

**XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia**

*Kémiai és Vegyipari Szekció*

*Pécs  
1997*



**XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia**  
***Kémiai és Vegyipari Szekció***

**PROGRAM ÉS ELŐADÁSKIVONATOK**

*Janus Pannonius Tudományegyetem*  
*Pécs*  
*1997*

**A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekció**

**RENDEZVÉNYEINEK HELYSZÍNEI**

<i>JPTE Jakabhegyi "A" kollégium</i>	<i>Pécs, Jakabhegyi út 8.</i>
<i>JPTE TTK főbejárat</i>	<i>Pécs, Ifjúság útja 6.</i>
<i>JPTE TTK Aula</i>	<i>Pécs, Ifjúság útja 6.</i>
<i>Szekcióülések</i>	<i>Pécs, Ifjúság útja 6.</i>

**Szerkesztő Bizottság**

*Marek Nándor  
Kunsági-Máté Sándor  
Kovács Barna  
Petz Andrea*

**A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekciójának**

**TÁMOGATÓI**

Janus Pannonius Tudományegyetem, TTK  
Janus Pannonius Tudományegyetem Alapítvány  
Művelődési és Közoktatási Minisztérium  
Környezetvédelmi és Területfejlesztési Minisztérium  
Magyar Kémikusok Egyesülete  
Bay Zoltán Alapítvány  
Magyar Tudományos Akadémia Pécsi Területi Bizottsága  
MK Nemzetbiztonsági Szakszolgálat  
Pécs Megyei Jogú Város Polgármesteri Hivatal

Alapítvány a Magyar Felsőoktatásért és Kutatásért  
Beremendi Cement és Mészipari Rt.  
GLÜCK Irodatechnika Bt.  
Hungária Biztosító  
LAEVOSAN Ltd.  
Magyar Televízió Körzeti Stúdió Pécs  
MERCK Kft.  
MEVID Rt. Pacsirta Étterem  
OPTIMER HardSoft Kft.  
Pannonpharma Kft.  
Pécsi Tabula Kereskedelmi Kft.  
Pécsi-Baranyai Kereskedelmi és Iparkamara  
Postabank Rt.  
Print Copy Kft., RICOH márkaképviselet  
Rank Xerox Magyarország Kft.  
Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Rt.



## TARTALOMJEGYZÉK

A konferencia fővédnökei és védnökei

OTDT Kémiai és Vegyipari Szekció Szakmai Szakértői Testület

A helyi szervezési munkában résztvevő munkatársak és hallgatók

A XXIII. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekciójának Alszekciói

Alszekció zsűrik és tagjai

A konferencia programja ..... 11

A XXIII. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekciójának  
alszekciók szerinti elhelyezése ..... 12

Az alszekciók programja ..... 13

Előadaskivonatok

I.	Analitikai kémia .....	39
II.	Szerves kémia .....	55
III.	Elméleti és fizikai kémia .....	85
IV.	Reakciókinetika és katalízis .....	119
V.	Koordinációs kémia .....	137
VI.	Biokémia, biotechnológia, agrokémia .....	155
VII.	Kémiai technológia .....	171
VIII.	Kémiai számítástechnika (pályamunka nem érkezett)	
IX.	Környezeti kémia és környezettechnológia .....	185
X.	Kémiai szakmódszertan .....	205
XI.	Szervetlen kémia .....	213

A konferencián résztvevő intézmények ..... 225

A résztvevők névsora ..... 226

## **A KONFERENCIA FŐVÉDNŐKEI**

*Prof. Dr. Pungor Ernő*  
*akadémikus, főigazgató*  
*Bay Zoltán Alapvetési Alapítvány*

*Prof. Dr. Kőrös Endre*  
*akadémikus*  
*az EU akadémia tagja*

*Dr Révész Mária*  
*alpolgármester*  
*Pécs Megyei Jogú Város Önkormányzata*

## **A KONFERENCIA VÉDNŐKEI**

*Prof. Dr. Barakonyi Károly*  
*rektor*  
*Janus Pannonius Tudományegyetem*

*Prof. Dr Tóth József*  
*dékan*  
*Janus Pannonius Tudományegyetem*  
*Természettudományi Kar*

## OTDT Kémiai és Vegyipari Szekció Szakmai Szakértői Testület

*elnök : Dr Zsuga Miklós Kossuth Lajos Tudományegyetem*  
*ü.v. elnök : Dr Marek Nándor Janus Pannonius Tudományegyetem*  
*titkár : Dr Kunsági-Máté Sándor Janus Pannonius Tudományegyetem*

### *intézményi képviselők :*

<i>Dr Duduk Vendel</i>	<i>Pannon Agrártudományi Egyetem</i>
<i>Dr Horváth Attila</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>
<i>Dr Kalas György</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>
<i>Dr Labádi Imre</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>
<i>Dr László Péter</i>	<i>Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem</i>
<i>Dr Murányi Zoltán</i>	<i>Eszterházy Károly Tanárképző Főiskola</i>
<i>Dr Nagy Sándor</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>
<i>Dr Póta György</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>
<i>Dr Raisz Iván</i>	<i>Miskolci Egyetem</i>
<i>Sarka Lajos</i>	<i>Bessenyei György Tanárképző Főiskola</i>
<i>Kóczán György</i>	<i>Pro Scientia Aranyérmesek Társasága</i>
<i>Jakus Péter</i>	<i>hallgatói képviselő</i>



## **A helyi szervezési munkában résztvevő munkatársak**

*Dr Kollár László  
Dr Kovács Barna  
Dr Past Tibor  
Dr Szabó Klára  
Petz Andrea  
Balogh Jánosné  
Vigné, Horváth Erzsébet*

## **A helyi szervezési munkában résztvevő hallgatók**

*Baki Tomaj  
Berta Renáta  
Bósz Krisztina  
Csóka Balázs  
Dombi Roland  
Gecse Orsolya  
Horváth Orsolya  
Jakab Ferenc  
Kovács Dóra  
Marton Péter  
Pongrácz Nóra  
Szaláncz Kozima  
Szilágyi Anna  
Szőke Károly  
Takátsy Anikó  
Tőke Veronika*

**A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekciójának**

**ALSZEKCIÓI**

- I. Analitikai kémia**
- II. Szerves kémia**
- III. Elméleti és fizikai kémia**
- IV. Reakciókinetika és katalízis**
- V. Koordinációs kémia**
- VI. Biokémia, biotechnológia, agrokémia**
- VII. Kémiai technológia**
- VIII. Kémiai számítástechnika**
- IX. Környezeti kémia és környezettechnológia**
- X. Kémiai szakmódszertan**
- XI. Szervetlen kémia**

1194257969

**A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekció**

**ALSZEKCIÓ ZSÚRIK ÉS TAGJAI**

**I. Analitikai kémia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Záray Gyula</b>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Novák Csaba</b>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>
	<b>Labádi Imre</b>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>

**II. Szerves kémia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Molnár Árpád</b>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Jászberényi Csaba</b>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>
	<b>Rábai József</b>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>

**III. Elméleti és fizikai kémia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Nagypál István</b>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Turányi Tamás</b>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>
	<b>Hargitainé dr. Tóth Ágnes</b>	<i>Bessenyei György Tanárképző Főiskola</i>

**IV. Reakciókinetika és katalízis alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Parlagh Gyula</b>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Bányai István</b>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>
	<b>Halász János</b>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>

**V. Koordinációs kémia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Horváth Attila</b>	<i>Veszprémi Egyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Andor József</b>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>
	<b>Király Róbert</b>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>

## **VI. Biokémia, biotechnológia, agrokémia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Bencze Lajos</b>	<i>Veszprémi Egyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Kiss László Péter Antal</b>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem József Attila Tudományegyetem</i>

## **VII. Kémiai technológia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Tungler Antal</b>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Szabó István Past Tibor</b>	<i>Veszprémi Egyetem Pécsi Orvostudományi Egyetem</i>

## **VIII. Kémiai számítástechnika**

*(pályamunka nem érkezett)*

## **IX. Környezeti kémia és környezettechnológia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Kosáry Judit</b>	<i>Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Hannus István Máthé Árpád</b>	<i>József Attila Tudományegyetem Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>

## **X. Kémiai szakmódszertan alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Adamkovich István</b>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Kónya Józsefné Murányi Zoltán</b>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem Eszterházy Károly Tanárképző Főiskola</i>

## **XI. Szervetlen kémia alszekció zsűrije**

<i>elnök:</i>	<b>Kollár László</b>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>
<i>tagok:</i>	<b>Pasinszki Tibor Farkas Etelka</b>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>



## A KONFERENCIA PROGRAMJA

### *Április 01. kedd*

16<sup>00</sup> -20<sup>00</sup> Regisztráció  
JPTE Jakabhegyi "A" kollégium

### *Április 02. szerda*

8<sup>00</sup> -12<sup>00</sup> Regisztráció  
JPTE TTK főbejárat

9<sup>00</sup> Megnyitó  
JPTE TTK Aula

10<sup>30</sup> -12<sup>00</sup> Szekcióülések  
A244, A245, A246, A353 terem

12<sup>00</sup> -14<sup>00</sup> Ebédszünet

14<sup>00</sup> -15<sup>30</sup> Szekcióülések  
A244, A245, A246, A353, A355 terem

15<sup>30</sup> -16<sup>00</sup> Szünet

16<sup>00</sup> -17<sup>30</sup> Szekcióülések  
A244, A245, A246, A353, A355 terem

17<sup>30</sup> -17<sup>45</sup> Szünet

17<sup>45</sup> -19<sup>00</sup> Szekcióülések  
A244, A245, A353 terem

### *Április 03. csütörtök*

9<sup>00</sup> -10<sup>30</sup> Szekcióülések  
A244, A245, A246, A353 terem

10<sup>30</sup> -10<sup>45</sup> Szünet

10<sup>45</sup> -12<sup>45</sup> Szekcióülések  
A244, A245, A246, A353 terem

12<sup>30</sup> -14<sup>00</sup> Ebédszünet

14<sup>00</sup> - Városnézés

19<sup>00</sup> Fogadás  
JPTE TTK Aula

### *Április 04. péntek*

9<sup>30</sup> Zárulás, eredményhirdetés  
JPTE TTK Aula

A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekciójának alszekciók szerinti elhelyezése

Janus Pannonius Tudományegyetem, Természettudományi Kar, A épület  
Pécs, Ifjúság út 6.

1997. április 2.

Idő	ELŐADÓTERMEK									
	A 244		A 245		A 246		A 353		A 355	
10 <sup>30</sup>	E L M É S F I Z	BME4	S Z E R V E S	BME1	K Ö R N Y  K É M I A	ELTE2	B I O K É M I A	BME2		
10 <sup>45</sup>		VE16		BME14		ELTE20		BME22		
11 <sup>00</sup>		ELTE23		ELTE16		ME1		JATE22		
11 <sup>15</sup>		JATE1		KLTE10		JPTE1		ELTE26		
11 <sup>30</sup>		K É M		JATE3		KLTE13		VE8		
11 <sup>45</sup>	K É M	JPTE9	BME23	VE2	BME21					
EBÉDSZÜNET										
14 <sup>00</sup>	E L M É S F I Z	ELTE4	S Z E R V E S	BME6	K Ö R N Y  K É M I A	BME3	B I O K É M I A	BME9	K Ö R D	JATE35
14 <sup>15</sup>		ELTE8		BME7		VE15		BME24		KLTE1
14 <sup>30</sup>		JATE6		ELTE18		JATE5		ELTE22		KLTE2
14 <sup>45</sup>		ELTE17		ELTE24		JATE19		JATE20		JATE38
15 <sup>00</sup>	K É M	JATE8	KLTE7	BME17	KÉE1	KLTE4				
15 <sup>15</sup>	K É M	KLTE15	KLTE6			VE12				
SZÜNET										
16 <sup>00</sup>	E L M É S F I Z	BME8	A N A L  K É M I A	BME19	K Ö R N Y  K É M I A	BME16	S Z E R V E T L E N K	VE17	K Ö R D	ELTE15
16 <sup>15</sup>		BME11		ELTE10		ELTE5		VE18		KLTE12
16 <sup>30</sup>		VE10		JPTE10		JATE25		VE9		VE13
16 <sup>45</sup>		VE11		VE19		JATE32		KLTE9		VE4
17 <sup>00</sup>		K É M		JATE23		KLTE14		VE5		JATE37
17 <sup>15</sup>	K É M	JPTE6	EKTF1		JATE14					
17 <sup>30</sup>	SZÜNET									
17 <sup>45</sup>	S Z A K M Ó D S Z	BGYTF1	A N A L  K É M	ELTE25			S Z E R V E T L E N	ELTE19		
18 <sup>00</sup>		BGYTF2		KLTE11				JATE17		
18 <sup>15</sup>		JPTE8		JATE4				ELTE21		
18 <sup>30</sup>		JPTE2		JATE26				ELTE11		
18 <sup>45</sup>				JPTE4						
VACSORA										

