)-ammónium-nitráttal a szubsztituátlan béta-laktám-diasztereomerek (17) elegyét szolgáltatva.

A diasztereomerek (4 és 5) CAN-os kezeléssel szembeni eltérő viselkedését molekula mechanikai számításokra támaszkodva geometriai és nukleofilitásbeli különbségekkel magyarázzuk.



FIN = ftálimido
PMF = *p*-metoxi-fenil

Az ábrán csak az egyik enantiomert tüntettük fel.

PEPTIDEK SZILÁRDFÁZISÚ SZINTÉZISE
ÉS FÉMKOMPLEXEIK TÉRSZERKEZET-VIZSGÁLATA

Somogyi László, vegyész VI. évf.

Témavezető: Dr. Hollósi Miklós
ELTE, Szerves Kémia Tanszék

Az utóbbi években jelentősen megnövekedett az igény az immunológiai, biokémiai és térszerkezet-vizsgálati célokra felhasználható kistagszámú peptidek iránt. Laboratóriumi előállításuk egyik gyors, hatékony és automatizálható módszere a szilárd-fázisú szintézis. Az általam alkalmazott speciális technikát barcelonai Tempus tanulmányutam során ismertem meg, ahol 12-15 aminosavból álló, feltételezhetően antibakteriális hatással rendelkező Cecropin A (CA)- Melittin (M) hibridpeptideket és módosított származékaikat szintetizáltam.

Ithon az Alzheimer-kór kialakulásáért részben felelőssé tehető neurofilamentum fehérje fragmenseinek szintézisébe és térszerkezet-vizsgálatába kapcsolódtam be. Az Alzheimer-kór az agy főként idős korban előforduló degeneratív elváltozása, melyet rendellenes fehérjebomlási és aggregálódási folyamatok okoznak. A neurofilamentum fehérje (NF) módosult alegységei a neuronokon belül rendellenes módon kialakuló neurofibrilláris fonadék összetevői. A közepes molekulatömegű alegység (NF-M) karboxi terminálisán hatszor ismétlődő NF-M13 (KSPVPKSPVEEKG), illetve az ennél négy aminosavval hosszabb NF-M17 (EEKGKSPVPKSPVEEKG) szekvenciák konformációja kis dielektromos állandójú közegben (TFE) Ca^{2+} és Al^{3+} ionok hatására jellegzetes változást mutat. A kialakuló β -konformáció a peptidláncokat intermolekulárisan összekapcsoló fémionok hatásának tulajdonítható. Al^{3+} esetén intramolekuláris komplex is képződhet. Feladatomban a fentebb említetteknel kisebb tagszámú peptidek szintézise és Ca^{2+} ill. Al^{3+} ionok jelenlétében bekövetkező konformációváltozásaik CD vizsgálata volt a fémionkötő aminosavak lokalizációja céljából. Előállítottam a PVVEEKG-NH₂, a PKSPVEEKG-NH₂, a PKAPVEEKG-NH₂, a PKSPVEEKG-OH és a PKAPVEEKG-OH peptideket és elvégeztem Ca^{2+} és Al^{3+} ionokkal CD titrálásaikat. A hat aminosavból felépülő amidvégű fragmens esetén Ca^{2+} és Al^{3+} ionok hatására nem következik be jelentős konformáció-átrendeződés. A kilenc aminosavból álló, szabad amid- és karboxil-végű szerintartalmú NF-M fragmensek Ca^{2+} ionok hatására jelentős β -átrendeződésen mennek keresztül. (A β -átrendeződés során valószínűsíthetően intermolekuláris peptid - fémion komplexek alakulnak ki). Al^{3+} ionok részleges β -átrendeződést csak az amidvégű peptid esetében okoznak. A szabad karboxil-végű peptid Al^{3+} ionokkal történő titrálásának eredménye intramolekuláris $[\text{Al pep}(\text{H}_1)]$ típusú komplex kialakulását feltételezi. A szerin alaninnal történő helyettesítésével előállított peptidek CD spektrumaiból kitűnik, hogy a Ca^{2+} ionok β -átrendeződést indukáló hatásához mindenképpen szükséges a szerin-oldallánc OH-csoportja. A szerin - alanin csere Ca^{2+} ionok jelenlétében csupán amidvégű peptid esetén enged meg részleges β -átrendeződést. Az Al^{3+} ionok hatását az elvégzett aminosav-csere amidvégű peptid esetén nem befolyásolja, szabad karboxi végű peptidnél viszont a szerin-oldallánc OH-csoportjának hiánya az intramolekuláris komplex kialakulásának gátja is egyben.

Királis hidroxizsírsavak előállítására alkalmas szénhidrát
szintionok tervezése

Szerző: Szabovik Gabriella

Témavezető: Dr. Lipták András

A *Mycobacterium avium* 17-es szerovariánsa pentaszacharid-típusú antigénjének terminális aminocukor része egy ismeretlen konfigurációjú 3-hidroxi-2-metil vajsavat tartalmaz. A két királis centrumot hordozó sav négy izomer formában létezhet. Szintézisüket szénhidrátokból, mint királis szintionokból kívántuk megoldani, kiindulási anyagokként metil- α -L- és - α -D-ramnopiranozidot választottunk. A D-ramnozid-származék szintézisét metil- α -D-mannopiranozidból kiindulva valósítottuk meg.

Az kiindulási glikozidokból a következő reakciószekvenciák alkalmazásával az alábbi vegyületeket nyertük: *Acetálozás*: izopropilidén-glikozidok, *oxidáció*: izopropilidén-4-ulozidok, *Wittig-reakció*: izopropilidén-4-C-metilén-glikozidok, *katalitikus hidrogénezés*: izopropilidén-4-C-metil-glikozidok és *savas hidrolízis*: metil-4,6-didezoxi-4-C-metil- α -L-talo- és metil-4,6-didezoxi-4-C-metil- α -D-talo-hexapiranozid. az utóbbiak vicinális diol molekula szerkezeti részletük alapján perjodátos oxidációval aldehidekké, ezek pedig [2R, 3S] konfigurációjú savvá illetve enantiomerjévé [2S, 3R] oxidálhatók. A C₄-metilének sztereoselektív redukciója csak *axiális* C-metil származékokhoz vezetett, így az L- és D-ramnózból csak a fent jelzett két, egymással enantiomer viszonyban lévő sav állítható elő.

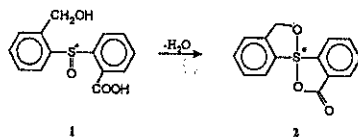
EGY OPTIKAILAG AKTÍV SPIROSZULFURÁN ELŐÁLLÍTÁSA ÉS MOLEKULASZERKEZETE

Szendeffy Szilárd, Doktorandusz hallgató

Témavezető: *Szabó Dénes*
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Diákköri munkám során egy spiroszulfurán típusú vegyület, az 1,1'-spirobi[3H-2,1-benzoxatiol]-3'-on (2) molekulaszervezetét, abszolút konfigurációját és képződésének illetve hidrolízisének sztereomechanizmusát tanulmányoztam.

A spiroszulfuránok a hipotetikus SH₄ kétfogú ligandummal helyettesített származékai. Térszerkezetük a központi kénatom körül trigonális bipiramisos geometriával írható le. Szerkezeti felépítésüknek következményeként kiralitáscentrummal rendelkeznek.



Előállítottam és rezolváltam az 1 szulfoxidot. Az optikailag aktív szulfoxidok enantiomertisztségét - kiralis sift-reagens alkalmazásával - NMR technikával meghatároztam. Röntgendiffrakciós módszerrel a (+)-enantiomer szulfoxid molekulaszervezetét és abszolút konfigurációját a Központi Kémiai Kutató Intézetben Kálmán Alajos és munkatársai határozták meg. Ez utóbbi enantiomer R konfigurációjú szulfoxidnak bizonyult.

Az optikailag aktív R-(+)-2 szulfoxidból intramolekuláris vízelvonással állítottam elő a (+)-2 spiroszulfuránt, melynek molekulaszervezetét is az említett kutatóintézetben határozták meg. A trigonális bipiramisos térszerkezetű vegyületekre vonatkozó nomenklatura alapján ez is R konfigurációjú. A kötéshossz adatok azt mutatják, hogy a kénatom és az alkoxi-oxigén között a kötés kovalensnek tekinthető (1.7 Å), a másik oxigén kötése viszont gyengébb a kovalensnél (2.1 Å).

Az optikailag aktív spiroszulfuránt savas, semleges és bázikus közegben vízzel hidrolizáltam és meghatároztam a termékek összetételét.

Távlati célunk, hogy optikailag aktív spiroszulfuránok segítségével szulfurán típusú átmeneti termékeken át lejátszódó más reakciók sztereomechanizmusát is megfejtjük, továbbá az, hogy a spiroszulfuránok sztereokémiai stabilitására vonatkozó kvantitatív adatokhoz (ΔG^\ddagger , ΔH^\ddagger , ΔS^\ddagger) jussunk.

DINÁTRIUM CISZ-EPOXI-SZUKCINÁT HIDROGENOLIZISE KIRÁLIS VÍZOLDHATÓ KATALIZÁTORRAL

(Diákköri munka rövid ismertetése)

Készítette: Szűcsné Cserépi Stefánia

Témavezető: Dr. Bakos József egy. adjunktus

Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

A homogénkatalitikus aszimmetrikus szintézis kiralis ligandumot tartalmazó katalizátorral oldható meg. Az optikailag aktív módosító anyag kis mennyisége kiralis információt hordoz és visz át katalitikus folyamatban a képződő termék nagy mennyiségére. Az egymással nem elegyedő folyadékrendszerek (víz/szerves oldószer) alkalmazása pedig lehetővé teszi a drága katalizátor regenerálását. A víz oldószerként történő felhasználását környezetvédelmi, humánegészségügyi és nem utolsósorban gazdasági okok is indokolják.

Munkám során a dinátrium-cisz-epoxi-szukcinát hidrogenolízisét vizsgáltam. A reakció terméke az optikailag aktív almasav, amely fontos kiralis szinten a szerveskémiai szintézisekben, továbbá az üdítőital gyártás fontos alapanyaga. A modellvegyület jól oldódik vízben, míg a katalizátorként alkalmazott, kiralis bisz(difenil-foszfino)-pentánnal (BDPP) módosított Rh-komplex vízoldhatósága gyenge. A katalizátor vízoldhatóságát a ligandum szulfonálásával biztosítottuk. A szulfonálást ólummal végeztük. Az ólوم/BDPP arány nagyságától és a szulfonálási időtől függően mono-, di-, és tetraszulfonált termékek elegye keletkezett. A különböző mértékben szulfonált származékok esetén különböző konfigurációjú termékek képződtek, így szükség volt szelektív elválasztásukra. A BDPP-vel és a monoszulfonált foszfínnal képzett ródiumkomplex hidrofób, míg a di-, és tetraszulfonált foszfínnal képzett hidrofíl jellegű. Ezen tulajdonságok alapján egy egyszerű elválasztási módot dolgoztunk ki.

A reakciómechanizmus tanulmányozása miatt a hidrogénezést különböző hidrogénnyomáson és deutériált víz oldószerben is elvégeztük. A deuterezés során kapott reakcióelegy és az almasav ¹H-NMR spektrumának összevetésével megállapítottuk, hogy a reakció az oxiránforma hidrogenolízisével játszódik le.

A vizsgálatok alapján sikerült víz/etilacetát kétfázisú, illetve vizes fázisú aktív és enantioszelektív, továbbá a környezetvédelmi szempontoknak is jobban megfelelő katalitikus rendszert kidolgozni az almasav előállítására. Bizonyítottuk, hogy tetraszulfonált foszfín ligandum alkalmazása esetén a víz nem csak oldószerként, hanem reagensként is részt vesz a hidrogenolízisben.

Ca²⁺-kötőhelyek lokalizálása neurofilamens fragmensék esetén

TDK dolgozat
1995

szerves kémia alszekció

Készítette: Tikl Ilona V. éves vegyészhallgató

Témavezető: dr. Perczel András

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Szerves Kémia Tanszék

Összefoglalás: Számos biológiai fontos peptid és fehérje térszerkezetét az aminosavak sorrendjén túl egyéb tényezők is módosíthatják, melyek között kiemelt jelentőségűek a különféle kationok. A neurofilamens olyan szerkezeti fehérjék, melyek az idegsejtek gyakori alkotóelemei. Denaturált formában találhatók meg azonban az Alzheimer-kór tüneteként keletkező fonadékserű fehérjekiválásokban. Érdekes, hogy egyikük C-terminálisa a Lys-Ser-Pro-Val-Pro-Lys-Ser-Pro-Val-Glu-Glu-Lys-Gly aminosavláncot többször is tartalmazza. Kézenfekvő az a modell, mely szerint a Ca²⁺-ionok szelektív megkötése e szekvenciárszlet negatív oldalláncot viselő két glutaminsavának hatása volna. A kation komplexálását szembeötlő térszerkezetváltozás kíséri, amelyet CD-spektroszkópiával eredményesen követhetünk nyomon. A térszerkezet kialakulásáért vélhetőleg felelős sóhidakat a fenti szekvenciájú peptid glutaminsav ill. lizin aminosavának alaninra történő cseréjével tanulmányoztam. A kapott eredmények az egyszerű modellt nem támasztják alá.

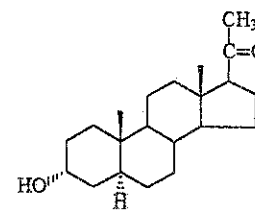
NEURO-SZTEROIDOK SZINTÉZISE

Timár Zoltán, V. évf. vegyész

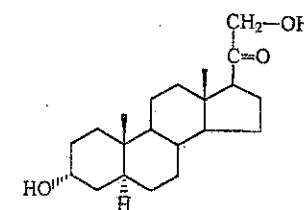
Témavezető: Dr. Schneider Gyula

JATE Szerves Kémiai Tanszék

A legújabb felismerés szerint az élő szervezet progeszteron egyensúlyát jelentős mértékben a neuroszteroidok szabályozzák. Hiányuk a hormonháztartás súlyos zavarát okozhatja. Gyógyszerként való alkalmazásukat hátráltatja a szokatlan térhelyzetű funkciós csoportokat tartalmazó vegyületek igen magas előállítási költsége.



(1)



(2)

Elhatároztuk, hogy a viszonylag egyszerűen hozzáférhető kiindulási vegyületből, a 3β-acetoxi-5,16-pregnadién-20-onból (PDA) lineáris szintézismódszert dolgozunk ki a két legjelentősebb neuromodulátor, a 3α-hidroxi-5α-pregnán-20-on (1), és a 3α,21-dihidroxi-5α-pregnán-20-on (2) előállítására.

A vegyületek klinikai ellenőrzése a Szent-Györgyi Albert Orvostudományi Egyetem Szülészeti és Nőgyógyászati Klinikáján (Szeged) történik.

A 19-dezmetil-19-(etoxi-karbonil)-vinkadiformin és a 18-(metoxi-karbonil)-D(14)-norvinkadiformin előállítása és gyűrűtranszformációja

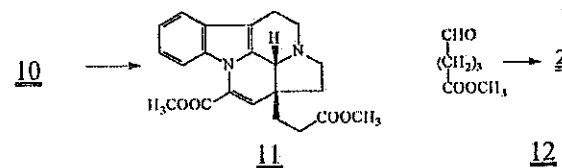
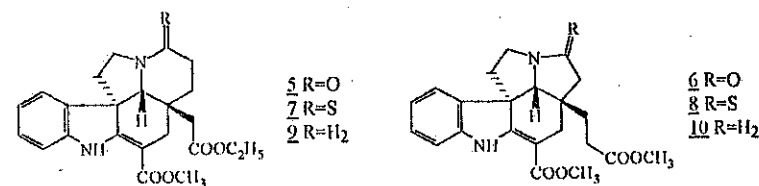
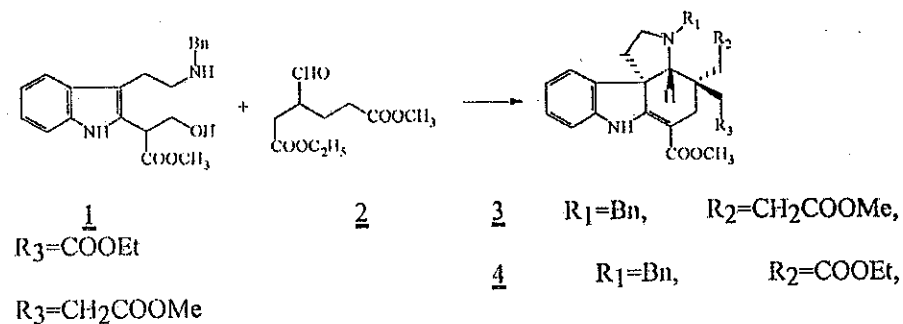
Vágó István, IV. évf.

Konzulens: Dr. Kalaus György egyetemi tanár, Szerves Kémia Tanszék

A Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémia Tanszékén működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban egyszerű módszert dolgoztak ki az 1 előállítására. Ezen vegyületből a későbbiekben számos indolvázis alkaloid és alkaloidszerű molekula totálszintézisét valósították meg. Erre a stratégiára építve célul tűztük ki a 19-dezmetil-19-(etoxi-karbonil)-vinkadiformin 9 előállítását.

Előállítottuk az irodalomban ismertetett utakon a metil-(4-formil-butanoátot) (12), illetve ebből kiindulva felépítettük az irodalomban nem ismeretes metil-[4-formil-4-(etoxi-karbonil-metil)]-butanoátot (2), mely a megvalósított szintézisben reakciópartnerként szolgált.

A konvergens szintézis egyik kulcsmolekulájaként választott indolszármazékot (1) alkalmasan kiépített aldehiddel (2) reagáltattuk, melynek eredményeként reaktív intermediereken keresztül, intramolekuláris reakcióban izomer tetraciklusos észterek (3 és 4) keletkeztek. Mindkét izomer vegyületet intramolekuláris N-acilezésen alapuló ciklizációs reakcióval a pentaciklusos aszpidospermánvázis 5, illetve D(14)-noraszpidospermánvázis 6 laktámokká alakítottuk. Az elsőként említett molekula laktám funkcióját két lépésben, a 7 tiolaktámon keresztül, redukálva megkaptuk a 19-dezmetil-19-(etoxi-karbonil)-vinkadiformint (9) illetve a nor-származékból a 9-en keresztül a 18-(metoxi-karbonil)-14-(D)-norvinkadiformint (10). Ezen utóbbi molekula gyűrűtranszformációjával sikerült előállítani a 20-dezmetil-20-(metoxi-karbonil)-D(18)-norapovinkamint (11).



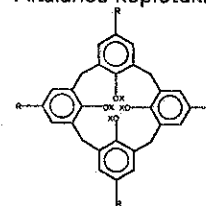
ELMÉLETI ÉS FIZIKAI KÉMIA

A kalix(4)arének számítógépes modellezése

Abonyi János
Vegyészmérnök III. évf.
Veszprémi Egyetem Szerves Kémia Tanszék

A kalixarének a szintetikus makrociklusok osztályába tartoznak. A fenolcsoportok a hidroxicsoporthoz képest orthohelyzetben lévő metilén-csoportok összekapcsolódásával alkotják a ciklusos vegyületet. Néhány közülük képes befogadós komplexeket létrehozni különböző szerves molekulákkal.

Általános képletük:



A megvizsgált származékok:

	X:	R:
1, (LBC)	H	t-Bu
2, (LOC)	H	1,1,3,3-tetrametilbutil
3,	Me	Me
4,	Me	t-Bu
5,	Et	t-Bu

A kalixarének számítógépes molekulamechanikai modellezése alkalmas lehet a vegyülettípus szerkezeti és energetikai tulajdonságainak meghatározására.

Célunk a vegyülettípus molekulamechanikai leírása és az egyes konformerek stabilitásának megállapítása volt.

Két kérdésre kerestünk választ: (1) milyen megbízhatósággal modellezik az általunk használt erőterek a kalixarének szerkezetét; (2) melyik konformációnak tulajdonítanak alacsonyabb energiát?

Munkánkhoz a DTMM program COSMIC, a PCMODEL, SPARTAN és CERIU² software-ek MMX, MM2, MM3, Dreiding 2.21, MM2(85) és Universal 1.01 erőtereit használtuk.

A DTMM töltésszámítása mellett még egy másik, általunk kifejlesztett töltésszámítási programot is alkalmaztunk. A program az orbitálok elektronegativitásának részleges kiegyenlítésével határozza meg a molekula egyes atomjainak töltéseit (PEOE módszer, Partical Equalization of Orbital Electronegativity). Ez egy gyors, iteratív eljárás, mely alkalmas σ - és nem konjugált π -rendszerek töltéseinek meghatározására is.

Mind egyik program jól reprodukálja a vizsgált molekulák szerkezetét; a fenolgyűrűk lejtése az oxigénatomok által kifeszített síkra a röntgennel kimért értékek körül van.

Tanulmányunkban az irodalomban fellelhető számított és mért (NMR) stabilitási sorrendeket hasonlítjuk össze a fenti erőterek eredményeivel.

transz-SZTILBÉN EGYKRISTÁLY VIZSGÁLATA POZITRONANNIHILÁCIÓS SPEKTROSKÓPIÁVAL

Bokor Mónika és Marek Tamás V. évf. vegyész

Témavezető: Süvegh Károly, Vértes Attila

ELTE TTK, Magkémiai Tanszék

transz-sztilbén egykristályon a pozitron élettartam és Doppler-kiszélesedés hőmérsékletfüggését mértük 140 és 293 K között (ill. előzetes mérések 20-300 K tartományban). Ezzel a módszerrel sikerült a *t*-sztilbén — eddig csak Raman-fonon spektroszkópiával észlelt — fázisátalakulásait egyértelműen kimutatni.

Mérési eredményeink azonban új megvilágításba helyezik a fázisátalakulások és a jelenlevő rendezetlen fázis viszonyát, így az irodalomban ismertett fázisátalakulási modell felülvizsgálata szükségesnek tűnik.

A *t*-sztilbén kristály elemi cellájában két kristálytanilag független helyzet (A és B) van. A röntgendiffrakciós mérések szerint alacsony hőmérsékleten (113 K) mindkét helyzetben rendezetten helyezkednek el a molekulák. Magasabb hőmérsékleten (298 K) a B helyzetben lévő molekulák egy része rendezetlen orientációjú — azaz megjelenik egy új fázis. A rendezetlenség magasabb rácsenergiát eredményez, tehát termodinamikailag a teljes rendezettség a kedvező. A B helyzetben a rendezettség jóval kisebb rácsenergiával növekedéssel jár, mint az A helyzetben. Ez a növekmény szobahőmérsékleten kisebb, mint az aktuális termikus energia, tehát a B helyzetű molekulák egy része rendezetlen orientációjú. Alacsony hőmérsékleten ez a viszony fordított, tehát csak a rendezett fázis stabil termodinamikailag.

Sem a röntgen, sem a Raman mérések nem mondanak semmit magáról az átalakulásról. Véleményünk szerint az átalakulás környékén jelentkező pozitronélettartam-növekedés magyarázható a molekulák orientációjának megváltozása miatt bekövetkező geometriaváltozással, a szabad térfogat megnövekedésével, ill. eloszlásának megváltozásával. Az átalakuláskor megnő a szabad térfogat, ezért megnő a pozitron élettartama. A szabad térfogatok eloszlása is megváltozik, ezért egy új pozitronállapot is létrejön. A Doppler-spektrumok S-paraméterének változása a fázisátalakulással járó változó elektron impulzuseloszlást követi. Amikor ugyanis megváltozik a molekulák egymáshoz viszonyított helyzete, mások lesznek az intermolekuláris kölcsönhatások is, ami a molekulapályákra is kihat.

Az aceton jódozása, mint frontreakció

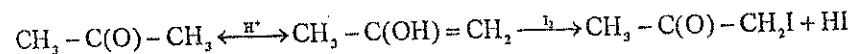
Csorba Csaba és Nemes Péter V. évf. vegyész hallgatók

Témavezető: Dr. Nagypál István tszv. egyetemi tanár
JATE Fizikai Kémiai Tanszék

Homogén, nem kevert oldatokban a kémiai reakció frontszerű lejtásódásának egyik feltétele az autokatalízis. Egy autokatalitikus rendszer katalizátor mentes oldatát például egy kvázi-egydimenziós kapillárisba juttatva és a cső egyik végén katalizátort hozzáadva, némely esetben a reakció frontszerű lejtásódása következik be. Ez azt jelenti, hogy a reakció úgy játszódik le, hogy a térbeli terjedése során kifejezett határvonal választja el az elreagált és katalizátortól mentes oldatrészt. A reakció ilyen végbemenetelének további feltételei is — például a megfelelő koncentrációtartomány biztosítása — vannak, melyek mibenléte még tisztázásra szorul.

Az aceton jódozása egy általánosan ismert autokatalitikus folyamat. Arra azonban, hogy e reakció is frontszerű viselkedést mutalhat, még senki sem gondolt. Munkánk elsődlegesen arra irányult, hogy a fenti reakción alapuló reakciófrontot hozzunk létre. Miután ez sikerült, a frontsebesség koncentráció-, valamint irányfüggésének a vizsgálata következett.

A reakció feltételezett mechanizmusa:



A lassú sebességhatározó lépés: az aceton enolizációja. Mivel ez a lépés protonkatalizált, a reakció a protonra nézve autokatalitikus. A reakciófront terjedése szemmel is jól követhető, hiszen a jó színű acetonszuszpenziót alkalmazva eltűnik.

A reakció frontszerű lejtásódását 1 mm belső átmérőjű üveggapillárisban, 30-45°C között, vizes közegben, a következő koncentráció-tartományokban vizsgáltuk:

$$[\text{I}_2] = 0,002 - 0,02 \text{ mol dm}^{-3}, [\text{KI}] = 0,05 - 0,4 \text{ mol dm}^{-3}, [\text{Ac}] = 0,05 - 0,44 \text{ mol dm}^{-3},$$

$[\text{H}^+] = 0,004 - 0,009 \text{ mol dm}^{-3}$. Azt tapasztaltuk, hogy a frontsebesség a komponensek közül csak a proton-, és az acetonkoncentrációtól függ, valamint a függőleges sík különböző irányában indítva a frontsebességek értékei nem mutatnak eltérést.

Az ismert frontreakciók közül az aceton jódozása az eddigi legegyszerűbb mechanizmusú. A reakció első szakaszára klasszikusan elfogadott sebességi egyenlet:

$$\frac{d[\text{I}_2]}{dt} = k[\text{Ac}][\text{H}^+].$$

A mechanizmus pontos megismerése által lehetőség nyílik a front terjedését leíró matematikai egyenletekbe való behelyettesítésre. Tulán ez teszi igazán izgalmasá és jelentőssé az ez irányban tovább folytatandó munkát. A dolgozat összefoglalásában bemutatjuk, hogy milyen összhang mutatkozik a modell által nyújtott és a mért eredmények között.

További munkánkban tehát a reakció mechanizmusát és az analog reakciók (oxovegyületek jódozása) frontszerű viselkedésének megletétét és feltételeit vizsgáljuk.

A biológiai homokiralitás eredete: gyenge kölcsönhatás vagy valami egyszerűbb?

Domján Attila, V. évf. vegyész

Témavezető: Süvegh Károly
ELTE, Magkémiai Laboratórium

A biológiailag aktív királis molekulák szinte kivétel nélkül homokirálisak. Az L-aminosavak és a D-cukrok a legismertebbek, de a szteroidok stb. között is csak az egyik enantiomer preferált. Erre a szimmetriasértésre sokféle magyarázat született, de egyik sem ad egyértelmű és kísérletileg bizonyítható választ arra a kérdésre, hogy miért homokirális a világ.

A szakirodalom egyik lehetséges kiváltó oknak a gyenge kölcsönhatás paritásértéséből eredő energiakülönbséget tartja, értéke azonban nagyon kicsi (10^{-17} kT). Másik lehetséges ok a β -bomlásból származó elektronok okozta reakciók, de polarizált részecskékkel végzett kísérletekkel nem sikerült az enantiomerpárok között különbséget kimutatni.

Pozitronélettartam spektroszkópia segítségével vizsgáltuk a vizet és biológiailag aktív királis molekulák vizes oldatait.

A víz szerkezetében három változást figyeltünk meg a 16-90 °C-os tartományban. Ezek a változások a víz hidrogénhidás, klaszteres szerkezetében következnek be. Számunkra legérdekesebb a 24-42 °C közötti többé-kevésbé stabil struktúra, hiszen a legtöbb állat testhőmérséklete ebbe a tartományba esik.

Két egyszerű, de eltérő típusú, királis, a biológiai folyamatokban fontos anyag (borkósav, alanin) vizes oldatát vizsgáltuk. Először az élettartam-paraméterek koncentrációfüggését tanulmányoztuk (R,R)- és (S,S)-borkósav vizes oldataiban. Kicsi, de szignifikáns eltérést találtunk a két enantiomer hatásában, ami szimmetriasértő kölcsönhatás meglétére utal a víz és a királis molekulák között.

A hőmérsékletfüggő mérések segítségével kimutattuk, hogy az enantiomerek eltérő módon befolyásolják a víz szerkezetét. A "természetes" enantiomer a kb. 42 °C-on bekövetkező szerkezetváltozást alig befolyásolja, a "nem természetes" ezt a hőmérsékletet jelentősen lecsökkenti. Ez a szerkezetstabilizáló hatás az anyagi minőségtől független, csak az anyag kiralitásától függ. A melegvérű állatok testhőmérséklete a fent említett tartomány felső részébe esik (35-41 °C), így ha elfogadjuk a víz szerkezet és a testhőmérséklet összefüggését, akkor egyértelmű következmény a homokiralitás (az L-aminosavak és a D-cukrok használata).

Az iontranszport folyamatok vizsgálatának új megközelítése a β -sugárzás intenzitás valamint energia spektrum változásának mérésén alapuló in situ radioizotópos nyomjelzéses eljárással.

Erdei László Ph.D. ösztöndíjas

Témavezető: Dr. Németh Zoltán egyetemi adjunktus
Veszprémi Egyetem, Radiokémia Tanszék, Pf.: 158,
8201 Veszprém

A Radiokémia Tanszéken több éve folynak kutatások az iontranszport vizsgálatára bevonati rendszerekben, radioizotópos nyomjelzéssel. A vizsgálatok során kezdetben a rétegen átjutó ionok mennyiségét határozták meg, mintavételes és mintavétel nélküli eljárással.

Sokkal célravezetőbbek azok a módszerek, ahol még az átjutás előtt, magában a rétegben történik az ionok eloszlásának meghatározása, jelentősen lecsökkentve a vizsgálatok idejét. A Radiokémia Tanszéken sikerült kidolgozni egy ilyen radioaktív nyomjelzéses módszert.

Meg kell említeni, hogy a migrációs vizsgálati eljárások között ez az első olyan radioizotópos módszer, amellyel in situ módon roncsolásmentesen lehet a felületben fellépő migrációs folyamatokat nyomon követni. Az így megvalósított mérési eljárás a migrációs vizsgálatok egy sor nehézkes részlépését kiküszöböli. A módszer érzékenységéből kifolyólag a lejátszódó migrációs folyamatokról számos esetben időben előbb illetve pontosabb információt lehet nyerni, mint más eddig alkalmazott vizsgálati technikákkal.

A módszer lényege, hogy a bevonat különböző mélységi rétegeiből származó béta-részecskék energiaeloszlása a mélység függvénye, így egy adott béta-spektrumhoz egy mélységi eloszlás rendelhető.

A radioizotópos technika alkalmazása jól áttekinthető nyomjelzett ionok (klór, kén, foszfor) transzportjának mérése folyamán, PERMAPLEX-A20 típusú anioncserélő membránban.