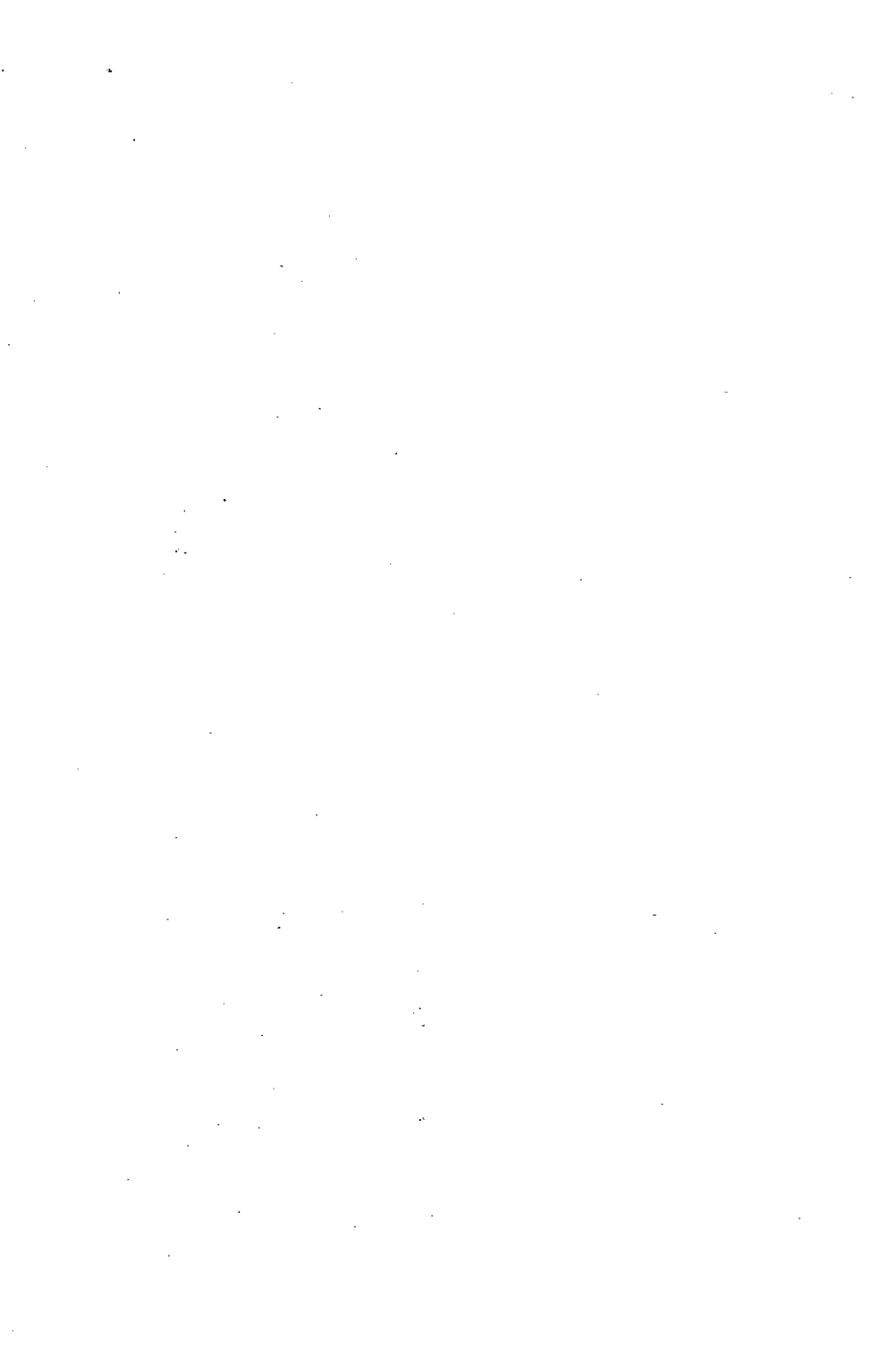
A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekciójának alszekciók szerinti elhelyezése

Janus Pannonius Tudományegyetem, Természettudományi Kar, A épület  
Pécs, Ifjúság út 6.

1997. április 3.

Idő	ELŐADÓTERMEK									
	A 244		A 245		A 246		A 353		A 355	
9 <sup>00</sup>	E L M és F I Z  K E M	ELTE7	S Z E R V E S  K E M	BME20	R E A K C  és K A T	JATE36	K E M  T E C H N O L	BME12		
9 <sup>15</sup>		JATE21		BME15		BME5		BME13		
9 <sup>30</sup>		JATE31		ELTE6		VE3		ELTE1		
9 <sup>45</sup>		JPTE3		ELTE9		JATE18		JATE2		
10 <sup>00</sup>		VE20		JATE16		JATE13		JATE12		
10 <sup>15</sup>				JATE29		JATE30		ELTE14		
SZÜNET										
10 <sup>45</sup>	E L M és F I Z	JATE7	S Z E R V E S  K E M		R E A K C  és K A T		K E M  T E C H N O L			
11 <sup>00</sup>		ELTE12		KLTE3		KLTE8		VE7		
11 <sup>15</sup>		ELTE13		KLTE5		JATE15		JATE11		
11 <sup>30</sup>		JPTE5		VE6		VE14		JATE28		
11 <sup>45</sup>		JATE40		JATE10		BME18		VE1		
12 <sup>00</sup>		ELTE3		JATE33		BME25				
12 <sup>15</sup>				JATE34		JATE24				
12 <sup>30</sup>		JATE27	JATE9							
EBÉDSZÜNET										





## AZ ALSZEKCIÓK PROGRAMJA

Április 2. délelőtt**III. Elméleti és fizikai kémia****A 244 teremben****10.30 Drucker Tamás****BME 4***DPPC-víz liposzóma rendszer gél fázisainak kisszögű röntgen diffrakciós vizsgálata**Témavezető: Dr. Bóta Attila**Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék**Szak: IV. évf. vegyészmérnök***10.45 Merényi László****VE 16***Termodinamikai egyensúlyi diagramok szerkesztése**Témavezető: Dr. Kristóf Tamás**Intézmény: Veszprémi Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék**Szak: V. évf. környezetmérnök***11.00 Torma Viktória****ELTE 23***Oxigénredukció vizsgálata aranyelektrodon impedanciaspektroszkópiával**Témavezető: Láng Győző**Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék**Szak: IV. évf. vegyész***11.15 Baranyi László****JATE 1***A talaj organo-komplexeinek modellezése agyagásványok szerves felületmódosításával**Témavezető: Dr. Tombácz Etelka**Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Kolloidkémiai Tanszék**Szak: V. kémia-fizika tanár***11.30 Budavári Viktória****JATE 3***Nafionba ágyazott glükóz-oxidáz enzim elektrokémiai vizsgálata**Témavezető: Dr. Novák Mihály**Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék**Szak: V. évf. vegyész***11.45 Szabó Klára****JPTE 9***A dimerizáció hatása a metilénkék redoxi- és spektroszkópiai tulajdonságaira**Témavezető: Dr. Kovács Barna**Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék**Szak: IV. évf. kémia-földrajz*

Április 2. délelőtt

**II. Szerves kémia**

**A 245 teremben**

**10.30 Balázs Barbara**

**BME 1**

*2,4-Diaril-2,3-dihidro-1,5-benzotiazepinek acilezési termékeinek vizsgálata modern NMR módszerekkel*

*Témavezető: Dr. Tóth Gábor*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Általános és Analitikai Kémiai Tanszék*

*Szak: PhD.*

**10.45 Köntös Zoltán, Horváth György**

**BME 14**

*Piridin egységet tartalmazó királis korona-éterek szintézise racém ammóniumsók kromatográfiás felbontása céljából*

*Témavezető: Dr. Huszthy Péter*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyészmérnök*

**11.00 Szarvas Szilvia**

**ELTE 16**

*Spiroszulfuránok királis folyadékromatográfiája*

*Témavezető: Dr. Szókán Gyula, Dr. Majer Zsuzsa*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. biológia-kémia tanár*

**11.15 Rákó János**

**KLTE 10**

*Parciálisan és teljesen benzilezett glikozil-azidok szintézise N-glikopeptidek előállításához*

*Témavezető: Dr. Kerékgyártó János*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Biokémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**11.30 Szuromi Endre**

**KLTE 13**

*Térhálósodó kopolimerek előállítása és vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Borbély János*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész-angol szakfordító*

**11.45 Szieberth Dénes**

**BME 23**

*Foszfinin -2-ilidén. Egy előállítható karbén?*

*Témavezető: Dr. Nyulászi László*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szeretlen Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

*Április 2. délelőtt*

**IX. Környezeti kémia és környezettechnológia A 246 teremben**

**10.30 Jávorszky Eszter**

**ELTE 2**

*Poliaromás szénhidrogének meghatározása ipari szennyvizekből*

*Témavezető: Dr. Torkos Kornél*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**10.45 Takáts Zoltán**

**ELTE 20**

*Klórozott benzolszármazékok vizsgálata talaj- és talajvízmintákban*

*Témavezető: Dr. Torkos Kornél*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**11.00 Román Renáta, Somló Edina**

**ME 1**

*Miskolc levegőtisztasági helyzete*

*Témavezető: Dr. Raisz Iván, Dr. Lénárt László*

*Intézmény: Miskolci Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. kohómérnök*

**11.15 Buchert Eszter, Kóczán Katalin**

**JPTE 1**

*A Dráva nem védett holtágainak vízminőségi alapállapot felvétele*

*Témavezető: Dr. Mayer József, Horváth Győző*

*Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem, Ökológia és Állatföldrajzi Tanszék*

*Szak: V. évf. biológia tanár*

**11.30 Nényei Árpád**

**VE 8**

*A légköri szennyeződés terjedésének szimulációja állandó és változó viszonyok mellett, környezeti sugárterhelés becslése*

*Témavezető: Dr. Kanyár Béla*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Radiokémiai Tanszék*

*Szak:*

**11.45 Csősz Katalin**

**VE 2**

*Környezetbarát flokkulációszer alkalmazása ivóvíztisztításban*

*Témavezető: Dr. Dencs Béláné*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Vegyipari Művelési Tanszék*

*Szak: V. évf. környezetmérnök*

Április 2. délelőtt**VI. Biokémia, biotechnológia, agrokémia****A 353 teremben****10.30 Csikász-Nagy Attila, Győrffy Béla****BME 2***A hasadó élesztő sejtciklusának matematikai modellezése**Témavezető: Dr. Novák Béla**Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék**Szak: IV. évf. biomérnök***10.45 Sárossy Gábor****BME 22***A weel és a cdc25 gén szerepe a hasadó élesztő mitózis méretkontrolljában**Témavezető: Sveiczter Ákos**Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék**Szak: V. évf. vegyész mérnök***11.00 Kupihár Zoltán****JATE 22***Bázikus oligonukleotid-foszforamidátok**Témavezető: Dr. Bottka Sándor**Intézmény: József Attila Tudományegyetem, MTA SZBK Növénybiológia**Szak: PhD.***11.15 Mihala Nikolett****ELTE 26***Kétfős specificitású biokonjugátumok szintézise**Témavezető: Dr. Hudecz Ferenc, Dr. Mező Gábor**Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem-MTA, Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport**Szak: V. vegyész***11.30 Hodosi Etelka****BME 10***Hazai sajtók jellemzése a biológiailag aktív N-tartalmú komponensei alapján**Témavezető: Simonné Dr. Sarkadi Livia**Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Biokémia és Élelmiszertechnológiai Tanszék**Szak: PhD.***11.45 Pászt Éva****BME 21***Natív cellulóz hozzáférhetőségének változása cellulolitikus enzimekkel szemben, előzetes reaktív színezés után**Témavezető: Dr. Vig András, Dr. Réczey Istvánné**Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Technológia Tanszék**Szak: PhD.*

*Április 2. délután*

**III. Elméleti és fizikai kémia**

**A 244 teremben**

**14.00 Kállay Mihály**

**ELTE 4**

*Jahn-Teller distortion in medium-sized fullerenes*

*Témavezető: Surján Péter*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**14.15 Lázár Armand**

**ELTE 8**

*Fullerénpolimerek STM képeinek számítása egy egyszerű modell alapján*

*Témavezető: Surján Péter*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**14.30 Csizsár Marika**

**JATE 6**

*C<sub>70</sub> fullerén filmek elektrokémiai vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Szűcs Árpád*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**14.45 Szekeres Zsolt**

**ELTE 17**

*Láthatatlan atomok a grafit felszínén*

*Témavezető: Surján Péter*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Kémiai Tanszék*

*Szak: II. évf. vegyész*

**15.00 Filipcsei Genovéva**

**JATE 8**

*Szalicilát adszorpció hatása a kaolinit felületi tulajdonságaira víz-es rendszerekben*

*Témavezető: Dr. Tombác Etelka*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Kolloidkémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**15.15 Urbin Zita**

**KLTE 15**

*A radioaktív szennyező <sup>60</sup>Co<sup>2+</sup>-ion határfelületi reakciója Ca-montmorillonit agyagásvány modellanyagon*

*Témavezető: Dr. Nagy Noémi*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Izotópalkalmazási Tanszék*

*Szak: okl. vegyész (1996)*

Április 2. délután

**II. Szerves kémia**

**A 245 teremben**

**14.00 Fogassy Katalin**

**BME 6**

*Poláris fémorganikus vegyületek szelektív reakciói*

*Témavezető: Dr. Faigl Ferenc*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész-mérnök*

**14.15 Gerencsér János, Macsári István**

**BME 7**

*Isoplagiochin A(?) szintézise*

*Témavezető: Dr. Nógrádi Mihály*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. szerves és biomérnök*

**14.30 Szlávik Zoltán**

**ELTE 18**

*Perfluoralkil-csoportot tartalmazó amfifil vegyületek előállítása és jellemzése*

*Témavezető: Dr. Rábai József*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**14.45 Varga Jenő**

**ELTE 24**

*Optikailag aktív szulfóniumsók előállítása*

*Témavezető: Szabó Dénes*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**15.00 Krecz Ágnes**

**KLTE 7**

*Mesterséges proteinek előállítása rekombináns DNS technikával*

*Témavezető: Dr. Borbély János*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész-angol szakfordító*

**15.15 Jerga Ágoston**

**KLTE 6**

*Kísérletek természetes eredetű dihidroizokumarinszármazékok enantioszelektív előállítására*

*Témavezető: Dr. Antus Sándor*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: III. évf. vegyész*

Április 2. délután

**IX. Környezeti kémia és környezettechnológia A 246 teremben**

**14.00 Doleshall Fruzsina, Járosi László, Kiss Katalin BME 3**

*Közreműködés atomerőművi szilárd radioaktív hulladék minősítésében*

*Témavezető: Dr. Gresits Iván, Dr. Ormai Péter*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,  
Paksi Atomerőmű Rt.*

*Szak: III. évf. vegyészmérnök*

**14.15 Várkonyi Zoltán VE 15**

*A mecseki uránbánya zagytározóinak rekultivációs elemzése*

*Témavezető: Dr. Kanyár Béla*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Radiokémia Tanszék*

*Szak: V. évf. környezetmérnök*

**14.30 Chikán Viktor**

*Az allil-alkohol adszorpciójának és reakciójának vizsgálata Y-EAC típusú zeolit katalizátorokon*

*Témavezető: Dr. Kiricsi Imre, Dr. Halász János*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

JATE 5

**14.45 Kollár Tibor**

*Halogéntartalmú szénhidrogének bomlása Y-zeolitokon*

*Témavezető: Dr. Kiricsi Imre, Kónya Zoltán*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

JATE 19

**15.00 Mikó Éva, Lenkei Tünde, Szőnyi Mónika BME 17**

*Környezetkímélő élelmiszeripari technológiák*

*Témavezető: Nagy József*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem*

*Szak: V. évf. vegyészmérnök*



Április 2. délután

**VI. Biokémia, biotechnológia, agrokémia**

**A 353 teremben**

**14.00 Hegedüs Gyöngyvér**

**BME 9**

*Immunoanalitikai (ELISA) rendszer kidolgozása és alkalmazása növényi hormonok kimutatására*

*Témavezető: Dr. Székács András, Dr. László Elemér*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Mezőgazdasági Kémia Technológia Tanszék*

*Szak: V. évf. biológusmérnök*

**14.15 Vágási Mónika**

**BME 24**

*Inert felületen a baktériumok megkötődését stimuláló gének meghatározása Escherichia coli modellen*

*Témavezető: Dr. Csikor Zsolt*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Vegyészkari Fejlesztő Laboratórium*

*Szak: V. évf. biológusmérnök*

**14.30 Tobisch Zsuzsanna**

**ELTE 22**

*Akutfázis fehérjék kvantitatív meghatározása HepG2 sejtek fejtűhúsójából ELISA módszerrel*

*Témavezető: Bősze Szilvia, Dr. Hudecz Ferenc*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, MTA-Peptidkémiai Kutatócsoport*

*Szak: III. évf. biológus*

**14.45 Kriván Emese**

**JATE 20**

*Vezető polimerek spektroelektrokémiai vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Visy Csaba*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**15.00 Csalári Judit**

**KÉE 1**

*A környezetet szennyező nehézfém ionok hatásának vizsgálata az izommunka anaerob szakaszára*

*Témavezető: Dr. Kosáry Judit*

*Intézmény: Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem, Kémia és Biokémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. élelmiszeripari mérnök*

Április 2. délután

**V. Koordinációs kémia**

**A 355 teremben**

**14.00 Török Ibolya**

JATE 35

*Imidazol gyűrűt tartalmazó polidentát ligandumok fémkomplexeinek  
egyensúlyi és szerkezetvizsgálata*

*Témavezető: Dr. Gajda Tamás*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai  
Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**14.15 Ágoston Csaba Gábor**

KLTE 1

*Diszulfidcsoportot tartalmazó peptidszármazék átmenetifém komplexeinek  
egyensúlyi vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Várnagy Katalin, Dr. Sóvágó Imre*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai  
Tanszék*

*Szak: V. évf. kémia-fizika tanár*

**14.30 Bóka Beáta**

KLTE 2

*Metionin tartalmú tripeptidek átmenetifém komplexei*

*Témavezető: Dr. Várnagy Katalin, Dr. Sóvágó Imre*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai  
Tanszék*

*Szak: IV. évf. kémia-fizika tanár*

**14.45 Kilyén Melinda**

JATE 38

*A nitraxepam, oxaxepam átmeneti fémekkel alkotott komplex vegyületei*

*Témavezető: Dr. Forizs Edit, Dr. Labádi Imre*

*Intézmény: Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Szervetlen Kémiai Tanszék  
JATE, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

*Szak: magiszteri hallgató*

**15.00 Enyedý Éva Anna**

KLTE 4

*Kalcium(II)- és magnézium(II)ionok kölcsönhatásának vizsgálata hidroxámsavakkal*

*Témavezető: Dr. Farkas Etelka*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai  
Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**15.15 Szabó Miklós**

VE 12

*Egy magvú alkil- és acil-kobalt-trikarbonil-foszfin komplexek szerkezeti  
jellegzetességeinek vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Bencze Lajos*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész-mérnök*

Április 2. délután

**III. Elméleti és fizikai kémia**

**A 244 teremben**

**16.00 Hajgató Balázs**

**BME 8**

*Szilülének stabilitásának kérdései. A  $\{C_2 H_4 N_2 Si\}$  potenciálfelület vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Veszprémi Tamás*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyészmérnök*

**16.15 Kárpáti Tamás, Soós László**

**BME 11**

*Allil-foszfinok és allil-arzinok tér- és elektronszerkezetének vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Nyulászi László*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyészmérnök*

**16.30 Schenker Ivonn**

**VE 10**

*Norbornén oligomerek molekulamechanikai vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Bencze Lajos*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyészmérnök*

**16.45 Steiner Csaba**

**VE 11**

*Szteroidok modellezése*

*Témavezető: Dr. Bencze Lajos*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. kémia-számítástechnika tanár*

**17.00 Lagzi István**

**JATE 23**

*A klorit-tetrationát front instabilitásának vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Tóth Ágota, Dr. Horváth Dezső*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. kémia-fizika tanár*

**17.15 Rosinger Boglárka**

**JPTE 6**

*Vibrációs átmenetek irányítottságának kvantumkémiai vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Kunsági-Máté Sándor*

*Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: kémia-matematika tanár (1996)*

Április 2. délután

**I. Analitikai kémia**

**A 245 teremben**

**16.00 Novák Tibor**

**BME 19**

*Enantiomerek elválasztása nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával*

*Témavezető: Dr. Fekete Jenő*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Általános és Analitikai Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. szerves és biomérnök*

**16.15 Pápai Zsuzsa**

**ELTE 10**

*Kirotitikai detektálás a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában*

*Témavezető: Dr. Szókán Gyula, Dr. Majer Zsuzsanna*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. kémia-fizika tanár*

**16.30 Végvári Ákos**

**JPTE 10 POTE**

*Új kapilláris izoelektromos fókuszálási rendszer uncoated kapillárisban*

*Témavezető: Dr. Kilar Ferenc*

*Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem*

*Szak: okl. biológia tanár*

**16.45 Kissné Németh Enikő, Varga Zoltán**

**VE 19**

*Alifás karbonsavak folyadékkromatográfiás elválasztása és retenciósi adatainak becslése kémiai egyensúlyi számítások alapján*

*Témavezető: Dr. Hajós Péter*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem*

*Szak: V. évf. vegyész-mérnök*

**17.00 Török János**

**KLTE 14**

*Kvaterner ammónium-vegyületekre érzékenyített membránok készítése, vizsgálata és alkalmazása*

*Témavezető: Dr. Kovácsné Dr. Hadady Katalin*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**17.15 Tomori Tünde**

**EKTF 1**

*Szilárd fázisú mikroextrakciós technika SPME alkalmazása a borok aromakomponenseinek vizsgálatában*

*Témavezető: Vas György, Dr. Lékó László*

*Intézmény: Eszterházy Károly Tanárképző Főiskola, Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. matematika-kémia tanár*

Április 2. délután

**X. Környezeti kémia és környezettechnológia A 246 teremben**

**16.00 Márki Edit**

**BME 16**

*Regenerálható SO<sub>2</sub>-abszorpció töltött oszlopon*

*Témavezető: Békássyné Dr. Molnár Erika*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Vegyipari Műveletek Tanszék*

*Szak: okl. vegyész mérnök*

**16.15 Kazinczy Béla**

**ELTE 5**

*A nikkell és a vanádium kémiai formáinak minőségi és mennyiségi analízise*

*olajtüzelésű erőmű környékén vett szállópor mintákban*

*Témavezető: Dr. Záray Gyula*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Technológiai és*

*Környezeti kémiai Tanszék*

*Szak: PhD.*

**16.30 Méhn Dóra**

**JATE 25**

*Nitrogén-oxidok ZSM-5-alapú zeolítkatalizátorokon történő bomlásának vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Halász János, Dr. Schöbel György*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. biológia-kémia tanár*

**16.45 Tamási Anikó**

**JATE 32**

*Kétfémes zeolítkatalizátorok (Pt/CuZSM-5 és Pt/CoZSM-5) előállítás és jellemzése*

*Témavezető: Dr. Halász János, Dr. Kiricsi Imre*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**17.00 Illés Krisztina , Illés Szabolcs**

**VE 5**

*Cianidionok fotooxidációja TiO<sub>2</sub> felületen*

*Témavezető: Dr. Horváth Attila*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Általános és Szerveetlen Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész mérnök*

Április 2. délután

**XI. Szervetlen kémia**

**A 353 teremben**

**16.00 Nagy Barnabás**

**VE 17**

*Fázisátalakulás vizsgálata a  $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-K}_2\text{O-CaO-P}_2\text{O}_5\text{-F}$  üveggerámia rendszerben*

*Témavezető: Dr. Szabó István*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szilikát és Anyagmérnöki Tanszék*

*Szak: III. évf. anyagmérnök*

**16.15 Zenkovics Ferenc**

**VE 18**

*Vas adalék hatása az  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{xFe}_x\text{O}_y$  összetételű szupravezető kerámiák tulajdonságára*

*Témavezető: Eniszné Dr. Bódogh Margit*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szilikát és Anyagmérnöki Tanszék*

*Szak: III. évf. műszaki menedzser*

**16.30 Sallai Mónika , Weisz Márta**

**VE 9**

*Közlekedési balesetek izzólámpamaradványainak mikroszkópos vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Kovács Kristóf*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Nagyműszer Laboratórium*

*Szak: III. évf. vegyész*

**16.45 Petrohán Krisztina**

**KLTE 9**

*Fémion indukált amid-NH deprotonálódás a 2-hidroxi-hippursav VO(IV) komplexében*

*Témavezető: Dr. Kiss Tamás, Dr. Buglyó Péter*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. matematika-kémia tanár*

Április 2. délután

**V. Koordinációs kémia**

**A 355 teremben**

**16.00 Szakács Zoltán**

**ELTE 15**

*A glutation mikrospeciációja és kiroptikai tulajdonságai*

Témavezető: *Dr. Noszál Béla, Nyíri Judit*

Intézmény: *Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

Szak: *IV. évf. vegyész*

**16.15 Szilágyi Magdolna, Nagy Zoltán**

**KLTE 12**

*A palládium (II)-tioéter kölcsönhatást tartalmazó rendszerek egyensúlyi viszonyai*

Témavezető: *Dr. Sóvágó Imre*

Intézmény: *Kossuth Lajos Tudományegyetem,*

Szak: *V. évf. matematika-kémia tanár*

**16.30 Szatura Ágnes, Szintay Gergely**

**VE 13**

*A cink- és a réz-tetrafenil-porfirin fotofizikai és fotokémiai tulajdonságainak összehasonlítása*

Témavezető: *Dr. Horváth Attila*

Intézmény: *Veszprémi Egyetem, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék*

Szak: *okl. angol-kémia tanár (1996)*

**16.45 Hegedüs Csaba**

**VE 4**

*Új királis foszfin-foszfit ligandumok szintézise*

Témavezető: *Dr. Bakos József*

Intézmény: *Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék*

Szak: *PhD.*

**17.00 Deák Andrea**

**JATE 37**

*Új bisz-triazén ligandumok Co(II) és Cu(II) komplexek előállítására és jellemzése*

Témavezető: *Venter Monica, Dr. Forizs Edit*

Intézmény: *Babes-Bolyai Tudományegyetem, Szervetlen Kémiai Tanszék*

Szak: *V. évf. kémia-fizika tanár*

**17.15 Jankovics Hajnalka**

**JATE 14**

*N-acetil aminosavak trifenilón(IV) komplexek előállítására és szerkezetvizsgálata*

Témavezető: *Dr. Nagy László, Buzás Norbert*

Intézmény: *József Attila Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

Szak: *V. évf. matematika-kémia tanár*

**17.30 Slobodan B. Gažurić**

**JATE 39**

*Cationic lead(II) chloride and bromide complex formation in molten  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4,7 \text{H}_2\text{O}$*

Témavezető: *István J. Zsigrai*

Intézmény: *Újvidéki Egyetem, Kémiai Tanszék, JATE*

Szak: *IV. évf. vegyész*

*Április 2. délután*

**X. Kémiai szakmódszertan**

**A 244 teremben**

**17.45 Szubi Erika**

**BGYTF 1**

*Számítógépes oktatóprogram készítése (szénvegyületek)*

*Témavezető: Sarka Lajos*

*Intézmény: Bessenyei György Tanárképző Főiskola, Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. biológia-kémia tanár*

**18.00 Tóth Antal Attila**

**BGYTF 2**

*Számítógépes oktatóprogram készítése és alkalmazhatóságának vizsgálata*

*Témavezető: Sarka Lajos*

*Intézmény: Bessenyei György Tanárképző Főiskola, Kémiai Tanszék*

*Szak: okl. biológia-kémia tanár (1996)*

**18.15 Szabados Zsuzsanna**

**JPTE 8**

*A környezetszennyezés hatásának szemléltetése a 7. és 8. osztályos kémia tananyagban*

*Témavezető: Dr. Erdősi Ferencné*

*Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem, Analitikai és Szerkezeti Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. biológia-kémia tanár*

**18.30 Michielutti Anita, Schmidt Róbert**

**JPTE 2**

*Környezetbarát szemlélet alakítása a kémia eszközeivel a 13-14 éves tanulóknak*

*Témavezető: Dr. Halblender Anna*

*Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem, Analitikai és Szerkezeti Kémia Tanszék*

*Szak: III. évf. matematika-kémia tanár*



Április 2. délután**I. Analitikai kémia**

A 245 teremben

**17.45 Virág István**

ELTE 25

*Új kinetikai modell és kiértékelési módszer alkalmazása az amorf ötvözetek átkristályosodására*

Témavezető: Dr. Pöppel László, Dr. Várhegyi Gábor

Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Szak: PhD.