Elektrokémiai töltésátvitel a citokróm c molekula és a Pt elektród között

Gömze Andreas V. éves vegyész hallgató

Témavezetők: Dr. Novák Mihály és Dr. Szűcs Árpád

JATE Fizikai Kémiai Tanszék

Elektrokémiai Csoport

A citokróm c molekula elektrokémiai tulajdonságait tanulmányoztam Pt elektródon. A vizsgálat célja a töltésátvitel jellegét (reverzibilitás/irreverzibilitás, stabilitás) meghatározó kísérleti tényezők felkutatása.

A kísérleti munka során ciklikus voltammetriás módszert és differenciál pulzus voltammetriát használtam.

Az eddigi vizsgálatok azt jelezték, hogy foszfát pufferben oldott citokróm c esetében a töltésátviteli folyamat kinetikai viselkedése a citokróm c és a hordozó elektrolit koncentrációjától, pH-jától és a hőmérséklettől függően a teljesen irreverzibilistól a reverzibilisig terjedhet, valamint a reverzibilist megközelítő viselkedés csak igen szűk koncentráció tartományban észlelhető.

Feltételezhető, hogy az elektrokémiai töltésátvitel a citokróm c és a Pt között függ a citokróm c molekulák oldatbeli aggregációjától, a molekula töltésállapotától, és a felületen bekövetkező szorpciótól.

A citokróm c és a Pt elektród közötti töltésátviteli folyamatok alapjelenségeinek vizsgálatát végeztem el, s a jelenség részletesebb megismeréséhez szükséges kísérleti munkát tovább folytatam.

FLUORESCENCIA SPEKTRUMOK MÉRÉSÉNEK ELMÉLETI ÉS KÍSÉRLETI VONATKOZÁSAIRÓL

Hartvig Nóra, II. évf. biológia - kémia szak

Témavezető: Dr. Kunsági Máté Sándor
JPTE Kémiai és Biokémiai Tanszék

A fluoreszkáló anyagok emissziós tulajdonságainak tanulmányozása kiemelkedő jelentőséggel bír úgy az anyagszerkezeti vizsgálatokban, mint a kémiai analízisben. Az alkalmazott mérőműszerek túlnyomó hányada a merőleges gerjesztési - megfigyelési optikai elrendezés mellett működik.

Vizsgálataink célja a fényelnyelés és a detektálható fluoreszcencia intenzitás közötti - geometriai okokból nemlineáris - összefüggés kvantitatív leírása volt. Ennek érdekében a széleskörűen tanulmányozott fluorescein emissziós tulajdonságait vizsgáltuk.

A fluorescein emissziós felületeinek mérésére négy méréssorozatot terveztünk és végeztünk el különböző koncentráció mellett ($1 \cdot 10^{-4}$ M és $5 \cdot 10^{-5}$ M), két eltérő geometriájú küvetta alkalmazásával (1 cm x 1 cm -es négyzet és 1 cm oldalú háromszög). A mérések során a fluorescein oldatokat 400 nm - 500 nm -es hullámhossz tartományban gerjesztettük 5 nm -ként, az emissziós spektrumokat a 480 nm - 600 nm -es spektrumtartományban vettük fel.

Az emissziós felületek különbségének kiszámításával kvantitatív leírását adtuk a merőleges gerjesztési - megfigyelési optikai elrendezésű fluoriméterek geometriai problémáinak.

Mérési eredményeink alapján megállapíthattuk, hogy az 1 cm x 1 cm -es négyzet küvetta mért emissziós felületek jelentősen különböznek egymástól, míg a háromszög küvetta által biztosított elülső oldali megfigyelés sokkal kedvezőbb.

Kiszámítva a Beer - Lambert törvénynek a küvetta kivilágítására gyakorolt hatását, a küvetta belső falán fellépő egyszeres és kétszeres reflexió figyelembe vételével matematikai leírását adtuk egy lehetséges korrekció elvégzésének.

Az adott korrekció végrehajtásával becsléseink szerint a fellépő hibák nagy része kiküszöbölhető, így a vizsgált anyagok mért fluoreszcencia intenzitása és az oldat koncentrációja közötti kapcsolat - a korrekció nélküli vizsgálatokhoz viszonyítva lényegesen nagyobb koncentrációk esetén is - egyértelműen leírható, ezáltal a mérési tartomány jelentősen kiterjeszhető.

MEMBRÁNPOLARIZÁCIÓS JELENSÉGEK VIZSGÁLATA
SAV-BÁZIS HATÁRFELÜLETEKEN

Hegedűs László okl. vegyészmérnök, Papp Ákos okl. vegyészmérnök, BME

Konzulens: Dr. Noszticzius Zoltán egyetemi tanár
BME, Kémiai Fizika Tanszék

A BME Kémiai Fizika Tanszékén körülbelül két évtizede foglalkoznak membránpolarizációs jelenségek és kémiai dinamikai rendszerek vizsgálatával. Mi ezekbe a kutatásokba kapcsolódunk be új géltreaktorok konstruálásával. A nyitott géltreaktorok a kémiai dinamikai rendszereknek egy igen érdekes új osztályát alkotják. Ezek tulajdonképpen olyan speciális, két környezettel bíró rendszerek, ahol a két környezetet szeparáltan tartalmazza a reagensket. E reagens két oldalról a gélbe diffundálva találkoznak, s ott kémiai reakcióba lépnek egymással. A reakció termékei ugyancsak a két környezet felé távoznak. Ha a két környezet állandó megújításától gondoskodunk (perisztaltikus pumpa), akkor az egyensúlytól távoli állapot tetszés szerinti ideig fenntartható. Ugyanakkor a gélben konvekció nem lehetséges, így a kémiai dinamikai rendszer viselkedését egyedül a kémiai reakció és diffúzió differenciálegyenletei fogják leírni. A géltreaktorok fenti előnyös tulajdonságait kívántuk alkalmazni a membránpolarizációs jelenségek vizsgálatánál is. Itt a kémiai reakción kívül még az elektromos tér is befolyásolja a rendszer viselkedését. Rendszerünkben az alkalmazott kémiai reakció egy sav-bázis reakció, az alkalmazott gél pedig valamilyen hidrogél.

A membránpolarizációs jelenségek vizsgálatához kétféle készüléket konstruáltunk. Az egyik az "egyoldalas" készülék melyben két koncentrikus henger alakú tér van kialakítva. Az "egyoldalas" jelző arra utal, hogy egy gélmembránnak ugyanazon az oldalán áramlik a sav és a lúgodat is, de egymástól elválasztva a belső koncentrikus henger által. A gélmembrán a belső teret zárja le. A belső cső a gél egy termosztált üveglemezhez szorítja. Így a gél elválasztja a két folyadékteret és egyben a tömítést is megoldja. A készülék időálló, aránylag kicsi, mivel a belső cső fala vékony, és így az alatta levő gyűrű alakú géltartomány vastagsága is kicsi. Méréseink során az elmélet alapján várható dióda karakterisztikákat mértük ki több anyagnál (poli-akrilamid, poli-vinil-alkohol gél), majd ezek után a sav ill. lúgodatba juttatott szénnyezés hatását vizsgáltuk. A reprodukálhatóságot aeroszil (kolloid méretű SiO_2) adalék alkalmazásával sikerült jelentősen megjavítani. A legkomolyabb probléma a gél megszoritása maradt, ugyanis a jelen konstrukció nem teszi lehetővé azt, hogy a gél állandó erővel szorítsuk. Ezért ennek a konstrukciónak a továbbfejlesztését tervezzük. Az injektálásos és oldatcserés mérésnél kapott eredmények alapján analitikai alkalmazásra is lehetőség mutatkozik.

A másik elrendezésben a két oldat a gél két oldalán áramlott, a diffúzió keresztirányban zajlott. Ezért neveztük el ezt az készüléket "kétoldalas" (cross-) készüléknek. Evvel a készülékkel mért karakterisztikák jó reprodukálhatóságukkal és gyorsaságukkal tűntek ki. A poli-vinil-alkohol gél ioncserélő tulajdonságát nagy molekulatömegű anjonos ill. kationos polielektrolit hozzáadásával tudtuk módosítani, és ennek különösen a szénnyezéses méréseknél volt jelentősége. A szénnyezéseseknél ugyanis a gélben záró irányban folyó áram egy bizonyos "küszöb" koncentráció felett hirtelen megugrik. Ez a "küszöb" a polielektrolit oldatával tetszés szerinti irányba eltolható. Az eltolás nagysága és irányja az alkalmazott polielektrolit ioncserélő sajátságának és mennyiségének függvénye. Ez a megfigyelés lehetőséget kínál ismeretlen membránok ioncserélő tulajdonságainak mérésére és kvantitatív értékelésére.

MÉRÉSVEZÉRLŐ SZOFTVER FEJLESZTÉSE ÉS ALKALMAZÁSA
A PAR MODEL 273 POTENCIOSZTÁTHOZ

Horváth Ákos, V. mérnök-fizikus

Témavezető: Lakatosné Varsányi Magda
ELTE Fizikai-Kémiai Tanszék

Az ELTE Fizikai-Kémiai Tanszékén 1991 óta folyik szoftverfejlesztés az EG&G cég Model 273 típusú számítógéppel vezérelhető potenciosztátján. A szoftver készítésénél az alábbi igényeket tartottuk szem előtt:

- az elektrokémiai mérés (sorbakapcsolt mérések) formális leírása, paramétereinek tervezése;
- a mérés végrehajtása, a mérőműszer (potenciosztát) vezérlése;
- a mérési adatok feldolgozása, archiválása;
- A gépfüggő adatokhoz a gyári alapszoftvert használtuk fel. A szoftver legfontosabb tulajdonságai mérési szempontból:
- az alpmérések gyors összeállítás, a paraméterek kényelmes bevitele;
- belső szövegszerkesztővel tetszőleges programok írhatók, összefűzhetők;
- a mérés nyomon követhető a számítógép képernyőjén;
- közvetlen kommunikáció a Model 273-mal a billentyűzetten keresztül.
- A programok összefűzése szükségessé válik, ha
- a mérés igen hosszú, az adatok száma meghaladja a memória méretét;
- egy méréstípuson belül változtatjuk a pontvétel sűrűségét;
- különböző méréstípusok követik gyorsan egymást.

Az alpmérések a következők: ciklikus voltametria, kronopotenciometria, kronoamperometria.

Az adatok feldolgozása csupán a minimális funkciókra szorítkozik: grafikus és digitális megjelenítés, összerajzolás, nyomtatás, egyenes illesztése, zajszűrés.

A szoftver alkalmazását néhány példával illusztráljuk:

- Acélminták lyukkorróziós hajlamának vizsgálata. Két Magyarországon előállított acélmintán (KO36Ti és KO6) meghatároztuk kronoamperometriás illetve kronopotenciometriás módszerrel a lyukkorróziót jellemző, E_c (kritikus lyukképződési) és E_{up} (újrappaszíválódási) potenciálokat.
- Diffúziókontrollált elektródfolyamatok kinetikai vizsgálata. Forgó korongelektród segítségével tanulmányoztuk a rézionok leválasztását, a leválasztás sebességét az elektród fordulatszámának és a rézion koncentrációjának függvényében, savas réz-szulfát oldatokban.
- Passzív rétegek stabilitásának vizsgálata. Ausztenites rozsdamentes acélon foszfát és citrát tartalmú semleges oldatokban konstans potenciálon képződő réteg stabilitásának jellemzésére hosszúidű áram-idő méréseket végeztünk.

A szoftverfejlesztés az OTKA 2111 pályázat támogatásával készült.

KORRELÁCIÓS ENERGIA SZÁMÍTÁSA ELEKTRONPÁR HULLÁMFÜGGVÉNYEK SEGÍTSÉGÉVEL

Jóvári Pál V.fizikus

Témavezető : Surján Péter ELTE TTK Elméleti Kémia

Tanszék

A hagyományos kvantumkémiai számítások (például perturbációs közelítés) műveletigénye rohamosan nő az elektronszámmal és a bázis méretével. Ez a nagyobb molekulákra történő, elfogadható pontosságú számításokat gyakorlatilag lehetetlenné teszi. A probléma kezelésére többféle lehetőség kínálkozik, például a szemempirikus módszereken túl olyan eljárások használata, melyekben a molekulát részrendszerek egyesítéseként fogjuk fel, és a fizikailag releváns mennyiségeket a részrendszerek adataiból "tesszük össze".

Ide sorolható az úgynevezett kételektron hullámfüggvény (geminál) módszer is, amennyiben a geminálokat térben lokalizált bázisfüggvények segítségével állítjuk elő. Az eljárás lényege, hogy a referencia állapotot kételektron hullámfüggvények antiszimmetrizált szorzataként írjuk fel. Ez aztán különbözőképpen finomítható tovább. Bár kémiai szemléletünknek ez a közelítés megfelel (kétcentrumú kémiai kötés, nemkötő elektronpár, stb.), mégis – pont a kötés fogalmának hiányosságai miatt – javításra szorul.

Munkám során a geminál közelítés hibáinak kvantumkémiai korrekcióival foglalkoztam. A kötések lokálisan gerjesztett állapotainak kölcsönhatása perturbációs számítással vizsgálható. Ez diszperziós jellegű energiatagokhoz vezet, melyek figyelembe vétele elkerülhetetlen a van der Waals komplexek leírásánál. Egészen más típusú korrekció adódik, ha olyan gerjesztéseket vizsgálunk, melyeknél az elektronok "átugranak" egyik kötéstől a másikra (delokalizáció). Ez a jelenség a linearizált coupled cluster módszerrel kezelhető hatékonyan.

SZILILÉN, A SZILÍCIUM LEGSTABILABB FORMÁJA AROMÁS VEGYÜLETEKBEN

Kárpáti Tamás IV. évf., BME

Konzulens: Nyulászi László adjunktus
BME, Szervetlen Kémia Tanszék

A szililének, a kétértékű szilíciumot tartalmazó vegyületek napjainkban fokozódó érdeklődés középpontjában állnak. Ezeket általában rövid élettartamú, reaktív intermediereként ismerik, azonban a legújabb közlemények már stabilis szililének szintéziséről számolnak be. Így előtérbe került e vegyületek stabilitásának, stabilizálhatóságának kérdése. Az egyre gyarapodó, főként elméleti munkák mind több kísérleti eredménnyel egészülnek ki. Külön érdekességet ad a problémának az analóg szénvegyületekkel való összehasonlítás: míg a karbén (CH_2) elektronszerkezete alapállapotban triplétt, addig a szililéné szinglett, és ez a származékok nagy részére is jellemző. Természetesen ez a különbség a vegyületek reaktivitásában is megmutatkozik. A stabilis vegyületek előállításának a kulcsa éppen a szinglett állapot elérése, és úgy tűnik, a szilícium számára sok esetben a szinglett, kétértékű forma a kedvezőbb.

A hipovalens szilíciumra épülő molekulák stabilizálásának két útja ismeretes. Az egyik szokásos módszer a reaktív szililénés centrum nagy térigényű (terc-butil-, metizil- vagy adamantil-) csoportokkal történő leányékolása. A másik út pedig a vegyületek energiájának az elektronszerkezet megváltoztatásával történő csökkentése. Az irodalomból ismeretes a π -rendszerben elektronküldő (amino-, hidroxil-, tio- stb.) csoportok ilyen hatása.

A Budapesti Műszaki Egyetem Szervetlen Kémia Tanszékén TDK munka keretein belül körülbelül másfél éve vizsgáljuk a szililének amino-származékait és az amino-szililén gyűrűs trimerjét kvantumkémiai módszerekkel. A vizsgálatokból eddig egy közlemény jelent meg (Nyulászi L., Kárpáti T. Veszprémi T., *J. Am. Chem. Soc.* 1994, 116, 7239).

A munka eredményei a következőkben foglalhatók össze röviden:

- 1) A gyűrűs trimerjének egyensúlyi geometriája planáris.
- 2) Ez a molekula stabilisabb még a klasszikus kettőskötésekre épülő aromás izomerjénél, a szimmetrikus triazin szilícium-analógiánál is.
- 3) A homodezmikus reakciók (aromás) stabilizációt mutatnak.
- 4) Értelmeztük az izodezmikus és a homodezmikus reakció ellentétes hőszínezetét.
- 5) Az egy szililén egységre jutó stabilizáció - az általunk vizsgált amino-szililének között - a szililén gyűrűs trimerjénél a legnagyobb.

AZ EU BEVITEL HATÁSA TI TARTALMÚ SZUPRAVEZETŐKBE

Klencsár Zoltán, V. évf. Fizikus

Témavezető: Kuzmann Ernő
ELTE, Magkémiai Laboratórium

A magashőmérsékletű szupravezetés 1986-os felfedezése óta a rézoxid alapú kerámiák mind a fizikai, mind a kémiai tudományos kutatás homlokterébe kerültek. Az eltelt hét évben a magashőmérsékletű szupravezető anyagok köre folyamatosan bővült, egyre magasabb átmeneti hőmérsékletű kerámiákat állítottak elő. Mindezek ellenére a jelenség elméleti értelmezését nem sikerült megoldani, s a témakör számos nyitott kérdést tartalmaz kísérleti oldalról tekintve is.

A jelen munkával az egyik ma ismert legmagasabb, 110 K kritikus hőmérséklettel rendelkező szupravezető kerámia, a $Tl_2CaBa_2Cu_2O_{8+d}$ szerkezeti kutatásához kívánunk hozzájárulni Mössbauer-spektroszkópiailag, valamint röntgen vizsgálatok elvégzésének útján.

A mérések Halász István (KKKI) által előállított, vassal dópolt és európiumot tartalmazó $Tl_2(Ca_{0.8}Eu_{0.2})Ba_2(Cu_{2.94}Fe_{0.06})O_{8+d}$ névleges sztöchiometriával bémért mintán, valamint $EuBa_2Cu_3O_{7-x}$ kerámián történtek, melyek mindegyike szupravezető átmenetet mutatott az előzetes vizsgálatok során.

A minták röntgendiffrakciós karakterizációja nyomán megállapítottam, hogy a Tl tartalmú kerámia a kívánt ún. 2122 szerkezetet főfázisként, valamint az analóg 1122 szupravezető fázist minorfázisként közelítőleg 1/3 részarányban tartalmazza.

Korábbi nagyfelbontású elektronmikroszkópos vizsgálatok azt mutatták, hogy a Tl tartalmú szupravezetők olyan nem sztöchiometriusan felépülő reális kristályok, melyekben bizonyos kristályhelyzetekben lévő kationok - például kalciumnak Ba vagy Tl általi - gyakori kicserélődése lehetséges. Ezt a korábban végzett ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópiailag vizsgálatok is kimutatták, melyekben a rezet helyettesítő vas atomokra vonatkozóan három különböző környezetet lehetett azonosítani, ellentétben az ideális szerkezet esetében elvárható egyetlen típusú környezettel.

Az európium tartalmú Tl-os szupravezető minta ^{57}Fe Mössbauer-spektruma szignifikánsan különbözött az európiumot nem tartalmazó mintáétól, ugyanis a Mössbauer-spektrum értelmezése legalább négy különböző vas-környezet feltételezését kívánta meg. Az újonnan talált környezet a kalciumot helyettesítő európiumnak feleltethető meg.

Ugyanakkor a Mössbauer-spektrumban talált ^{57}Fe környezeteknek megfelelő alspektrumok területeinek arányai alapján kvalitatív számítás végezhető a különböző szubsztitúciós hibák gyakoriságára vonatkozóan. Megállapítható volt, hogy a Tl tartalmú szupravezető kerámia szerkezete maximum 75%-ban ideális atomi elrendeződésű, míg az összes olyan szubsztitúciós hibák részaránya ahol a Ca reguláris helyzetében Ba, Tl, vagy Eu található, legalább 25%.

A fenti számítás alapján kapott eredmények továbbá arra engedtek következtetni, hogy az európiumtartalom legnagyobb része a várározásnak megfelelően a kalcium reguláris helyére épült be, amit a Tl tartalmú szupravezető kerámián elvégzett ^{151}Eu Mössbauer-spektroszkópiailag vizsgálat is alátámasztott.

Marosvásárhelyi Orvosi és Gyógyszerészeti Egyetem, Románia

Fizikai Kémia Tanszék

Tanszékvezető: dr. Tőkés Béla, egyetemi tanár

Üsszefüggések egyes benzooesavszármazékok elektrokémiai és kémiai adatai között

Kuszálik Éva, V. éves gyógyszerészhallgató

Üsszefoglalás

Néhány benzooesavszármazék polarográfiás viselkedését tanulmányozva, a szerző

* mennyiségi összefüggéseket állapított meg:

- a határáram és az oldatok koncentrációja, továbbá

- a határáram és a tartálymagasság között;

** vizsgálta a határáram - hőmérséklet függvényt.

*** A vizsgálati eredmények alapján összefüggéseket talált a szerkezeti hatások és a polarográfiás adatok között, ezen kívül mennyiségi meghatározási módszert dolgozott ki a karboxisavak polarográfiás meghatározására.

TERMÉSZETES AMINOSAVAK, MINT KORROZIÓS INHIBÍTOROK

László Zsuzsanna, IV. évf. kémia-fizika

Témavezető: Dr. Lukács Zoltán

JATE Fizikai Kémiai Tanszék

A korrózióvédelemben jelentős szerepet töltenek be a korróziós *inhibitorok*, amelyek nagy elektronsűrűségű funkciós csoportjaikkal a felületen megkötődve blokkolják a korróziós folyamatokat. Ezeknek a vegyületeknek jó részéről régóta tudjuk, hogy mérgezőek vagy éppen rákkeltők. Az utóbbi években egyre nagyobb az igény ezeknek az anyagoknak környezetkímélő vegyületekkel történő helyettesítésére. Néhány aminosavról - elsősorban oldalláncai miatt - feltételezhető, hogy inhibíciós sajátságokat mutat. Munkánk során az *arginint*, a *hisztidint*, a *triptofánt*, az *ornitint* és a *metionint* vizsgáltuk, mint potenciális inhibitorokat.

A kísérletek során a PIT technikával vizsgáltuk az aminosavak inhibitorhatását savas, kén-hidrogénmentes, ill. kén-hidrogéntartalmú oldatokban, oxigén kizárásával, 40°C-on, valamint elektrokémiai módszerekkel (nyitáramkörü potenciálmérés, galvanosztatikuss polarizáció, polarizációs ellenállásmérés) metionin hatását az elektrokémiai paraméterekre. Az aminosavak önmagukban is mintegy 60-70 %-os inhibitorhatásfokot mutatnak, de halogénidionok jelenlétében - feltehetően a *szinergikus hatás* következtében - ez akár a 99 %-ot is elérheti.

Az elektrokémiai korróziósebesség-mérések összhangban vannak a tömegvesztés-méréssel kapottakkal. A nyitáramkörü mérések során az inhibált oldatokban a potenciál és a polarizációs ellenállás szinkronizált oszcillációját figyeltük meg. Az anódos galvanosztatikuss polarizációs görbéket a metionin ill. a metionin + kálium-jodid jelenléte nem befolyásolta, a katódos görbéken viszont túlfeszültségnövelő hatást mutatott.

KÉMIAI HULLÁMOK FERROINNAL KEZELT MEMBRÁNFELÜLETEN A BELOUSZOV-ZSABOTYINSZKIJ REAKCIÓBAN

Lázár Attila V. évf. BME

Konzulens: Dr. Noszticzius Zoltán egyetemi tanár
BME, Kémiai Fizika Tanszék
dr. Anna Péter tudományos munkatárs
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Az utóbbi években a kutatók figyelmének középpontjába kerültek a nemlineáris dinamikai rendszerek, az egzotikus reakciók tanulmányozása. Ezen folyamatok megismerésével szeretnénk magyarázatot találni olyan biológiai problémák kémiai hátterére, mint például az embrionális morfogenezis.

Az egzotikus reakciókat eddig sokat tanulmányozták nyitott tankreaktorban. A katasok során kifejlesztettünk egy olyan új típusú nyitott, nem kevert reaktort, amiben oszcilláló rendszerek - különös tekintettel a Belouszov-Zsabotyinszkij reakcióra - időbeli változásán kívül a térbeli változások is figyelemmel kísérhetők. A reaktor "lelke" egy olyan membránlap, aminek a felületén a reakció katalizátorát rögzítettük. A katalizátor az alkalmazott redox rendszer indikátorául is szolgál, ezért a reakciók térbeli lefutása a katalizátor színváltozásán keresztül követhető.

Hogy milyen térbeli szerkezet alakul ki, azt nemcsak a reakció kinetikája dönti el, hanem lényeges szerepet kap a közeg transzporttulajdonsága is. A kialakuló térbeli szerkezeteknek két nagy családja van: a kémiai hullámok és a Turing féle szerkezetek. Az eddigi kísérletek célja az volt, hogy kísérleti metodikát dolgozzon ki azokhoz a későbbi kutatásokhoz, amelyeknek célja a transzporttulajdonságok változtatásával Turing szerkezetek létrehozása.

A kísérletek során három különböző membrántípusra dolgoztunk ki olyan eljárást, amivel a katalizátor a felületen rögzíthető. Vizsgáltuk a kémiai hullámok által alkotott térstruktúrák kialakításának lehetőségeit és reprodukáltuk azt a "chemical pinwheel"-nek nevezett jelenséget, amit eddig csak gél-gyűrű reaktorban sikerült előállítani.

FRONTREAKCIÓ A BROMÁT-CÉRIUM(III) KÉNSAVAS RENDSZERBEN
A MÁGNESES MEZŐ HATÁSA A BROMÁT-CÉRIUM(III)
FRONTREAKCIÓRA

NAGY KRISZTINA III. évf. kémia-fizika szakos hallgató

Témavezető: Dr. Boga Endre docens
József Attila Tudományegyetem
Fizikai-kémiai Tanszék

A cérium(III)-bromát erősen savas rendszerében, feleslegben alkalmazott cérium(III) jelenlétében frontreakciót sikerült felfedeznem. Ezt az tette lehetővé, hogy a bromát cérium(III)-mal való reakciója indukciós periódussal rendelkezik és autokatalitikus természetű. Viszonylag szűk bromát koncentráció tartományban és alacsony hőmérsékleten jelentkező elegendően hosszú indukciós periódus lehetővé tette a frontreakció természetének tanulmányozását. Megállapítható az a tendencia, hogy a fronthaladás sebessége a bromát koncentrációval nő, de az indukciós periódus reprodukálhatatlansága miatt mennyiségi összefüggés nem mutatkozik a fronthaladás sebessége és a bromát koncentráció között.

Mivel a reakció folyamán paramágneses Ce(III)-ból diamágneses Ce(IV) keletkezik, így az inhomogén mágneses tér hatással van a rendszerre: az inhomogén mágneses térbe haladva a front a reakció során keletkezett diamágneses Ce(IV)-nek a mágneses tér taszítása révén lelassul, míg csökkenő inhomogenitású mágneses térben felgyorsul a taszított Ce(IV) és a vonzott Ce(III) által létesült konvekció következtében. A mágneses effektust különböző bromát koncentrációk esetén vizsgáltam. Azt a tapasztalatot, hogy nagyobb bromát koncentrációknál a mágneses hatás erőteljesebb, értelmeztem.

TERMÉSZETES ÉS MESTERSÉGES TENZIDEK KÖLCSÖNHATÁSA
ÉS SZEREPÜK AZ EMULZIÓK STABILITÁSÁBAN

ÖRDÖG TIBOR V. éves vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Balázs János egyetemi adjunktus

JATE Kolloidkémiai Tanszék

A természetes felületaktív anyagok között legjelentősebbek a kazein, lecitin, kofalin, koleszterin stb. A kőolaj aszfalténeket a tankönyvek, kézikönyvek rendszerint nem is említik, holott a legnagyobb tömegben vannak jelen a természetben és felületaktív hatásuk következtében egyértelműen felelősek a természetes kőolajemulziók stabilitásáért.

Milyen vegyületek az aszfaltének? A kőolaj kolloidálisan diszpergált nagy relatív moláris tömegű azon komponensei, melyek aromás szénhidrogénekben jól oldódnak, alifás szénhidrogénekben viszont oldhatatlanok. Szerkezetük a grafitéhoz hasonlít, vagyis nagy lamelláris molekula aggregátumok alkotják, melyekhez számos különböző funkciós csoport kapcsolódik. Az aszfaltén szerkezetét kisszögű röntgen (SAXS) vizsgálatokkal tanulmányoztam. Az aszfaltén az olaj szervesen komponenseinek (S, N, O) hordozója. Apoláris láncú és poláris csoportjai miatt feldúsul az olaj-víz emulziók határfelületén és stabilizálja azokat.

Kísérleti munkám során az aszfaltének felületi feszültség csökkentő hatását vizsgáltam és meghatároztam azok kritikus micelláris koncentrációértékét aromás-alifás szénhidrogén elegyekben. Tanulmányoztam néhány mesterséges tenzidnek az aszfaltén peptizációs állapotára gyakorolt hatását az UV spektrofotometria módszerével. Összefüggést állapítottam meg a peptizáció mértéke és az emulgeáló hatás között. Munkám jelentős részét képezi az aszfalténnel stabilizált emulzió állandóságát és reológiai tulajdonságait meghatározó tényezők vizsgálata. Ezen vizsgálatok célja a természetes kőolajemulziók destabilizálásának optimális megoldása.

A $\text{HSO}_4^-/\text{SO}_4^{2-}$ - és Ag^+ -ionok szimultán adszorpciója polikristályos aranyelektrodon

Pápai Kornél

Veszprémi Egyetem, Radiokémia Tanszék

Témavezető: Dr. Varga Kálmán egyetemi docens

Az Ag^+ -ionok előleválása (underpotential deposition), valamint az Ag-adatok által megnövelt $\text{HSO}_4^-/\text{SO}_4^{2-}$ -adszorpció értelmezése évtizedek óta foglalkoztatja a kutatókat. A témakörben folyó vizsgálatoknak gyakorlati aktualitást ad az a tény, hogy a Paksi Atomerőmű VVER típusú reaktorblokkjainak primer hűtőkörében a radioaktív szennyeződés (kontamináció) döntő hányada az $^{110\text{m}}\text{Ag}$ izotópnak tulajdonítható. Az Ag-leválás kinetikájának és a rétegképződés mechanizmusának tanulmányozása - távlatokban - lehetőséget nyújthat a hatékony felületvédelmi, illetve dekontaminációs módszerek kidolgozására.

A VE Radiokémia Tanszéken továbbfejlesztett in situ radioizotópos nyomjelzéses technika - voltametriás mérésekkel kombinálva - eredményesen alkalmazható a kérdéses ionok szorpciójának tematikus vizsgálatára. Az $^{110\text{m}}\text{Ag}$ -mel jelzett Ag^+ -ionok és a ^{35}S -nel jelzett $\text{HSO}_4^-/\text{SO}_4^{2-}$ -ionok megkötődése jól mérhető a - közelmúltban kialakított - dE/dX β -plasztik scintillációs detektorral.

Előadásomban bemutatom a vizsgálati módszert, a kidolgozott detektálási eljárást, valamint a $\text{HSO}_4^-/\text{SO}_4^{2-}$ - és Ag^+ -ionok aranyfelületen lejátszódó adszorpciójára vonatkozó kísérleti adatokat.

A radioizotópos nyomjelzéses és voltametriás mérések alapján a legfontosabb kísérleti eredmények a következők:

(1) A β -plasztik detektor alkalmas a vizsgált speciesz által emittált β^- -sugárzás mérésére. A másodlagos sugárzások (γ -, fékezési- és karakterisztikus röntgensugárzás) zavaró hatása a mérés során elhanyagolható.