**18.00 Sógor Csilla**

KLTE 11

*Cr (VI) on-line szorpciós dúsítása és atomspektrometriás meghatározása FI-HHPN mintabevitellel*

Témavezető: Dr. Posta József

Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Szak: okl. vegyész

**18.15 Buzder-Lantos Lajos**

JATE 4

*A <sup>125</sup>I nuklid aktivitásának meghatározása folyadékszcintillációs mérés technikával*

Témavezető: Dr. Novák Mihályné Dr. Hajdú Éva

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szilárdtest- és Radiokémiai Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

**18.30 Mogyorósi Károly**

JATE 26

*Környezeti minták nehézfém-tartalmának potenciometriás stripping mérése*

Témavezető: Dr. Galbács Zoltán

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Szak: IV. évf. vegyész

**18.45 Nagy Tamás**

JPTE 4 POTE

*"Szent László pénze" (nummulites) kémiai analízise*

Témavezető: Dr. Kellermayer Miklós

Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem,

Pécsi Orvostudományi Egyetem

Szak: III. évf., ÁOK

Április 2. délután

**XI. Szervetlen kémia**

**A 353 teremben**

**17.45 Sztáray Bálint**

**ELTE 19**

*Magánospár-kölcsönhatás konformációfüggése As-As és Sb-Sb kötésű fémorganikus vegyületekben*

*Témavezető: Szepes László, Szalay Péter*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**18.00 Kiricsi Mónika**

**JATE 17**

*A Fourier transzformációs rezgési spektroszkópia egy lehetséges orvosi alkalmazása. Vesekövek osztályozása*

*Témavezető: Dr. Berkes Ottó*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**18.15 Tarczay György**

**ELTE 21**

*TiCl<sub>4</sub>-2L komplexek (L: piridin, pirazin, triazin) szerkezete és bomlása*

*Témavezető: Szepes László*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**18.30 Rosta Edina**

**ELTE 11**

*A (C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>Zr (BH<sub>4</sub>)<sub>2</sub> molekula tér- és elektronszerkezetének vizsgálata*

*Témavezető: Sztáray Bálint, Szepes László*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék*

*Szak: II. évf. vegyész*

Április 3. délelőtt

**III. Elméleti és fizikai kémia**

**A 244 teremben**

**9.00 Kerner Zsolt**

ELTE 7

*Izzólámpák impedanciaspektroszkópiája*

*Témavezető: Dr. Pajtkossy Tamás*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, KFKI Atomenergia Kutató Intézet*

*Szak: V. évf. vegyész*

**9.15 Kóta Zoltán**

JATE 21

*Fotoszintetikus szervezetek nehézfém stresszre bekövetkező szerkezeti változásainak vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Szalontai Balázs*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, MTA-SZBK Biofizikai Intézet*

*Szak: V. évf. vegyész*

**9.30 Szorcsik Attila**

JATE 31

*Mikroemulziók stabilitása, nanorészecskék előállítása mikroemulziókban*

*Témavezető: Dr. Balázs János*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Kolloidkémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**9.45 Hartvig Nóra**

JPTE 3

*Energiatranszfer vizsgálata tripaflavin-rodamin B modellrendszeren*

*Témavezető: Dr. Kunsági-Máté Sándor*

*Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem*

*Általános és Fizikai Kémiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. biológia-kémia tanár*

**10.00 Galamb Szabolcs**

VE 20

*Elektronmikroszkópos képek minőségének javítása számítógépes képfeldolgozással*

*Témavezető: Dr. Kovács Kristóf*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Nagyműszeres Laboratórium*

*Szak: vegyész mérnök*

Április 3. délelőtt

**II. Szerves kémia**

**A 245 teremben**

**9.00 Novák Tibor**

**BME 20**

*A 6,6-diklór-3-foszfabiciklo[3.1.0] hexán-3-oxidok katalitikus hidrogénezési reakcióinak vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Keglevich György*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerveskémia és Technológia Tanszék*

*Szak: V. évf. szerves és biomérnök*

**9.15 Le Thanh Giang**

**BME 15**

*N-(p-Metoxi-fenil)-csoport oxidációjának vizsgálata a tetrazolil csoporttal helyettesített  $\beta$ - és  $\gamma$ -laktámok körében*

*Témavezető: Dr. Fetter József*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: PhD.*

**9.30 Kele Péter**

**ELTE 6**

*Fluoreszcens peptidok és peptidárak*

*Témavezető: Dr. Sebestyén Ferenc*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. biológia-kémia tanár*

**9.45 Nagy Péter**

**ELTE 9**

*1,8- Helyzetben kénnel diszubsztituált naftalinvegyületek előállítása és szerkezetük vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Kapovits István, Dr. Kálmán Alajos*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**10.00 Kámán Judit**

**JATE 16**

*4-Telíteilen-3-aminoszteroidok előállítása*

*Témavezető: Dr. Vincze Irén*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**10.15 Sebők Ferenc**

**JATE 29**

*Szteroid acetátok szelektív dezacetilezési és acilvándorlási reakciójának vizsgálata  $Al_2O_3$ -on mikrohullámú energiaközlés hatására*

*Témavezető: Dr. Schneider Gyula*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

Április 3. délelőtt

**IV. Reakciókinetika és katalízis** A 246 teremben

9.00 Varga Mónika

JATE 36

*Pd-Zr örvözetek termikus és katalitikus vizsgálata*

Témavezető: Dr. Molnár Árpád

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

9.15 Farkas Gabriella

BME 5

*Enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezések*

Témavezető: Dr. Tungler Antal

Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Szak: V. évf. vegyészmérnök

9.30 Gulyás Henrik

VE 3

*Új típusú vízőldható monotercier foszfinok szintézise és homogénkatalitikus alkalmazásuk*

Témavezető: Dr. Bakos József

Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

Szak: PhD.

9.45 Kis Attila

JATE 18

*Adszorbeált azometán bomlása és  $\text{CH}_3$ -gyök előállítása  $\text{Rh}(\text{I})$  felületén*

Témavezető: Dr. Kiss János, Dr. Solymosi Frigyes

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, MTA-Reakciókinetikai Tanszéki Kutatócsoport

Szak: V. évf. vegyész

10.00 Hrivnák Béla

JATE 13

*Réteges szerkezetű anyagok kitémasztása savas és bázikus közegben*

Témavezető: Dr. Kiricsi Imre

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

Szak: IV. évf. vegyész

10.15 Szathmáry Mónika

JATE 30

*Alumínium tartalmú magadiüt szintézise és kitémasztása szerves ionokkal*

Témavezető: Dr. Kiricsi Imre, Fudala Ágnes

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

Szak: IV. évf. vegyész

Április 3. délelőtt

**VII. Kémiai technológia**

**A 353 teremben**

**9.00 Kassai Csaba**

**BME 12**

*Racém alkoholok O,O-dibenzoil-2R,3R- borkósavval képzett komplexen keresztül történő resolválása, a komplexek termoanalitikai és röntgendiffrakciós vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Kozma Dávid, Dr. Sztatisz Janisz*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*

*Szak: V. évf. szerves és biomérnök*

**9.15 Katona Zoltán**

**BME 13**

*Mandulásav-észterek resolválása koordinációs komplexek alkalmazásával*

*Témavezető: Mravik András, Dr. Fogassy Elemér*

*Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*

*Szak: okl. vegyészmérnök*

**9.30 Csesztregi Tamás, Erdődi Gábor**

**ELTE 1**

*Poli(éter szulfon) kémiai módosítása*

*Témavezető: Dr. Máthé Árpád*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Technológia és*

*Környezatkémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**9.45 Bozsó Zsolt**

**JATE 2**

*Hexánizomerek elválasztása zeolitokon*

*Témavezető: Dr. Halász János, Dr. Kiricsi Imre, Dr. Tasi Gyula*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**10.00 Horváth Anita**

**JATE 12**

*Szelektív oxidációs reakciók tanulmányozása titán-szilikáti katalizátorokon*

*Témavezető: Dr. Halász János*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**10.15 Szabó Edit**

**ELTE 14**

*Ferroelektromos folyadékkristály elegyek vizsgálata*

*Témavezető: Fodorné Dr. Csorba Katalin, Dr. Varga Imre*

*Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, MTA-KFKI Szilárdtestfizikai*

*Kutatóintézet*

*Szak: PhD.*

Április 3. délelőtt

**III. Elméleti és fizikai kémia**

A 244 teremben

**10.45 Dunai Beáta**

JATE 7

*Szilika szuszpenziók stabilizálása/destabilizálása kationaktív tenziddel*

Témavezető: Dr. Szekeres Márta

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Kolloidkémiai Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

**11.00 Somogyi András**

ELTE 12

*Konfidenciatartomány számítása likelihood ratio módszerrel*

Témavezető: Dr. Keszei Ernő

Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Radiológiai Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

**11.15 Szabados Ágnes**

ELTE 13

*Csillapított perturbációszámítás kvázi-degenerált esetekben*

Témavezető: Dr. Surján Péter

Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Kémiai Tanszék

Szak: IV. évf. vegyész

**11.30 Román Hedvig**

JPTE 5

*Predomináns vibronikus átmenetek vizsgálata*

Témavezető: Dr. Kunsági-Máté Sándor

Intézmény: Janus Pannonius Tudományegyetem

Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

Szak: IV. évf. matematika-kémia tanár

**11.45 Anton Kiss**

JATE 40

*Matrices within the Matrix Operator  $W_{(M1, M2, M3)}$*

Témavezető:

Intézmény: Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémiai Intézet, JATE

Szak: V. évf. vegyész

**12.00 Juhász Gergely**

ELTE 3

*$Ba_{0.95}Ca_{0.05}Fe_{0.8}Co_{0.2}O_{3-x}$  összetételű perovszkit vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiás módszerekkel*

Témavezető: Dr. Homonnay Zoltán

Intézmény: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Magkémia Tanszék

Szak: IV. évf. vegyész

Április 3. délelőtt

**II. Szerves kémia**

**A 245 teremben**

**11.00 Czakó Barbara**

**KLTE 3**

*Nitrogéntartalmú morfináندیének szintézise és átalakítása*

*Témavezető: Dr. Berényi Sándor*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**11.15 Garadnay Sándor**

**KLTE 5**

*A tebain Diels-Alder adduktjai izomerizációjának vizsgálata. A  $\beta$ -nepenton első előállítás*

*Témavezető: Dr. Makleit Sándor, Dr. Marton János*

*Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyész*

**11.30 Jeges György**

**VE 6**

*Szteroidok átalakítása kapcsolási és Diels-Alder reakcióban*

*Témavezető: Skodáné Dr. Földes Rita*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak:*

**11.45 Hajnal Andrea**

**JATE 10**

*Szteroid-oxetánok savnitrilekkel történő gyűrűbővülési reakciója*

*Témavezető: Dr. Schneider Gyula*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**12.00 Tömböly Csaba**

**JATE 33**

*Szteroidok oxidációja kálium-permanganáttal*

*Témavezető: Dr. Vincze Irén*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**12.15 Tapolcsányi Pál**

**JATE 34**

*Izomer 16-metil-szteroidok előállítása és szerkezetigazolása*

*Témavezető: Dr. Schneider Gyula*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*Szak: PhD.*

**12.30 Péter Mária**

**JATE 27**

*Cikloalkán vázas  $\beta$ -aminosavak HPLC-s elválasztása*

*Témavezető: Dr. Péter Antal*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*



Április 3. délelőtt

**IV. Reakciókinetika és katalízis** A 246 teremben

**11.00 Lente Gábor**

KLTE 8

*A szulfition vas (III)-katalizált autooxidációja*

Témavezető: Dr. Fábán István

Intézmény: Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

**11.15 Jordán Sándor**

JATE 15

*Az infravörös spektroszkópia kinetikai alkalmazhatósága. Az aldolkondenzáció vizsgálata*

Témavezető: Dr. Berkes Ottó, Peintler Gábor

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

**11.30 Tuba Róbert**

VE 14

*2,2,6,6-Tetrametil-piperidil-1-oxil szabadgyök és oktakarbonil-dikobalt reakciójának kinetikai vizsgálata*

Témavezető: Dr. Ungváry Ferenc

Intézmény: Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

Szak: IV. évf. környezetmérnök

**11.45 Nagygyörgy Szilveszter, Visegrádi András**

BME 18

*A Belousov-Zsabotyinszkij oszcilláló reakció mechanizmusának vizsgálata*

Témavezető: Dr. Noszticzius Zoltán, Pintér Szilveszter

Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Kémiai Fizika Tanszék

Szak: V. évf. szerves és biomérnök

**12.00 Volford András**

BME 25

*A platina mint 'klorit szelektív elektród' klórdioxid alapú oszcillációs reakcióban*

Témavezető: Dr. Wittmann Mária

Intézmény: Budapesti Műszaki Egyetem, Kémiai Fizika Tanszék

Szak: V. évf. szerves és biomérnök

**12.15 Major Andrea, Siska Andrea**

JATE 24

*A reakciók kezdeti koncentrációinak hatása a klorit-tetrationát front sebességére*

Témavezető: Dr. Tóth Ágota, Dr. Horváth Dezső

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

Szak: IV. évf. vegyész

**12.30 Fráter Zoltán**

JATE 9

*Alkoholok oxidációja oxigénnel*

Témavezető: Dr. Zsigmond Ágnes

Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék

Szak: V. évf. vegyész

Április 3. délelőtt

**VII. Kémiai technológia**

**A 353 teremben**

**11.00 Kiss Gábor, Szabó Csongor**

VE 7

*Motorolaj adalékok színergízmusának vizsgálata*

*Témavezető: Dr. Bartha László*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Ásványolaj és Széntechnológiai Tanszék*

*Szak: IV. évf. vegyészmérnök*

**11.15 Hoffmann Eufrozina Andrea**

JATE 11

*Alkilaromás vegyületek lánc- és átalakítási reakciói zeolitkatalizátorokon*

*Témavezető: Dr. Halász János*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**11.30 Rozmanitz Péter**

JATE 28

*Indiummal és galliummal módosított mikropórusos katalizátorok szerepe a könnyű szénhidrogének átalakításaiban*

*Témavezető: Dr. Halász János, Dr. Kiricsi Imre*

*Intézmény: József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyész*

**11.45 Abonyi János**

VE 1

*Szakaszos polimerizációs reaktor szabályozása Fuzzy-szabályozóval*

*Témavezető: Dr. Szeifert Ferenc, Dr. Nagy Lajos*

*Intézmény: Veszprémi Egyetem, Vegyészmérnöki Kibernetika Tanszék*

*Szak: V. évf. vegyészmérnök*



## *I. ANALITIKAI KÉMIA ALSZEKCIÓ*





I. Analitikai kémia alszekció

<b>Novák Tibor</b>	<i>BME 19</i>	
<i>Enantiomerek elválasztása kromatográfiával</i> .....		43
<b>Pápai Zsuzsa</b>	<i>ELTE 10</i>	
<i>Kioptikai detektálás a nagyhatékonyságú folyadék-</i> <i>kromatográfiában</i> .....		44
<b>Végyári Ákos</b>	<i>JPTE 10</i>	
<i>Új kapilláris izoelektromos fókuszálási rendszer uncoated</i> <i>kapillárisban</i> .....		45
<b>Kissné Németh Enikő, Varga Zoltán</b>	<i>VE 19</i>	
<i>Alifás karbonsavak folyadékkromatográfiás elválasztása és</i> <i>retenciós adatainak becslése kémiai egyensúlyi számítások alapján</i> .....		46
<b>Török János</b>	<i>KLTE 14</i>	
<i>Kvaterner ammónium-vegyületekre érzékenyített membránok</i> <i>készítése, vizsgálata és alkalmazása</i> .....		47
<b>Tomori Tünde</b>	<i>EKTF 1</i>	
<i>Szilárd fázisú mikroextrakciós technika SPME alkalmazása a</i> <i>borok aromakomponenseinek vizsgálatában</i> .....		48
<b>Virág István</b>	<i>ELTE 25</i>	
<i>Új kinetikai modell és kiértékelési módszer alkalmazása az</i> <i>amorf ötvözetek átkristályosodására</i> .....		49
<b>Sógor Csilla</b>	<i>KLTE 11</i>	
<i>Cr (VI) on-line szorpciós dúsítása és atomspektrometriás</i> <i>meghatározása FI-HHPN mintabevitellel</i> .....		50
<b>Buzder-Lantos Lajos</b>	<i>JATE 4</i>	
<i>A <sup>125</sup>I nuklid aktivitásának meghatározása folyadékszintillációs</i> <i>méréstechnikával</i> .....		51
<b>Mogyorósi Károly</b>	<i>JATE 26</i>	
<i>Környezeti minták nehézfém-tartalmának potenciometriás</i> <i>strípping mérése</i> .....		52
<b>Nagy Tamás</b>	<i>JPTE 4</i>	
<i>"Szent László pénze" (nummulites) kémiai analízise</i> .....		53



## ENANTIOMEREK ELVÁLASZTÁSA KROMATOGRÁFIÁVAL

Novák Tibor, V. évf., Szerves és bio. vegyipari Szak

Témavezető: Dr. Fekete Jenő  
BME, Általános és Analitikai Kémia Tanszék

Dolgozatom első részében optikailag aktív izomerek elválasztásával foglalkoztam nagyhatékonyságú folyadékromatográfiával.

Királis álló fázison ( $\beta$ -ciklodextrin) tetrametrin izomereknek az elválasztását valósítottam meg metanol-víz, metanol-acetonitril-víz összetételű eluensokban. Azt tapasztaltam, hogy metanol-víz elegyében nagy elválasztást és szelektivitást lehet elérni, de a komponensek retenciós idői nagyok. Kisebb retenciós időekkel történő elválasztást lehet elérni, ha acetonitril-víz elegyében kromatografálunk, de ez az elválasztás romlását vonja maga után. Ezután megkerestem azt az optimális eluensösszetételt (metanol-acetonitril 1:1 - víz), ahol az elválasztás és szelektivitás még megfelelő és a retenciós idők még elfogadhatóak. Az optimális eluens összetételénél reprodukálhatósági méréseket is végeztem.

Királis additív,  $\beta$ -ciklodextrin-szulfó-butil-éter segítségével krizantémsav izomerek elválasztását vizsgáltam. Azt tapasztaltam, hogy a vizsgálataim körülményei között a krizantémsav optikai izomerjeit nem lehet szétválasztani. A krizantémsav diasztereomerjeit viszont nagy szelektivitással tudtam elválasztani. Megállapítható, hogy a hasonló körülmények között végzett kísérletek kapilláris elektroforézisnél a krizantémsav optikai izomerjeinek elválasztását eredményezték, amíg nagyhatékonyságú folyadékromatográfiánál az elválasztás nem jött létre.

Elvégeztem azon vékonyréteg-kromatográfiás méréseket, amelyek különböző bázisok rezolválhatósága (2R,3R)-borkősavval és O,O-dibenzoil-borkősavval és kromatográfiás viselkedésük közötti feltételezett kapcsolatot próbálja igazolni. Megállapítottam a testvegyületek retenciós faktorának erős hőmérsékletfüggését, ami azt teszi szükségessé, hogy az összetartozó méréseket egyszerre, vagy a hőmérséklet azonos értéken tartása mellett végezzék el. A fentiek az általam vizsgált vegyületek nagy többségére igazak, de a vizsgálatokat más enantiomer párokkal folytatni kell.



## ELTE 10

KIROPTIKAI DETEKTÁLÁS A NAGYHATÉKONYSÁGÚ  
FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁBAN

Pápai Zsuzsa, VI. (V.) évf., kémia-fizika szak

Témavezető: Dr. Szókan Gyula és Dr. Majer Zsuzsanna  
ELTE Szerves Kémia Tanszék, Budapest

*A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiában átfolyóküvetés nagy érzékenységgű királításdetektorok kifejlesztésével lehetőség nyílik optikailag aktív vegyületek, különböző sztereoizomerek detektálása.*

*A Szerves Kémia Tanszéken megoldottuk a nagyhatékonyságú folyadékkromatográf (Labor MIM), a cirkuláris dikrográf (Jobin Yvon Dichrograph-III) és egy UV detektor (Labor MIM) "on-line" kapcsolását (küvetta: Helma Co). Az adatfeldolgozó szoftvert Farkas Ödön PhD hallgató készítette.*

*Feladatom volt a HPLC-CD rendszer működésének kipróbálása és teljesítőképességének meghatározása. Optikailag aktív anyagként krománvázis vegyületek és  $\alpha$ -naftil-etil-amin álltak rendelkezésemre. HPLC rendszerem: RP-C18 oszlop, acetonitril-víz, metanol-víz eluens rendszerek (utóbbi királis ionpároképzőt is tartalmaz).*

*Kísérleteim során optimaltam a kromatográfiás rendszert krománvázis vegyületek illetve racém  $\alpha$ -naftil-etil-amin elválasztására, és bebizonyítottam e HPLC-CD rendszer "on-line" működőképességét és a "stop-flow" módszer alkalmazhatóságát.*

*A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiát együtt alkalmazva kiroptikai detektálással lehetővé válik szerves és szervetlen racémátok hatékony szétválasztása és az enantiomerek megkülönböztetése. Így jelentős elválasztástechnikai módszerhez jutunk, mely felhasználható többek között az (R), (S) enantiomerek preparatív kromatográfiái elválasztásában, amely ma a világon a gyógyszeriparban elsődleges célként van kitűzve.*

ÚJ KAPILLÁRIS IZOELEKTROMOS FÓKUSZÁLÁS RENDSZER UNCOATED  
KAPILLÁRISBAN

Végyvári Ákos, okl. biológia szakos középiskolai tanár (1996)

Témavezető: Dr. Kilar Ferenc  
Pécsi Orvostudományi Egyetem, Központi kutató Laboratórium

*Munkánk céljával a kapilláris izoelektromos fókuszálás módszer fejlesztését tűztük ki, mely a korábban ismert izoelektromos rendszereknél nagyobb felbontást és jobb reprodukálhatóságot biztosít fehérje molekulák elválasztásában. Másodlagos szempontunk a mérések idejének ill. a felhasznált anyagok, így a beruházási költségek csökkentése volt.*

*Aminometilfenol származékokat, mint kis molekulásúlyú pl markereket valamint hemoglobin (egészséges és diabetes mellitusban szenvedő donoroktól származó) mintákat használtunk az új kapilláris izoelektromos fókuszálás rendszer tesztelésére uncoated kapillárisban. A korábbi kapilláris izoelektromos fókuszálás módszerek a minta és az ampholyte oldatokat egy keverékben alkalmazták a kapillárisban. Kísérleteinkben ezen oldatokat külön részletekben juttattuk a kapillárisba, ezt a fajta injektálási protokollt "szendvics ampholyte-minta-ampholyte dugó"-nak neveztük el.*

*Egy PrinCE (PRINCE Technologies, Emmen, The Netherlands) félautomata kapilláris elektroforézis készüléken különböző forrásokból (LKB, Pharmacia, BioRad, Serva) származó, eltérő pH tartományú ampholyte-okat vizsgáltunk. Az új szendvics injektálási módszerrel sikerült javítanunk a kapilláris izoelektromos fókuszálás elválasztási teljesítményét uncoated kapillárisban. Az eredmények azt mutatták, hogy olyan amfoter tulajdonságú minta is elválasztható így, amelynek pI-ja kívül esik az alkalmazott ampholyte pH tartományán.*

*Az új módszert sikeresen használtuk fehérjék (hemoglobin variánsok) nagyfelbontású elválasztására. Az eredmények rövid migrációs ideje, a kis anyagmennyiségek (mind a minta, mind az ampholyte oldatok tekintetében) gazdaságos, eljárást adtak.*

*Távlati elképzelésünk a hemoglobin minták kellő számú mennyiségi feldolgozása után, a rutin diagnosztikában könnyen alkalmazható eljárás biztosítása lenne.*

VE 19

**ALIFÁS KARBONSAVAK FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁS ELVÁLASZTÁSA  
ÉS RETENCIÓS ADATAINAK BECSLÉSE KÉMIAI EGYENSÜLYI  
SZÁMÍTÁSOK ALAPJÁN**

*Kissné Németh Enikő, Varga Zoltán, V. évf. Vegyészmérnöki szak*

*Témavezető: dr. Hajós Péter  
Veszprémi Egyetem, Analitikai Kémia Tanszék*

*A biológiailag aktív szerves savak retenciós tulajdonságainak vizsgálata, analitikai meghatározása fontos feladatot jelent mind elméleti, mind gyakorlati szempontból. Jelentős vizsgálatok tárgyát képezi a retenció leírására érvényes modellek kidolgozása, hogy ezáltal megértsük a megoszlási folyamat mibenlétét. A folyadékkromatográfiás módszer hatékony alkalmazása megköveteli a minta retenciójának pontos fizikai és kémiai jellemzését. Ennek birtokában a retenció előre számítható, az analitikai elválasztás tervezhető. A retenciós adatok további értékes adatokkal szolgálhatnak a komponensek kémiai szerkezetét illetően.*

*Munkánk során tíz különböző sűrűségű mono- és dikarbonsav (almasav, borostyánkóssav, oxálsav, glikolsav, maleinsav, fumársav, ecetsav, monoklór-ecetsav, diklór-ecetsav, triklór-ecetsav) protolitikus egyensúlyi viszonyait vizsgáltuk. Széles pH tartományban meghatároztuk azt az intervallumot, amelyben a komponensek aktuális móltörteloszlása többnyire anionos, deprotonált formát biztosít. Ez a körülmény lehetőséget ad nagyhatékonyságú ion-kizárásos analitikai elválasztásra azáltal, hogy a megosztó fázis a sűrűség függvényében - elektrosztatikus okok miatt - ez egyes komponenseket kizárja. Tanulmányoztuk a minta-komponensek retenciós tulajdonságait különböző savas eluensrendszerekben, továbbá a pH, a koncentráció és a mintasavak szerkezetének hatásait a retenció mértékére. A folyadékkromatográfiás módszer alkalmazhatóságát ipari szennyvízminta elemzésével igazoljuk.*

KLTE 14

**KVATERNER AMMÓNÍUM-VEGYÜLETEKRE ÉRZÉKENYÍTETT MEMBRÁNOK  
KÉSZÍTÉSE, VIZSGÁLATA ÉS ALKALMAZÁSA**

Török János V. vegyész

Témavezető: Dr. Kovácsné Dr. Hadady Katalin  
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

*A kvaterner ammónium-vegyületek meghatározására a klasszikus kétfázisú titráláson kívül főleg spektrofotometriás vagy potenciometriás módszereket használnak. Elterjedtek a kvaterner ammónium-vegyületekre érzékeny membránelektrodokat alkalmazó módszerek, ezek összefoglalását tartalmazza Vytřas (1) munkája.*

*PVC alapú kvaterner ammóniumsóra érzékenyített elektród többféleképpen állítható elő. Vytřas és mtsai (2) "mártott drót" típusú elektródokat készítettek, ezek membránja csak PVC-t és lágyítót tartalmazott, az elektródokat titrálásra használták. Ishibashi és mtsai (3) hasonló összetételű membránokat készítettek, az elektród "érzékenyítését" a megfelelő kvaterner ammóniumsó oldatában történő áztatással biztosították. A Kovács (4) által készített membránokban kationos és anionos felületaktív anyagok ionpárjai szolgálták szenzoranyagként.*

*Munkánk során néhány "áztatással" és "beépítéssel" előállított membrán jellemzőit vizsgáltuk, tetrametil-ammónium, tetrabutil-ammónium és cetil-trimetil-ammónium kationokra. Meghatároztuk az elektródfüggvény lineáris tartományát, vizes és vizes-metanolos közegben, a szelektivitási tényezőket különböző anionok és kationok jelenlétében. Az "áztatással" előállított membránok esetében vizsgáltuk az "átérzékenyítés" lehetőségét, különböző szerkezetű kvaterner ammónium-kationokat alkalmazva. Mindkét típusú membrán esetében több koncentrációnál meghatároztuk a válaszidőket és az elektród-potenciál reprodukálhatóságát.*

Irodalom:

- (1) K. Vytřas, *Electroanalysis*, 3 (1991) 343.
- (2) K. Vytřas, *Microchim. Acta*, III (1984) 139.
- (3) N. Ishibashi, T. Masasome, T. Imoto, *Anal. Sci.*, 2 (1986) 487.
- (4) Kovács, B. *Doktori disszertáció*, Pécs, 1990.