(2) Az Ag^+ -ionok leválása a teljes vizsgált potenciáltartományban detektálható az aranyelektrodon. A felületi borítottság jelentősen alacsonyabb a monoréteg borítottságnál ($\theta \leq 0,15$), és alapvetően függ a kísérleti körülményektől.

(3) A felületi többletkoncentráció értékekből, valamint a mikrocoulombmetriás adatokból a levált Ag-adatok elektroszorpció állapotát meghatározható, amely Ag-oxidok (Ag_2O , AgO) képződésére utal az aranyfelületen.

(4) A $\text{HSO}_4^-/\text{SO}_4^{2-}$ -ionok adszorpciójának mértékét az Ag-adatok jelenléte jelentősen megnöveli az oxidmentes aranyfelületen mért értékekhez viszonyítva.

GÁZFEJLŐDÉS VIZSGÁLATA AZ OSZCILLÁCIÓS BELOUSZOV-ZSABOTYINSZKIJ REAKCIÓBAN

Pintér Szilveszter okl. vegyész mérnök, Nagygyőry Szilveszter IV. évf. BME

Konzulens: Dr. Noszticzius Zoltán egyetemi tanár
BME, Kémiai Fizika Tanszék

A Belouszov-Zsabotyinszkij reakció az ún. oszcillációs reakciók családjába tartozik, ez egy vagyis kémiai nemlineáris dinamikai rendszer. A reakciót sokféle módon vizsgálták már. A BME Kémiai Fizika Tanszékén a reakció folyamán keletkező gáz alakú végtermék vizsgálata irányába fordult, ugyanis itt fedezték fel a szén-dioxid fejlődést kísérő szén-monoxid fejlődést.

Ez a TDK dolgozat három fő részből áll. Az első rész egy olyan számítógépes mérőrendszer építését ismerteti, amelynek a számítógép négy csatornán gyűjti egy oszcillációs reakció jeleit. A négy csatorna közül kettő a CO_2 illetve a CO mennyiségét méri úgy, hogy a fejlődő gázokat H_2 vívgáz hajtja ki az oldatból, majd katalitikus metanizáció után lángionizációs detektor méri. A másik két csatorna ezzel egyidőben két elektród potenciálját követi; egy bromid szelektív és egy platina elektródot. A mérőrendszer egyik fő újdonsága, hogy a CO_2 és CO mérését egyszerre és folyamatosan teszi lehetővé. E mérési összeállítás oszcillációs reakciókra történő kipróbálásával zárul az első rész, amely lényegében Pintér Szilveszter diplomamunkájára épül.

A második rész az oszcilláló Belouszov-Zsabotyinszkij reakció egyik részrendszerének, a Ce^{4+} -malonsav reakciónak a vizsgálatát tartalmazza. Ezen vizsgálatokat Nagygyőry Szilveszter végezte az előző részben ismertetett mérőrendszerrel. E reakció tanulmányozásának aktualitását az adta, hogy a Marburgi Fülöp Egyetem Fizikai Kémia Tanszékén (mely tanszékkel szorosan együttműködünk a BZ reakció kutatásában) érdekes felfedezés született. Megállapítást nyert, hogy a Ce^{4+} -malonsav reakcióban képződő szabad gyökök nem diszproporcionálódnak, hanem rekombinálódnak. Vagyis az eddig intermediéreként feltételezett tartronsav nem képződik, hanem helyette többek között etán-teirakarbonsav jelenik meg. Fontos lett ezért a Ce^{4+} -malonsav reakció CO_2 fejlődésének vizsgálata. Elsősorban azt kellett megvizsgálni, hogy történik-e decarboxileződés a reakció első szakaszában.

A dolgozat harmadik részét tulajdonképpen a második részben felvetett probléma indította. Nevezetesen annak eldöntéséhez, hogy a CO_2 a reakció mely fázisában keletkezik reakciósebesség-idő diagramra van szükségünk. A reaktor és a csőrendszer viszont ezt a diagramot többé-kevésbé kisimítja, mire a CO_2 mint CH_4 a lángionizációs detektorba jut. Ezért szükség van a detektoráram-idő diagramnak a reakciósebesség-idő diagramná való visszaszámolására. Ezt a feladatot hivatott megoldani az a "dekonvolváló" program melynek fejlesztése jelenleg is folyik. E fejlesztés elsősorban Pintér Szilveszter diplomaterve utáni munkája. A módszert és az első biztató eredményeket ismerteti a harmadik bevezető rész.

Az eredményekből annyi következtetés máris levonható, hogy a Ce^{4+} -malonsav reakcióban a reakció elején fellépő kevés CO_2 egy mellékreakció eredménye, aholis a malonil gyök rekombináció helyett decarboxileződik.

FLUORESZKÁLÓ MOLEKULÁK VIZSGÁLATA
SZEMIEMPIRIKUS KVANTUMKÉMIAI MÓDSZERREL

Rosinger Boglárka, III. évf. matematika - kémia

Témavezető: Dr. Kunsági Máté Sándor
JPTE Kémiai és Biokémiai Tanszék

Egyes heteronukleáris aromás vegyületek fotokémiai reakcióban átalakulnak, és ezt a folyamatot fémionok katalizálják. A termék fluoreszcenciás tulajdonsága alapján kvantitatíve mérhető a katalizátor mennyisége. Ezért fontos, hogy az ilyen szerves vegyületeket különböző elméleti vizsgálatoknak vessük alá. Az általunk vizsgált molekula a 2,2'-dipiridil-ke-ton-nikotinsav-hidrazon fotokémiai reakciójának a terméke. A reakciót Mn(II)ionok katalizálják, ezért a folyamat Mn(II)ionok meghatározására használható. Vizsgálataink célja a katalitikus termék konformációanalízise volt.

A molekulaspektromok kvantumkémiai értelmezése egyértelművé tette, hogy a szerkezet és az anyag spektroszkópiái viselkedése között szoros összefüggés van. Ezért kiemelkedő jelentőségűek a molekula térszerkezetére irányuló vizsgálatok. A konformáció, mint a teljes energia függvénye, a fix belső koordináták (kötéshosszak, kötésszögek, torziós szögek) kijelölésével és néhány független változóként tekintett paraméter variációjával vizsgálható.

Munkánk során a MINDO/3 szemempirikus kvantumkémiai módszert alkalmaztuk. Számításokat végeztünk a molekula két izolált gyűrűje által bezárt torziós szög 36 helyzetében. Meghatároztuk a molekula teljes energiáját a gyűrűk egyes konformációiban, majd megállapítottuk az egyensúlyi konformációt, mely a két gyűrű 60 fokos helyzetében valósul meg. A kapott energiaértékekből kiszámítottuk a molekula rotációs gátját, mely 1.202 eV.

Meghatároztuk a molekula elektronjai energiáinak és a magok Coulomb-taszításából származó potenciális energia értékeknek a konformáció változásától való függését.

Vizsgálataink során különös figyelmet fordítottunk a töltéseloszlás tanulmányozására. A torziós szög változtatásakor az izolált gyűrűk között kötetést létesítő két atom töltése hasonló, viszont a gyűrűk töltésszegének változása ellentétes irányú, ezért a töltésselölődés a gyűrűkön belül megy végbe, oly módon, hogy az elektronok egy része a 110-190, valamint 220-290 fokos torziós szög értékeknél a molekula gyűrűi kapcsolódási helyének környezetében, más esetekben a kapcsolódási helytől távoli tartományokban tartózkodik.

Elméleti eredményeink elősegíthetik a 2,2'-dipiridil-ke-ton-nikotinsav-hidrazon és az izo-nikotinsav-hidrazon típusú vegyületek fémion-katalizált reakcióinak tervezését.

VOLFRÁM-ALKÉN-KARBÉN KOMPLEXEK
MOLEKULAMECHANIKAI MODELLEZÉSE

SZILÁGYI RÓBERT
Veszprémi Egyetem
Szerves Kémia Tanszék

Számos fémorganikus reakció intermedierje átmenetifém-alkén-karbén komplex. Ilyen reakció az olefin metatézis is. Mechanizmusa ma már általánosan ismert és elfogadott: a karbénkomplex az olefinnel metalla-ciklobutánt képez, amely egy új olefinre és egy új karbénre bomlik. Véleményünk szerint a reakció egyik kulcslépése az olefin koordinálódása a karbénkomplexhez. Ezt a π -komplex képződést követi a már említett katalitikus ciklus. A volfrám központi atomot tartalmazó vegyületek a legaktívabb metatézis katalizátor rendszerek közé tartoznak. Ezek tanulmányozása, mind elméleti, mind pedig kísérleti szempontból tanulságos és hasznos lehet.

Munkánk során elsősorban az olefin metatézis reakciókban észlelt regio- és sztereoselektivitás okainak kiderítésére folytatunk vizsgálatokat. Ennek érdekében kísérletet teszünk a katalitikus ciklus intermedierjeinek pontos szerkezeti leírására, hogy ezek ismeretében foglalkozhassunk a reakciók elemzésével.

Első állomásként, kifejlesztettünk egy MM2 típusú erőteret (METMOD1), amely nagy pontossággal írja le az ötszörösen koordinált volfrám-karbén komplexek szerkezetét. Közel 600 új paramétert vezettünk be. Erről a bázisról lépünk tovább most az alkén-karbén-, és később majd a metalla-ciklobután-komplexeket leíró erőterekre.

A módszerünk lényege az, hogy az irodalomban fellelhető molekulaserkezetek alapján paraméterezzük fel a már említett molekulamechanikai erőteret hatszorosan koordinált, η^2 típusú volfrám-olefin-karbén-komplexekre. Ilyen komplexek képződnek azokban a rendszerekben, ahol ötször koordinált karbént tételezünk fel prekurzorként. Kísérleti szerkezeti információk hiányában kvantumkémiai számítások eredményeit használtuk paraméterezésre. Az új erőteret METMOD2-nek neveztük el. A paraméterezés során az összegyűjtött szerkezeti adatok alapján nemcsak a METMOD2 erőteret készítettük el, hanem kiterjesztettük a METMOD1 erőter alkalmazhatóságát a hatos-koordinációjú karbén-komplexekre is.

A METMOD erőter-család átlagosan a következő pontossággal reprodukálja a kísérleti molekulaserkezeteket:

Erőter	Komplexek	RMS illesztési hiba (Å)
METMOD1	WL ₄ CR ¹ R ²	0.03-0.05
	WL ⁵ CR ¹ R ²	0.05-0.06
METMOD2	η^2 -alkén-WL ₄ CR ¹ R ²	0.06-0.08

L = F, Cl, Br, I, OR, OSiR₃, OSO₃CF₃; L' = CO, Cl

A számítások elvégzésére a PCMODEL PI V4.0 kereskedelmi szoftvert használtuk. A hardveres háttérre két Silicon Graphics munkaállomás biztosította.

Témavezető: Dr. Bencze Lajos, egyetemi tanár

β -ciklodextrin zárványkomplexek vizsgálata pozitronannihilációs spektroszkópiával

Tarsoly Róbert, V. vegyész

Témavezető: Sívegh Károly
ELTE Magkémiai Tanszék

A ciklodextrinek (CD) ipari és tudományos felhasználása szinte kizárólag zárványkomplekképző sajátosságokon alapul. Ezért fontosak azok a vizsgálatok, amelyek az ilyen molekulaasszociátumok képződéséről, vagy szerkezetéről adnak felvilágosítást. A legtöbb felhasználás szilárd anyagokat igényel, így a szilárd fázisban végzett vizsgálatok nyújthatják a leghasznosabb információkat számunkra. A hagyományos módszerek (röntgen-diffrakció, NMR, IR) csak korlátozott információkat adnak ezekről a vegyületekről. Fontos tehát egy olyan módszer bevezetése a szilárdfázisú ciklodextrin-zárványkomplexek vizsgálatába, amely egyértelmű választ ad arra, hogy valóban képződött-e a várt zárványkomplex, és amely alkalmas a vendégmolekula koncentrációjának meghatározására.

Erre a feladatra bizonyult megfelelő eljárásnak az általunk alkalmazott pozitronannihilációs spektroszkópia, amely az anyagokban lévő szabad térfogatok változására roppant érzékeny módszer. Ilyen szabad térfogatok ui. a ciklodextrin-üregek, amelyek a komplexképződés során "betöltődnek". A β -CD-ben képződött orto-pozitronium (o-Ps) élettartamának, ill. relatív intenzitásának követésével ezeket a változásokat figyelhetjük meg. Ezek alapján pedig eldönthető volt, hogy az adott vendégmolekula valóban képez-e zárványkomplexet a β -CD-nel; valamint a valódi komplexek esetében a vendégmolekula-tartalom meghatározható volt szilárd fázisban. A munka során egyrészt a gyógyszeripar számára fontos vegyületek (piroxicam, molsidomin, indomethacin), másrészt a módszer kidolgozása és ellenőrzése szempontjából érdekes kisebb molekulájú anyagok (mentol, toluol) pozitronannihilációs paramétereit határoztuk meg. Az eddigi eredmények alapján módszerünk általánosan alkalmazható lehet egyéb vegyületek esetében is.

A fenti eredményeken kívül megállapítottuk, hogy az o-Ps érzékenyen reagál a vendégmolekula aromás jellegére, ami lehetőséget kínál a molekulaszerkezet és a pozitronannihiláció összefüggéseinek további feltárása felé.

GRAFIT-VÍZ HATÁRFELÜLET MÉRÉSE PÁSZTÁZÓ ALAGÚTMIKROSKÓPPAL

Torma Viktória, II évf. vegyész

Témavezető: Nagy Gábor
ELTE Fizikai-Kémiai Tanszék kihelyezett laboratóriuma, KFKI AEKI

A pásztázó alagútmikroszkópot (Scanning Tunneling Microscope) 1982-ben találta fel Gerd Binnig és Heinrich Rohrer. Ezzel új fejezetet nyitottak a felületkutatásban. Ez a módszer lehetővé teszi hogy atomokat láthassunk a legkülönbözőbb vezető felületű anyagokon. Vizsgálni lehet vele vezető kerámiákat, félvezetők és szupravezetők felületét, követni lehet lassú felületi folyamatokat és elektroliit-elektrod határfelületi folyamatokat is.

Az alagútmikroszkóp működése azon a tényen alapszik, hogy az elektron (mint bármely más részecske is) olyan energiagáton is át tud hatolni, amire klasszikus értelemben nincs elég kinetikus energiája. Egy hegyes tű és a minta közé feszültséget kapcsolunk; majd a tűt olyan közel visszük a felülethez, hogy létrejöjjön az alagútjelenség, vagyis áram induljon meg közöttük. Ekkor a minta betöltött energiaszintjeiről a tű üres szintjeire vándorol az elektron. Az így keletkezett alagútáram mérhető. A mérés sajnos nem rutinszerű. Ez a fellépő nagy nehézségek miatt van. A legnagyobb, és a mindennapi mérést leginkább megnehezítő probléma a megfelelő minőségű tű elkészítése. Ha ugyanis atomokat szeretnénk látni, akkor a tű végén is legfeljebb egy-két atom lehet, ezt nagyon nehéz elérni. Ezért a tüket viszonylag könnyen kezelhető anyagokból (wolframból, vagy platinából) készítjük. A tűt készíthetjük mechanikai vagy elektrokémiai úton. Az utóbbi esetben az anyagot megfelelő geometriai elrendezésben tömény lúggal elmaratjuk. Ezt a módszert elsősorban wolfram tűknél használjuk.

Ha a tű és a minta között vákuum van, akkor az áram távolságfüggése exponenciális. De a tű és a minta közé bármi mást is tehetünk, amiben a tű viszonylag könnyen mozog. Mi vízzel kísérletezünk. A témavezetőm platina-víz határfelületet vizsgált alagútmikroszkóppal, és molekuladinamikai számításokat végzett hasonló modellrendszeren. Azt tapasztalta (a mérés és a számítások összhangjaként) hogy a platinafelületen van egy viszonylag erősen kapcsolódó vízréteg, amelynek hatása az alagútáram-távolság diagramokon is jól látszik. A víz nedvesíti a platínát. De mi a helyzet nemnedvesítő minták esetén?

Ennek felderítésére most grafit-víz határfelületeket tanulmányozunk. A mérésekhez egy különleges fajta, HOPG-nek nevezett (Highly Oriented Pyrolytic Graphite) anyagot használunk, amelyet különlegesen szabályos szerkezete tesz igazán alkalmassá a használatra. Az eddigi mérések eredményei arra utalnak, hogy a víznek lehet valamilyen speciális struktúrája a grafit közelében. Ezt azért gondoljuk, mert az áram-távolság diagramok alakja függ attól, hogy milyen gyorsan távolítjuk, vagy közelítjük a tüet, és hogy a mintának éppen melyik része felett vizsgálódunk, és azért is, mert a távolságfüggés nem exponenciális (mint azt várnánk), hanem közelítőleg lineáris. Terveink szerint az alagútáram vízes közegben tapasztalt távolságfüggésének pontosabb meghatározása után megállapíthatjuk az alagútátmenet közelében tartózkodó víz-molekulák elektronjainak az alagútátmenetben fellépő potenciál alakjára gyakorolt hatását. Ebből tudnánk következtetni arra, hogy az alagútáram hatására végbemegy-e a víz-molekuláknak valamiféle rendeződése.

TELJESEN DISSZOCIÁLÓDÓ BROMIDOK ÉS
JODIDOK VILLAMOS VEZETÉSÉNEK AKTIVÁLÁSI
ENERGIÁI

Török Imre és Levelés László, IV éves vegyész hallgatók

"Babeş-Bolyai" Tudományegyetem, Kémia és Vegyész-mérnöki Kar
Kolozsvár

A bromidok és jodidok irodalomban közölt vezetőképességi adataiból [1,2] számítottuk a vezetés aktiválási energiáját (E_a) és hőmérsékleti együtthatóját (β) különböző hőmérsékleten és oldatkonzentrációnál. A rendelkezésre álló adatok száma és megbízhatósága függvényében három módszert javasoltunk. Néhány esetben ugyanazon adatcsomag feldolgozására két módszert is alkalmaztunk.

Részletesen elemeztük 11 kation (H^+ , Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ , NH_4^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+}) és 3 anion (Cl^- , Br^- , I^-) valamint a belőlük levezethető halogénidek (főleg bromidok és jodidok) végtelen hig oldataira vonatkozó vezetőképességi adatait kiszámítva különböző hőmérsékleteken (0-60°C) a vezetésnek úgy az aktiválási energiáját mint a hőmérsékleti együtthatóját. E_a hőmérséklettel való csökkenéséből az ionok különböző mértékű hidratációjára és a vízszerkezet szétesésére lehet következtetni. E_a valamint β adatok alapján a Ba^{2+} ion, de főleg az NH_4^+ és Mg^{2+} ionok különleges sajátyságot mutatnak a vízzel mint oldószerezrel való kölcsönhatás tekintetében.

A vegyületek közül véges hígításban csak a HBr, HI (összehasonlításként a HCl), KI, KBr, MgBr₂, BaBr₂-ra vonatkozó vezetőképességi adatokból nyílt lehetőség E_a és β számítására. E_a csökken a hőmérséklettel és ez feltétlenül kapcsolatban van a víz asszociált szerkezetének szétesésével. Az elektrolit töménység növekedése is általában E_a csökkenését eredményezi mely elsősorban az elektrolitok vízszerkezet roncsoló hatásával, kevésbé hidratált ionok sőt ionaggregátumok képződésével magyarázható.

A vezetés hőmérsékleti együtthatója (β) E_a -hoz hasonló lefutást mutat úgy a T mint a c függvényében. β pontos értékeinek ismerete gyakorlati szempontból is jelentőséggel bírhat.

A dolgozat 61 ábrán mutatja be az $E_a=f(t)$, $E_a=f(c)$, $\beta=f(t)$ és $\beta=f(c)$ függvényeket. Számítógép segítségével lehetővé vált az ekvivalens vezetőképesség (Λ vagy $\ln\Lambda$), E_a és β a T és c függvényében való háromdimenziós, számítógépes ábrázolása. E felületek újszerűek és rendkívül szemléletesek, de alapos értelmezésük még várta magára. A HBr, HI, HCl-ra vonatkozó $E_a=f(T,c)$ felületek egymással hasonlóságot is, de eltéréseket is mutatnak.

[1]. Landolt-Börnstein : "Zahlenwerte und Funktionen...", 2. Band, 7. Teil, Springer-Verlag, Berlin, 1960.

[2]. V.M.M.Lobo : "Handbook of Electrolyte Solutions", Elsevier Science Publishers, Amsterdam-Oxford-New-York-Tokyo, 1989.

Témavezető: Dr. Muzsnay Csaba

Organikus közegű diszperz rendszerek
kisszögű röntgenszórása

Turi László II. éves Kémia Ph.D. ösztöndíjas

Témavezető: Dr. Dékány Imre egyetemi tanár

JATE Kolloidkémiai Tanszék

Hidrofil és hidrofób felületű Degussa AEROSIL szilika részecskék szerkezetképzési tulajdonságait vizsgáltuk benzol-heptán és metanol-benzol biner elegyekben.

A szórásgörbékől a rendszerek jellemzésére felhasználható paramétereket (az inhomogenitásra jellemző koherencia- és keresztmetszet hossz, a Porod konstans, az invariáns, a fajlagos felület, valamint az inhomogenitási térfogat értékeit) határoztunk meg különböző módszerekkel. A szakirodalomban jól ismert, Guinier és Porod által kidolgozott kiértékelési módszerrel, valamint A. Jánosi által javasolt $I(h)^{-1}/h^2$ szórásgörbe reprezentáció felhasználásával határoztunk meg a fenti paramétereket.

Az így kapott SAXS adatokat összevetettük a már korábban mért szorpciós és viszkozimetriás mérésekből számolt szerkezetképzési és stabilitási paraméterekkel, melyekkel jó egyezést tapasztaltunk.

Ezzel a módszerrel lehetőségünk adódott arra, hogy a diszperziós kolloidok (emulziók, szolok) vizsgálati eredményeit egy tjabban, az eddigi módszerektől független metodikával megerősítsük.

A STRUKTURÁLIS MODELLEN ALAPULÓ INVERZ DINAMIKUS SZIMULÁCIÓ ÉS ALKALMAZÁSI LEHETŐSÉGEI

Serguei Perez Uriza

Témavezető: Csukás Béla

A megmaradási folyamatok modellezésénél a világ természetéből adódóan, de célszerűségi megfontolásokból is gyakran érdemes aktív és passzív építőelemekből álló diszkrét modelleket alkalmazni. A passzív mérlegelemek a jellemző additív mértékek olyan elegendően kis (összertartozó) részeit írják le, amelyekhez az adott vizsgálat során közelítőleg állandó minőségeket rendelhetünk. Az aktív elemi változások a különféle additív mértékek összertartozó csökkenéseit és növekedéseit eredményező elemi folyamatokat modellezik. Ennek megfelelően az aktív elemek

- egyrészt tartalmaznak az adott elemi folyamat ok-okozatilag helyes kiszámításához szükséges passzív elemekbeli jellemzők listáját és a megfelelő formulára való hivatkozást,
- másrészt meghatározzák a szóban forgó folyamatban elszámolandó csökkenő és növekvő mennyiségek sztöchiometriai együttthatókkal készített listáját.

Az ok-okozatilag helyes kiszámítás és a sztöchiometriai szempontból helyes elszámolás teljes elválasztása lehetővé teszi a vizsgált folyamat időben visszafelé történő szimulációját. Ehhez mindössze arra van szükség, hogy az összes sztöchiometriai együtttható ellentettjét használjuk, azaz az additív mérték csökkentése helyett növeléseket illetve növelések helyett csökkentéseket alkalmazzunk.

A technológiai rendszerek irányításánál az irányított megmaradási folyamat modelljét hagyományosan az irányítási folyamat "tanácsadójaként" használjuk. Egy másik alkalmazási lehetőség rejlik a direkt (időben előre haladó) és inverz (időben visszafelé haladó) szimuláció együttes alkalmazásában. Ilyen módon ugyanis minden megmaradási folyamatához egy olyan természetes szabályozó rendelhető, amely a következőképpen működik:

Az előre számolás utáni (jövőbeli) időpontban az alapjeleknek megfelelően módosított modellt visszazámolva megnézzük, hogy milyen mértékben kellene módosítani a bázis mérlegelemekhez tartozó extenzív mennyiségeket. Ezután a bázis mérlegelemekre ható változtatható aktív elemek (pl. áramok) előjelét és sztöchiometriai koefficiensét figyelembe véve meghatározzuk, hogy milyen mértékű változtatásuk szükséges a bázis mérlegelemekben megvalósítandó változások eléréséhez.

A algoritmus ugyanúgy működik azonosításhoz a különbséggel, hogy a változtatható aktív elemek nem áramokra vonatkoznak, hanem a fenomenológikus formulákhoz tartozó paraméterekre.

POLY(N-METILPIRROL)/HEXACIANO-FERRÁT FILMELEKTRÓDON FELLÉPŐ KATIONHATÁS TANULMÁNYOZÁSA

ZSOMBOK ZSOLT V. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Visy Csaba egyetemi docens

JATE Fizikai Kémiai Tanszék

A szerves vezetőpolimer filmelektrodok egyik jellemző sajátága, hogy a vezető-szigetelő átmenetet az elektroneutralitás szabálya szerint ellentétes töltésű ionoknak a rétegbe történő be-, illetve kiáramlása kíséri. A legegyszerűbb esetben az oxidált polimer pozitív töltéseit a rétegbe beáramló anionok kompenzálják. Redoxi anionnak a filmbe való beépítésével annak viselkedése megváltoztatható, és a film kationcserélő tulajdonságokat mutathat.

E jelenség vizsgálata céljából a poly(N-metilpirrol) filmelektrodot $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ ionok jelenlétében készítettük potenciállépcső technika alkalmazásával. A réteg viselkedését különböző minőségű és koncentrációjú sóoldatok jelenlétében ciklikus voltammetriás módszerrel tanulmányoztuk. A vizsgálatokat Na^+ , K^+ , Li^+ , Me_4N^+ és Et_4N^+ kloridok esetére terjesztettük ki.

Megfigyeltük, hogy a filmbe beépített redoxi anion redukciójának tulajdonítható elektrokémiai folyamat potenciálja függ a jelenlévő kationtól, melyből arra következtettünk, hogy a folyamat során a rétegbe kationoknak kell belépnie. A réteg a különböző kationok számára eltérő módon 'átjárható', mely sajátosság a polimerfilm pórusos szerkezetéből fakad.

A redoxi anionnal kiépített poly(N-metilpirrol) elektród ezen megfigyelt sajátossága alapján felmerülhet esetleges kationcserélőként történő alkalmazása.

REAKCIÓKINETIKA ÉS KATALÍZIS

A METANOL METIL-FORMIÁTTÁ TÖRTENŐ DEHIDROGÉNEZÉSÉNEK VIZSGÁLATA Cu-Zr ÖTVÖZETEN

Ifjabb Domokos László, IV. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Katona Tamás
JATE Szerves Kémiai Tanszék

Az amorf ötvözetek felhasználása katalitikus szintézisekben a kataliziskutatás egyik legújabb ágát képviseli. Számos példát ismerünk arra, hogy az amorf prekurzorból készített katalizátorok a klasszikus módszerrel előállított polikristályos megfelelőikhez képest jelentősen eltérő, különleges viselkedést mutatnak a vizsgált reakciókban. A JATE Szerves Kémiai Tanszékén modellreakciók használatával az amorf Cu-Zr ötvözeteket tesztelték az alkoholok dehidrogénezésében. Jelen munkával a célunk az volt, hogy a modellreakciók körét egy ipárilag és elméletileg is fontos reakcióra, a metanol metil-formiáttá történő dehidrogénezésére is kiterjesszük.

Cu₄₁Zr₅₉ nominális összetételű ötvözetet vizsgáltunk áramlásos mikroreaktorban. A metanol szaturálással juttattuk a vivógázba. A reaktort elhagyó gázelegy analizését hagyományos gázkromatográfias illetve kifagyasztás nélküli (on-line) tömegspektrometriás módszerrel végeztük. A mérések automatizálása és a kiértékelés számítógépes integráló-rendszer segítségével történt.

Célkitűzésünk volt a lehetséges reakcióirányok felderítése, valamint empirikus összefüggések keresése a termékösszetétel és a katalizátor állapota között. Vizsgáltuk az előkezelések, a reakciókörülmények megváltoztatásnak hatását a katalizátor aktivitására, szelektivitására és stabilitására. Terveink közt szerepelt a lehetséges reakciómechanizmus izotópjelzéses technikával történő felderítése.

Megállapítottuk, hogy az amorf Cu-Zr prekurzorból előállított katalizátor a metanol dehidrogénezésében aktív, aktivitása nagymértékben függ az előkezelés módjától. A katalizátor aktivitásával a reakcióirányok is változnak, a metil-formiát mellett szén-monoxid, szén-dioxid és víz képződik. A termékek között kis mennyiségben kimutattuk a formaldehid-metil-acetált, ami a reakció egy lehetséges intermediere. A mérési eredményekből kiderült, hogy a metil-formiát a 200-240°C hőmérséklet-tartományban nagy szelektivitással képződik.

Hidrogénezési kísérleteink fényt derítettek arra, hogy a Cu-Zr ötvözetben a felületi Cu(II) és Cu(I) állapotú réz alacsony hőmérsékleten redukálható a metanol dehidrogénezése közben *in situ* felszabaduló hidrogénnel. Az így előállított katalizátor a reakció szempontjából egyenértékű a kimerítő hidrogénezéssel kapott felülettel.

Az izotópjelzéses mérések az irodalomban leírtakhoz képest bizonyos anomáliákat mutattak. A felületre vitt deutérium mennyiségének változtatásával egy új típusú reakciómechanizmus létezését vizsgáltuk. A részletes tömegspektrometriás analízis számos általunk feltételezett mechanizmuslépést megerősített. Ez arra utal, hogy a reakciót Cu-Zr katalizátoron más alapokból kiinduló, összetettebb mechanizmus szerint írhatjuk le.

A KÁLIUM-TRISZOXALÁTO-VAS(III) ALAPÚ AKTINOMÉTER

ALKALMAZÁSI TAPASZTALATAI

Fazekas Zsolt, V. vegyész

Témavezető: Dr. Szalay Tibor

KLTE Fizikai Kémiai Tanszék

A vas(III)-oxalát alapú aktinométer régóta ismert és széleskörben alkalmazott rendszer. Vizsgálata fizikai-kémiai laboratóriumi gyakorlat keretében éppúgy alkalmas a fotokémia törvényeinek megismerésére, mint az uranil-oxaláté, annak hátrányos tulajdonságai (környezetszennyezés radioaktív anyagokkal) nélkül. A hallgatói gyakorlaton a fotokémiai reakcióban képződött vas(II) o-fenantrolinos meghatározása (hagyományos módszer) mellett bevezettük a vas(III) mennyiségének közvetlen spektrofotometriás mérését és egy ezen alapuló kiértékelési eljárást. Emiatt az általánosan használatnál jóval kisebb koncentrációjú oldatokat használtunk és reprodukálhatatlan eredményeket kaptunk. A hibaforrások (pl. a lámpa fényerőingadozása) felderítése után sikerült eredményeinket reprodukálhatóvá tenni. A tapasztalatokat hasznosítva lehetséges lesz az UV-dózis mérése folyékony sejttenyészetekben *in situ*.