## EKTF 1

*A SZILÁRD FÁZISÚ MIKROEXTRAKCIÓS TECHNIKA (SPME)  
ALKALMAZÁSA A BOROK AROMAKOMPONENSEINEK VIZSGÁLATÁBAN*

*Tomori Tünde, IV. matematika-kémia*

*Témavezető: Vas György, Dr. Lékó László  
Eszterházy Károly Tanárképző Főiskola, Eger, Kémia Tanszék*

*A borok aromakomponenseinek vizsgálata őszi-őszre aktuálissá válik. Vizsgálataink célja az, hogy a bor aromakomponenseinek minőségét és mennyiségét befolyásoló tényezőket minél mélyebben megismerjük. Ezekhez a vizsgálatokhoz nyújt segítséget a gázkromatográfia, mivel a borokban igen sok aromakomponens található, és a vizsgálandó komponensek többsége illékony. A vizsgálatok eredményét számos tényező befolyásolja pl. a mintavétel, a mintaelőkészítés, stb. Munkám során megismerkedtem a különböző mintaelőkészítési módszerekkel, többek között a Szilárd Fázisú Mikroextrakciós technikával (SPME) illetve a folyadék-folyadék extrakcióval.*

*Munkám célja az volt, hogy megismerkedjem egy 1990-ben kifejlesztett technikával, amelyet Szilárd Fázisú Mikroextrakciónak (SPME) neveznek, továbbá összehasonlítva a klasszikusnak számító folyadék-folyadék extrakcióval, megismerjem e technika előnyeit ill. hátrányait. A borok aromakomponenseinek minőségét és mennyiségét befolyásoló tényezők közül kettőt kiemelten vizsgáltam. Megfigyeltem az élesztő és a hőmérséklet hatását az aromaösszetételre. Összehasonlítottam az azonos termőhelyről származó, de különböző körülmények között erjesztett borminták aromakomponenseit.*

*Bebizonyosodott, hogy a SPME a boraroma vizsgálatok számos területén jól alkalmazható. Összehasonlítva a folyadék-folyadék extrakcióval jelentős előnyökkel bír. Ez a borászati analitikában igen korszerűnek számító módszer gyors, olcsó, oldószert nem igényel, ezért környezetbarát, amely igen fontos kitétel. Ezzel szemben a folyadék-folyadék extrakció nagy mennyiségű tiszta oldószert igényel, ezért drága, munkaigényes technika, amely környezet-és egészségkárosító hatású.*

ÚJ KINETIKAI MODELL ÉS KIÉRTÉKELÉSI MÓDSZER ALKALMAZÁSA  
AZ AMORF ÖTVÖZETEK ÁTKRISTÁLYOSODÁSÁRA

Virág István, V éves vegyész

Témavezetők: Dr. Pöpl László, Dr. Várhegyi Gábor (MTA)  
ELTE, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A TDK munkám elsődleges célja az volt, hogy információt kapjunk az amorf fémötvözetek kristályosodási folyamatainak kinetikájáról. A módszer nem új, hiszen az átkristályosodási folyamatokat ezeknél az ötvözeteknél már részletesen vizsgálták, de mi egy új kinetikai modellt és számítási módszert alkalmaztunk a kiértékelésre, melynek segítségével következtetni tudunk az amorf fémötvözet mikroszkopikus szerkezetére, különös tekintettel a rövid- és hosszútávú kristálytani szerkezetre.

Modellvegyületként a gyorshűtéssel előállított Ni<sub>81</sub>P<sub>19</sub> amorf ötvözetet alkalmaztuk, mert ennél a fémötvözetnél igazolódott, hogy a relaxációs folyamatok kisebb mértékűek összehasonlítva más amorf rendszerekkel. Az átkristályosodási folyamat vizsgálatára Differenciál Páztázó Kalorimetriát (DSC) használtunk, mivel ez a legalkalmasabb módszer az amorf fémötvözetek kristályosodási folyamatainak vizsgálatára.

A DSC görbék kiértékelése során információkat kaptunk az átkristályosodási folyamat kinetikájáról: a kiindulási reakciófelület nagyságáról, a góccok keletkezéséről és növekedéséről a kristályosodási folyamat során, illetve a góccok növekedés közbeni átfedéséről. Azt is megvizsgáltuk, hogy milyen hatással van az előállítási paraméterek változtatása (a gyorshűtés sebessége, az olvadék hőmérséklete, az amorf fém minta vastagsága, a minta izoterm előkezelésének időtartama) ezekre a tulajdonságokra.

A kiértékelés során két kinetikai modellt próbáltunk ki. Az elsöben feltételeztük, hogy az amorf fém mintában nincsenek jelen a kristályos termék csíragócai, hanem azok teljes egészében az átkristályosodási folyamat során keletkeznek. Ez a kiértékelési módszer irreális eredményre vezetett.

A második alkalmazott modell jól leírta a kísérleti görbéket és megerősítette azt a tényt, hogy a nikkel-fosfor amorf fémötvözetben már megvannak kezdetben a csíragócok, mint azt már elektrokémiai úton is igazolták, bár az irodalomban több szerző vitatta annak helyességét.

## KLTE 11

**Cr(VI) ON-LINE SZORPCIÓS DÚSÍTÁSA ÉS ATOMSPEKTROMETRIÁS  
MEGHATÁROZÁSA FI-HHPN MINTABEVITELLEL**

Sógor Csilla

Témavezető: Dr. Posta József  
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A króm természetes mintákban két, viszonylag stabil formában, Cr(III) és Cr(VI) alakban fordul elő. A Cr(III) az élő szervezet számára eszenciális, a Cr(VI) viszont kifejezetten rákkeltő hatású. Ezért vált mostanára olyan fontossá az öszskróm-tartalom mellett a Cr(III) és a toxikus Cr(VI) külön-külön történő meghatározása. Mivel a természetes minták króm-koncentrációja legtöbb esetben igen kicsi, 0.01-0.1 ng/ml körüli érték, előterbe kerültek az olyan szeparációs módszerek, melyek során adott komponens elválasztásával egyidejűleg elvégezhető annak kellő mértékű dúsítása is. A jelen munkánkban olyan Cr(VI) dúsítására alkalmas kombinált módszert ismertettünk, amelyben sikerült összekapcsolnunk egy FI (Flow Injection) dúsító rendszert a jelenleg leghatékonyabb mintabeviteli eljárással, a nagynyomású porlasztással.

Az általunk kidolgozott FI-HHPN/FAAS rendszert a toxikus Cr(VI) szorpciós dúsításához és meghatározásához alkalmaztuk. A szorpciós dúsítás elve az, hogy a Cr(VI) ammónium-pirrolidin-ditiokarbamáttal (APDC) vízdíhatatlan fémkomplexet képez, amely a HPLC technikában használatos poliéter-éter-kezon (PEEK) anyagú hurokban leválasztható, majd izobutil-metil-kezon (IBMK) segítségével nagy sebességgel eluálható, s az atomspektrométer lángjába öblíthető. 5 ml mintát felhasználva a Cr(VI) dúsítása és FAAS meghatározása 2 percen belül elvégezhető volt. A dúsítási faktor 64. A kimutatási határ (3 $\sigma$ ) 0.84  $\mu\text{g/l}$ -nek adódott, az elemzés precizitása 50  $\mu\text{g/l}$  Cr(VI) dúsítás során RSD=2.8 % (N=6) volt.

Az ismertetett, szorpciós megkötésen alapuló Cr(VI) dúsító és atomabszorpciós detektáló rendszer felhasználásával elvégeztük néhány gyakorlati minta Cr(VI)-tartalmának meghatározását. Eljárást dolgoztunk ki nagy szervesanyag-tartalmú, szilárd illetve folyadék minták króm-tartalmának Cr(VI)-tá alakítására. E Cr(III)→Cr(VI) konverziós eljárás és a szorpciós Cr(VI) dúsítási módszer alkalmazásával különböző minták nyomnyi mennyiségű Cr-tartalmát határoztuk meg.

*A  $^{125}\text{I}$  NUKLID AKTIVITÁSÁNAK MEGHATÁROZÁSA  
FOLYADÉKSCINTILLÁCIÓS MÉRÉSTECHNIKÁVAL*

*Buzder-Lantos Lajos, V. évf., kémia*

*Témavezető: Dr. Novák Mihályné Dr. Hajdú Éva  
József Attila Tudományegyetem, Szilárdtest- és Radiokémiai Tanszék*

*A folyadékszcintillációs mérés technika (liquid scintillation counting = LSC) az egyik leggyakrabban alkalmazott mérés technika  $\beta$  sugárzó nuklidok esetén. A geometriai elrendezésből adódóan a lágy  $\beta$  sugárzó radionuklidok ( $^3\text{H}$ ,  $^{14}\text{C}$ ) is nagy hatásokkal detektálhatóak ezzel a mérés technikával.*

*A PACKARD cég TRI-CARB 1000TR spektrométere a fent említett izotópokon kívül  $^{125}\text{I}$  és  $^{32}\text{P}$  tartalmú minták mérésére, sőt a quench korrekciós technikák (SIS, tSIE) segítségével, aktivitásuk meghatározására is alkalmas. A meghatározáshoz egy  $\eta$  vs. quench görbe felvétele szükséges, amihez viszont standard sorozatra van szükség.*

*A folyadékszcintillációs spektrométereket gyártó és forgalmazó cégek csak  $^3\text{H}$  és  $^{14}\text{C}$  standard sorozatokat tudnak biztosítani, ezért az volt a feladatomban, hogy  $^{125}\text{I}$  standard sorozatot készítsék. Munkám során többféle scintillációs kóktélt és kioltó anyagot vizsgáltam meg ahhoz, hogy az elkészített standard sorozat alkalmas legyen quench korrekciós görbe felvételére. Vizsgáltam továbbá a térfogat, a  $^{125}\text{I}$  aktivitás csökkenésének hatását a kétféle korrekciós eljárással (SIS, tSIE) felvett görbék lefutására.*

*A standard sorozat elkészítésével lehetővé vált a  $^{125}\text{I}$  jelzett  $\Gamma$  ionok homogén illetve heterogén cserereakcióinak aktivitás adatokkal történő követése.*



JATE 26

**KÖRNYEZETI MINTÁK NEHÉZFÉM-TARTALMÁNAK  
POTENCIOMETRIÁS STRIPPING MÉRÉSE**

Mogyorósi Károly, IV. éves vegyész

Témavezető: Dr. Galbács Zoltán  
József Attila Tudományegyetem, Szerveetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

*Környezetünk és egészségünk védelmében fontos analitikai feladat a veszélyes anyagok felismerése és mérése, így a mérgező nehézfémeké is. Munkám célja az volt, hogy a potenciometriás stripping technikát megismerjem és választ kapjak arra a kérdésre, hogy ez a módszer milyen jellegű vizsgálatokat tesz lehetővé.*

*A potenciometriás stripping analízis egy olyan elektroanalitikai módszer, amellyel elsősorban amalgámképző fémek alacsony koncentrációjú meghatározására nyílik lehetőség. A módszer lényege, hogy az alkalmasan megválasztott munkaelektrod felületére előzetesen elektrolizissal leválasztott fémek megfelelő oxidálószer hatására, a fémek minőségétől függő potenciálon leoldódnak az elektródról, miközben a munkaelektrod potenciáljának időbeli változását regisztrálva információit nyerhetünk a potenciálásban jelentkező lépcsők helye alapján a minta fémion-tartalmának minőségéről, illetve a lépcsők hossza alapján (azonos körülmények között végezve a felvételt) az oldatbeli koncentrációjáról. Elsősorban kadmiumot, ólmot és rezet  $10^{-6}$ - $10^{-3}$  g/l mennyiségben tartalmazó mintákat vizsgáltam: így a határértékek alatti koncentrációkat mérhettem vizeletben, italokban (borok, üdítők).*

*A szegedi közúti közlekedésből származó ólommal szennyezett hólé vizsgálatával olyan adatokat nyerhettem, amely a városi levegő szennyezettségi arányairól informál.*

*Foglalkoztam még a dohányfüst kadmiumtartalmának meghatározásával. A dohány mikrohullámú salétromsavas feltáráásával készített oldat méréséből állapítottam meg a cigaretta teljes kadmiumtartalmát, és ebből vontam le az elszívott szálak filterében és hamujában levő mennyiséget. Víz tisztítási vizsgálatával és kerámiaipari termékek kioldási vizsgálatával is próbálkoztam.*

*Az eredmények alapján meggyőződtem arról, hogy a PSA technika olcsósága, egyszerűsége és nagy érzékenysége miatt felhasználását a környezetvédelemben bővíteni lehetne.*

*"SZENT LÁSZLÓ PÉNZE" ( NUMMULITES ) KÉMIAI ANALÍZISE**Nagy Tamás AOH III.**Témavezető: Dr. Kellermayer Miklós egyetemi tanár  
Pécsi Orvostudományi Egyetem, Orvostudományi Kar, Klinikai Kémiai Intézet*

*Szent László pénzének hívja a népyelv azt az ősi kővéletet, amely az eocén kori rétegekben ( kb.50 - 60 millió évvel ezelőtt ) található nagy mennyiségben. Ezek, a hazánkban is fellelhető, lapos, kerek, pénzérmére emlékeztető fossziliák egy különös egyséjtű élőlény maradványai mely képes volt maga köré egy igen bonyolult felépítésű sejtvezát növeszteni. Jelen kutatásaink célja, hogy felderítsük kémiai összetételét és az esetleges megőrzött organikus fehérje, nukleinsav tartalmát egy Erdélyből származó nummulina speciesnek.*

*Infravörös spektroszkópiával történő vizsgálataink Ca-karbonátot jelöltek meg fő összetevőként, azonban utaltak kis mennyiségű szerves anyag jelenlétére is. Analitikai méréseink az anorganikus komponensek irányában (atomabszorpciós spektrofotometria, lángfotometria ) pontosították a szervesen összetevők mennyiségi arányát, mely megfelelt a rendelkezésünkre álló korábbi irodalmi adatoknak.*

*Érdeklődésünk fókuszába - utalva az infravörös spektroszkópiás vizsgálatokra - az organikus összetevők kerültek. EDTA-s feltárást választottunk a potenciális fehérjetartalom megőrzése, kémelése végett. Az így nyert szolubilis frakciókat egyrészt direkt fotometriásan mértük, másrészt koncentrálsási, tisztítási eljárások után használtuk további analíziseinkhez. Az utóbbi esetekben a minták liofilizátumát elektroforézisnek és megfelelő érzékeny detektálási eljárásoknak vetettük alá a feltételezett fehérjék jelenlétének kimutatására. Vizsgálataink jelen eredményei az organikus összetevők pontosabb megismerésének lehetőségét vetítik előre.*