A rendszer érzékenysége az oldott oxigénre korábban is ismert volt, de részletesen nem tanulmányozták a fotolízisre gyakorolt hatását. Vizsgálatainkkal bizonyítottunk veljünk, hogy az oldat oxigéntartalma bizonyos mértékben képes visszaoxidálni a fotolízis termékeként keletkezett vas(II)-t vas(III)-á, ami a maradék oxaláttal újra komplexet képez. Emiatt a fotolízis látszólag lassúbb lesz és ennek következménye a kétszakaszos bomlásgörbe. (A hallgatói gyakorlat kiértékelésében az oxigén nem szerepel, de a mérést így is tanulságosnak tartjuk, mert a hallgatók gyakorolhatják két párhuzamosan végbemenő folyamat sebességi állandóinak egyidejű meghatározását.) Ha a (nem kevert) oldat összes oxigéntartalma felemésződik, a bomlás gyorsul. A bomlásgörbe lefutása függ a vas(III)-oxalát aránytól is, nagy oxalátfelesleg esetén a bomlás a második szakaszban lelassul, akár meg is áll, majd újra felgyorsul, amikor az oxigén az oldatból elfogy. A számítógépes modell alátámasztotta az oxigén jelentőségét, további vizsgálatok szükségesek viszont a rendszer leírásához oxalátfelesleg mellett. A homogén (folyadék) fázisban végzett kísérletek megmutatták, hogy az aktinométer tulajdonságai szabályozhatók, az itt szerzett tapasztalatokat zselatíngélebe ágyazott aktinométerek készítésekor hasznosítani tudjuk.

ASZIMMETRIKUS HETEROGÉN KATALITIKUS HIDROGÉNEZÉSEK

Fodor Karina V. évf., BME

Konzulens: dr. Tungler Antal docens
BME, Szerves Kémiai Technológiai Tanszék

Napjainkban a vegyipar egyre inkább igényli az optikailag tiszta termékeket eredményező szintetikus utakat. Ez igen fontos követelmény a katalízis mindhárom, heterogén, homogén, enzimes területén.

Az optikailag aktív vegyületek redukcióval történő előállításának módjai:

1. Királis redukálószerrel felhasználásával;
2. Homogén fázisú katalitikus hidrogénezéssel, királis fémkomplex katalizátorokkal;
3. Optikailag aktív szubsztrátok diasztereoselektív redukciójával;
4. Heterogén fázisú katalitikus hidrogénezéssel, királis vegyület jelenlétében;
5. Heterogén fázisú katalitikus hidrogénezéssel, királis komponensekkel módosított katalizátorokkal.

Kísérleteinkben ez utóbbi módszert alkalmazva vizsgáltuk az etil-piruvát és a keto-pantolaktion heterogén katalitikus hidrogénezését különböző hordozós Pt katalizátorokon. Királis hozzátétként (-)-14,15-dihidrovincetint, illetve összehasonlításként (-)-10,11-dihidrocinkonidint használtunk.

Tapasztaltuk, hogy a dihidrovincetint királis hozzátét mind az etil-piruvát, mind a keto-pantolaktion hidrogénezésében a dihidrocinkonidinnel összemérhető hatású. A dihidrovincetint királis hozzátét metanolban, a dihidrocinkonidint királis hozzátét toluolban eredményez nagyobb optikai termelést.

Mind az etil-piruvát, mind a keto-pantolaktion hidrogénezésében a hőkezelt Pt/Al₂O₃/Janssen/ katalizátor adta a legnagyobb enantioszelektivitást.

Etil-piruvát hidrogénezésében dihidrocinkonidint alkalmazva királis hozzátétként, a katalizátor előzetes hőkezelése növelte a reakció optikai termelését. A katalizátornak a módosító oldatával történő előkezelésének nem volt jelentős hatása. Mind dihidrovincetint, mind dihidrocinkonidint hatására nőtt a hidrogénezés sebessége.

Keto-pantolaktion hidrogénezésében a katalizátor hőkezelése, illetve a módosító oldatával való előkezelése egyaránt növelte az optikai termelést.

Ahhoz, hogy a reakció enantioszelektivitását eredményező katalizátor-módosító-szubsztrátum kölcsönhatások természetét felderíthessük, további kísérletek szükségesek. Ezek során vizsgálni fogjuk a hidrogénezés enantioszelektivitásának és sebességének a dihidrovincetint királis hozzátét, az ecetsav adalék mennyiségétől, a konverziótól való függését. Méréseket végzünk, hogy megismerhessük a dihidrovincetint jelenlétében végzett hidrogénezések kinetikáját.

A CO ÉS A H₂O REAKCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA HORDOZÓS Ir KATALIZÁTOROKON

Fodor Krisztina, V. évf. vegyész

Témavezető: Erdőhelyi András docens
József Attila Tudományegyetem Szilárdtest és Radiokémiai Tanszék, Szeged

A CO különböző reakcióit, valamint a CO és a fémek kölcsönhatását az utóbbi időkben sokan és nagyon intenzíven tanulmányozták, de a H₂O + CO reakcióra különösképpen a Kölbl-Engelhardt reakcióra ($4\text{CO} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CH}_4 + 3\text{CO}_2$) lényegesen kevesebb figyelmet fordítottak. Jelen munkában részletesen vizsgáltuk a H₂O + CO reakciót hordozós Ir katalizátorokon. A reakciómechanizmus felderítésének érdekében tanulmányoztuk a CO adszorpcióját és deszorpcióját a reakcióban is használt mintákon.

A katalizátorokat a hordozóknak (SiO₂, Al₂O₃, TiO₂, MgO) H₂IrCl₆·H₂O oldattal történő impregnálásával állítottuk elő. A katalizátorok fémtartalma minden esetben 5% volt. A minta előkezelése a reaktorban történt; 673 K-en 30 percig oxidáltuk, majd ugyanezen a hőmérsékleten 60 percig redukáltuk a katalizátort.

A kinetikai vizsgálatokat áramlásos reaktorban végeztük. A 10% CO-ot tartalmazó Ar-t desztillált vízzel töltött és fűtött gázmosón buborékoltattuk át. A kiindulási anyagokat és a termékeket Chrompack 9001 típusú gázkromatográfval analizáltuk.

A CO adszorpcióját és hőmérséklet-programozott deszorpcióját (TPD) impulzus reaktorban vizsgáltuk. A katalizátorok diszperzítését H₂ titrálással határoztuk meg.

A szobahőmérsékletű CO adszorpció után a mintát 24 K/perc fűtéssebességgel 1100 K-ig fűtöttük és a deszorbeálódó termékeket detektáltuk. CO és CO₂ deszorpciót 373 K felett már észleltünk, de még 823 K felett is detektáltunk deszorbeálódó gázokat. Az adszorpció hőmérsékletének növelésével a megkötődött CO mennyisége csak kis mértékben csökkent. Például az Ir/SiO₂ esetében szobahőmérsékleten a CO/Ir_s arány = 0,9, 673 K-en ez csak 0,55. 523 K felett a CO adszorpciója során CO₂ is keletkezik.

A CO + H₂O reakcióban H₂-en és CO₂-on kívül metán és egyéb szénhidrogének (etilén, etán, propán) képződését észleltük. Vizsgálataink szerint a képződött metán mennyisége a H₂O koncentrációjának növelésével nőtt, a CO koncentrációjának növelésével viszont csökkent.

Tanulmányoztuk a hordozó hatását is a reakcióra. Megállapítottuk, hogy az Ir/TiO₂-on több mint egy nagyságrenddel gyorsabban játszódik le a reakció mint az Ir/SiO₂ vagy az Ir/MgO mintákon. Metánképződés szempontjából leghatékonyabbnak a TiO₂ bizonyult. A MgO és a SiO₂ hordozós mintákon szénhidrogének csak nyomokban keletkeztek.

Eredményeink alapján részletesen tárgyaljuk a CO + H₂O reakció mechanizmusát is.

AZ NO BONTÁSÁBAN ALKALMAZOTT ZSM-5 TÍPUSÚ ZEOLITKATALIZÁTOROK VIZSGÁLATA

Fudala Ágnes V.éves vegyészhallgató

Témavezetők: Dr. Kiricsi Inre, Dr. Halász János
JATE Alkalmazott Kémia Tanszék, Szeged

A gépjárművek kipufogógázai, az erőművi füstgázok és az ipari véggázok viszonylag nagy mennyiségben tartalmazzák a környezetre káros nitrogén-oxidokat, melyek eltávolítása fontos környezetvédelmi feladat. Az NO_x-emisszió csökkentési lehetőségeinek elemzésével megállapítható, hogy az eltávolítás leghatásosabb módszere a katalitikus redukció. A módosított zeolitok katalitikus hatással rendelkeznek az NO_x-emisszió csökkentésére szolgáló szelektív katalitikus (SCR) és nem-szelektív katalitikus (NSCR) redukciós reakciókban, de elősegíthetik az NO bomlását is. Az irodalmi adatok szerint elsősorban a Cu-ZSM-5 rendelkezik nagy aktivitással, de a különböző átmenetifémion-tartalmú zeolitok is potenciális katalizátorok, tulajdonságaik meghatározása alapvető jelentőségű.

Munkánk során elkészítettünk Na-, illetve H-ZSM-5 alapmintából kiindulva három-három, különböző ionokkal (Co, Ni és Fe) cserélt zeolitot két, lényegileg eltérő ioncsere módszerrel (hagyományos és szilárd fázisú ioncsere).

Az ioncserélt zeolitokat fizikai-kémiai módszerekkel jellemeztük. Röntgendiffraktometriás, infravörös-spektroszkópiás és BET-felület vizsgálatokkal megállapítottuk, hogy a szilárd fázisú ioncserével készített zeolitok porüstérfogata és kristályossága nem csökkent a kiindulási Na-ZSM-5, illetve az oldatban ioncserélt változatokkal összevetve.

Derivatográfias vizsgálataink alapján megadtunk egy valószínű mechanizmust a szilárd fázisú ioncsere közben lejátszódó folyamatokra.

Infravörös-spektroszkópiás mérések alapján bizonyítottuk, hogy a szilárd fázisú ioncserével előállított zeolitok Brønsted savassága csekély, azonban mind az oldatban, mind a szilárd fázisban ioncserélt mintákon mindkét típusú (Brønsted és Lewis) savcentrumok detektálhatók voltak.

Az NO adszorpciójakor in situ felvett infravörös spektrumok különbözősége a mintákon lejátszódó adszorpciós folyamatok és felületi átalakulások különbözőségére vezethető vissza, de ezt a savasságban kimutatott eltérések is értelmezhetik.

A [TRISZ(2,2'-BIPIRIDIL)-RUTÉNIUM(III)] KATION REAKCIÓJA VÍZZEL RuO_2 KATALIZÁTOR JELENLÉTÉBEN

Gulyás Éva

V. évf. vegyész szakos hallgató

Témavezető: Dr. Körtvélyesi Tamás egy.adj.

József Attila Tudományegyetem
Fizikai Kémiai Tanszék

Napjainkban, amikor a fosszilis energiahordozók fogytán vannak, és környezetünk védelme egyre fontosabbá válik, előtérbe kerül a környezetbarát energiahordozók kutatása: részben a természeti erők felhasználásával, részben pedig környezetkímélő mellékterméket eredményező energiaforrások felkutatásával. Az általunk vizsgált reakció kétszeresen is eleget tesz ezen elvárásoknak. A víz oxidációjának olyan módjáról van szó, amely során hasznosítható a napenergia, reakciótermékként pedig hidrogént kapunk, ami köztudottan a legkörülményesebb energiaforrás.

Az általunk vizsgált gyors reakcióban $\text{Ru}(\text{bipi})_3^{2+}$ -val oxidáltuk a vizet, RuO_2 kolloid katalizátor jelenlétében. A reakciósebességi együtthatót és az aktiválási energiát határoztuk meg különböző feltételek mellett. Változtattuk a katalizátor mennyiségét, a katalizátort stabilizáló polimer mennyiségét és minőségét. Emellett vizsgáltuk az ionerősség hatását a reakciósebességre, ill a kolloid katalizátor stabilitására. A méréseket HI-TECH SF-51 stopped-flow spektrofotométerrel végeztük.

Vizsgálataink során megállapítható volt, hogy a reakció elsőrendű kinetika szerint játszódik le a [Trisz(2,2'-bipiridil)-ruténium(III)]kationra nézve ill. a RuO_2 -ra nézve is.

TÖBBVÁLTOZÓS PARAMÉTERBECSLŐ PROGRAM FEJLESZTÉSE SZUBPIKOSZEKUNDUMOS REAKCIÓK MÉRÉSI EREDMÉNYEINEK DEKONVOLÚCIÓS KIÉRTÉKELÉSÉHEZ

Holpár Péter, IV. évf. vegyész

Témavezető: Keszei Ernő
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A szubpikoszekundumos reakciók jellegzetessége, hogy az átmeneti termékek koncentrációja nem mérhető közvetlenül a rendelkezésre álló elektronika lassúsága miatt. Ilyen reakció az általunk tanulmányozott elektronszolvatáció is, így az átmeneti termékek megfigyeléséhez speciális időfelbontásos módszer szükséges, melynek bemutatására az előadás elején kerül sor.

A mérések kiértékelésének célja a feltételezett reakciómechanizmus sebességi állandóinak, az átmeneti termékek moláris abszorpciós együtthatóinak meghatározása, pontosabban ezen paraméterek statisztikai becslése.

Feladatomban az volt, hogy egy, már meglévő programot továbbfejlesztve, lehetővé tegyem eltérő adatszámú mérések egyszerre történő kiértékelését, illetve a mérés módszeréből adódóan kísérletileg meghatározott mérési hiba súlyfüggvényként való figyelembevételét. Ugyancsak célul tűztük ki, hogy az egyes fizikai mennyiségek a programban egyaránt választhatóak legyenek paraméterként, illetve konstansként, mely a felhasználót megkíméli a program gyakori átírásától és az ismételt fordításoktól, továbbá lehetővé teszi különböző kezdeti értékekkel történő futtatások automatikus elvégzését.

Bár a program eredendően reakciókinetikai mérések kiértékelésére készült, a megfelelő szubrutinok kisebb átalakításával tetszőleges nem-lineáris többváltozós paraméterbecslés elvégezhető, teljes statisztikai jellemzéssel együtt.

A továbbfejlesztett programmal tiszta metanol fotoionizációjakor keletkező elektronok solvatációs mechanizmusát vizsgáltuk. Sikertelenül bizonyítani, hogy a mért kinetikai görbék értelmezhetők anélkül, hogy a mechanizmusban szereplő elektronállapotok abszorpciós spektrumairól feltételeznénk a reakció közbeni folytonos kékcititolódást.



KÉTDIMENZIÓS KÉMIAI HULLÁMOK A SALÉTROMSAV- JODID RENDSZERBEN

KÁROLY TAMÁS
IV. ÉVF. VEGYÉSZ

TÉMAVEZETŐK: DR. NAGY ISTVÁN DR. BAZSA GYÖRGY
EGYETEMI ADJUNKTUS TANSZÉKVEZETŐ EGYETEMI TANÁR

Munkánk során a jodid-salétromsav rendszerben különböző komplexképzőkkel kialakuló kétdimenziós hullámjelenségeket vizsgáltuk. Kísérleteinket nyitott petri-csészében végeztük levegőn, majd inert atmoszférában. A reakcióelegy összetétele a kísérletek során a következő volt:

nátrium-jodid: 2×10^{-3} M

salétromsav: 4.0 M

keményítő: 0.2 %

hidrazin-szulfát: 2×10^{-4} M

A reakció indítására nátrium-nitrit oldatot csepegtettünk az oldat közepére. A reakcióban szabályos kör alakú kémiai hullám indult el, amely néhány perc múlva torzult és speciális hullámterjedés kezdődött el, sejtyszerű hullámalakzatok alakultak ki. A struktúrák alakja és mérete függ a rétegvastagságtól, a függés 0.5 és 1.5 mm között tapasztalható. Ezen vastagságok alatt és fölött nem tapasztaltunk sejtyszerű szerkezeteket. A struktúrák élettartama 5-8 perc levegőn, de 12-15 percre növelhető inert atmoszféra használatával.

Magyarázatot kerestünk a reakcióban fellépő struktúrák keletkezésére és szerkezetére. Megállapítottuk a struktúrák kialakulásáért az oldatban megjelenő trijodid-keményítő komplex és a jodid ion a felelős, mely részecskéknek jelentősen különbözik a diffúziós állandója ezáltal az általuk kiváltott kettős-diffúziós konvekció, illetve az emiatt fellépő keveredésből a felületi feszültség révén kialakuló Marangoni-típusú konvekció a felelős.

Bizonyos tekintetben hasonló a helyzet a Turing-struktúrák kialakulásánál a klorit-jodid-malonsav-keményítő rendszerben, illetve újabb kutatási eredmények a konvekció-típusok bizonyos szerepét vizsgálják a Turing-struktúrák kialakulása során. Ezekben a vizsgálatokban nagy segítség lehet a már eddig vizsgált reakciók tanulmányozása során kidolgozott gyakorlati és elméleti módszerek eszköztára.

Káosz szabályozása mesterséges neuronhálózattal

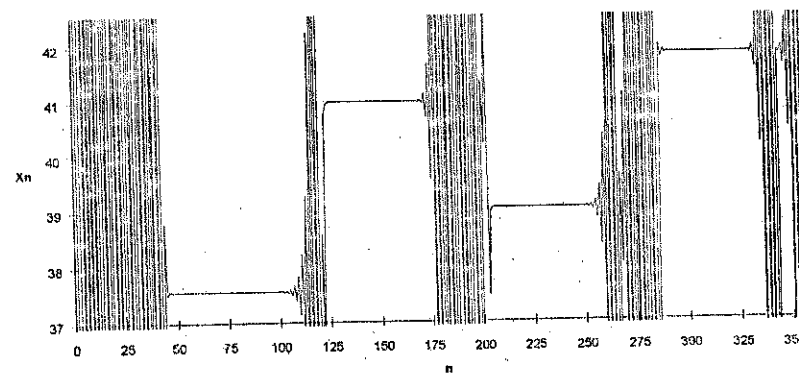
Kiss István V. vegyész hallgató
Témavezető: Dr. Gáspár Vilmos
KLTE, Fizikai Kémiai Tanszék

A kaotikus rendszerek viselkedése hosszútávon előrejelezhetetlen, ezért sokáig szabályozhatatlannak tartották őket. 1990-ben azonban Ott, Grebogi és Yorke kidolgoztak egy szabályozási algoritmust, melynek lényege: egy kontrollparaméter kicsiny változtatásával stabilizáljuk a kaotikus attraktorban lévő, végtelen számú instabil periódikus pályák egyikét. Munkámban az algoritmus egyszerűsített változatát alkalmaztam (Peng, Petrov és Showalter, 1991) amely jól használható alacsony dimenziójú káosz szabályozására.

Mesterséges neuronhálózatokat széleskörűen használnak különböző, bonyolult kémiai feladatok (például spektrumanalízis, HPLC optimalizálás, kvantunkémiai számítások) elvégzésére. A káosz mesterséges neuronhálózattal történő szabályozására Alsing és munkatársai adtak meg egy lehetséges algoritmust. Dolgozatomban ezt fejlesztettem tovább a Peng-féle káoszszabályozási eljárás alapján. Egy mesterséges neuronhálózattal megtanítjuk a kaotikus rendszer Poincaré-metszetét egy adott kontrollparaméter széles tartományában, s ezt a hálózatot használjuk a káosz szabályozására.

Az alkalmazott módszer előnye, hogy tetszőleges instabil pálya szabályozását teszi lehetővé (lásd ábra).

A Kaotikus Autokatalátorban fellépő káosz szabályozása a Poincaré-metszet különböző fix pontjain (sorrendben $X_f=37.5, 41.0, 39.0, 41.5$) esetén egy 2-6-6-1 neuronhálózat segítségével



A módszer hátránya, hogy a hálózat nem mindig pontosan az általunk megadott pályát stabilizálja. Egy további egyszerű algoritmus segítségével azonban a rendszert könnyen a kívánt pályára terelhetjük. A káosz mesterséges neuronhálózattal végzett szabályozását a kémiai káosz egyszerű modelljén, a Kaotikus Autokatalátoron teszteltem.

AUTOKATALITIKUS HULLÁMOK A SALÉTRÓMSAV-FORMALDEHID RENDSZERBEN

Komlósi Andrea
V. éves vegyész

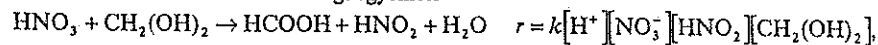
Témavezetők:

Dr. Póta György, egyetemi docens
KLTE Fizikai Kémiai Tanszék, Debrecen

Dr. Geoffrey Stedman, Reader in Inorganic Chemistry
Department of Chemistry, University College of Swansea, Swansea, UK

A folyadékfázisú kémiai reakciókban terjedő reakciófrontok, más néven kémiai hullámok iránt — fizikai, kémiai és biológiai jelentőségüknél fogva — nagy érdeklődés nyilvánul meg. A kémiai hullámok rendszerint autokatalitikus rendszerekben jelentkeznek, és terjedési sebességükkel valamint térbeli koncentrációprofiljukkal jellemezhetők. A hullámparaméterek és a homogén reakció mechanizmusa közötti kapcsolat felderítésével bepillantást kapunk a hullámterjedés módjába, egyúttal lehetőségünk nyílik a mechanizmus megerősítésére, esetleg elvetésére is.

Ebben a munkában a formaldehid salétromsavas oxidációjában általunk felfedezett autokatalitikus kémiai hullám vizsgálatáról számolunk be. Horváth és munkatársai¹ szerint az oxidáció sztöchiometriai és sebességi egyenlete



az autokatalizátor a salétromossav. Kolmogorov, Petrovskij és Piszkunov² elmélete alapján megmutattuk, hogy e kinetikának a

$$v = 2(Dk[\text{H}^+]_0[\text{NO}_3^-]_0[\text{CH}_2(\text{OH})_2]_0)^{\frac{1}{2}}$$

képlettel leírt terjedési sebesség felel meg, ahol D a salétromossav diffúziós együtthatója. A hullámprofil inflexiós pontbeli meredekségét egy vele arányos mennyiséggel, a rögzített térkoordinátánál értelmezték

$$r_m = 0,247k[\text{H}^+]_0[\text{NO}_3^-]_0[\text{CH}_2(\text{OH})_2]_0^2$$

maximális reakciósebességgel jellemeztük.

A hullámokat 1×1 cm-es termosztált küvetében keltettük oly módon, hogy a reakcióelegy tetejére autokatalizátort termelő, dodekánban oldott butil-nitritet rétegeztünk. A szintelen oldatban mozgó, *szabad szemmel nem látható* hullámfront mozgását spektrofotometriásan, a kívetára adott pontjára irányított keskeny sugárral detektáltuk. A fenti képleteket a többváltozós legkisebb négyzetek módszerével illesztettük a kísérleti adatokhoz, és ebből a $k=1,5 \times 10^{-3}$ (mol dm⁻³)⁻³ min⁻¹ és $D=1,5 \times 10^{-5}$ cm² s⁻¹ értékeket kaptuk. Ezek az értékek realizitkusak, az illeszkedés minősége pedig megfelel a kémiai hullámok területén érvényes jelenlegi követelménynek. Vizsgálataink alátámasztják a Horváth és munkatársai¹ által javasolt mechanizmus főbb pontjait.

1. M. Horváth, I. Lengyel, G. Bazsa, *Int. J. Chem. Kinet.* **5**, 57 (1986)

2. A. H. Колмогоров, И. Г. Петровский, Н. С. Пискунов, *Вол. МГУ, Математика и механика* **1**, 1-26 (1937)

A vízdoldható Vaska-komplex előállítása és vizsgálata

KOVÁCS JÓZSEF V. éves vegyészhallgató
Kossuth Lajos Tudományegyetem
Fizikai Kémiai Tanszék
Debrecen

Témavezető: Dr. Joó Ferenc egyetemi tanár

A homogénkatalitikus rendszerek jellemző tulajdonsága, hogy képesek kismolekulák aktiválására. Számos iparilag is fontos reakción túlmenően biológiai membránok módosításában is fontos szerepet játszanak. Utóbbi esetben katalitikus hidrogénezés és izomerizáció révén a membránok fluiditását változtathatjuk meg. A természetben is megtalálható kismolekulák (N₂, O₂, CO₂) aktiválása révén egyes homogénkatalitikus reakciók biológiai folyamatok modelljének is tekinthetők.

Egyik ilyen katalitikus hatású vegyület a Vaska-komplex: transz-IrCl(CO)(PPh₃)₂, mely éppen az oxigénhordozó tulajdonságáról vált híressé. Reverzibilis oxigénhordozó sajátsága ellenére nem tekinthető teljes biológiai modellnek, mivel vizes közegben nem oldódik. Ezért előállítottam a vízdoldható Vaska-analógot, a transz-IrCl(CO)(TPPMS)₂ komplexet [TPPMS=P(C₆H₅)₂(C₆H₄SO₃Na)(H₂O)₂]. Ez a vegyület oldékonysága és hidrogénező tulajdonsága révén biológiai membránok homogén rendszerben történő módosításra is fölhasználható lehet.

Elsőként Végvári Imre állította elő, aki szakdolgozatában (1975) igen bonyolult, körülményes előállításról számolt be. Kidolgoztam egy igen egyszerű, jó hozamú előállítási reakciót, amely a Vaska-komplex PPh₃ csoportjával egyszerű szubsztitúcióján alapul. A terméket infravörös és ultraibolya-látható spektruma alapján jellemeztem.

Ultraibolya-látható spektrumának változása alapján megvizsgáltam a vízdoldható irídium-vegyület reakcióját molekuláris hidrogénnel és oxigénnel, vízben és 2-metoxi-etanolban egyaránt, több reverzibilitási cikluson keresztül. Előállítottam az oxigéntartalmú O₂IrCl(CO)(TPPMS)₂ vegyületet is, melyet infravörös spektruma alapján azonosítottam.

A vízdoldható Vaska-komplex katalitikus hidrogénező aktivitását néhány egyszerű karbonsav redukcióján keresztül vizsgáltam és gázvolumetriás méréssel követtem.

Modell membránok (liposzómák) hidrogénezését is vizsgáltam, melynek eredményéről gázkromatográfiás méréssel kaptam információt.

AZ ALLIL-ALKOHOL ÁTALAKULÁSA Cu-Zr AMORF ÖTVÖZETBŐL KIALAKULÓ KATALIZÁTORON

Martinek Tamás IV. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Katona Tamás
JATE Szerves Kémiai Tanszék

Az amorf ötvözetekből készített katalizátorok irodalma a közelmúltban látványos növekedésen ment át, mivel számos esetben különleges katalitikus tulajdonságokkal rendelkező katalizátorokat készítettek ezekből az anyagokból. A JATE Szerves Kémiai Tanszékének egyik központi témája a szerves vegyületek átalakulásainak tanulmányozása rézkatalizátorokon. Az amorf Cu-Zr ötvözetekből készített katalizátorok vizsgálata így újdonsága mellett is jól illeszkedik a tanszéki kutatási irányokba. Korábbi mérések megmutatták, hogy a Cu-Zr ötvözetek az izopropanol mint modellvegyület dehidrogénezésében aktívnak bizonyultak. Ez indokolta a modellvegyületek körének kiterjesztését az allil-alkoholra, mivel ez a molekula nemcsak dehidrogéneződésen, de izomerizáción is átmehet.

Jelen munka célja tehát, a Cu-Zr ötvözetek katalitikus tulajdonságainak tesztelése az allil-alkohol modellvegyület reakcióinak vizsgálatán keresztül, azaz a katalizátor jellemzése a modellreakcióban mutatott viselkedése alapján. Ehhez szükség volt a reakcióirányok felderítésére, a katalizátor aktivitásának és szelektivitásának vizsgálatára különböző reakciókörülmények között, különböző előkezelések, aktiválások után. Ahhoz, hogy a kapott adatokat a katalizátor jellemzésére felhasználhassuk, összehasonlítást végeztünk egyéb rézkatalizátorokkal is. A katalizátorok további jellemzésére elektronmikroszkópiát és *in-situ* dinitrogén-oxidos részfelület-mérést alkalmaztunk. Deutériumban végzett mérésekkel vizsgáltuk a reakció lehetséges mechanizmusát.

A méréseket átáramlásos folyamatos mikroreaktorban végeztük. Az allil-alkoholt szaturálással juttattuk a hidrogén vívőgázba. A termékek analizését automatikus mintavevő rendszer segítségével gázkromatográfiával végeztük. A deutériumban végzett mérésekhez GC-MS technikát alkalmaztunk.

Megállapítottuk, hogy az amorf Cu-Zr ötvözetből készített katalizátor működése alapvetően eltér az összehasonlításra alkalmazott, Cu-por és Cu-Cab-O-Sil katalizátorokétól. Az azonos részfelületű de különböző katalizátorokon mért eltérő szelektivitások arra utalnak, hogy a katalizátorok működését inkább a részfelület struktúrája (minősége), mint nagysága befolyásolja. Külön kiemelendő, hogy a Cu-Zr ötvözeteken a reakció és az aktiválás hatására az eredeti Cu(0)-felület kb. 500-szorosára növekszik, amely természetesen a felületi struktúra alapvető megváltozását eredményezi. A deutériumban végzett vizsgálatok termékeinek analízise arra utal, hogy a reakció közti-terméke akrolein, amelynek a felületi hidrogénnel történő reakciója vezet a propionaldehid és a n-propanol képződéséhez.

Az elektronmikroszkópiás felvételek alapján a működő Cu-Zr katalizátort úgy jellemezhetjük, mint egy közelítőleg sík ZrO₂-felületen elhelyezkedő 0.05-2 μm átmérőjű rézszemcsék együttesét.

A NORMÁL-BUTÉNEK ÉS A C₄-FRAKCIÓ ÁTALAKULÁSAINAK VIZSGÁLATA V₂O₅-Sb₂O₄ KEVERÉKOXID KATALIZÁTOROKON

Schmél Zoltán, V. évf. biológia-kémia szak

Témavezető: Dr. Halász János egyetemi docens
JATE Alkalmazott Kémiai Tanszék

A petrokémiai iparban, a különböző - termikus és katalitikus - eljárásokat alkalmazó krakküzemek melléktermékeként, 4-10%-os mennyiségben képződik a C₄-frakció, melynek az egyedi komponensekre történő feldolgozása az elválasztás bonyolultsága miatt eléggé nehézkes és gazdaságtalan.

A C₄-frakció - mely főként normál- és izo-buténeket, normál- és izo-butánt, továbbá kisebb mennyiségben butadiént tartalmaz - gazdaságos hasznosításának egyik lehetősége a szelektív oxidáció, ugyanis ilyen reakciókkal az egyes komponensekből fontos ipari intermedierek és végtermékek állíthatók elő.

Munkánk során mikrokatalitikus impulzusreaktorban meghatároztuk a különböző összetételű Sb₂O₄-V₂O₅ keverékoknak a butének és a C₄-frakció oxidációjában kifejtett aktivitását és szelektivitását 250, 300 és 350 °C hőmérsékleteken.

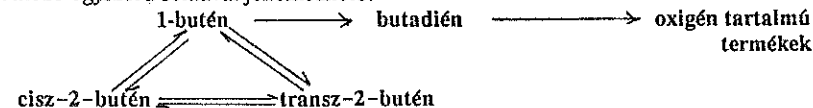
A katalizátorok összetételének hatását tanulmányozva megállapítottuk, hogy a legnagyobb butadién szelektivitás a V:Sb = 1:5 és 1:9 összetételű keverékokon érhető el, míg a V:Sb = 1:1 összetételű oxid az 1-butén kettőskötés izomerizációjában rendelkezik nagy aktivitással.

A kitüntetett tulajdonságokkal rendelkező katalizátorok derivatográfias és röntgendiffrakciós vizsgálata bizonyította, hogy az adott keverékok rendszerben új kristályfázisok nem alakulnak ki; és az antimonhoz rendelhető felületi redox centrumok aktívak a dehidrogénezési, a V₂O₅-hoz rendelhető savas centrumok pedig az izomerizációs reakciókban hatásosak.

Az oxidatív dehidrogénezés mechanizmusának tárgyalásakor abból kell kiindulni, hogy a két butén-izomer viselkedését összevetve megállapítható, hogy a 2-butén oxidációban mind a konverzió, mind a szelektivitás messze alatta marad az 1-butén reakciójában tapasztalt értékeknek. Véleményünk szerint mindez a katalizátor Brønsted savcentrumain lejátszódó kettőskötés izomerizációval hozható kapcsolatba. Az izomerizáció az általunk alkalmazott rendszerben a maximális felületi savassággal rendelkező keverékokon játszódik le a legnagyobb sebességgel, s ez a katalizátor a 2-butén oxidációjában is maximális aktivitást mutat. Az izomerizációs lépésben a 2-butén karbónium-kation közti-termékek keresztül 1-buténné alakul, amely vagy deszorbeálódva és újból adszorbeálódva az oxidációs centrumon, vagy a felületen az oxidációs centrumhoz vándorolva képes π-allil-intermediereken keresztül butadiénné alakulni.

Az a tapasztalat, hogy 623 K fölött a 2-buténből képződő butadién tovább oxidálódik, az 1-buténből képződő viszont nem, csak úgy magyarázható, hogy az 1-butén a gyors oxidációs reakcióban elfogyasztja a felületi aktív oxigént, ezzel szemben a 2-butén lassú reakciójában a feleslegben maradó aktív oxigének reakcióba lépnek a butadiénnel is.

A butének vanádium-antimon keverékokon végbemenő oxidatív dehidrogénezése a következő egyszerű sémával jellemezhető:



AZ IONVEZETÉS AKTIVÁLT KOMPLEXEINEK TERMODINAMIKAI ES KINETIKAI
JELLEMZŐI

I. Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+ , Cl^- , Br^- , I^- ES H_3O^+ IONOK VEZETÉSE
VÉGTELEEN HIG OLDATBAN 0-60°C HŐMÉRSÉKLETTARTOMÁNYBAN

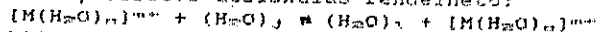
Török Imre, V. évfolyam

Témavezető: Dr. Muzsnay Csaba
Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyész-mérnöki Kar
Kolozsvár

A villamos vezetés aktiválási energiája, de különösen az ionmozgékonyyságra vonatkozó aktiválási energia alapvető adat az ionvezetés aktivált komplexeinek jellemzésére. Előzetes vizsgálatakból kiderült: az aktiválási energia hőmérséklet és töménység függése és ez szükségessé tette az aktiválási folyamat hőmérsékletfüggésének pontos megállapítását. Az abszolút reakciósebesség-elmélet alapján megfogalmazott sebességi állandó (k_a), mely első közelítésben az ionmozgékonyysággal egyenlő, a következő összefüggéssel adható meg:

$$k_a = \chi \cdot \frac{k \cdot T}{h} \cdot e^{-\frac{\Delta S^\ddagger_{akt}}{R}} \cdot e^{-\frac{\Delta H^\ddagger_{akt} - z(E_a)}{RT}}$$

ahol k -Boltzman állandó, h -Planck állandó, R -egyetemes gáz-állandó, T -abszolút hőmérséklet, ΔS^\ddagger_{akt} -aktiválási entropia-változás, ΔH^\ddagger_{akt} -aktiválási entalpia-változás, E_a -aktiválási energia, χ -transzmissziós tényező. Reakciókinetikai megközelítésben a k_a sebességi állandóhoz a következő térhatására sokszor végbemenő "ütközés", illetve átalakulás rendelhető:



Az aktivált komplex termodinamikai adatainak kiértékelése ΔH^\ddagger_{akt} -al kezdődik a rendelkezésre álló E_a adatokból. Két módszer felhasználására került sor. A ΔH^\ddagger_{akt} illetve ΔS^\ddagger_{akt} csak kísérletekben különböznek az alkalmazott módszertől függően. A ΔG^\ddagger_{akt} , k_a és k_a^{-1} -ra vonatkozó adatok nem függenek a megválasztott módszertől. A ΔH^\ddagger_{akt} és ΔS^\ddagger_{akt} az E_a -hoz hasonlóan hőmérsékletfüggők és ez a körülmény a folyamat bonyolultságára utal. A H_3O^+ ion kicsiny E_a és ΔH^\ddagger_{akt} -ja alapján nagyszámú hatékony ütközést bonyolít le a tér hatására, ezt bizonyítja az exponenciális tag legnagyobb értéke. Az üsszüttközések száma általában kisebb mint a többi ion esetén azonban a hatékony ütközések az üsszüttközésekhez viszonyított aránya a H_3O^+ esetén sokkal nagyobb mint a többi ion esetén. A H_3O^+ ion ΔS^\ddagger_{akt} -ja nem utal sem különleges vezetési komplex kialakulására sem prototróp vezetésre az aktivált komplex kialakulásának szakaszában.

KOORDINÁCIÓS KÉMIA

BISZ(2-IMIDAZOLIL)CSOPORTOT TARTALMAZÓ PEPTIDSZÁRMÁZÉKOK ÁTMENETIFÉM-KOMPLEXEINEK EGYENSÚLYI VIZSGÁLATA

Ágoston Károly IV. biológia-kémia

Vizsgálataim során biológiailag aktív imidazol csoportot tartalmazó vegyületcsoporttal foglalkoztam. Kobalt(II) BIM, BIMA és BIP rendszerek törzskomplexeit vizsgálva, és a kapott eredményeket a Cu(II) és Zn(II) ionokkal összevetve megállapítható, hogy a másik két átmenetifémionhoz hasonlóan viselkednek. Jelen esetben is bisz és mono komplexek keletkeztek nagy mennyiségben. A Co(II) komplexek stabilitása a Cu(II) komplexeknél kisebb a Zn(II) komplexeknél viszont nagyobb. Protonált komplexek is képződtek alacsony pH értéknél a BIMA esetén. Ezek deprotonálódási állandói megfelelnek a NH_3^+ csoport pK-jának. Hidroxo komplexek létezését is kimutattuk a BIM és a BIP esetén pH ~ 9 körüli értéknél. A biszkomplexek vizsgálata során tapasztaltuk, hogy a második ligandum belépése gátolt, ez a magas $\lg(K_1/K_2)$ értékekkel magyarázható. Ez a gátlás a BIP esetén a legnagyobb, ami a karboxilát anion axiális koordinációjára vezethető vissza.

A komplexek szerkezetét spektrofotometriásan vizsgáltuk, és oktaédes térállást valószínűsítettünk a többi átmenetifémhez hasonlóan.

A Cu(II) - BIM, BIMA, BIP vegyeskomplex rendszereknél megállapítottuk, hogy a CuAB összetételű komplexek képződése a kedvező. Megfelelő ligandumok esetén protonált komplexek képződtek. A kialakuló CuAB komplexek stabilitása a - más munkákban már megállapított módon - a $\lg(K_1/K_2)$ értékek növekedésével növekszik. Hasonlóan levonható az a tapasztalat is, hogy a vegyeskomplexbépződésnél az aromás N és a fenolos O koordinációja kedvező.

A pirrol hidrogén ionizációját pH ~ 9-10 körüli értéken a BIMA-HIS és a BIP-B lig esetén igazolni tudtuk. Ez azt mutatja, hogy a pirrol hidrogén deprotonálódása a szabad ligandumnak megfelelő pH érték alatt ~ 4,5 lg-egységgel lezajlik. Ezt a folyamatot legkevésbé a tiron segíti elő, mivel csökkenti a Cu(II) és az imidazol π felhője közötti kölcsönhatást.

Témavezető: Dr. Várnagy Katalin tudományos munkatárs

A RÉZ(II)-2-AMINO-1,6-ANHIDRO-2-DEOXI- β -D-GLÜKOPIRANÓZ KOMPLEX LOKÁLIS SZERKEZETÉNEK MEGHATÁROZÁSA EXAFS MÓDSZERREL

Csányi István, IV. évf. kémia-fizika

Témavezető: Dr. Nagy László

József Attila Tudományegyetem Szerveletlen és Analitikai Kémia Tanszék

A szénhidrátok és származékaik biológiai jelentőségét a hosszú ideje tartó, széleskörű kutatások alapjaiban tisztázták. Példaként álljon itt néhány a természetben játszott szerepeikből: energiahordozók, vázanyagok, szivglükózok, ribonukleinsavak, alkotórészei stb.

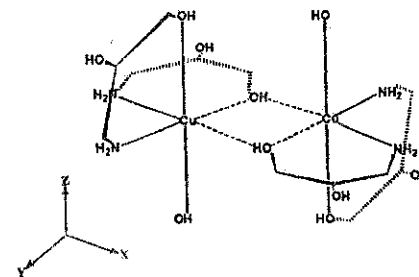
Az aminocukrok a legelterjedtebb természetes szénvegyületek közé tartoznak, nitrogén és oxigén donoratomjaik révén fémionkoordinációra képesek. Kimutatták, hogy a legstabilisabb komplexeket ezekkel a ligandumokkal a réz(II) képezi. Az egymagvú komplexek mellett dimer komplexek is képződnek. ESR, CD és UV-látható spektroszkópiás vizsgálatok szerint a D-glükózamin pH=6-9 kémhatású oldatban az aminocsoport nitrogénatomján és egy deprotonált hidroxilcsoporton keresztül koordinálódik a réz(II)-höz.

A réz(II) ion 1,6-anhidro-aminocukrok [91Ko, 94Ko] komplexeinek egyensúlyi vizsgálata kapcsán Kozłowski és mtsai. felfigyeltek egy szokatlan szerkezetű dimer részecske képződésére. A dimer részecskék már viszonylag alacsony pH-értéken (pH ~ 5) megjelennek az oldatban, de még pH 7.5 - 8 körül is megfigyelhetők. A mért potenciometriás (pH-metriás) titrálási görbék dimer komplexek feltételezésével jól illeszthetők voltak. Ugyanakkor az oldat "ESR-csendes", azaz a paramágneses réz(II) ionok antiferromágneses kölcsönhatásban vannak egymással.

A 2-amino-1,6-deoxi- β -D-glükopiranoz ligandum réz(II) komplexének lokális szerkezetét pH 5.5 környékén vizes közegben tanulmányoztuk Cu-K-XANES és EXAFS módszerekkel. Az EXAFS spektrum elemzése azt mutatta, hogy a komplex hatos koordinációs számú, a Cu-O_{eq} és Cu-O_{ax} kötéstávolságok pedig 193 és 220 pm nagyságúak.

Az EXAFS Fourier transzformációkon világosan láthatók csúcsok, amit a nem-kötött Cu...C és Cu...Cu kölcsönhatásoknak tulajdonítható, jelezve a cukor ligandumok kelát gyűrűinek kialakulását, valamint a részecskék dimerizálódását. Az utóbbi kötéstávolságok 275 és 299 pm nagyságúak.

A kutatások jelenlegi állása, a talált szerkezeti adatok, valamint logikai ill. szimmetriai megfontolások alapján az ábrán látható térszerkezetet javasoltuk:

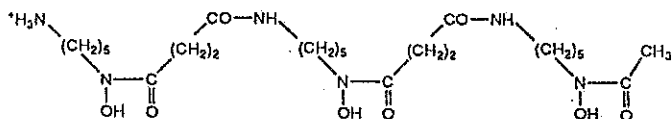


A RÉZ(II) – , NIKKEL(II) – , CINK(II) – DESFERRIOXAMIN RENDSZEREK OLDATEGYENSÚLYI VIZSGÁLATA

Készítette: Csóka Hajnalka IV. vegyész

Témavezető: Dr. Farkas Ételka egyetemi docens

A munka során a réz(II)-, nikkel(II)-, illetve cink(II)-desferrioxamin (DFA) rendszerek oldategyensúlyi vizsgálatát végeztük elsősorban pH-metriás, kisebb mértékben spektrofotometriás méréseket alkalmazva.



DFA

Meghatároztuk az egyes rendszerekben képződő komplexek sztöchiometriai összetételét és a vonatkozó stabilitási állandókat. Számos protonált komplex képződését állapítottuk meg a teljesen deprotonált DFA-t tartalmazó részecskéken kívül. A réz(II)-DFA rendszerben kétmagvú komplex képződését is kimutattuk. Modellként a fémion-acetohidroxámsav adatokat választva, következtetéseket tettünk a komplexek kötémódjára. Valamennyi esetben csak hidroxamát-kelátokon keresztül koordinációt tudunk feltételezni. Nikkel(II)- és cink(II)-ionokhoz maximálisan három hidroxamát koordinációja feltételezhető, míg a réz(II) ionhoz kettő.

Szigma-allil→pi-allil átalakulás tanulmányozása UV-fotoelektron- spektroszkópiával

Frigyes Dávid, V. évf. vegyész

Témavezető: Szepes László

ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

Tudományos diákköri munkám során irodalmi előíratok alapján előállítottam négy fémorganikus vegyületet ((σ -allil)Mn(CO)₅, (π -allil)Mn(CO)₄, (σ -allil)Re(CO)₅, (allil)₄Sn). Felvettem UV-fotoelektron-spektrumukat, s értelmeztem azokat. A spektrum-adatok az alábbi táblázatban láthatók (a dőlt betűkkel szedett sor a korábbi irodalomból ismert):

	fém d ⁻¹	(M-C) ⁻¹	(π_{C-M}) ⁻¹	egyéb
(η^1 -allil)Mn(CO) ₅	8,14;8,54	8,95	10,56	11,95;12,46;12,73
(η^1 -C ₃ H ₅)Re(CO) ₅	8,49;9,07	9,55	11,43	
(allil) ₄ Sn	—		9,74;10,23;10,92	
	fém d ⁻¹	(d+ π_1) ⁻¹	(d+ π_2) ⁻¹	
(η^3 -allil)Mn(CO) ₄	8,09;8,49	9,10	11,12	

A spektrumok értelmezésénél más vegyületek (propén, 1-butén, CH₃Mn(CO)₅, Cp(allil)Fe(CO)₂ és Cp(CH₃)Fe(CO)₂) irodalmi spektrumát, valamint szemlempirikus számításokat használtam fel. Az összehasonlítások jó lehetőséget adnak a π_{C-C} — d kölcsönhatás jellemzésére. Eszerint az említett fémeknél a kölcsönhatási energia az alábbi sorrendet követi:



A Mn- és Re-vegyület CO-leadással járó $\sigma \rightarrow \pi$ átalakulását a spektrométerhez kapcsolt pirolizátor segítségével vizsgáltam. A különböző hőmérsékleteken felvett spektrumok jól mutatják az átalakulás előrehaladását. Jellemző tapasztalat a kis energiájú sávok kiszélesedése is, ami a gátolt rotáció (a π -allil ligandum rotációja a Mn(CO)₄ fragmens szimmetriatengelye körül) szabaddá válásával magyarázható. A termikus átalakulást a Re esetben eddig nem publikálták.

A spektrumok gyors és egyszerű megjelenítésére Windows-rendszerbe kapcsolódó programot írtam.

Néhány új poliamino-polikarbonsav protonálódási és európium(III)-ionnal való komplexképződésének a tanulmányozása

Hargitai Judit, V. vegyész hallgató

Témavezető: Dr. Labádi Imre
JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az utóbbi évtizedben igen nagy érdeklődés figyelhető meg a különböző poliamino-polikarbonsavak ill. lantanoida fémekkel alkotott komplexek, azoknak az orvosi diagnosztikában való alkalmazhatóságuk iránt. A kutatások többek között olyan új ligandumok előállítására irányulnak, amelyek az alkalmazhatóság szempontjából alkalmas fotofizikai (lumineszcenciás) tulajdonságú komplexeket képeznek pl. az európium ionnal. Vizsgálatainkat két ligandummal végeztük, amelyek komplexei kedvező lumineszcenciás tulajdonságokat mutattak.

Potenciometriás és spektrofotometriás módszerrel vizsgáltuk a 2,2',2'',2'''-[(2,2':6',2''-terpirid-6,6''-il)bis(metilénitrilo)] tetraecetsav és a 3,5-bis{6'-bis[N,N-bis(karboxymetil)aminometil]-2'-piridil}-1,2,4-triazole protonálódási folyamatát, meghatároztuk a pK értékeket. Spektrofotometriás módszerrel tanulmányoztuk a fenti ligandumok és az európium ion közötti komplexképződést, valamint a komplex stabilitását 0-12 pH között. A komplexképződést részletesebben pH=7.16 mellett vizsgáltuk.

A kísérleti eredmények alapján megállapítottuk, hogy a komplexképződés pH-tól függően két lépcsőben játszódik le. A karboxil csoportok széles pH tartományban viszonylag erősen, míg az aromás N atomok csak bizonyos pH tartományokban és relatíve gyengén kötődnek az európium ionhoz. Az aromás N atomok koordinációja erősen függ a közegtől is. A puffer oldat ill. EDTE (etiléndiamintetraecetsav) erősen gátolja a N atomok kötődését. pH=7.16 mellett egy ML₂ típusú komplex keletkezése javasolható.

AZ N-D-GLÜKONIL-GLICIN SZÁRMAZÉKOK KOMPLEXKÉPZŐ SAJÁTSÁGAINAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA

JAKUSCH TAMÁS *IV.évf. vegyész szakos hallgató*

Témavezetők: Gyurcsik Béla és Dr. Nagy László

József Attila Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Tanszék

Az előző vizsgálataink bizonyították, hogy az N-D-glükonil-glicin hatásosan komplexálja az átmeneti fémionokat a fiziológiai pH tartományban. Míg a peptidmolekulák esetében egyértelműen a terminális aminosocport a fémionok elsődleges kötőhelye, addig a fenti pszeudopeptid vegyületnél a peptid nitrogén deprotonálódását elősegítő "horgony donor csoport" szerepe nem tisztázott. E probléma megoldása céljából az N-D-glükonil-glicin különböző módosulatait állítottuk elő.

Az egyik származékban, az N-D-glükonil-glicil-glicinben, a karboxilát csoport távolabb került a szénhidrát lánctól, míg az N-D-glükonil-glicin-amid esetében e csoportot egy nagyságrendekkel nagyobb bázicitású amidcsoportra cseréltük ki. Terveink között szerepel még az N-D-glükonil-hisztamin illetve az N-D-glükonil-szarkozin előállítása is. Méréseinkkel azt próbáltuk kideríteni, mely donor csoport koordinálódik elsőként a fémionhoz, és milyen stabilizáló szerep jut a cukorlánc alkoholos hidroxilcsoportjainak.

A vizsgálatokhoz pH-metriás, CD és ESR spektroszkópiai módszereket alkalmaztunk. Az N-D-glükonil-glicin 5:1 ligandum-fém arány mellett képes a fémiont oldatban tartani. A glicil-glicin származék esetében ligandum-fém arány növelésével a fémion hidrolízise megakadályozható. Az így képződött síkplanáris szerkezetű komplexben a ligandum a tripeptidekhez hasonlóan koordinálódik, csak a terminális aminosocport helyett deprotonálódott alkoholos hidroxilcsoport található. A glicinamid származék még nagy felesleg mellett sem képes meggátolni a fémhidroxid csapadék kiválását, és csak pH 9 felett képez a fém:ligandum aránytól függően különböző összetételű komplexet.

Glikaminok protonálódása és réz(II)-komplexeinek potenciometriás és spektroszkópiás vizsgálata

Jancsó Attila III. évf. vegyész szakos hallgató

Témavezetők: Gyuresik Béla és Dr. Nagy László

József Attila Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dolgozatunkkal az aminocukoralkoholok koordinációs kémiai viselkedésének jobb megismeréséhez szándékoztunk hozzájárulni. Ennek érdekében a D-glükamin, 2-amino-2-dezoxi-D-szorbit, N-metil-D-glükamin, N-metil-D-galaktamin és az N-aminoetil-D-galaktamin ligandumok protonálódási, illetve az N-aminoetil-D-galaktamin réz(II)-ionokkal képzett komplexeinek egyensúlyi viszonyait vizsgáltuk potenciometriás és spektrofotometriás módszerekkel. A protonálódási állandók a polihidroxi lánc elektronszívó, a nitrogénatom szubsztituáltságának valamint az intramolekuláris hidrogénhidak együttes hatását tükrözik.

Az N-aminoetil-D-galaktamin már pH ~ 3-tól stabilis komplexeke képez réz(II)-ionokkal mind ekvimoláris elegyekben, mind ligandumfelesleg alkalmazása esetén. A stabilitási állandókból kiderül, hogy az ML és ML₂ komplexekben a ligandum az etiléndiaminhoz hasonlóan kelátként koordinálódik az aminocsoportok részvételével. A fémet és ligandumot azonos mennyiségben tartalmazó rendszerekben, mivel ML₂ részecske képződésére nincs lehetőség, már pH ~ 5 körül különböző összetételű di-, és/vagy oligomer komplexek alakulnak ki valószínűleg az alkoholos hidroxilcsoportok deprotonálódása révén. pH ~ 9 felett újabb deprotonálódási folyamatok játszódnak le.

Kiegészítésképpen az egyensúlyi módszerekhez CD és ESR spektroszkópiás méréseket végeztünk. Ezek segítségével megerősítettük a részecskemátrix megválasztásának helyességét. A CD spektrumok alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy az alkoholos hidroxilcsoportok már a törzskomplexekben is koordinálódnak, de a deprotonálódásuk a koordinációs szféra átrendeződését is eredményezheti. Az ESR spektrumok alapján meghatározott hiperfinom csatolási állandók és g₀ értékek alátámasztják a törzskomplexekre javasolt szerkezetet, viszont pH ~ 10 felett az axiális koordinációra való kisebb érzékenysége miatt az ESR módszer nem tesz különbséget az M:L = 1:1 és 1:2 rendszerek között, ellentétben a látható és CD spektroszkópiás módszerekkel.

Bár az általunk tanulmányozott komplex egyensúlyok részletes felderítése még munkát igényel, az eddigi vizsgálatokból annyit megállapíthatunk, hogy a polihidroxi-lánc alkoholos hidroxilcsoportjai jelentős szerepet játszanak a képződött részecskék összetételének, stabilitásának és szerkezetének meghatározásában is. További terveink arra irányulnak, hogy a monoamino származékok fémkomplexeiről is bővítsük ismereteinket.

BENZODIAZEPIN-SZÁRMAZÉKOK RÉZ (II) KOMPLEXEINEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA

Kilyén Melinda, IV. évf. kémia-fizika

Témavezető: Forizs Edit

Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Az 1,4-benzodiazepin-származékok mint nyugtató és altató hatású aktív anyagok a gyógyszerkémiaiban igen széles körben elterjedtek. A benzodiazepin alapú gyógyszerek komplexeinek a tanulmányozását a biológiai aktivitás és a kémiai szerkezet közötti összefüggés tisztázása váltotta ki. Köztudott, hogy a ligandumok fém komplexeinek biológiai aktivitása nagyobb mint a szabad ligandumé, ezért koordinációs vizsgálatuk feltétlen indokolt.

Munkánk során előállítottuk a nitrazepam Cu(II) halogénidekkel (Cl, Br) alkotott komplexeit, majd ezen komplexek kémiai összetételét klasszikus analitikai módszerekkel határoztuk meg. A termikus tulajdonságokat szimultán TG-DTG-DTA módszerrel vizsgáltuk. Felvettük a komplexek infravörös spektrumát is, melyekből értékes információkat kaptunk a kötések jellegére. Tanulmányoztuk az előállított komplexek elektronspinrezonancia (ESR) spektrumait. A komplexek CuL₂X₂ · 2H₂O (X=Cl, Br) típusúak, szilárd állapotban monomerek és pseudo tetraédres szimmetriával rendelkeznek.

Fenotiazin-származékok biológiai aktivitása és szerkezete, kémiai tulajdonságai közötti kapcsolat vizsgálata

Kis Attila, IV. vegyész hallgató

Témavezetők: Dr. Labádi Imre, Dr. Tasi Gyula

JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
JATE Alkalmazott Kémiai Tanszék

A fenotiazin(benzolgyűrűrűttel kondenzált 1,4-tiazin) és N-szubsztituált származékai régóta ismert vegyületek, s különböző biológiai aktivitásuk (antiplazmid, antibakteriális, antihisztamin, ...stb.) is jól ismert. Ezért a vegyületcsalád jó modellnek látszik a molekulák biológiai aktivitása és geometriája, elektronszerkezete ill. egyéb kémiai paraméterei közötti kapcsolat tanulmányozására. A vizsgálatainkhoz öt ismertebb fenotiazin származékot (klórpromazin, prometazin, levomepromazin, teperin, melipramin) választottunk.

Potenciometriásan vizsgáltuk a fenti vegyületek protonálódási folyamatát. Megállapítottuk, hogy az oldalláncban levő N atomhoz rendelhető protonfelvétel a pH=7-9 tartományban játszódik le. Feltételezhető, hogy az oldalláncnak a biológiai aktivitást befolyásoló szerepe a N atomon levő pozitív töltéssel, annak elektrosztatikus kölcsönhatásban való részvételével kapcsolatos.

További vizsgálatokat folytatunk a molekulák stacking affinitásának ill. annak a biológiai aktivitásban játszott szerepének a meghatározására.

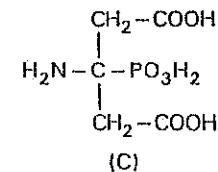
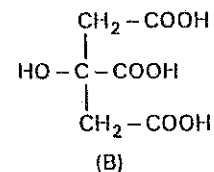
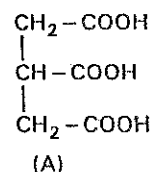
Az elméleti számolásaink során meghatároztuk az egyes molekulák optimális geometriáját, a molekulán belüli töltéeloszlást, de nem találtunk direkt kapcsolatot ezen paraméterek és a biológiai aktivitás között. Egy sokkal összetettebb kapcsolat felderítésére ad lehetőséget az ún. hasonlósági vizsgálat, amelyet elvégezve a PcMOL számítógépi programmal, lineáris kapcsolatot figyeltünk meg a molekulák hasonlósági indexe és bizonyos biológiai aktivitások között.

A CITROMSAV ÉS EGYES ROKONVEGYÜLETEINEK RÉZ(II)-KOMPLEXEI

Készítette: Kiss Erzsébet IV.vegyész hallgató

Témavezető: Dr. Kiss Tamás egyetemi docens

A trikarballil sav (A), a citromsav (B) és a 3-amino-3-foszfoglutarinsav (C) Cu(II) ionnal képzett komplexeit tanulmányoztuk pH-metriás, látható és ESR spektrális módszerekkel.



Meghatároztuk a ligandumok pK értékeit, valamint a különböző ligandum-fém rendszerekben képződő részecskék sztöchiometriáját, stabilitási állandóját és a spektrális adatok figyelembevételével javaslatot tettünk a képződő részecskék legvalószínűbb szerkezetére.

Megállapítottuk, hogy a Cu(II)-citromsav rendszerben CuAH , Cu_2A_2 , $\text{Cu}_2\text{A}_2\text{H}_{-1}$, $\text{Cu}_2\text{A}_2\text{H}_{-2}$ típusú részecskék képződnek, és a komplexképzésben kitüntetett szerepe van az alkoholos -OH csoportnak, ami egyrészt megnöveli a komplexek stabilitását a Cu(II)-trikarballil sav komplexekhez képest, másrészt széles pH-tartományban (pH 4,5-11) az alkoholát csoport hiddonorcsoportként való koordinálódásával Cu_2A_2 összetételű dimer komplexet képez.

A Cu(II)-3-amino-3-foszfoglutarinsav rendszerben CuAH_2 , $\text{Cu}_2\text{A}_2\text{H}_2$, $\text{Cu}_2\text{A}_2\text{H}$, CuA , CuAH_{-1} és CuAH_{-2} típusú részecskéket valószínűsítettünk. Kisebb pH-n e ligandum citromsav-származékként viselkedik és a COO^- és PO_3^{2-} csoportok részvételével monomer és dimer komplexeket képez. Nagyobb pH-n azonban a legbázikusabb aminocsoporton való protonkompetíció csökkenésével a komplex a nagyobb stabilitású aminoszfonszerű kötőmódba megy át.

ALUMÍNIUM-AMINOPOLIKARBOXILÁT-FLUORID VEGYESLIGANDUM-
KOMPLEXEK:
FLUORID ELEKTROD ALKALMAZÁSA ANALITIKAI ÉS KINETIKAI CÉLOKRA

KOVÁCS JUDIT
V. ÉVF. VEGYÉSZ

TÉMAVEZETŐ:
DR. TÓTH IMRE

KLTE, SZERVETLEN ÉS ANALITIKAI KÉMIAI TANSZÉK

Fluoridion-szelektív elektróddal (ISE) tanulmányoztuk az $AlYF^{(n+1)-}$ ($Y =$ aminopolikarboxilát) vegyesligandum-komplexek képződését abból a célból, hogy az alábbi egyenlet felhasználásával mérhessük az $Al(III)$ ion koncentrációját, és hogy meghatározzuk az AlY^n komplex kinetikai viselkedését:

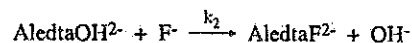
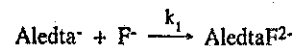


Azt találtuk, hogy az $AlYF^{(n+1)-}$ vegyeskomplexek ($Y =$ edta és hedta) sztöchiometriája megfelelő kísérleti körülmények esetén jól meghatározott, és hogy a reakció végpontja fluoridion-szelektív elektród segítségével jól mérhető. A térfogatossághatározás koncentrációját körülbelül 1 mmol/dm^3 $Al(III)$ ion, főleg edta jelenlétében a $Fe(III)$ ion és a Ca^{2+} nem zavar. Bár a módszer nem versenyezhet a modern műszeres technikákkal, előnye, hogy meglehetősen olcsó, és automatikus titrálásokhoz alkalmazható.

Az $Al\text{edta}F^{2-}$ vegyesligandum-komplex képződésének sebességi egyenletét a kezdeti sebességek módszerének alkalmazásával határoztuk meg:

$$-d[F^-]/dt = k_1[Al\text{edta}^-][F^-] + k_2[Al\text{edta}(\text{OH})_2^-][F^-]$$

ahol $298,2 \text{ K}$ -en $k_1 = 29,9 \pm 4,6 \text{ mol}^{-1}\text{dm}^3\text{s}^{-1}$, $k_2 = 5,4 \pm 1,9 \text{ mol}^{-1}\text{dm}^3\text{s}^{-1}$, az



k_1 és k_2 sebességi állandókkal jellemezhető reakcióútra az aktiválási paraméterek a megfelelő sorrendben következnek: $\Delta H^\ddagger = 45,6 \pm 1,0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ és $40 \pm 9 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S^\ddagger = -64,2 \pm 3,3 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ és $-98 \pm 28 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$. A javasolt mechanizmus mindkét reakcióút esetén az asszociatív interchange I_a .

NUKLEINSAV BÁZISOK ÉS SZÁRMAZÉKAINAK PROTO-
NÁLÓDÁSI EGYENSÚLYA ÉS STACKING AFFINITÁSA
KÖZÖTTI KAPCSOLAT VIZSGÁLATA

Petneházy Livia V. éves kémia-fizika szakos hallgató

Témavezető: Dr. Labádi Imre

JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A nukleinsav bázisok stacking kölcsönhatásban való részvételére, s annak a különböző molekulafelismerési reakciókban játszott szerepére számos példát ismerünk [1,2]. Gyakran a molekula protonált és a nem protonált formájának stacking affinitása különböző, s ez indokolja a molekulák protonálódási egyensúlya és stacking affinitása közötti kapcsolat tanulmányozását.