## *II. SZERVES KÉMIA ALSZEKCIÓ*



1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24  
25  
26  
27  
28  
29  
30  
31  
32  
33  
34  
35  
36  
37  
38  
39  
40  
41  
42  
43  
44  
45  
46  
47  
48  
49  
50  
51  
52  
53  
54  
55  
56  
57  
58  
59  
60  
61  
62  
63  
64  
65  
66  
67  
68  
69  
70  
71  
72  
73  
74  
75  
76  
77  
78  
79  
80  
81  
82  
83  
84  
85  
86  
87  
88  
89  
90  
91  
92  
93  
94  
95  
96  
97  
98  
99  
100

II. Szerves kémia alszekció

<b>Balázs Barbara</b>	<b>BME 1</b>	
2,4-Diaril-2,3-dihidro-1,5-benzotiazepinek acilezési termékeinek vizsgálata modern NMR módszerekkel .....		59
<b>Köntös Zoltán, Horváth György</b>	<b>BME 14</b>	
Piridin egységet tartalmazó királis korona-éterek előállítása ammóniumsó racemátok részolválása céljából .....		60
<b>Szarvas Szilvia</b>	<b>ELTE 16</b>	
Spiroszulfuránok királis folyadékkromatográfiája .....		61
<b>Rákó János</b>	<b>KLTE 10</b>	
Parciálisan és teljesen benzilezett glikozil-azidok szintézise N-glikopeptidok előállításához .....		62
<b>Szuromi Endre</b>	<b>KLTE 13</b>	
Térhálósodó kopolimerek előállítása és vizsgálata .....		63
<b>Szieberth Dénes</b>	<b>BME 23</b>	
Foszfinin -2-ilidén. Egy előállítható karbén? .....		64
<b>Fogassy Katalin</b>	<b>BME 6</b>	
Poláris fémorganikus vegyületek szelektív reakciói .....		65
<b>Gerencsér János, Macsári István</b>	<b>BME 7</b>	
Isoplagiochin A(?) szintézise .....		66
<b>Szlávik Zoltán</b>	<b>ELTE 18</b>	
Perfluoralkil-csoportot tartalmazó amfifil vegyületek előállítása és jellemzése .....		67
<b>Varga Jenő</b>	<b>ELTE 24</b>	
Optikailag aktív szulfóniumsók előállítása .....		68
<b>Krecz Ágnes</b>	<b>KLTE 7</b>	
Mesterséges proteinek szintézise rekombináns DNS technikával .....		69
<b>Jerga Ágoston</b>	<b>KLTE 6</b>	
Kísérletek természetes eredetű dihidroizokumarinszármazékok enantioszelektív előállítására .....		70
<b>Novák Tibor</b>	<b>BME 20</b>	
A 6,6-diklór-3-foszfabiciklo[ 3.1.0] hexán-3-oxidok katalitikus hidrogénezési reakcióinak vizsgálata .....		71
<b>Le Thanh Giang</b>	<b>BME 15</b>	
N-(p-Metoxi-fenil)-csoport oxidációjának vizsgálata a tetrazolil csoporttal helyettesített β és γ-laktámok körében .....		72
<b>Kele Péter</b>	<b>ELTE 6</b>	
Fluoreszcens peptidek és peptidátrak .....		73
<b>Nagy Péter</b>	<b>ELTE 9</b>	
1,8- helyzetben kénnel diszubsztituált naftalinvegyületek előállítása és szerkezetük vizsgálata .....		74

<b>Kámán Judit</b>	<i>JATE 16</i>	
<i>4-telítetlen-3-aminoszteroidok előállítása</i> .....		74
<b>Sebők Ferenc</b>	<i>JATE 29</i>	
<i>Szteroid acetátok szelektív dezacetilezési és acilvándorlási reakciójának vizsgálata <math>Al_2O_3</math>-on mikrohullámú energiaközlés hatására</i> .....		75
<b>Czakó Barbara</b>	<i>KLTE 3</i>	
<i>Nitrogéntartalmú morfináندیének szintézise és átalakítása</i> .....		76
<b>Garadnay Sándor</b>	<i>KLTE 5</i>	
<i>A tebain Diels-Alder adduktjai izomerizációjának vizsgálata.</i>		
<i>A <math>\beta</math>-nepenton első előállítása</i> .....		77
<b>Jeges György</b>	<i>VE 6</i>	
<i>Szteroidok átalakítása kapcsolási és Diels-Alder reakcióban</i> .....		78
<b>Hajnal Andrea</b>	<i>JATE 10</i>	
<i>Szteroid-oxetánok savnitrilekkel történő gyűrűbővülési reakciója</i> .....		79
<b>Tömböly Csaba</b>	<i>JATE 33</i>	
<i>Szteroidok oxidációja kálium-permanganáttal</i> .....		80
<b>Tapolcsányi Pál</b>	<i>JATE 34</i>	
<i>Izomer-16-metil-szteroidok előállítása és szerkezetigazolása</i> .....		81
<b>Péter Mária</b>	<i>JATE 27</i>	
<i>Cikloalkán vázas <math>\beta</math>-aminosavak HPLC-s elválasztása</i> .....		82

2,4-DIARIL-2,3-DIHDRO-1,5-BENZOTIAZEPINEK ACILEZÉSI TERMÉKEINEK  
VIZSGÁLATA MODERN NMR MÓDSZEREKKEL

Balázs Barbara, doktoráns

Témavezető: Dr. Tóth Gábor  
BME, Általános és Analitikai Kémia Tanszék

Jelentős biológiai aktivitást mutató 1,5-benzotiazepinek közül a 2,4-diaril-2,3-dihidro-1,5-benzotiazepin vegyületek megfelelő O-acetil ( $R^1, R^2 = OAc$ ) származékait kivántuk előállítani piridinben ecetsavanhidriddel kezelve. A reakció minden esetben egy fő termék eredményezett. Kimutattuk, hogy nemcsak a hidroxil csoport acetileződött, hanem egy további N-acil csoport is kialakult. Kézenfekvőnek tűnt, hogy 5-acetil-1,5-benzotiazepin származékok keletkeztek, melyekhez hasonló N-alkil ill. N-aril származékok az irodalomban már ismertek voltak. A termékek szerkezetét egy- és kétdimenziós  $^1H$  és  $^{13}C$  NMR módszerekkel (INAPT, COSY, HMQC, HMBC, NOESY) vizsgáltuk.

Vizsgálataink alapján bizonyítást nyert, hogy az acilezés során gyűrűszűkülés történt, melynek eredményeként 2,3-dihidro-benzotiazol származékok keletkeztek. A 2 ill. 3 kötésen keresztüli távolható J(C,H) csatolások kimutatását lehetővé tevő HMBC mérések igazolták, hogy a termékek milyen szerkezetnek felelnek meg és egyúttal lehetővé tették a kvaterner szénatomok egyértelmű hozzárendelését is. A szerkezet további alátámasztását adták a 2D NOESY mérések, melyekkel lehetővé vált a térszomszédos protonok azonosítása és így módon a domináns konformer meghatározása. Hőmérsékletfüggő NMR mérésekkel meghatároztuk az amidcsoport gátolt rotációja folytán fellépő Z/E izomerek rotációs potenciálgátját és szabadentalpia különbségét. Eredményeinket molekuláris modellezéssel (AM1) is alátámasztottuk.

Javaslatot teszünk a 2,3-dihidro-1,5-benzotiazepinek acilezés körülményei hatására lejátszódó eddig nem tapasztalt gyűrűszűkülésének mechanizmusára. Ez a reakcióút az irodalomban eddig nem ismert, új típusú 3-acetil-2-aril-2,3-dihidro-2-sztililbenzotiazolin származékok racionális szintézisének biztosítja.



BME 14

**PIRIDIN EGYSÉGET TARTALMAZÓ KIRÁLIS KORONAÉTEREK ELŐÁLLÍTÁSA  
AMMÓNIUMSÓ RACEMÁTOK RESZOLVÁLÁSA CÉLJABÓL**

*Horváth György, Köntös Zoltán, V. évf.*

*Témavezető: Dr. Huszthy Péter  
BME, Szerves Kémia Tanszék*

*A TDK dolgozat célkitűzése olyan királis koronaéterek előállítása volt, melyek klórmetil csoportot tartalmazó sztírol-divinil-benzol kopolimerhez (ún. Merrifield-féle gyantához), illetve szilikagélhez köthetők. A királis koronaéter típusú vegyületek gyakorlati jelentősége a gyógyszeriparban várható racemátok elválasztása terén, mivel biológiai szempontból általában csak egy enantiomer hatásos, a másik esetleg mérgező is lehet. Egyéb felhasználási lehetőségek: királis HPLC oszlop töltetének aktív anyagaként, enantioszelektív elektródként, aszimmetrikus szintézisek katalizátoraként, ellenáramú folyadék-extrakció révén történő reszolváláshoz.*

*A szilárd adszorbenshez köthető koronaétereket a megfelelően szubsztituált 2,6-piridin-dimetil-ditiozilát **(9,10)** és a szubsztituált tetraetilén-glikolok  $\{(S,S)\text{-7}, (R,R)\text{-8}\}$  erősen bázikus közegben végrehajtott reakciójában állítottuk elő. Az  $(S,S)\text{-5}$  molekuláról a tritil védőcsoportot ecetsavas hidrolízissel távolítottuk el. A munka során az  $(S,S)\text{-5}$  vegyület előállításakor 15, az  $(R,R)\text{-6}$  előállításakor 17 reakciólépést kellett végrehajtani.*

*A dolgozatban összefoglaltuk a téma előzményeit, valamint a piridin egységet tartalmazó királis koronaéterek és szerves ammóniumsó enantiomerek között fellépő királis felismerés mértékét (enantioszelektivitást) jellemző, kísérleti úton meghatározható kinetikai és termodinamikai paramétereiket.*

*A későbbiekben folytatandó munka keretében az említett tölteteket kívánjuk előállítani a dolgozatban leírt módon és olyan mennyiségben, hogy abból reszolválásra alkalmas oszlopokat készíthessünk.*

*A preparatív munka során a már ismert vegyületek előállítását tökéletesíteni próbáltuk, illetve új vegyületek előállítását dolgoztuk ki. A vegyületeket fizikai állandókkal, több helyen IR, NMR és MS spektroszkópiai úton jellemeztük. A reakciók követéséhez az optimális VRK-s futtatószerkezet kísérleti úton meghatároztuk és feltüntettük a relatív retenciók ( $R_f$ ) faktorokat is.*

*SPIROSZULFURÁNOK KIRÁLIS FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁJA*

*Szarvas Szilvia, V. éves biológia-kémia szakos hallgató,*

*Témavezetők: Szókán Gyula docens, Majer Zsuzsa adjunktus  
ELTE, Szerves Kémiai Tanszék*

*Munkám célja királis elválasztások megvalósítása volt, királis állófázisú oszlopon UV-, illetve kiroptikai detektálás (cirkuláris dikroizmus spektroszkópia) mellett. Feladatom volt: egyrészt analitikai módszer kidolgozása racém, optikailag aktív spirozulfurán minták szétválasztására, másrészt a már rezolvált vegyületek vizsgálata.*

*Napjainkban egyre nagyobb figyelem fordul a királis elválasztások felé, főként a gyógyszeripar területén. Ennek farmakológiai jelentősége az, hogy a hatóanyag mellett jelenlévő másik enantiomer -amely akár toxikus hatású is lehet- eltávolítható. Ez az eljárás főként akkor előnyös, ha a szétválasztás más módon nem valósítható meg.*

*Az alkalmazott Kromasil márkanevű királis állófázisú oszlop számos nehéz elválasztási problémát old meg. Egy esetben sikeresen alkalmazták spirozulfurán alapvegyület elválasztására is. Kiroptikai detektálás HPLC-CD összekapcsolt rendszerrel történt, melynek előnyei: hogy a szelektivitás miatt a kromatogram leegyszerűsödik; a szétválasztott racémátoknál az enantiomerek elúciós sorrendje, illetve az optikai tisztaság meghatározható.*

*Elért eredményeim: UV-detektálás mellett elővizsgálatokat folytattam spirozulfurán mintákra. Bebizonyítottam, hogy a Kromasil márkanevű, királis állófázisú oszlop alkalmazható diaril-diaciloxi-spirozulfuránok és származékaik elválasztására, mely kiroptikai detektorral összekapcsolva kiváló kromatográfiás rendszert alkot királis szeparálások nyomon követésére.*

*A kapott eredmények felhasználása sokrétű: lehetőség nyílik a preparatív elválasztás kidolgozására; másrészt a CD-spektroszkópia adatainak felhasználásával a CD-ben alkalmazott empirikus -de elméletileg is igazolt- szektor szabály állapítható meg spirozulfuránokra. A térszerkezet meghatározása lehetővé teszi a szerves kénvegyületek reakcióinak sztereokémiai vizsgálatát is.*

KLTE 10

PARCIÁLISAN ÉS TELJESEN BENZILEZETT GLIKOZIL-AZIDOK  
SZINTÉZISE N-GLIKOPEPTIDEK ELŐÁLLÍTÁSÁHOZ

Rákó János V. vegyész

Témavezető: Dr. Kerékgyártó János  
Kossuth Lajos Tudományegyetem, Biokémiai Tanszéke, Debrecen

Az N-glikoproteinek szerkeázó és alapvető szerepet játszanak a biológiai folyamatokban, sejt felszíni receptorok, sejt-adhéziós molekulák, immunglobulinok, szérum glikoproteinek és tumor-antigének formájában. Ezen glikokonjugátumokban a fehérje adott aszparaginjaihoz a Man-b-(1→4)-GlcNAc-b-(1→4)-GlcNAc törzs triszacharidon keresztül N-glikozidos kötéssel szénhidrátláncok kapcsolódnak. A glikopeptidek a glikoproteinek jellemző parciális szerkezeti elemei, melyeket nagy nehézségek árán vagy még úgy sem lehet megfelelő mennyiségben és tisztaságban természetes forrásból izolálni, illetve géntechnológiai módszerekkel előállítani. Ezért az N-glikopeptidek kémiai szintézise rendkívül idősezerű feladat a szerkezet-funkció összefüggések vizsgálatához.