Vizsgálatainkhoz a nukleinsav bázisoknak olyan származékait választottuk, amelyek várhatóan nagy stacking affinitással és savas hidrogén atommal is rendelkeznek. Vizsgáltuk különböző xantin származékok (koffein, teofillin, teobromin, hypoxantin) és pirimidin származékok (alloxán, barbitursav, dietilbarbitursav, 5-etil,5-fenil barbutursav) protolitikus egyensúlyát és spektrális viselkedését indol jelenlétében. Vizsgálati módszerül a potenciometrikus titrálást, valamint az UV és látható spektrumoknak a partner jelenlétében és távollétében való felvételének módszerét választottuk. A spektrofotometriás módszernél a Job módszert alkalmaztuk.

Számításokat végeztünk a molekulák geometriai és energetikai paramétereinek meghatározására. Vizsgáltuk a számított paraméterek és a kísérleti megfigyeléseink közötti kapcsolatok lehetőségét.

[1] Kamiichi K., Doi M., Nabae M., Ishida T., Inoue M.: J.Chem.Soc. Perkin Trans. II. (1987) 1739

[2] Ishida T., Ueda H., Segawa K., Doi M., Inoue M.: Arch. of Biochem. and Biophys. 278 (1990) 217

SZÉNHIRÁTOK VAS(III)IONNAL KÉPZETT KOMPLEXEINEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS SPEKTROSKÓPIÁS VIZSGÁLATA

Schranz Krisztina, Ph.D hallgató

Témavezető: Dr. Nagy László
JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A szénhidrátok fontos szerepet játszanak a biológiai rendszerekben, mint szerkezetépítő, mint fémionhordozó anyagok, egyaránt. Ez indokoltá teszi a vas(III) és egyéb fémionok cukortípusú ligandumokkal képzett komplexeinek egyensúlyi és szerkezetvizsgálatát.

Munkánk során a vas(III)ion D-glukózzal és D-szaharózzal alkotott komplexeit állítottuk lúgos közegből elő, szilárd formában. A vegyületek anionos karakterűek, ellenionként nátriumot tartalmaznak, amelynek mennyiségi meghatározása lángfotometriás módszerrel történt. Vastartalmukat, cc. salétromsavas feltárás után, atomabszorpciós spektroszkópiával, spektrofotometriásan és titrimetriásan határoztuk meg. A víz és az ún. kötött víztartalomra termogravimetriás mérésekből következtettünk. Az analitikai eredmények polimer szerkezetre utaltak.

A komplexek Mössbauer spektrumai szimmetrikus dublettek. A folyékony nitrogén hőmérsékletén felvett Mössbauer spektrumok paraméterei ($IS = 0.46$, $QS = 0.68-0.75$ mm/s) nagy spinszámú vas(III)ionok jelenlétére mutattak és alátámasztották a komplexek polimer szerkezetét. A QS értékek a központi ion körüli torzult oktaéderes szimmetriára utaltak.

A vegyületek EPR spektrumai két komponensből állnak. Egy igen széles, $g \sim 2$ körül jelentkező vonal, amelyből következtetni lehetett az erős antiferromágneses kölcsönhatásra a nagy spinű vas(III)ionok között a polinukleáris részecskében. A $g = 4.2$ körül található vonal az izolált nagy spinű vas(III)ion jelenlétét mutatja. Az izolált vas(III) centrumok mágneses szuszeptibilitása alacsonyabb hőmérsékleten eltér a Curie törvénytől ami antiferromágneses kölcsönhatásra engedett következtetni.

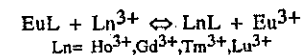
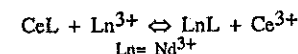
A szelektív vonalkiszélesedési mérések (melyek a paramágneses fémion koordinációjával okozott mag-elektron spin-spin kölcsönhatás véletlenszerű változásán alapulnak) alkalmasak a ligandumon levő lehetséges koordinációs helyek meghatározására. A vegyületek ^{13}C NMR spektrumaiban nem volt észlelhető szelektív vonalszélesedés a vas(III) adagolás hatására, ami arra utalt, hogy a fémionnak nincs specifikus koordinációs helye a vizsgált ligandumokon.

A 10-[2,3-dihidroxi-(1-hidroxiometil)-propil]-1,4,7,10-tetraazaciklododekán-1,4,7-triacetsav ritkaföldfém komplexeinek egyensúlyi és kinetikai vizsgálata

Szilágyi Erika IV. vegyész Témavezető: Dr. Brücher Ernő, egyetemi tanár

A ritkaföldfémek funkcionizált tetraazaciklododekán makrociklusokkal képzett komplexei mind gyakorlati, mind elméleti szempontból lényegesek. A gyakorlati jelentőségüket az adja, hogy a Gd-komplexek az orvosi diagnosztikában egyre jobban terjedő NMR tomográfia már bevezetett (pl. Gd(DOTA), Gd(HP-DO3A)), vagy potenciális kontrasztanyagai. Ezen ligandumok közül különös jelentőséggel bírnak a triacetát származékok, melyek a Gd-mal töltés nélküli komplexeket képeznek. Egyik képviselőjük az általunk vizsgált DO3A-B is (1.ábra). Elméleti szempontból pedig azért érdekesek ezek a komplexek, mert különlegesen nagy stabilitásúak, és a ritkaföldfém komplexek többségével ellentétben lassan képződnek és disszociációjuk is lassú.

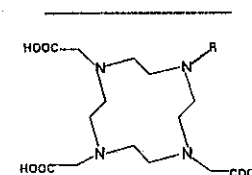
Meghatároztuk számos ritkaföldfém DO3A-B komplexének stabilitási állandóját. A Ce- és Eu(DO3A-B) komplexek esetében közvetlen spektrofotometriás méréseket végeztünk, míg a többi ritkaföldfémre vonatkozóan az alábbi kompetíciós egyensúlyt vizsgáltuk:



A kapott stabilitási állandók értékei az Ln(DOTA) komplexekhez hasonló menetet mutatnak a ritkaföldfém sorozaton belül: Eu-Gd-ig növekednek majd a sorozat végéig közel állandók maradnak.

Tanulmányoztuk továbbá a DO3A-B egyik hidroxilcsoportjának deprotonálódását pH-metriásan, mely a szabad ligandumban nem, csak az Ln(DO3A-B) komplexekben következik be. A különböző ritkaföldfémekkel képzett komplexek esetében meghatározott protonálódási állandók függenek a ritkaföldfémion méretétől, a pK értékek La-tól a Gd-ig közel állandóak, majd a Lu-ig lényegesen csökkennek.

Spektrofotometriásan vizsgáltuk az Eu(DO3A-B) képződési kinetikáját. Más Ln(DO3A-B) és Ln(DOTA) komplexekhez hasonlóan ebben az esetben is a reakció első lépésében egy köztitermék képződik, melynek hidroxidionok által katalizált deprotonálódása vezet a végtermékhez.



1.ábra

R=H H₃(DO3A); R=2-hidroxiopropil H₃(HP-DO3A)
R=2,3-dihidroxi-(1-hidroxiometil)-propil H₃(DO3A-B)

ÁTMENETIFÉMEK CIKLOOKTATETRAÉN KOMPLEXEINEK VUV FOTOELEKTRON-SPEKTROSKÓPIÁS VIZSGÁLATA

Sztáray Bálint, III. vegyész

témavezetők: Vass Gábor és Szepes László

ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

Tudományos diákköri munkám során ciklooktatetraén átmenetifémekkel képzett komplexek elektron szerkezetét vizsgáltam. A vegyületeket a fémorganikus irodalomban már ismertett módszerekkel állítottam elő és elektron szerkezetüket szilárd minta beérésztésére alkalmas vákuum-ultraibolya fotoelektron-spektrométerrel, valamint ab initio kvantumkémiai számításokkal tanulmányoztam.

Munkám célja volt

- az irodalomban eddig nem szereplő fotoelektron-spektrumok felvétele;
- a spektrumok alapján a ciklooktatetraén ligandum térszerkezete és a molekula elektron szerkezete közötti kapcsolat értelmezése;
- annak vizsgálata, hogy a ligandumokkal való kölcsönhatás hogyan változtatja meg a fém d-pályáinak ionizációs energiáját;
- a CpCrCot molekula tér- és elektron szerkezetének elméleti meghatározása;
- a kétmagvú komplexekben a fém-fém kötés fotoelektron-spektrumban való megjelenésének vizsgálata.

Kutatásaim során eddig a következő vegyületeket állítottam elő:

vas-komplexek: $(\text{CO})_3\text{FeCot}$, $[(\text{CO})_3\text{Fe}]_2\text{Cot}$;

króm-komplexek: CpCrCot , Cp^*CrCot , $[\text{CpCr}]_2\text{Cot}$.

(Cp: (1,3)-ciklopentadienil, Cp*: (1,2,3,4,5)-pentametil-(1,3)-ciklopentadienil, Cot: (1,3,5,7)-ciklooktatetraén)

A vegyületek spektrumában szereplő kisenergiájú sávok

VEGYÜLETEK	VEGYÉRTÉK-ELEKTRONOK SZÁMA	COT KAPCSOLÓDÁSA	d(FÉM) IONIZÁCIÓS ENERGIA (eV)	π -IONIZÁCIÓS ENERGIA (eV)
$(\text{CO})_3\text{FeCot}$	18	(1,3)- η^4	7.8	8.7, 10.6
$[(\text{CO})_3\text{Fe}]_2\text{Cot}$	34, vagy 36	η^4 - η^4	7.8	8.7, 10.6
CpCrCot	17	η^5	6.4, 7.7, 7.9	9.3, 8.7
$\text{Me}_3\text{CpCrCot}$	17	η^5	N/A	N/A
$[\text{CpCr}]_2\text{Cot}$	30	η^5 - η^5	5.82, 6.04, 6.16	

A $(\text{CO})_3\text{FeCot}$ fotoelektron-spektrumában szereplő fel nem hasadt d-sáv megfelel a vegyület 18 vegyértékelektronos szerkezetének. A kétmagvú vaskomplex sávjai jól egyeznek az egymagvú komplex megfelelő sávjaival, tehát a két fém közötti kötés nem jelentős.

A CpCrCot komplex d-pályáihoz rendelhető sávok összefüggésbe hozhatók a vegyülettel szerkezetileg analóg CpCrBz megfelelő ionizációs energiáival. Az ab initio számítás eredményeképpen kapott molekulageometria az előzetes elképzelésekkel összhangban van, valamint sikerült elméletileg meghatározni a két gyűrű egymáshoz viszonyított – eddig nem tisztázott – helyzetét.

A $[\text{CpCr}]_2\text{Cot}$ komplexben a d-pályák felhasadása a krómatomok közötti kettős kötés jelenlétére utaló első kísérleti tapasztalat.

Új királis biszfoszfit ligandumok szintézise és alkalmazása Rh- és Pt-katalizált enantioszelektív hidroformilezésben

(Diákköri munka rövid ismertetése)

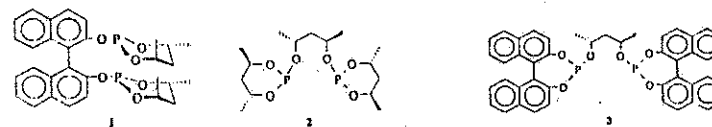
Készítette: Szücsné Cserépi Stefánia

Témavezető: Dr. Bakos József egy. adjunktus

Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

A gyógyszerekkel és növényvédőszerrel szemben támasztott fokozódó biológiai követelmény a kutatókat az enantioszelektív szintézisek kidolgozására, a gyártókat pedig az optikailag tiszta enantiomerek forgalmazására kényszeríti. Az optikailag tiszta anyagok egyik előállítási lehetősége a homogénkatalitikus aszimmetrikus szintézis. A katalitikus aszimmetrikus szintéziseknél akirális, tehát optikailag inaktív vegyületből kiindulva, valamely királis segédanyag (pl. reagens, katalizátor, oldószer felhasználásával nyerhetünk optikailag aktív vegyületet. A homogénkatalitikus aszimmetrikus szintézis királis ligandumot tartalmazó katalizátorral oldható meg. Az optikailag aktív módosító anyag kis mennyisége királis információt hordoz, és visz át a katalitikus folyamatban a képződő termék nagy mennyiségére.

A Veszprémi Egyetem Szerves Kémia Tanszékén végzett munkám során a sztirol és vinilacetát homogénkatalitikus aszimmetrikus hidroformilezését vizsgáltam. Az optikailag aktív 2-fenil-propanal a lázcsillapítóként használt Ibuprofen fontos alapanyaga, a 2-acetoxi-propanalból pedig a tejsav állítható elő. A munkám alapvető célja a katalizátorrendszer kemo-, regio- és enantioszelektivitásának vizsgálata volt. A ligandum szerkezetének és az átmenetifém minőségének változtatásával vizsgáltam a katalizátorrendszer tulajdonságait. Katalizátorként királis biszfoszfit ligandummal (1-3) módosított Pt-, és Rh-komplexekeket használtam.



Elsőként alkalmaztam axiális és centrális kiralitású foszfit ligandumokat Pt-tartalmú katalizátorrendszer módosítására. Bizonyítottam, hogy a ligandum hidban lévő centrális, vagy axiális kiralitásának meghatározó szerepe van a termék konfigurációjára és enantiomerikus tisztaságára. Megállapítottam, hogy a könnyen előállítható foszfitok alkalmasak elfogadható kemo-, regio- és kiemelkedő enantioszelektivitású (96%) katalizátorrendszerek előállítására.

N-D-glükonilglicin és dietilón(IV)-diklorid egyensúlyi kölcsönhatásokor képződő részecskék szerkezetmeghatározása

Várnai László IV. évf. kémia-fizika szakos hallgató

Témavezetők: Dr. Nagy László egyetemi docens
Buzás Norbert TMB ösztöndíjas

JATE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A klinikai gyakorlatban a fémkomplexekkel végzett kemoterápiás kezelések fontossága egyre nő, bár ez ma még többnyire csak a platína-származékok alkalmazására korlátozódik. Ezek a vegyületek azonban csak néhány speciális daganat kezelésére jók, s erősen toxikusak, így felhasználásuk korlátozott.

A platina alapú rákellenes terápiák hátrányai növekvő érdeklődést váltottak ki olyan lehetséges antitumor aktivitással rendelkező vegyületek iránt, mint pl. az ónorganikus komplexvegyületek. A vizsgálatok során kiderült, hogy a tumorgátló hatás erősen függ az ónorganikus részecskét hordozó ligandum sajátosságaitól, azonban egyértelmű kapcsolatot a szilárd komplex szerkezete és inhibáló hatása között mindmáig nem sikerült találni. Ennek nyilvánvaló oka, hogy a vegyületek oldott állapotban fejtik ki hatásukat, és az oldatban levő részecskék szerkezetvizsgálata még nem eléggé kiterjedt.

Vizsgálataink célja az volt, hogy egy potenciális hordozómolekula, az N-D-glükonilglicin dietilón(IV) kationnal képzett komplexeinek szerkezetét felderítsük különböző pH-jú vizes oldatokban. Ehhez a rendelkezésünkre álló pH-metriás és ^{13}C NMR adatok alapján az egyes részecskék koncentráció-maximumánál gyorsfagyasztott oldatokon ^{119}Sn Mössbauer spektroszkópiás méréseket végeztünk. A központi ion körül kialakult lokális szimmetria meghatározásához a mérések eredményeit az un. PQS (Partial Quadrupole Splitting) elmélet alapján értékeltük, és a számított és mért adatok összevetésével választottuk ki az oldatban levő legvalószínűbb szerkezeti izomereket.

BIOKÉMIA, BIOTECHNOLÓGIA, AGROKÉMIA

ALMA ÉRETTSGÉNEK MEGHATÁROZÁSA VIDEOKÉP ANALÍZISSSEL

Aust Krisztina V. évf., Dióspatonyi Ildikó IV. évf., BME

*Konzulens: dr. Merész Péter adjunktus
BME, Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék*

Magyarország a világ jelentős almatermelői közé tartozik. A folyamatos ellátás érdekében az egyidőben, nagy mennyiségben termelt almát megfelelően tárolni kell. Az alma húsa a sejtekben végbemenő folyamatok eredményeképpen tárolás közben károsodik, puhul. Lényeges, hogy a tárolás alatt minél kevésbé menjenek végbe olyan változások, amelyek az alma színét, élvezhetőségét károsan befolyásolják vagy fogyasztásra alkalmatlanná tennék.

A növekvő minőségi követelmények miatt, mind a termesztők, mind a feldolgozó ipar, mind a forgalmazók számára egyre inkább szükséges a gyümölcsök érettségének és minőségének objektív és gyors megállapítása, valamint a tárolás körülményeinek és időtartamának a minőségre gyakorolt hatásának ismerete.

Az érés során az almában változik a keményítő mennyisége. Jelenleg a keményítőtartalom meghatározása a színmeghatározáshoz hasonló módszerrel, szubjektív módon történik, mely nem elég pontos, ha a hosszú idejű tárolhatóságot akarjuk meghatározni. Az utóbbi időben fejlődésnek indult a videokép-analízis, mely alkalmas a keményítőérték meghatározására.

Dolgozatunk céljait annak megállapítását tűztük ki, hogy milyen összefüggés van a keményítőindex és az irodalomban található egyéb érettségi indexek között, valamint, hogy a videokép-analízis alkalmas-e keményítőtartalom meghatározására.

Három különböző szedési időpontból származó, négy almafajtával: Jonagold, Jonathan, Golden Delicious és Gloster végeztük a vizsgálatokat. Mértük az almák keménységét, refrakcióját, savtartalmát és meghatároztuk a keményítőindexét hagyományos módszerrel és a videokép-analízis módszerével. A mért eredményekből érettségi indexeket számítottunk. Vizsgáltuk a videofelvétel készítését befolyásoló paramétereket.

Megállapítottuk, hogy a clusteranalízis során alkalmazott és a minta analízise során alkalmazott megvilágításnak, és a háttér minőségének azonosnak kell lennie. A clusteranalízist elvégezve meghatároztuk a videokép-analízis alapját képező RGB osztályhatárokat. A különböző szedési időpontú almák, valamint az egyes fajták közötti szignifikancia meghatározása érdekében az érettségi indexekkel variancia analízist végeztünk. A várakozásnak megfelelően valamennyi vizsgált tényezőnek szignifikáns hatása volt. Vizsgáltuk a videokép-analízissel meghatározott keményítőindex alkalmazhatóságát. Lineáris regressziót hajtottunk végre a hagyományos módon és a videokép-analízissel meghatározott keményítőindexek között. Az eredményül kapott 0.9265 korrelációs együttható azt igazolja, hogy a videokép-analízissel kapott keményítőérték alkalmazható az egyébként sok szubjektivitást tartalmazó hagyományos összehasonító módszer helyett.

IMMOBILIZÁLT BÉTA-GLÜKOZIDÁZ STABILITÁSÁNAK VIZSGÁLATA

Brumbauer Anikó IV. évf., BME

*Konzulens: dr. Réczey Istvánné docens
BME, Mezőgazdasági Kémiai Technológiai Tanszék*

Napjainkban egyre több tápanyag-, takarmány-, és energiaprobléma vetődik fel. Ezen problémák megoldásában, a Földünkön nagy mennyiségben újratermelő cellulózból nyert glükóz nagy szerepet játszhatna, ha képesek lennének gazdaságos lépésekkel előállítani.

A cellulóz lebontásában az enzimes hidrolízis új távlatokat nyitott meg, de ipari méretekben történő alkalmazásához még számos probléma megoldásra vár. Problémát jelent, hogy a cellulóz termeléshez felhasznált törzsek nem a számunkra megfelelő arányban állítják elő az enzimkomplex alkotóit, és így az utolsó komponensből, a *béta-glükozidáz*-ból hiány mutatkozik a hidrolízis során. Ennek hatására viszont a termékben nem lesz megfelelő arányú a glükóz mennyisége.

A *béta-glükozidáz* önálló enzimkészítményként történő előállításával és immobilizálásával lehetővé válna az enzim kiegészítő adagolása, illetve többszöri felhasználhatósága is.

Munkám során *Aspergillus phoenicis* törzssel oszlopreaktorban és rázatott lombikokban *béta-glükozidáz* aktivitású pelleteteket állítottam elő. Ezen utóbbi pelletek viselkedését vizsgáltam kis koncentrációjú, 0.1%-os glutáraldehides kezelés hatására. A tanszéken eddig végzett kísérletek során ennél nagyobb glutáraldehid koncentrációkat alkalmaztak, mely koncentrációk hatására a hidrolízisek kezdeti szakaszában egy lappangási szakaszt tapasztaltak, miáltal az enzim működése gátolt volt.

A kísérleteimben mind a glutáraldehiddel kezelt, mind a kezeletlen gyöngyökkel végeztem egymást követő hidrolíziseket. A kezelés jóságának vizsgálatát a kezdeti hidrolízis sebességekkel és a 24 órás konverzió adatokkal végeztem.

A kezdeti hidrolízis görbék több szempontból is értékelhetők voltak, így az enzim felezési idejét is innen állapítottam meg. A glutáraldehiddel kezelt gyöngyökben rögzített enzim felezési ideje 540 órának, a kezeletleneké pedig 180 órának bizonyult.

A glutáraldehiddel kezelt gyöngyök hidrolízise során a pelleteknek fokozatosan csökkent az aktivitása, míg a kezeletlen gyöngyök esetén a hidrolízisek kezdeti szakaszában a pelletek jelentős aktivitásvesztést szenvedtek. Ennek valószínűleg a nagyfokú enzimkiáramlás lehetett az oka.

Az alkalmazott kezelési körülmények között a hidrolízis kezdeti szakaszában nem észleltem lappangási zónát. Ez arra utal, hogy az általam használt glutáraldehid koncentráció az enzim rögzítését úgy végezte el, hogy a hidrolízis során nem akadályozta a cellobióz átalakítását, azaz a *béta-glükozidáz* működését.

Az Echinops fajok különböző növényi részeiből nyerhető poliszacharidok előállítására és vizsgálata

Horváth Zsolt V. évfolyam biológia-kémia szak

Témavezető: Dr. Nánási Pál professzor

KLTE Biokémia Tanszék

Az Echinops (Labdatóvis) növényekből nyert drogokat a kínai népi gyógyászat mint gyulladáscsökkentő anyagokat használja különböző fekélyek gyógyítására. Más növényekről szóló szakirodalom szerint feltehető, hogy ezen hatás a magas uronsavtartalomú poliszacharidoknak köszönhető.

Vizsgálataink célja az volt, hogy az Echinops fajokból a szakirodalom által eddig nem tanulmányozott poliszacharidokat kivonjuk és szerkezetükről felvilágosítást nyerjünk. Az általunk tanulmányozott fajok a következők voltak: Echinops sphacroccephalus L. és Echinops ritro Fisch. (Magyarországon megtalálható növény), Echinops exaltatus Schrad. (Románia területén honos növény), Echinops commutatus és Echinops orientalis Tranto. (Transzkaukázusban élő növény).

Ezek gyökéréből, valamint az Echinops sphacroccephalus L. gyökér, levél, szár és termés részeiből forró vízzel szakaszos extrakciót hajtottunk végre. A gyökér uronsavtartalmának két maximuma van: az első az extrahálás kezdetén, a második a több órás extrahálás után. Ez a jelenség a poliszacharidok eltérő szerkezetével, illetőleg a sejten belül eltérő elhelyezkedésével lehet összefüggésben. Az Echinops sphacroccephalus L. növényi részei közül csak a szár uronsavtartalmát vehetjük össze a gyökér hasonló adataival. A gyökér és a szár uronsavtartalmát hasonlóan változik az extrahálás során.

Az Echinops orientalis gyökér/6 dializált frakcióját anioncserélő gélikromatográfiával (DEAE-Sephacrose Cl-6B), desztillált vízzel, 0,2 M és 1 M NaCl oldattal elúciót végezve neutrális és különböző mértékben savas frakciókat (1., 2., 3., 4.) nyertünk. A frakciók cukoranalízisére Hellerqvist módszerrel hajtottuk végre, amelynek eredményei alapján elmondható, hogy az Echinops orientalis gyökéréből izolálható poliszacharidok bonyolult keveréket képeznek: az 1. frakció glükánnak, a 2. frakció galaktomannó-glükánnak, a 3. frakció arabino-xilánnak és glükó-mannánnak, a 4. frakció arabino-xilánnak és glükánnak adódott.

Feltételezhető, hogy a növényfajok hatóanyagai között a poliszacharidok jelentős szerepet játszanak, ezért vizsgálatainkat tovább folytatjuk a poliszacharidok elválasztása és szerkezetvizsgálata céljából.

HOSSZUTENYÉSZIDEJŰ FEJESKÁPOSZTA-FAJTÁK BELTARTALMI ÉRTÉKEINEK VÁLTOZÁSA TÁROLÁS SORÁN

HUTZEK BEÁTA KATALIN /1994/ V. évf. hallgató
PÁTE GEORGIKON Mezőgazdaságtudományi Kar
Állattáplálási és Állategészségtani Tanszék

Dolgozatomban feladatom volt nyomon követni a fejeskaposzta-fajták beltartalmi értékeinek változását tárolás során, ezek alapján megnevezni azokat a fajtákat, amelyek a legkisebb veszteség mellett tárolhatók.

Irodalmi összefoglalót készítettem a fejeskaposzta természetéről.

Ismertettem a fejeskaposzta ökológiai igényét. A növényvédelemre /gyomirtás, kártevők és kórokozók elleni védekezés/ részletesen kitértem.

Foglalkoztam az alkalmazott tárolási módszerekkel, a tárolás alapkövetelményeivel.

Ismertettem az anorganikus elemek hatását a fejeskaposzta fejlődésére.

A harmadik fejezetben bemutattam a kísérleti területet, a tárolás körülményeit. Röviden ismertettem az általam vizsgált fejeskaposzta-fajtákat.

Ezután a beltartalmi vizsgálatok módszereit a vonatkozó szabványok alapján mutattam be.

A kémiai vizsgálatok eredményét számítógéppel dolgoztam fel. Az IBM számítógépre elkészített matematikai statisztikai programcsomag szignifikancia vizsgálatot és homogenitás vizsgálatot végzett.

A szignifikancia vizsgálat eredményeit felhasználva összehasonlítottam a fajtákat egy időszakon belül, illetve értékeltem az egyes fajták beltartalmi mutatóinak változását tárolás során, kiemelve az 1992 őszi és az 1993 tavaszi időszakot.

Fontos volt számomra a homogenitás vizsgálat, melynek során azt tapasztaltam, hogy a vizsgált kaposztafajták némelyike helyettesíthető egymással néhány fontos tulajdonság esetében.

Ezután javaslatot tettem az adott termesztési célnak megfelelő fejeskaposzta-fajták kiválasztására, megneveztem a legkisebb tárolási veszteséggel tárolható fajtákat, melynek alapján sorrendet állítottam fel a 12 fajta között.

Témavezető tanár: dr. Lóth Tiborné
egyetemi adjunktus

Kalmár Bernadett

V. éves biológia-kémia szakos hallgató

K⁺-FELSZABADULÁS KÉMIAI SZABÁLYOZÁSÁNAK MÉRÉSE TÚLÉLŐ SEJTSZUSZPENZIÓ

Témavezető: Dr. Rónai András
Dr. Szókán Gyula

A nyiroksejtek kémiai kommunikációs rendszerei, jellegzetes sajátosságai mellett, számos hasonló jelátviteli megoldást mutatnak az ideg- és izomsejtekénél valamint a hormonális sejteknél korábban megismert mechanizmusokkal. A dolgozat tárgya fenti analógiák alapján a T- és B- típusú nyiroksejtek K⁺-csatornái működésének és a működés kémiai (receptorális) szabályozásának vizsgálata K⁺-ionszelektív detektor alkalmazásával.

A megoldandó részfeladatok:

- T- és B-típusú nyiroksejtek preparálása,
- a K⁺-szelektív detektort tartalmazó mérőrendszer elektronikájának összeállítása, külső együttműködéssel, és a mérőrendszer érzékenységi- és szelektivitási mutatóinak meghatározása,
- a K⁺-csatorna-blokkoló apamin (méhméreg-komponens) tisztítása HPLC-technikával,
- különböző ismert és feltételezett K⁺-csatornára ható anyagok tesztelése a nyiroksejteken.

Kevesebb, mint két hónap alatt B-típusú nyiroksejt tenyésztését, valamint az apamin tisztítását lényegében megoldottuk, s jelenleg a K⁺-szelektív detektor-rendszer összeállításán dolgozunk.

Immunológiailag aktív poliszacharidok előállítása és szerkezetvizsgálata Magyarországon előforduló édesgyökér (Glycyrrhiza) fajokból

Kiss Tünde, V. évf. biológia-kémia szak
Témavezető: Dr. Nánási Pál professzor
KLTE, Biokémia Tanszék

Az édesgyökér (*Glycyrrhiza* sp.) már régóta alkalmazott gyógynövény gyulladáscsökkentő, allergiák kezelésére. Hatóanyagai közül kiemelkedő jelentőségűek a gyökérből extrahálható – elsősorban az uronsavtartalmú – poliszacharidok, amelyek jelentős immunológiai aktivitást mutatnak. Ezek tanulmányozására világszerte folytak kutatások, amelyek céljaira azonban csak az Ázsiában honos édesgyökér fajokat (*G. uralensis* Fisch., *G. glabra* L.) használták.

Ezen eredmények alapján vizsgálatokat kezdtünk a Magyarországon honos *G.* fajok (*G. glabra* és *G. echinata*) poliszacharidjai tekintetében, összehasonlítva ezeket az ázsiai fajok vizsgálati eredményeivel, illetve kiterjeszve a gyökéren kívül más növényi részek tanulmányozására is. Céljaink közé tartozik, hogy a magyarországi *Glycyrrhiza* fajokból biológiailag aktív poliszacharidokat izoláljunk, tisztítsuk és szerkezetileg jellemezzük azokat. Mivel a *G. echinata* fajjal az irodalmi adatok szerint szénhidrátkémiai vizsgálat nem folyt, részletesebb tanulmányozásába kezdtünk.

A poliszacharidok izolálása forró vizes, szakaszos extrakcióval történt a növények gyökereiből, szárából és leveléből. Az extraktumok uronsavtartalmát mutatta, hogy bár az ázsiai eredetű növények szénhidráthozama magasabb a magyar mintákénál, de a magyar *G. glabra* uronsavtartalma vetekszik azokéval. A *G. echinata* esetében kedvezőtlenebb eredményeket kaptunk. A savanyú poliszacharidok mennyisége általában a gyökérben a legnagyobb, de figyelemreméltó a szár több órás extraktjaiban is.

A frakciókkal dialízálás után α -naftolos módszerrel össz-szénhidrát-, illetve Folin-féle módszerrel fehérjetartalom meghatározást végeztünk. A mintákat DEAE-Sepharose CL-6B anioncserélő oszlopon – desztillált vízzel, 0,2 M és 1,0 M NaCl-oldattal – elúciót végezve neutrális és különböző mértékben savas frakciókra különítettük el. A mintákkal cukoranalízist végeztünk.

A *G. glabra* gyökere és a *G. echinata* szára esetében kapott eredményeket az irodalmi adatokkal összehasonlítva megállapítható, hogy a poliszacharidokat felépítő monoszacharidok közül a mi mintáinkban is jelentős mennyiségben van jelen arabinóz és galaktóz, illetve kisebb mennyiségben glükóz, ramnóz és mannóz, de az irodalmi értékektől eltérően a *G. echinata* szára esetén domináns komponens a xilóz is. Feltételezzük, hogy a *G. glabra* gyökereiből izolált poliszacharidok főleg arabinogalakán és arabinán típusúak, míg a *G. echinata* szárában az arabinoxilán típus a meghatározó.

További vizsgálatok még folyamatban vannak, mivel eddigi eredményeink azt mutatják, hogy a magyarországi fajok is alkalmasak lehetnek gyakorlati felhasználásra.

**VAS MEGYE KÜLÖNBÖZŐ TERMŐHELYEIRŐL
BEGYŰJTÖTT ŐSZI BÚZA ÉS TAVASZI ÁRPA
MAGNÉZIUM ÉS KÁLCIUM TARTALMA**

NÉMETH ZSUZSANNA (1994) V.évf.hallgató
PATE GEORGIKON Mezőgazdaságtudományi Kar
Állategészségtani és állatlélettani tanszék

Vas megye különböző talajtípusain termesztett 1993-94-es évi őszi búza, illetve 1994-es tavaszi árpa magnézium, kalcium tartalmának meghatározását végeztem.

A megye gabonaforgalmi vállalatainál begyűjtött (termőhelyre és fajtára feltüntetett) gabonatételekből mintát vettem, majd a vizsgálatra történő előkészítés után atomabszorpciós spektrometriával elemeztem. Az eredmények kiértékelésekor figyelembe vettem az adott termőhely könnyen oldható magnézium tartalmát, talajtípusát, kötöttségét, mésztartalmát, pH-t, és a kilúgzódási veszteségeket.

Mindezek alapján a következőket állapítottam meg:

A talajok könnyen oldható magnézium tartalmának növekedése nem vonta maga után a takarmány magnézium tartalmának a növekedését. A pszeudoglejes barna erdőtalajon (Vas megye DNY-i része) az 5.5pH kedvezett a magnézium feltáródásának, itt azonban a fellépő kilúgzódás miatt csökkent a felvehető magnézium mennyiség.

A vizsgálatra kerülő takarmányok magnézium tartalmát 100g bemért szemtermésben őszi búzánál 0.18-0.23g, tavaszi árpánál 0.09-0.11g között mértem. A legnagyobb mennyiséget a réti öntéstalajon (Répce Menté) kaptam, míg a Raumann-féle barna erdőtalaj (Kemeneshát) magnézium vonatkozásában hiányos területnek mutatkozott.

Vizsgálataimat abból a célból végeztem, hogy megállapítsam a gazdasági haszonállatok magnézium szükségletének fedezése milyen arányban történik alaptakarmányokból.

Továbbiakban vizsgálom a Táplánszentkeresztli és a Sopronhorpácsi Növénytermesztési Kutató Állomás államilag minősített fajtáinak (őszi búza, tavaszi árpa, kukorica) magnézium, kalcium tartalmát. A fajtasorok makroelem tartalmára még nincsenek kiértékelt eredményeim.

Témavezető tanár: Dr. Lóth Tiborné
egyetemi adjunktus

KÉMIAI TECHNOLÓGIA

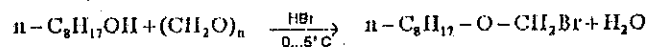
Témavezető: Dr. Máthé Árpád egy. docens
ELTE TTK Kémiai Technológiai Tanszék

A polimerek nagy szerkezeti változatoságra és tulajdonságaik messzemenő befolyásolhatóságára különösen alkalmasá teszi ezt az anyagcsaládot membránszűrők készítésére. Az alappolimerek kémiai átalakításával módosíthatjuk a belőlük előállított membránok sajátosságait. Eljárhatunk úgy, hogy a kiindulási polimeret szubsztituáljuk és az így nyert számmazékból készültünk membránt (homogén módosítás), vagy az eredeti polimermembránt alakítjuk át, feloldás nélkül, hogy a mikrostruktúrája ne változzék (heterogén módosítás). Munkám során poli(éter-szulfon) (Vitrex PES 4800, IC) brommetilézéssel és poli-szulfon (Udel P-1700, Union Carbide) karboxilezésével foglalkoztam, továbbá — bekapcsolódván egy műegyetemi diákköri munkába — poliszulfon membrán heterogén szulfonálását is elvégeztem. Várkoztunk szerint a karboxilezés és a szulfonálás egyaránt a membrán hidrofilitásának növekedését fogja eredményezni; a brommetilézett számmazékból pedig ún. bipolár-membránokat lehet készíteni. Ezekkel a módosított membránokkal környezetvédelmi szempontból jelentős szeparációs feladatokat remélünk megoldani (pl. tejsavó elkülönítése ipari szennyvizekből, NaOH visszanyerése szennyezett NaOH-oldatokból).

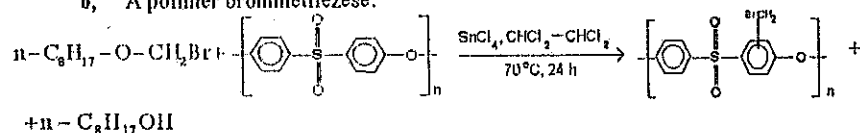
Az alábbi sémák szemléltetik az elvégzett reakciókat. A brommetilézés és a karboxilezés mértékét és pozícióját elemáanalízis- és NMR-mérésekkel ellenőriztük, továbbá termóanalitikai vizsgálatokat is végeztünk.

1. Poli(éter-szulfon) brommetilézése

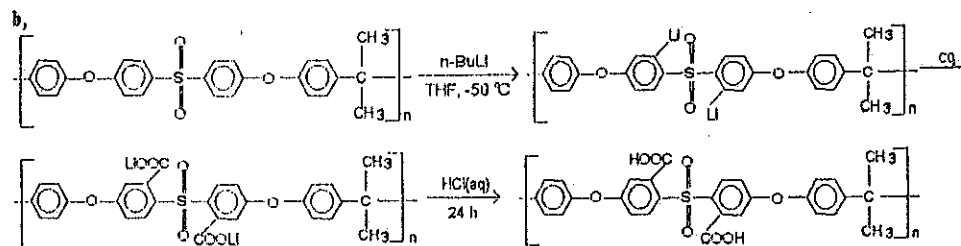
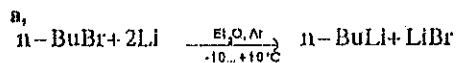
a, A brommetiléző szer elkészítése:



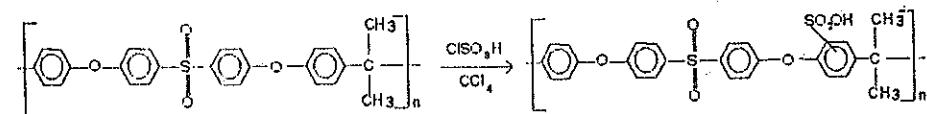
b, A polimer brommetilézése:



2. Poliszulfon karboxilezése



3. Poliszulfon membrán szulfonálása



ÖSSZEFÜGGÉSEK A BIFUNKCIÓS REAKTÍV SZÍNEZÉKEK SZERKEZETE ÉS FÉNYÁLLÓSÁGA KÖZÖTT

Csepregi Zsuzsanna vegyész-mérnök, BME

Témavezető: dr. Frankl Judit adjunktus és dr. Vig András tudományos főmunkatárs
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék

A színes textíliákból készült termékek használati értékét fényállóságuk nagymértékben befolyásolja. A cellulóz alapú szálasanyagok színezésére elterjedten használt reaktív színezékek fényállósága közepes vagy gyenge. Fontos tehát a reaktív színezék-cellulóz rendszerek fotokémiai tulajdonságainak ismerete.

A munka célja két hasonló szerkezetű bifunkciós monoklórtriazin illetve szulfatoetil-szulfon reaktív csoportú reaktív azoszínezék ("A", "B") fényállóságának a vizsgálata, eltérő fényállóságuk okainak felderítésére. Az "A" és "B" színezék eltérő fényállóságának a jobb megértéséhez tanulmányoztuk az ezen színezékeket felépítő úgynevezett "elővegyületek" ("A1", "A2", "B1", "B2") fotokémiai tulajdonságait, valamint a színezék-szál között kialakuló kötés erősségének (sav- illetve lúgállóságát) a fényállóságra gyakorolt hatását. Az elővegyületeket úgy választottuk ki, hogy a vizsgált "A" és "B" színezék egy-egy molekuláriszével teljesen azonos legyen.

A körülményektől függően (pH, hőmérséklet) a színezéken lévő két különböző reaktív csoport reaktivitása eltérő, nem azonos sebességgel képes létrehozni a színezék-szál kötését. A színezék szerkezetében végrehajtott változtatások befolyásolhatják a színezék-szál kötések erősségét. A színezék-szál között kialakult kapcsolatnak a fényállóságra gyakorolt hatását három különböző módon előállított színezék-szál rendszeren kutattuk. Az első esetben a színezék kovalensen kötődik a szálhoz (RC); a második esetben a reaktív csoport jelen van a rendszerben, de nem kötődik a szálhoz (N); a harmadik esetben a reaktív csoport hidrolizált formában van jelen (H). Megállapítottuk, hogy a kovalensen kötött minták fényállósága az esetek többségében a legjobb.

A színezék molekulatömegének növelésével a színezett rendszerek fényállósága javult az "A" és "B" típusú színezékek esetében egyaránt. A H-sav alapú "A" típusú reaktív színezékek fényállósága jobb mint a γ-sav alapú "B" típusúaké. A fényel szembeni eltérő viselkedés a színezékek kromofórijának szerkezetéből és a reaktív csoportokat összekötő hidban lévő különbségekből adódhat.

Az "A" és "B" típusú színezékekkel kialakított színezék-szál kapcsolat stabilitását vizsgálva savas illetve lúgos hidrolízissel megállapítható, hogy az "A" típusú színezékek esetében ("A", "A2") pH=3-as közegben lényegesen több színezék oldható le mint hasonló körülmények között a "B" típusú színezékekről ("B", "B2").

Összefüggést keresve a színezékek fényállósága és a sav- illetve alkáliallóság között megállapítható, hogy a jobb fényállóságú "A" színezék savállósága gyenge, a gyengébb fényállóságú "B" színezék savállósága jó. Ebből arra lehet következtetni, hogy az "A" színezék főleg a monoklórtriazin csoporton keresztül kapcsolódik a szálhoz, míg a gyengébb fényállóságú "B" színezék elsősorban a szulfatoetil-szulfon csoporton kötődik.

TEXTILMINTATERVEZŐ CAD RENDSZERHEZ ALKALMAS SZÍNMINTAGYÜJTEMÉNY LÉTREHOZÁSA

Czilik Melinda I. éves doktorandusz, BME

*konzulens: dr. Csányi Sándor adjunktus
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*


Korunkban a piaci verseny szélesedése arra ösztönzi a vállalatokat, hogy a megrendelők igényeinek maximálisan eleget tegyenek, azaz gyorsan és pontosan a lehető legjobb minőséget a legkedvezőbb árszinten állítsák elő. A számítógéppel támogatott tervező és tennelő rendszerek (CAD-CAM rendszerek) - így a számítógépes textilmintatervezők is - nagyban hozzájárulnak az üzemek, vállalatok ilyen irányú törekvéseinek segítéséhez.

A Coloroid szírendszer az ember színélményeit nemcsak érzet szerint, hanem esztétikailag is egyenletesen rendszerezi. A Coloroid színmintákkal számos harmónia kísérletet végeztek el és így olyan harmóniaösszefüggések is rendelkezhetők a Coloroid színekhez, melyek felhasználásával könnyen lehet harmónikus színsorokat szerkeszteni. A szírendszernek ezt a tulajdonságát kiválóan lehetne alkalmazni textilminták tervezésekor. Előnyös tulajdonsága az is, hogy kölcsönösen egyértelmű kapcsolatban áll a CIE XYZ rendszerrel, így biztosított az átjárhatóság egyéb különleges jellemzőkkel rendelkező más szírendszerhez. A rendszer hátránya, hogy színmintáinak hagyományos gyakorlati megvalósítása körülményes.

Munkám célja kettős volt. Egyrészt létrehozni egy olyan Coloroid színtáblaszt, melyet monitorokon lehet megjeleníteni, másrészt így a Coloroid rendszert számítógépes mintatervezőkben textilipari alkalmazásra is hozzáférhetővé tenni.

A Coloroid rendszer jellemzőinek pontos matematikai definíciója és a számítógépes rendszerek azon tulajdonsága, hogy színeiket fények additív keverésével hozzák létre - tette lehetővé, hogy a Coloroid színtáblasz színeit egy a hagyományostól eltérő, hatékonyabb módszerrel állítsam elő.

Vonatkozási alapként a D65 fényforrást kalibrált szabványos monitor fehér színét választottam. A Coloroid határszínekkel egyező színezeti szögű és a monitorok által megjeleníthető legteljesebb színeket mint keverési alapszíneket rögzítettem. Kiszámítottam a felépíthető Coloroid színek szinkordinátáit és Coloroid színösszetevőit. A rendelkezésemre álló Szivárvány színkeverő programmal az R, G, B színösszetevőket is meghatároztam.

Így meghatároztam a Coloroid színtáblaszt bármely olyan számítógépes rendszer számára mely rendelkezik a számítástechnikában legelterjedtebb R, G, B színkeverési programmal. A Kispesti Textil-⁴⁵⁰ mintatervező programjában létrehoztam a Coloroid rendszer 48 lapos színtábláját, amely 48 db színt tartalmaz és a mintatervező program számára elérhető.

Retardált gyógyszerformák előállítása és *in vitro* vizsgálata

Helyszín: KLTE Alkalmazott Kémiai Tanszék
Témavezető: Dr. Zsuga Miklós
Készítette: Danyi Zoltán V. biológia-kémia szakos hallgató
és Steiner Judit biológia-kémia szakos középiskolai tanár

Általános és konkrét célkitűzéseink: a hatóanyag specifikus terápiás hatást fejtsen ki a szervezetben, ill. a forgalomban lévő orális gyógyszereknél kedvezőbb kioldódású készítmények előállítása.

Hatóanyagok jelentősége: Vízben oldódó sószerű drogok. A szalicilsav-származékok többek között antipiretikus (lázcsillapító), analgetikus (fájdalomcsillapító), anti-reumatikus (köszvényellenes) hatásúak.

A kálium-ion minden élő sejten (születben, testfolyadékban) megtalálható, a sejtek ingerelhetőségéhez nélkülözhetetlen, emellett specifikus farmakológiai hatásokkal is rendelkezik (izomzat, idegrendszer, növekedés, stb.)

Vizsgálatainkat az Amerikai XXII. Gyógyszerkönyv előírásait követve végeztük el. A módszer lényege, megfelelő körülmények között (mesterséges gyomor és bélnedvben) - az arra alkalmas berendezésben - azt vizsgáljuk, hogy a gyógyszerből kioldódó hatóanyag koncentrációja hogyan növekszik az idő függvényében. Először gyári, majd az általunk előállított termékek kioldódását követtük nyomon. Ehhez modelleznünk kellett a gyomor-béltraktus működését: hőmérséklet 37°C , ami megfelel a belső testhőmérsékletnek; fordulatszám 100/min, ami a tápcsatorna nedveinek a mennyiségének felel meg; kioldódás ideje 8 óra, ami megfelel a táplálék gyomor-bélrendszerben való tartózkodásának. Néhány tényező esetén korlátokba is ütköztünk.

A gyári Na-szalicilát draszt gyomorrezisztens bevonattal készül, ami többek között a savas hidrolízis lehetőségét is kizárja, így a hatóanyag ténylegesen csak a bélben szabadul fel. A KCl esetében a konduktométer alkalmazása kizárta a mesterséges gyomorsav, mint közeg használatát, így a mérés desztillált-vízben történt.

A kioldódás dinamikáját leíró modellek egyike a Weibull-eloszlási függvény, melynek linearizált alakja megkönnyíti a vizsgálatok kiértékelését. A gyógyhatású készítmények esetén a hatóanyag kioldódását reakciókinetikai értelemben általában nullad, vagy elsőrendű sebességi állandó jellemzi. Mindkét esetben sikerült célkitűzéseinket megvalósítani és kedvezőbb kioldódású tablettákat előállítani. A Na-szalicilátnál első, a KCl esetében nulladrendű volt a kioldódást leíró függvény.

Szűrési célra alkalmas mikropórusú kerámia előállítása Al_2O_3 -ból

Kivonat

Fábián Réka
Veszprémi Egyetem

A mindennapi élet legkülönbözőbb területein - ipar, mezőgazdaság, közlekedés, környezetvédelem, egészségügy, háztartás stb. - adódnak olyan feladatok, hogy folyadékokat vagy gáznemű anyagokat meg kell tisztítanunk szilárd halmazállapotú lebegő szennyezőseiktől. E feladat megoldása legtöbbször szűréssel - a tisztítandó közeg szűrőszerkezeten, szűrőn való átvezetésével - valósítható meg.

A különféle célokra alkalmas szűrők, bár működési mechanizmusuk azonos, a rendeltetési céltól függően, mind anyaguk, mind mikroszerkezetük szempontjából nagyon sokfélék lehetnek.

Munkám célja egy Al_2O_3 alapú szűrőkerámia előállítása volt.

A tiszta alumínium-oxid jó kémiai ellenállóképessége, valamint hő- és kopásállósága révén kiváló szerkezeti anyagként közismert, ugyanakkor a keramizálási technológia számára nem a legkedvezőbb nyersanyag, mert őrmagában nehezen szinterelhető.

Feladatom - elsősorban a kerámiai technológus szempontjából - az alábbi alapvető kérdés megválaszolása volt:

A szóbanjehető ipari előállítású nyersanyag milyen előkészítő műveletekkel állítható elő olyan alumínium-oxid módosulat, illetve nyersanyag, amelyik könnyen szinterelhető, és ebből milyen égetési körülményekkel hozható létre olyan kerámiai cserép-struktúra, amely mint szerkezeti anyag a szűrési célokra való alkalmasság alapkövetelményeinek megfelel?

POLIALKILEZETT NAFTALIN OLIGOMEREK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS KENŐOLAJ-TULAJDONSÁGAINAK VIZSGÁLATA

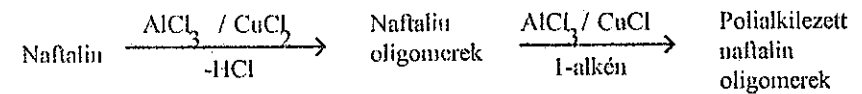
KOVÁCS MÓNICA IV. VEGYÉSZ

Témavezető: Dr. Nemes Sándor egyetemi adjunktus
KLTE Alkalmazott Kémiai Tanszék

Összefoglalás

A szintézissel előállított kenőolajok egyik csoportját a megfelelő tulajdonságú alkilaromás szénhidrogének alkotják. A viszonylag hosszú egyenes alkiláncokkal polialkilezett aromás szénhidrogének kitűnnek viszkozitásuk kis hőmérsékletfüggésével (=nagy viszkozitási indexükkel), széles hőmérséklettartományban felmutatott folyékonyságukkal, jó oxidációállóságukkal és kis illékonyságukkal. Mindezek alapján a polialkilezett naftalin oligomerek jó tulajdonságai várhatóak.

A polialkilezett naftalin oligomerek előállítása az alábbi reakció szerint történ:

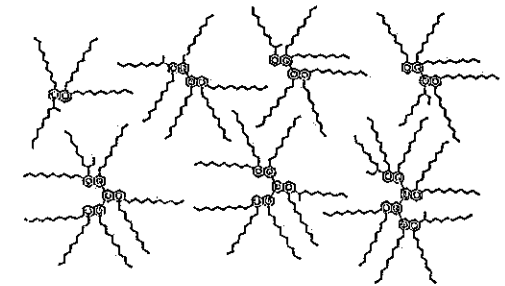


ahol az 1-alkén az 1-hexén, 1-oktén, 1-dekén, 1-dodekén, 1-tetradekén, 1-hexadekén és 1-oktadekén volt.

A polialkilezett naftalin oligomerek szerkezete vázlatosan (az 1-dekénnel való polialkilezés példáján bemutatva) az ábrán látható:

Az azonos fokban oligomerizált naftalin különböző páros szénatomszámú lineáris 1-alkénnel polialkilezett származékainak átlagos molekulatömege az 550-1900; viszkozitási indexe a 90-161; dermedéspontja a -24 - $+17$ °C; nyílttéri lobbásponja a 210 - 310 °C tartományban van és növekszik az alkilező normál 1-alkén szénatomszámának növekedésével. A termékek ugyanazon hőmérsékleten mért viszkozitása, valamint oxidációval szembeni ellenállása szintén növekszik az alkilező lineáris 1-alkén szénatomszámának növekedésével. A termékek tulajdonságainak ilyen irányú változása a kémiai szerkezetük alapján értelmezhető.

Vizsgálataink szerint az előállított anyagok tulajdonságaikban hordozzák a lehetőségét annak, hogy kiváló tulajdonságú kenőolajok, illetve kenőolaj-komponensek legyenek. Ha az alacsony hőmérsékletű folyékonyság nem követelmény, mert a felhasználás magas hőmérsékletű helyen történik, akkor a nagyobb szénatomszámú; ha az fontos, akkor a kisebb szénatomszámú lineáris 1-alkénnel polialkilezett termékek közül választhatunk az adott felhasználás követelményeinek megfelelően kompromisszumot kötve.



TÖLTÖTT KÉN-DIOXID ABSZORBER HIDRODINAMIKÁJA

Márki Edit IV. évf., BME

Konzulens: Békássyné dr. Molnár Erika docens, Bágyi István doktoráns
BME, Vegyipari Műveletek Tanszék

A kén-dioxid kinyerése ipari gázokból és levegőből, azaz a savas esők meggátolása a környezetvédelem egyik legfontosabb feladata. A napjainkban alkalmazott nagyipari eljárások az olcsó reagenst felhasználó, nem regenerálható abszorpciókat alkalmazzák. Ezek hátránya, hogy a reakció során keletkezett terméknek csak kis részét tudja az ipar feldolgozni, nagyobb részét deponálni kell.

Az általam alkalmazott regenerálható eljárás még nem kellően kidolgozott. Lényege, hogy a reagens, a Na-citrát puffer, az abszorpció után újra felhasználható, mert a regenerálás során a kén-dioxid nagy töménységben kihajtható az oldatból.

Munkám célja: Na-citrát puffer/kén-dioxid abszorpciós eljárás megvalósíthatóságának vizsgálata töltött abszorberben. Ennek első fázisaként eddig a következő munkákat végeztem:

Részt vettem egy új, $D = 100$ mm átmérőjű, $H = 1$ m magasságú, $\varnothing 12 \times 12 \times 2$ mm-es Raschig-gyűrűkkel töltött félüzemi abszorber tervezésében és szerelésében. Mérőperemet terveztem és mérőműszereket kalibráltam. Megmértem a töltött oszlop hidrodinamikáját (nyomásesését és folyadék hold up-ját) a folyadék és a gázterhelés széles tartományában vízzel, hogy az eredményeket összevethessem irodalmi adatokkal, valamint Na-citrát pufferrel.

A töltött oszlop nyomásesését mértem különböző gázsebességeknél és folyadékterheléseknél. Az eredményekből jól elkülöníthető az irodalomban közölt három kinetikai működési tartomány. Megvizsgáltam a gáz- és a folyadék hőmérséklet hatását a hidrodinamikai jellemzőkre. A mérési eredmények azt mutatják, hogy a kolonna nyomásesésére és a hold up-ra ebben a tartományban gyakorlatilag nincs hatással a betáplált levegő és folyadék hőmérséklete.

A folyadék és a gáz bemenő hőmérsékletének változtatásával mértem az abszorpció szempontjából lényeges hőmérsékleti viszonyokat. A hidrodinamikai állapot jelentősen befolyásolja a gáz és a folyadék lehűlését a kolonnában, ami lényeges hatással van az abszorpcióra. Végül levegő - SO_2 gáz keverékével és Na-citrát pufferrel mértem a töltött abszorber határfokát, és néhány mérést végeztem a regenerálásra.

Eddigi eredményeim a választott regenerálható eljárás vizsgálatának első fázisát képezik. Jelenleg a hidrodinamikai jellemzők (nyomásesés, hold up és a kolonna-hőmérséklet változása) matematikai modellezésével foglalkozom. Az abszorpció és a regenerálás kidolgozását további munka keretében kívánom folytatni.

KRISTÁLYOSODÁS VIZSGÁLATA
RITKAFÖLD FÉMEKEL ADALÉKOLT
FLUORIDÜVEG RENDSZEREKBE

Kivonat

Rasztovits Zsolt
Veszprémi Egyetem

A fluoridüvegek számos alkalmazási lehetősége mellett - úgy mint fényvezető optikai szálak, ionvezető szilárdelektrolitok - lézeraktív ionok hordozóközegeként, ún. "laser-host"-ként hasznosíthatók.

Napjainkban a lézerfizikában a ritkaföldfémek gerjesztődési jelenségeinek nagy jelentősége van, mivel látható tartományban sugárzó fényforrás segítségével a közeli infravörös tartományba eső lézerek állíthatók elő. Számos ritkaföldfémion Er^{3+} , Tm^{3+} , Pr^{3+} , Nd^{3+} , Ho^{3+} , Eu^{3+} stb. [1] esetén megfigyelték a gerjesztési fluoreszcencia jelenségét. Ezek az ionok fluorid mátrixban jó hatásokkal gerjeszthetők, mivel környezetükben a hordozó anyag szerkezeti hálózatának fononenergiái kicsik, így a nem sugárzó relaxációs folyamatok során bekövetkező fényintenzitás veszteség kisebb, mint egyéb oxidos közegek esetén [2].

A fluoridüvegek optikai elemekként illetve fényvezető szálakként történő alkalmazását leginkább nagy kristályosodási hajlamuk gátolja.

Munkánk során korábbi munkák [3,4] tapasztalatait felhasználva vizsgáltuk az Eu^{3+} és a Ho^{3+} lézeraktív ritkaföldfém ionok nukleációra és kristálynövekedésre gyakorolt hatását. Hőkezelt minták törésfelületeinek SEM vizsgálata segítségével minőségi információkat nyertünk az egyes minták nukleációs viselkedésére vonatkozólag. Az adalékolt üvegminták kristályosodásának kinetikáját nemizoterm DSC módszerrel követtük nyomon. A kapott eredményeket az irodalomban leírt matematikai módszerekkel [5] feldolgozva megállapítottuk, hogy európium esetében a kristályosodás aktiválási energiája egy minimum görbe szerint, holmium esetében egy maximum görbe szerint változik a vizsgált összetétel tartományban.

Irodalom:

1. L. Samek, I. Wasylak, K. Marczych: Proc. of 7th Int. Symp. on Halide Glasses, Lorne, Vol.1. (1991) 6.19 - 6.24
2. K. Hirao, S. Todoroki, N. Soga: Bol. Soc. Esp. Ceram. Vid. 31-C(3) (1992) 121-126
3. I. Szabó, G. H. Frischat: J. Non-Cryst. Solids 140 (1992) 16-18
4. I. Szabó, G. H. Frischat: J. Non-Cryst. Solids 161 (1993) 66-69
5. H. Yinnon, D. R. Uhlmann: J. Non-Cryst. Solids 54 (1983) 253-275

LABORATÓRIUMI FOLYAMATIRÁNYÍTÓ RENDSZER FEJLESZTÉSE

Székely Tibor V.évf., BME

Témavezető: dr. Marosi György docens
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Dolgozatom kapcsolódik a BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéken korábban megkezdett oktatásfejlesztő munkához, amelynek eddigi eredményei a DIAZOTÁLÁS, és az EMULZIÓS POLIMERIZÁCIÓ folyamatirányításra irányuló célprogramok voltak. A munkám során olyan folyamatirányító szoftver létrehozására törekedtem, amely a csupán meghatározott célra korlátozott működésű programok helyett bármely egyszerűbb szakaszos technológiájú kémiai reakció végrehajtására képes, s a végrehajtandó reakciók paramétereit tárolja. Alkalmos a programok megszerkesztésére, eltávolításra majd későbbi beolvasásra s azok végrehajtására.

Az általános működés alapvető feltételeit igyekeztem megteremteni, a rendszer hardver részének fejlesztésével is. Különösen hangsúlyos szerepet kapott a dolgozat során a Diazotálás reakció, mert ez jól illeszkedik a Szerves Vegyipari Alapfolyamatok című tárgy laborgyakorlatainak aktuális fejlesztési feladataihoz, és alkalmas a továbbfejlesztett program működésének ellenőrzésére, és modellezésére is.

Az általános működésű folyamatirányító program ezen túlmenően kiszélesítheti a laboratóriumi gyakorlatok során végrehajtható reakciók körét.

A hardver konfiguráció fejlesztése alapvető feltétele volt az általános működésű folyamatirányító program létrehozásának. A digitális mérleg beépítése az adagolás pontosabb nyomonkövetését, és szabályozását biztosította. A diazotálási laborgyakorlat eddigi tapasztalatai alapján olyan új diazotáló reaktor kialakítása látszott célszerűnek, amely a reakcióelegy térfogatának és a hűtés intenzitásának széles határok közötti változtatását teszi lehetővé.

A folyamatirányító szoftver fejlesztése során elkészítettem a folyamatirányító program felhasználóbarát grafikus menükezelő keretprogramját, amely egyszerű programkezelést tesz lehetővé. A menükezelés rugalmasan bővíthető, újabb menüpontok létrehozása nem igényel szoftver beavakozást. Elkészítése tehát biztosította a program folyamatos fejlesztettségét is. A program több nyelvű futtatás lehetőségét tartalmazza, a felhasználó a programindításnál választhat a nyelvek közül. Kialakítottam a főmenüben egy globális, az almenükben pedig egy lokális HELP-rendszert, amely szintén a program kezelőjét segíti munkájában.

A munkámban a legnagyobb hangsúlyt a szekvenciális szabályozás létrehozása kapta, hiszen ez az alapja az általános célú működésnek. Ennek érdekében kialakítottam egy szekvenciális táblázatot, és az ott bekért adatokat használtam fel a szekvenciális szabályozás során.

A szekvenciális szabályozásra írt programrész mind a fűtés-hűtéses, mind az adagolós szabályozást (váltakozva is) képes végrehajtani. Létrehoztam egy programrészt, amely a táblázatban megadott értékek alapján grafikusan megjeleníti a várható hőmérsékletprofil, majd a valódi (mért) hőmérsékletprofil is.

Az így elkészült folyamatirányító szoftver működését ellenőriztem két egyszerű hőmérsékletprofil, és a diazotálás reakció végrehajtásával. Az elvégzett kísérletek igazolták, hogy a kialakított folyamatirányító szoftver alkalmas többféle funkció egymást követő végrehajtását igénylő kémiai reakciók szabályozására, lehetőséget adva a különböző paraméterkombinációk alkalmazására is.

Veszprémi Egyetem Szilikátkémiai és -Technológiai Tanszék

TDK DOLGOZAT

A melegsajtolás kinetikai vizsgálata az $Y_2O_3-ZrO_2$ rendszerben

Széwald Oszkár

Témavezető: dr. Korim Tamás

Munkám célja a parciálisan stabilizált ZrO_2 melegpréslésekor lejátszódó, a késztermék tulajdonságainak javulását eredményező folyamatok (tömörödés, szilárdulás, keményedés) kinetikájának tanulmányozása volt.

Kísérleti munkám első részében bázikus-cirkóniumkarbonát és 3 % (n/n) Y_2O_3 felhasználásával együttelecsapásos módszerrel présport állítottam elő, majd rúd alakú próbatesteket fröccsöntöttem.

A melegpréslési kísérletsorozatban előszinterelt mintákat használtam. A maximális nyomáson tartás idejét változtattam 10 perces időközökkel 10 perctől 70 percreig.

A melegpréslést próbatestek fázisösszetételét röntgenfrakciós módszerrel, szövetszerkezetét pásztázó elektronmikroszkóppal vizsgáltam.

A próbatestek fizikai tulajdonságainak vizsgálatakor a testsűrűség, vízfelvétel, porozitás meghatározása mellett tanulmányoztam azok szilárdsági jellemzőit roncsolásos és roncsolásmentes módon.

A kinetikai vizsgálatok során megállapítottam, hogy a sűrűsödés és a keményedés sebessége a maximális nyomáson történő szinterelés első 30-40 percében erősen csökken. Ezzel egyidőben a testszilárdság-növekedés sebessége nő. Ezen folyamatokkal összefüggésben az is megfigyelhető, hogy a ZrO_2 szemcsék szabályos kristályformái szintén 30 perces préslést követően alakulnak ki.

Megállapítottam, hogy a homogén szövetszerkezet 30 perces maximális nyomáson tartás utáni kialakulása a sűrűsödési és keményedési sebesség növekedését eredményezi.

A 60. perctől mindhárom vizsgált tulajdonság változásának sebességcsökkenését figyeltem meg, ami azzal magyarázható, hogy a fizikai tulajdonságok nem javíthatók minden határon túl, így azok változási sebessége az elméleti értékek megközelítésekor nullához kell tartson.

Az általam elvégzett kísérletek paramétereit mellett az elméleti sűrűség közelében tömörített Y-ZPS minta szemcsemérete csökkent. Ez az irodalmak áttanulmányozása után új kutatási eredménynek minősül.

HALOGÉNMENTESEN ÉGÉSGÁTOLT POLIOLEFINEK

Toth András doktoráns, BME

*Konferensek: dr. Anna Péter adjunktus, Dr. Bertalan György docens
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*

A poliolefinek közül a polipropilén és a polietilén kedvező fizikai és kémiai tulajdonságaik, egyszerű feldolgozhatóságuk, valamint alacsony árak következtében egyre nagyobb mennyiségben kerülnek felhasználásra. Számos iparágban, így az elektromos- és építőiparban, a gépjárműgyártásban azonban a poliolefinek fokozott tűzveszélyességük miatt kizárólag égésgátolt formában kerülhetnek felhasználásra. A poliolefinek égésgátlása korábban megoldható volt halogéntartalmú égésgátló adalékokkal, melyek alkalmazását azonban a szigorodó környezetvédelmi előírások korlátozzák.

Munkám során a poliolefinek égésgátlásához a legígéretesebbnek tetsző felhabosodó ("intumescent") égésgátló adalékrendszer technológiai célú vizsgálatával és módosításával, valamint elméleti vonatkozású vizsgálatával foglalkoztam. A felhabosodó égésgátló adalékrendszer hatásmechanizmusának lényege, hogy a foszfortartalmú komponens (ammónium-polifoszfát), valamint a poliol adalék (pentaeritrit) az égő polimerfelület szenesedését segítik elő, míg a nitrogéntartalmú, gázképző komponens (melamin) felhabosítja a polimer felületén a szenes réteget. Az égő polimer felületén kialakított szeneshabos réteg gátolja a hő- és anyagtranszportot, azaz az égés fenntartásához szükséges hőmennyiségnek a szilárd fázisba való visszatáplálását, illetve az oxigénnek a polimerhez való diffúzióját. Munkám technológiai jellegű része során a felhabosodó adalékrendszer összetételének, valamint a kompaundálás körülményeinek olyan módosítását végeztem el, amely a hatékony égésgátláson túlmenően a kompaundok jobb feldolgozhatóságát (az adalékok alacsonyabb vizes kioldhatóságát biztosító) és kedvezőbb mechanikai tulajdonságok kialakítását teszi lehetővé. Az elméleti vonatkozású munka során az adalékrendszer komponensei között a kompaundálás körülményei között fellépő kölcsönhatásokat vizsgáltam termoanalitikai (TG, DTG, DTA, DSC), IR spektroszkópiái, valamint mikroszkópos módszerekkel.

Megállapítottam, hogy az adalékrendszer komponensei közül az ammónium-polifoszfát és a pentaeritrit fizikai-kémiai (szorpció), és kémiai (észteresedés) kölcsönhatása, valamint a módosított adalékrendszerben a tetra-etoxi-szilán és a pentaeritrit reakciója, valamint a reakciók következtében az ammónium-polifoszfát mikrokapszulázódása eredményezi a feldolgozhatóság és egyes terméktulajdonságok javulását.

KÖRNYEZETI KÉMIA

OLAJSZÁRMAZÉKOKKAL SZENNYEZETT VIZEK ÁRTALMATLANÍTÁSÁNAK MÓDSZEREI

(Összefoglaló)

Szepesi Ibolya

Bukta Attila

Az olaj energiahordozóként, ipari nyersanyagként és az élet sok más területén történő felhasználása magával hozta a környezetszennyező anyagként való megjelenését is. Ezek közül a vízkészlet szennyezése az egyik legjelentősebb, melynek megelőzésére és rehabilitációjára egyre újabb módszereket dolgoznak ki a szakemberek, kezdve az egyszerű mechanikus eszközöktől, a fizikai-kémiai ismereteken alapuló agyagás-ványokon, természetes és mesterséges, nagyfelületű szerves anyagokon történő adszorpción át a biológiai lebontásig. Ez a dolgozat e technológiákat foglalja össze néhány alkalmazási példával kiegészítve.

KÖRNYEZETVÉDELEM A KÖZLEKEDÉSBEN. ALTERNATÍV ÜZEM- ANYAGOK ÉS KOMPONENSEK KATALIZÁTOROK.

Molnár Tibor IV. évf. Agrárkémia

Konzulens: Dr. Somlyay István egy.docens

PATE Keszthely, Kémiai Tanszék.

Amikor a közlekedés környezetszennyező hatásáról hallunk, sokunkban csak a levegő CO-, NO_x-, por, korom stb. koncentrációjáról készült grafikonok jutnak eszünkbe. Jelen dolgozat megközelítési módja más.

A belsőégésű motorok működésének sajnos velejárója a károsanyag-kibocsátás. A kipufogógázok legnagyobb része veszélytelen az emberre, hiszen főként elemi nitrogén és oxigéngáz. Vannak azonban olyan komponensek is, amelyek károsak lehetnek a vérképző szervekre, az idegrendszerre, esetleg karcinogének is, továbbá szmogot idéznek elő.

A károsanyag kibocsátás csökkentésének több útját tanulmányoztam. Egyik út az üzemanyagok gyártási eljárásának olyan módosítása /hatékonyabb kéntelenítés, ólom-tetraetil helyett MTBE alkalmazása, ún. reformulázott benzin stb./, hogy abból később az autó kipufogócsövén kedvezőbb összetételű gáz távozzon. Másik lehetőség, mely részben épül az előzőre is, a gépkocsik katalizátorral való felszerelése, még a gyártás során, vagy utólag.

Következő lehetőségként tanulmányoztam, hogy a főként kőolajeredetű üzemanyagok alternatívájaként, speciális vagy általános célokra, milyen más energiaforrások, -tárolók alkalmazhatók.

A környezetvédelem érdekében sokat tehet a törvényhozás is, azzal, hogy előírja az üzemanyagok és a kipufogógázok megengedett károsanyag tartalmát, továbbá javítja a környezetkímélő megoldások piaci pozícióját.

CdS és ZnS méretkvantált nanofázisú félvezetők előállítása és jellemzése SiO₂ (aerosil) hordozókon

Nagy Livia V. éves vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Dékány Imre tanszékvezető egyetemi tanár
József Attila Tudományegyetem Kolloidkémiai Tanszék

Az utóbbi tíz évben a tudományos érdeklődés -főként az anyagtudomány területén- jelentősen megnőtt a szubkolloidális mérettartományba eső, 1-10 nm-es részecskék iránt. Tanulmányozásuk azért fontos, mert ezen félvezető, illetve mágneses tulajdonságokkal rendelkező anyagok viselkedése eltér a makroszkópikus sajátságoktól, fizikai tulajdonságaik változnak a részecskemérettel.

Vizsgálataink során CdS és ZnS nanofázisú, n-típusú félvezető részecskéket preparáltunk etanol-ciklohexán és metanol-ciklohexán elegyek szilárd/folyadék határfelületi adszorpciós rétegéből hidrophil A-200 aerosil és hidrofób R-972 aerosil szorbensek felületén. Poláris szerves folyadékokban, dimetil-formamidban (DMF) és dimetil-szulfoxidban (DMSO) is előállítottunk kondenzációs reakcióval CdS és ZnS szubkolloidokat, amelyeket szintén az SiO₂ részecskék felületén vizsgáltunk.

Az ily módon előállított félvezető-SiO₂ hordozó komplexek szuszpenzióinak tulajdonságait fényabszorpciós spektroszkópiái, reológiai mérésekkel, valamint elektronmikroszkópos vizsgálattal jellemeztük.

Munkánk célja az volt, hogy méretkvantált nanofázisú félvezetőket állítsunk elő. A képződött részecskéket reológiai mérésekkel detektáltuk, azok néhány fizikai tulajdonságát meghatároztuk annak érdekében, hogy további kísérletekben fotodegradációs készségük tanulmányozható legyen.

Az eredmények megfeleltek várakozásainknak, a képződött részecskékre jellemző fényabszorpciós küszöb értékek eltértek a makrofázisú anyagokéitól, illetve a szubkolloidok jelenléte megváltoztatta a szuszpenziók reológiai sajátságait.

AZ UV-SUGÁRZÁS MÉRÉSE ZSELATINGÉLBE ÁGYAZOTT UV-DÓZISMÉRŐKKEL

NEMES ATTILA, IV. ÉVF. VEGYÉSZ

TÉMAVEZETŐ:
DR. SZALAY TIBOR
KLTE FIZIKAI KÉMIAI TANSZÉKE

Több okból is szükséges lehet annak ismerete, hogy egy adott helyen és időben (időszakban) mekkora mennyiségű UV-sugárzást bocsát ki természetes fényforrásunk, a Nap, vagy egy mesterséges fényforrás. Ráadásul a sugárzás intenzitása az időjárási körülményektől és a földrajzi helyzettől függően is állandóan változik. Különösen megnövekedett az igény az UV-sugárzás mérésére azóta, mióta közismertté vált az ózonréteg elvékonyodása, s az ennek következtében megnövekedett sugárzás. Köztudott, hogy a túlságosan nagy UV-sugárdózis egészségkárosodáshoz vezet.

Régóta állnak már rendelkezésünkre mind műszeres, mind kémiai mérő módszerek, ezek azonban nem minden szempontból megfelelőek. A KLTE-n kifejlesztett SUNTEST nevű egyéni dózismérő egyike a legjobbaknak. Ez a rendszer egy kémiai aktinóméter, lényegében zselatingélbe ágyazott, együttesen lecsapott Ag₂C₂O₄/Hg₂C₂O₄ szuszpenziója. "Higany"-tartalma miatt környezetvédelmi okból tömeges alkalmazásra nem alkalmas, tudományos célokra azonban jól használható.

Munkánk során arra törekedtünk, hogy a Hg₂²⁺-ionok helyett más változó vegyértékű fémiont használhassunk szenzibilizátorként.

Kísérleteink során a fényérzékeny anyagot házi készítésű öntőgéppel barított papírra öntöttük, majd napfényel, kvarclámpával, illetve szolárszimulátorral megvilágítottuk, és meghatároztuk a besugárzott felületek reflexiós denzitását. Ezek alapján határoztuk meg a rendszerek jelleggörbéjét és spektrális érzékenységét.

Egy ismert kémiai aktinóméter összetételéből kiindulva Fe³⁺-ionokat használtunk szenzibilizátorként. Vizsgáltuk a Fe³⁺-ionok mennyiségének érzékenységre gyakorolt hatását. Sikertült meghatározni az optimálisan érzékeny vas(III)-koncentrációt. Más alkalmas fémiont mindaddig nem találtunk.

Változtattuk a komplexképző/lecsapószer minőségét is, de erre a célra az oxálsav mutatkozott a legalkalmasabbnak. Megállapítottuk, hogy az oxálsav-koncentráció növelésével nő az érzékenység.

A rendszer pH-ja a Fe³⁺-komplexek eloszlására gyakorolt hatása miatt befolyásolja az érzékenységet, s ebből a szempontból a magasabb pH lenne a kedvezőbb. A szuszpenziók azonban alacsonyabb pH-n stabilisabbak.

A vas(III)-mennyiség, a savasság, és az oxálsav-mennyiség változtatásával sikerült olyan rendszereket előállítani, amelyek elsősorban az UVB-tartományra érzékenyek, és amelyek érzékenysége is megfelel az elvárásoknak. Ezen rendszerek alapul szolgálhatnak egy olyan újfajta kémiai aktinóméterhez, amelynek segítségével bárki egyszerűen, gyorsan meghatározhatja az UV-sugárzás adott idő alatt a felszínre érkezett mennyiségét. Ezen dózismérő segítségével pedig elkerülhető a leégések, bőrrákok kialakulása; tehát egészségvédelemre használható.

OLAJSZÁRMAZÉKOKKAL SZENNYEZETT TALAJOK MENTESÍTÉSI LEHETŐSÉGEI (Összefoglaló)

Szepesi Ibolya

Az olajszármazékokkal szennyezett talajok ártalmatlanításának többféle módszere ismert. Ennek kiválasztása előtt meg kell vizsgálni, hogy milyen szennyezőanyagról van szó és milyen tulajdonságokkal rendelkezik (pl. illékonyaság, mozgékonyaság, mérgező hatás). Ugyanakkor a talaj geológiai, hidrogeológiai, ásványtani viszonyait sem lehet figyelmen kívül hagyni. Ebből is látható hogy az alkalmazandó módszer kiválasztása mennyire bonyolult dolog, hiszen a hatékonyság mellett a gazdaságosság is lényeges kérdés. A mentesítés lehet in-situ, on-site, off-site. Az in-situ eljárás a legegyszerűbb abból a szempontból, hogy a talajt nem kell elmozdítani a helyéről. Ennek során használhatjuk a már helyben található mikroorganizmusokat úgy, hogy tápanyagot és vizet adagolunk. A biológiai lebontás hatékonyságát tovább növelhetjük vákuumextrakció vagy biológiai szellőztetés alkalmazásával. Emellett a talajmosást is gyakran használják. Ezzel szemben az on-site kezeléseknél a talajt már ki kell emelni, de helyben végzik el a mentesítést. A biológiai lebontás és a termikus eljárás a leggyakoribb, azonban a talajvíz ilyenkor további kezelést igényel. A későbbiekben valószínűleg előtérbe fog kerülni az elektroozmózis, amelyet egyelőre még csak laboratóriumi kísérletek során alkalmaznak. Az off-site kezeléseket a legdrágábbak, hiszen költségesebb, illetve a lerakásnál külön telepre is szükség van. A szilárdításnál, a bedolgozásnál, a lezárásnál pedig csak elzárjuk a vegyületet a környezetétől. A kezeléseket során ügyelni kell arra, hogy ne okozzunk újabb károkat. Sőt minden mentesítő eljárás végén gondoskodni kell az eltávolított szennyezők kezeléséről, elhelyezéséről, ha szükséges.

ETV-ICP-AES módszer talajok néhány nehézfém-szennyezőjének gyors meghatározásához

Varga Anita, V.évf., vegyész

Témavezető: Dr. Zárny Gyula
ELTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Ipari tevékenységből adódó környezetszennyezések következtében a felszíni talajrétegek kémiai összetétele gyakran megváltozik és egyes elemek koncentrációja az átlagos földkéregbeli gyakoriság alapján elvárt értékeket több nagyságrenddel is meghaladhatja. Technológiai jelentőségük és nagymértékű felhasználásuk alapján különös figyelmet érdemelnek egyes nehézfémek (pl. As, Cd, Cr, Ni, Pb, Zn), amelyeknek az élővilágra kifejtett hatása még számos vonatkozásban megválaszolásra vár.

Munkánk során a könnyen párolgó nehézfémek (As, Cd, Pb, Zn) szimultán meghatározására alkalmas atomspektroszkópiai módszert dolgoztunk ki, amely a kérdéses elemek elektrotermikus fűtésű grafitkemencében (ETV) végrehajtott szelektív elpárologtatásán és a keletkezett gőzök (aeroszol) induktív csatolású plazmában (ICP) történő gerjesztésén alapul.

A vizsgálatokhoz az Európai Gazdasági Közösség BCR-141 és BCR-320 jelzésű meszes, agyagos talajt, illetve folyami üledéket reprezentáló hiteles anyagmintáit használtuk fel. A kísérleteket a tanszéken kifejlesztett grafitkemencével és gázellátó rendszerrel, valamint egy LABTAM 8440 típusú ICP-spektrométerrel végeztük. A négy elem szilárd mintából történő elpárologtatásához egy négy lépésből álló hevítési programot dolgoztunk ki (szárítás, előhevítés, elpárologtatás és utólisztítás). Talajminták esetében különös jelentőséggel bír az előhevítési lépés, amely a szerves anyagok, valamint gázfejlődést eredményező szervetlen komponensek termikus bontásáért szolgál.

A kísérleteknél vívpárologtatás révén a külső (argon) kemencegázhoz petroléteergőt, míg a belső (argon) kemencegázhoz toluolergőt adagoltunk. Az előbbi a grafitkemence külső felületén pirolitikus réteg kialakítását, míg az utóbbi az elpárologtatott komponensek szállítási hatásfokának a növelését célozta. Ugyancsak a szállítási hatásfok javítását kívántuk elérni Na-szenit adalékadásával, amely nehezen párolgó CdSe és ZnSe kialakulását eredményezi.

A párolgási tanulmányokat követően három kalibrációs módszerrel (1. standard oldatokkal felvett kiértékelő görbék alapján; 2. standard adalékos technikával; 3. változó tömegű szilárd standard mintákkal) végeztünk kvantitatív méréseket. Megállapítottuk, hogy pontosság tekintetében a standard adalékos technika szolgáltatja a legkedvezőbb analitikai információkat (1-10% relatív hiba). A reprodukálhatóságot jellemző, három független mérés alapján meghatározott, relatív standard deviáció értéke 5-10% között változik, amely a viszonylag kis tömegű bemérést (10mg) és a relatív nagy szemcseméretet (<math><90\mu\text{m}</math>) figyelembe véve a gyors információt adó szilárdmintás technikák között rendkívül sokatigérő.

KÉMIAI SZAKMÓDSZERTAN

SZÁMÍTÓGÉPES ELLENŐRZŐ PROGRAM ÁLTALÁNOS KÉMIÁBÓL

Bekő Zsolt, III. évf. biológia - kémia

Témavezető: Hargitainé Dr. Tóth Ágnes
Bessenyei György Tanárképző Főiskola Kémia Tanszék

Az önellenőrzés és önértékelés nagyon lényeges motívuma cselekedeteinknek. Az értékelés akkor éri el célját, ha egyre jobb teljesítményekre ösztönöz, fejleszti a felelősségtudatot és az önértékelő képességet. Korábbi pedagógiai kísérletek igazolták, hogy az egymással összekapcsolt értékelés és önértékelés serkentőbb hatású, mint a nevelői értékelés kizárólagossága.

Az 1992/93-as tanévben az "Általános és fizikai kémia" c. tantárgy hallgatása során közvetlen tapasztalatokra tettem szert a kémia oktatásával kapcsolatban felmerülő problémákról. Ilyen például, hogy alapvető hiányosságok mutatkoznak a kémiai alapismeretekben, szokatlan az alkalmazott ellenőrzési forma, nagyon sok elégtelen zárthelyi dolgozat születik. Az évközi zárthelyi dolgozatok tesztkérdéseket, esszékérdéseket és számítási feladatokat tartalmaznak. A középiskolai ellenőrzési forma nem egységes, általában az esszékérdéseket részesíti előnyben. A teszteknek kisebb szerep jut, a feleletmegoldás pedig csaknem teljesen háttérbe szorul. Régóta érlelődött bennem a gondolat, hogy tenni kell valamit a tudásszint emelése érdekében.

Dolgozatom céljával tűztem ki az évközi tanulmányi munka segítségét, valamint számítógépes programmal a zárthelyi dolgozatok előtti önellenőrzés lehetőségének biztosítását és a kémiai alapismeretek megszilárdítását. A program az elsőéves tanárjelöltek számára készült.

A tudásszintmérés egyik eszköze a kémiában a tantárgyteszt. Alkalmazó gondolkodást igényel. Céi, hogy a hallgató legyen képes a felismert problémákat elemezni a megtanult ismeretek, fogalmak, törvények, elvek, összefüggések segítségével, valamint legyen képes megoldani a kémiai számítási feladatokat.

A program a zárt és a konstruktív feladatokat alkalmazza, ezen belül a tesztek az egyszerű választás ill. az egyszerű hibakutatás típusba tartoznak. Négy megoldási lehetőség közül kell kiválasztani az egyetlen helyeset, ill. az egyetlen helytelenet. A kérdések között található egyszerűbb számítási feladat, mennyiségi viszonyok összehasonlítása, kisebb-nagyobb reláció, hibakeresés. A program részegységekre bontja a tantárgyat fejezetek, témák szerint. Lehetővé teszi az ismeretek rögzítését, alkalmazását és az individualizált ellenőrzést. Minden hallgató a saját ütemében haladhat az önellenőrzés során. A gondolkodási idő nincs korlátozva. A program jól alkalmazható fontos alapfogalmak, elnevezések, és egyéb lexikális jellegű ismeretek begyakorlására is. Felbontása az egy-egy nagyobb fejezet után megírt zárthelyi dolgozatokhoz igazodik.

A program használhatóságát kipróbálás után értékeltem. A dolgozatban ismertetem az erre vonatkozó tapasztalatokat.

KARBONSAVAK ÉS ÉSZTEREK VIZSGÁLATA A KÖZÉPISKOLÁBAN

Dobos Éva, V. évf. kémia-szociológia

Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék, Debrecen

A középiskolában a kémia nem tartozik a kedvelt tantárgyak közé. Különösen nehéznek tűnik a másodikos gimnazisták számára a szerves kémia. Ezért úgy gondoltam, hogy megpróbálom közelebb hozni a szerves vegyületek világát a tanulókhöz azzal, hogy megmutatom milyen szerves anyagok találhatóak azokban az élelmiszerekben, melyeket mindennap fogyasztunk.

A szerves vegyületek közül a karbonsavakat és az észtereket választottam ki. Arra törekedtem, hogy minél egyszerűbben kivitelezhető, de látványos kísérletekkel mutassam be ezt a két vegyületfajtát. A gimnáziumi tankönyvekben megtalálható kísérleteken túlmenően elvégeztem olyan reakciókat, melyek a hétköznapi életben is előfordulhatnak.

Például:

1. Miért változtatja meg a színét a vöröskáposzta, ha főzés közben egy kis ecetet öntünk rá?
2. Miért savanyú a sóska?
3. Miért világosodik ki a tea színe, ha citromot csepegtetünk bele?
4. Mi található az aludtej, kefir, joghurt savójában?
5. Mi okozza a gyümölcsök kellemes illatát?
6. Miben különbözik az olaj és a zsír?
7. Hányféleképpen készíthetünk szappant?

Élelmiszereink (sóska, hagyma, savanyúkáposzta, ... stb.) karbonsav tartalmát indikátorokkal mutattam ki. Az univerzál indikátor mellett, a vöröskáposztából kivont festékanyagot különösen alkalmaztam egy belőle készült pH sorozat alapján az élelmiszerekben lévő karbonsavak savasságának bemutatására. Továbbá néhány egyszerű kémcsőreakcióval kvalitatíve kimutattam, hogy adott élelmiszerben konkrétan melyik karbonsav található meg.

A gyümölcsök aroma - illetve illatanyagát képező észtereket sikerült kivonnom gyors, könnyű módszerekkel és így a kémcsőből kiáramló illattal a gyümölcs illúzióját keltenem.

Különböző olajos megvakból (dió, napraforgó) kivont olajat vizsgáltam és tulajdonságait összehasonlítottam kémcsőreakciók alapján az étolajéval.

Ezeket a kísérleteket elvégezve, úgy gondolom, hogy sikerülni fog tanárként a tanulók érdeklődését jobban felkelteni a szerves kémia iránt.

Témavezető: Maglóczkiné Dr. Menyhárt Márta

A NEMFÉMES ELEMÉK ÉS VEGYÜLETEIK
(ÁLTALÁNOS ISKOLAI DEMONSTRÁCIÓS KÍSÉRLETEK VIDEOKAZETTÁN)

Gyöngy Gyöngyi, 1994-ben végzett mat-kém. szakos tanár

*Témavezető: Murányi Zoltán
EKTIF Kémia Tanszék*

Az oktatófilm fontos pedagógiai szemléltető eszközt ad a tanár kezébe. A kémiai oktatófilmeknek más információhordozókkal szemben legfőbb előnyük, hogy a kísérletek bemutatására alkalmasak olyan esetekben is, amelyek térbeli vagy időbeli korlátok miatt, esetleg veszélyes voltok folytán nem lennének megtekinthetők.

Nagyon sok iskolában eszköz- vagy vegyszerhiánnyal küzdenek, nincsennek megfelelő körülmények a kísérletek elvégzésére. Pedig a kémia - gyerekek számára - legfontosabb része, lényege a kísérletezés. Ilyenkor segítenek az oktatófilmek. Természetesen az oktatófilm csak helyettesítheti a kísérletezést; a tanteremben, a gyerekek előtt, esetleg általuk elvégzett kísérletek sokkal hatásosabban segítik elő a kémia megértését.

Az általam készített film a 8. osztályos szerves kémia témaköréből a Nemfémek elemek és vegyületeik c. téma kísérleteit foglalja magába. A hidrogén előállítását és tulajdonságait, valamint a hidrogén-durranógázt mutatja be az első két kísérlet, melyek után a klórral és a hidrogén-kloriddal ismerkedhetünk meg részletesebben, illetve a többi halogénelem néhány tulajdonságát is láthatjuk. Az oxigén néhány reakciója után a kén és legfontosabb vegyületei, a kén-dioxid és a kénsav következnek. A levegő összetételének vizsgálatát a nitrogén fontos vegyületei követik, az ammónia, a nitrogén-monoxid, a nitrogén-dioxid és a salétromsav. Az utolsó néhány kísérlet pedig az aktívszén, a széndioxid és a szénsav bemutatására szolgál.

A kísérletek összeállításánál nem ragaszkodtam szorosan az általános iskolai törzssanyaghoz, nagyon sok olyan egyenlet illetve kísérlet szerepel a filmen, amely a jobb megértést szolgálja, illetve a differenciált oktatáshoz, a saakköri munkához ad segítséget.

PEZSEG, BESZÍV, MELEGÍT, MI EZ?

A SOKSZÍNŰ SZÉN-DIOXID

Malatinszky Beáta, IV. évf. biológia-kémia
tanárszakos hallgató

Témavezető: Dr. Rózsahegyi Márta, egyetemi docens
ELTE TTK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Módszertani diákköri munkám céljaul azt a feladatot tűztem ki, hogy a tankönyvekben sok helyen szereplő szén-dioxidról egy átfogó, új kísérletekkel színezett és fontos információkkal kiegészített leírást adjak.

Az első fejezetben a szén-dioxiddal, mint hétköznapi gázzal ismerkedhetünk meg. Az egyszerű meszes vizes kimutatási próba nemcsak a jól ismert gázfejlesztési eljárásokról, hanem a pezsgőtablettából felszabaduló szén-dioxid jelzésére is kiválóan felhasználható.

Gyakran elfeledkezünk arról, hogy a szén-dioxid magas koncentrációban mérgezéshez, sőt fulladásos halálhoz is vezethet. Ennek a tulajdonságnak a megemlítését az oktatásban elengedhetetlenül fontosnak tartom, tudatos felkészítéssel sok balesetet előzhetünk meg.

A szén-dioxid molekula szerkezetét jellemezhetjük a szén-oxigén kötés távolságával, a kötési energiával. A kötés poláris vagy apoláris jellegét az elektronegativitások ismeretében állapíthatjuk meg. A poláris kötésekkel rendelkező molekula szabályos, szimmetrikus szerkezete miatt nem rendelkezik eredő dipólusmomentummal.

A szén-dioxid fázisdiagramja alapján a szilárd-folyadék-gáz fázisátmenetekről, és a fázisok közötti egyensúlyi állapotok kialakulásáról tájékozódhatunk. Szobahőmérsékleten a szilárd halmazállapotú szárazjég a folyadék fázis érintése nélkül gázzá alakul, szublimál.

A szén-dioxid jól oldódik a vízben. A vizes-szappanos oldatban feloldódva, majd azon átdiffundálva a szén-dioxid réteg fölött lebegő szappanbuborékok térfogata megnő. A szén-dioxid vízben való oldódása eredményezi a természetformáló karsztosodás jelenségének kialakulását, az egyensúly eltolásával a fordított irányú folyamatban a cseppkőképződés jelenségét tapasztalhatjuk.

Az üvegházhatás jelensége az utóbbi 10 évben került a figyelem középpontjába. A hosszútávú időjárási előrejelzések globális felmelegedést jósolnak, melyek valódi okát a légkörben egyre nagyobb mértékben feldúsuló üvegházhatású gázok jelenlétével magyarázhatjuk. Ez a folyamat nagyon összetett, ezért érdemes ebben az esetben nemcsak a szén-dioxidot, hanem a hatásért felelős további gázok hővisszatartó képességét és légköri mennyiségét is megvizsgálni.

SZÁMÍTÓGÉPES OKTATÓPROGRAM KÉSZÍTÉSE
(VAGYŰRŐ)

Tóth Antal Attila, III. évf. biológia - kémia

Témavezető: Sarka Lajos
Bessenyei György Tanárképző Főiskola Kémia Tanszék

A tanulás és tanítás folyamán felhasznált eszközök között mindig megjelentek az adott kor technikai szintjét túlröző eszközök is. Napjaink fejlett technikai színvonalát a számítógépek képviselik, és az iskolai oktatásban is egyre nagyobb szerephez jutnak.

A számítógép megfelelő alkalmazása az oktatásban jelentősen megkönnyítheti mind a tanuló, mind a tanár munkáját, ezért TDK dolgozatom témájaként számítógépes oktatóprogram készítését és a tanórai alkalmazás lehetőségeinek vizsgálatát választottam.

Programom témája a nyersvas- és acélgyártás. Célja, hogy megkönnyítse ennek az anyagnak a tanítását és elsajátítását.

A program gyakorló és ellenőrző részből áll.

A gyakorló rész tartalmazza:

- a nyersvasgyártást,
- a főbb acélgyártási eljárásokat /Siemens -Martin, Bessemer - Thomas, Linz - Donawitz/,
- néhány érdekességet a vassal kapcsolatban.

A gyerekek a saját tempójukban tekinthetik át az anyagot. Ábrák és animációk segítik a téma könnyebb megértését és elsajátítását. A kiemelések a gyerekek figyelmét a fontosabb információkra irányítják.

Az ellenőrző rész segítségével visszajelzést kaphatunk a gyerekek felkészültségéről. Ez a rész tesztkérdéseket tartalmaz. Tíz kérdést ad a gép a tanulónak, s minden kérdéshez három válaszlehetőség tartozik. A feladat a lehető legjobb, leghelyesebb válasz megadása. A tizedik kérdés megválaszolása után a gép értékeli a tanuló teljesítményét.

A programot sokféleképpen be lehet építeni a kémia óra menetébe. Az egyes részek külön-külön is használhatók, de folyamatosan is futtathatók.

Előnye, hogy

- a lényegét kiemelve, rendszerezve mutatja be a nyersvas- és acélgyártást;
- könnyen kezelhető, így a gyerekek akár önállóan is dolgozhatnak vele;
- a számítógéppel való munka pozitívan motiválhatja a gyerekeket, s ez egy nagyon fontos szempont az oktatásban.