Új módszert dolgoztunk ki N-glikopeptidek preparálásához szükséges oligoglikozil-aminok előállítására: az N-glikoproteinekben előforduló törzs oligoszacharidok szintézisére a Biokémiai Tanszéken bevezetett eljárás<sup>1,2</sup> továbbfejlesztéseként, tioglikozidokat alakítottunk át glikozil-azidokká enyhe körülmények között, magas hozamokkal. Ilyen módon előállítottunk számos parciálisan illetve teljesen benzilezett GlcNPhth-b-(1→N<sub>3</sub>) származékot. A kitobiozil kötést tioalkil-glikozidokkal<sup>1,2</sup> alakítottuk ki. A fiálimido→acetamido funkciók cseréjét a megfelelő glikozil azidok etilén-diaminos kezelést követő N-acetilézéssel megvalósítottuk. A glikozil azid funkció kemoszelektív redukciója újítusú, benzil-éterekkel védett (oligo)-glikozil-aminokat eredményezett, amelyek az eddigieknél jobb nukleofilitással rendelkező glikozil donorok glikopeptid szintézisésekhez.

1. J. Kerékgyártó, J. G. M. van der Ven, J. P. Kamerling, A. Lipták and J. F. G. Vliegthart, *Carbohydr. Res.*, **186** (1993) 51-62.

2. J. G. M. van der Ven, J. Kerékgyártó, J. P. Kamerling, A. Lipták, J. F. G. Vliegthart, *Carbohydr. Res.*, **264** (1994) 45-62.

## TÉRHALÓSODÓ KOPOLIMEREK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS VIZSGÁLATA

Szuromi Endre IV. évf. vegyész-angol szakfordító

Témavezető: Dr. Borbély János  
KLTE Alkalmazott Kémia Tanszék, Debrecen

*Az egyfunkciós monomereknek kétfunkciósokkal való kopolimerizációja iránt az utóbbi időben megnőtt az érdeklődés ezen rendszerek széleskörű gyakorlati felhasználási lehetősége miatt. Fő alkalmazási területük a konzervatív fogászat, esztétikai korrekció.*

*A gyökös kopolimerizáció során a lineáris makromolekulákon lévő, át nem alakult vinilcsoportok, azaz telítetlen oldalcsoportok jelenléte miatt e kopolimerek alkalmasak további átalakításokra. Így pl. eltérő körülmények között a polimerizációt lehet folytatni térhálós szerkezet kialakítása céljából.*

*Vizsgálatunk tárgyát az eltérő reaktivitású és szerkezetű stírol (ST) és etilén-glikoldimetakrilát (EDM) monomerek kopolimerizációja képezte. A kopolimerek szintézisét toluolos közegben hajtottuk végre, melynek előnye a tömbpolimerizációval szemben az, hogy lehetőség van a gélmentes polimerek előállítására, melyekben az oldalcsoportok igen nagy mértékben változatlanul maradnak.*

*A kopolimerek szerkezetmeghatározása céljából  $^1\text{H}$  NMR, átlagos molekulatömegük és polidiszperzitásuk meghatározására GPC, termikus viselkedésük tanulmányozására pedig DSC méréseket végeztünk.*

*Az NMR spektrumok alapján megállapítottuk a különböző monomerösszetételű reakcióelegyekben képződött polimerek monomerösszetételét, s így lehetővé vált az összetételi diagram megszerkesztése.*

*A GPC spektrumok alapján az átlag molekulatömeg és a polidiszperzitás időbeli változását tudtuk nyomon követni.*

*A DSC spektrumokból kiderült, hogy a polimer termikusan instabil, primer, ill. szekunder ciklizáció, majd pedig térhálósodás megy végbe.*

BME 23

## FOSZFININ-2-ILIDÉN. EGY ELŐÁLLÍTHATÓ KARBÉN?

Szieberth Dénes V. évf.

Témavezető: Dr. Nyulászi László  
BME, Szervetlen Kémia Tanszék

A karbéneket általában rövid élettartamú, nagy reakciókészségű, triplet alapállapotú molekuláknak tekintjük.  $\pi$ -donor szubsztituensek azonban képesek a szinglet állapotot stabilizálni a triplethez képest. Ez tette lehetővé két szobahőmérsékleten stabil, szinglet alapállapottal rendelkező karbén típusú vegyület szintézisét, a Bertrand-féle és az Arduengo-féle karbénét. A  $\pi$ -donor jellegű foszfor stabilizálta a Bertrand-féle karbénét.

Munkám célja annak kimutatása volt, hogy a foszfor által stabilizált karbén felhasználható egy új aromás rendszer építőköveként, amely a foszfinin izomerje.

A foszfinin aromasságát elméleti és kísérleti vizsgálatok is igazolják. Hasonló jellegű, planáris  $\sigma^3, \lambda^3$  foszfort tartalmazó aromás rendszer azonban mindmáig nem ismert.

*POLÁRIS FÉMORGANIKUS VEGYÜLETEK SZELEKTÍV REAKCIÓI**Fogassy Katalin V. évf.**Témavezető: Dr. Faigl Ferenc  
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*

*A poláris fémorganikus vegyületek felfedezése új lehetőségeket ad a szerves szintetikus kémiának. Segítségükkel egyszerűbb, hatékonyabb szintéziseket lehet kidolgozni, ezért a hatvanas évek óta intenzív kutatások folynak ezen a területen.*

*A poláris fémorganikus vegyülettel történő metallálás (H-fém csere) olyan regio szelektív reakció, amely mechanizmusának megismerése nagy segítség a szintézis tervezésének szempontjából. Ezért vizsgáltuk a két aromás gyűrűvel és egy közepes erősségű irányító hatású szubsztituenssel rendelkező 1-(metoxi-fenil)-pirrolokat.*

*A leginkább négyes (néha ötös vagy hatos) koordinációs számra törekvő Li atom butillítium származékát használtuk metalláló reagensként. Ehhez komplexánsként két vagy három fokú ligandumként TMEDA-t vagy PMDTA-t adtunk ekvivalens mennyiségben.*

*A kiindulási anyagok előállítása után a metallálás körülményeit dolgoztuk ki úgy, hogy az eredmény szelektíven egy termék legyen. Vizsgáltuk a két komplexáns hatásának különbözőségeit, összevetve az eredményeket az irodalomban talált magyarázatokkal.*

*A kísérleti eredményeket azzal magyaráztuk, hogy a vizsgálati körülmények között a LiC-PMDTA komplexben a lítium koordinációs szférája telített. Így az elegyben többségében monomerként van jelen és ilyen formában nagyon reakcióképes. Ezért a modellvegyület legsavasabb hidrogén atomját támadja. A LiC-TMEDA dimer komplexben a lítium további koordinatív kötés létrehozására képes a metoxi csoport oxigénjének nemkötő elektronpárjával. Az átmeneti komplex miatt a lítium olyan közel kerül a metoxi csoport melletti orto helyzetű hidrogénhez, hogy ezt cseréli ki.*

BME 7

## AZ ISOPLAGIOCHIN A (?) SZINTÉZISE

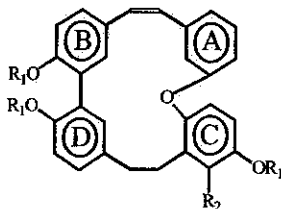
Gerencsér János, doktoráns és Macsári István V. évf., szerves és bio. vegyipari szak

Témavezető: Dr. Nógrádi Mihály  
BME, Szerves Kémia Tanszék

Japán kutatók 1993-ban vonták ki a *Plagiochila fruticosa* nevű májmozhából a makrociklusos bisz-bibenzilek családjába tartozó isoplagiochin A-t és B-t. A molekulák szerkezete érdekes eltéréseket mutat a már korábban izolált plagiochinokhoz képest, amelyek totálszintézisét a BME Szerves Kémiai Tanszékén már megoldották. Dolgozatunkban az isoplagiochin A 23 lépéses totálszintézisét és az isoplagiochin B szintézisének eddig megvalósult lépéseit ismertetjük.

Az isoplagiochin A esetében a makrociklus kialakítását intramolekuláris Wittig reakcióval hajtottuk végre. A reakció során egyetlen gyűrűzárt terméket kaptunk, de vegyületünk  $^1\text{H-NMR}$  és  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumának értékelésekor nem az irodalom alapján várható kémiai eltolódásokat észleltük. A demetilezés során kapott termék NMR spektruma analóg volt a trimetiléterrel. Mindkét termék szerkezetét 2D NMR mérések is alátámasztották. Így azt kell gondolnunk, hogy az isoplagiochin A szerkezete nem felel meg az Asakawa és munkatársai által közöltnek.

Az isoplagiochin B szintézisében az A és C gyűrűket tartalmazó kulcsintermedier előállításáig jutottunk el, a B és D gyűrűknek megfelelő intermedier már az isoplagiochin A szintézise során elkészült. A szintézis további tervezett lépései megegyeznek az isoplagiochin A-nál leírtakkal.



	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>
isoplagiochin A	H	H
B	H	OH

PERFLUORALKIL-CSOPORTOT TARTALMAZÓ AMFIFIL VEGYÜLETEK  
ELŐÁLLÍTÁSA ÉS JELLEMZÉSE

Szlávik Zoltán, V. Vegyész

Témavezető: dr. Rábai József  
ELTE, Szerves Kémiai Tanszék

*A perfluoralkil-csoportot tartalmazó amfifil vegyületek (fluoros amfifilek, vagy F-amfifilek) kémiája az utóbbi évtized egyik dinamikusan fejlődő tudományága. A fluoros amfifilek egyedi szupramolekuláris viselkedése, struktúráképző hajlama a perfluoralkil-szegmens erősen hidrofób és lipofób jellegéből adódik. Új F-amfifilek szintézisére ösztönző hatással van olyan injektálható fluorokarbon emulziók kifejlesztése, amelyek vérpótló készítményként (antihypoxikus ágensként) alkalmazhatóak. Ez a perfluorvegyületek egyedülálló oxigén oldhatósági tulajdonságán (40-50 % v/v) és a keringési rendszerben mutatott inertségén és stabilitásán alapszik.*

*Munkám kezdeti szakaszában olyan vegyületeket állítottam elő, amelyekből az irodalomban még nem szereplő fluoros amfifilek szintetizálhatók. Így kidolgoztam egy új, "one-pot" eljárást 3-perfluoralkil-propanol típusú vegyületek szintézisére, amely az eddigi módszereknél hatékonyabb és könnyebben kivitelezhető. Az aránylag olcsó F-oktánsav redukciójával képzett perfluorheptil-metanolból Riess és Krafft módszerével előállítottam egy új, neutrális F-amfifil vegyületet, az ((F-heptil)-metil)dimorfolinoszforamidátot (hatástani vizsgálata folyamatban van).*

*Napjainkig csak olyan fluoros felületaktív vegyületek előállítása valósult meg, amelyek a perfluoralkil-csoportot a szénlánc terminális pozíciójában tartalmazzák. Felmerül a kérdés, hogy milyen struktúráképző hajlamot kölcsönöz a molekulának a benne lévő fluoros és szénhidrogén szegmens helyzetének cseréje. Ezért egy olyan szintézisutat dolgoztunk ki, amelynek eredményeképpen az F-alkilén lánchoz az egyik végén a neutrális "hidrofil fej", míg a másikon egy hosszú alkil-lánc kapcsolódik. A tervezett és előállított (2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,9,9-hexadekafluoro-eikozil)dimorfolinoszforamidát molekulában, a fluoros rész és a hidrofil dimorfolinoszforamid csoport közé - az előbb említett amfifilhez hasonlóan - csak egy metilén-csoport (a legrövidebb összekötő szegmens) van beépítve.*



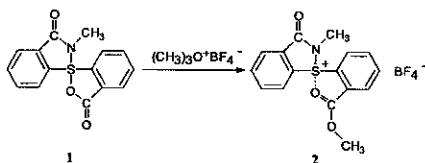
ELTE 24

## OPTIKAILAG AKTÍV SZULFÓNiumsók ELŐÁLLÍTÁSA

Varga Jenő V. Évf. Vegyész

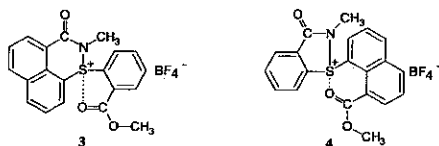
Témavezető : Szabó Dénes  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Aciloxi szerkezeti részletet tartalmazó spirozulfuránok trimetil-oxónium-tetrafluoro-borát hatására analog szerkezetű szulfóniumsókká alakíthatók (pl.: **1** & **2**).



A szerkezeti analógia — amely a két kötésrendszer összehasonlítását is lehetővé teszi — a központi kénatomot körülvevő ligandumok trigonális bipiramisos elrendeződését jelenti, amit a **2** szulfóniumsó esetében az intramolekuláris S··O kölcsönhatás stabilizál.

Diákköri munkám első része a fenti típusú reakció kísérleti körülményeinek optimalizálására irányult, melynek során az alábbi két vegyületet (**3**, **4**) is előállítottam.



A bemutatott modellvegyületek szerkezeti felépítésükből adódóan kiralitáscentrummal rendelkeznek, így optikailag aktív spirozulfuránokból kiindulva lehetőség van a megfelelő szulfóniumsó enantiomerjeinek előállítására.

Munkám második részében megvalósítottam az optikailag aktív szulfóniumsók előállítását, amelyekből kiindulva hidrolizisvizsgálatokkal a központi kénatomon lejátszódó nukleofil reakciók sztereomechanizmusát tanulmányoztam.

Távlati célunk az analog szerkezetű optikailag aktív spirozulfuránok és szulfóniumsók abszolút konfigurációjának, valamint a sztereokémiai stabilitást jellemző kvantitatív adatoknak a meghatározása ( $DG^{\ddagger}$ ,  $DH^{\ddagger}$ ,  $DS^{\ddagger}$ ).

KLTE 7

**MESTERSÉGES PROTEINEK SZINTÉZISE REKOMBINÁNS DNS TECHNIKÁVAL**

*Krecz Ágnes V. vegyész - angol szakfordító*

*Témavezető : Dr. Borbély János  
KLTE Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Biotechnológiai úton előállított proteinek jelentős szerepet játszanak a proteinek viselkedésének és szerkezetének megismerésében. A genetikailag tervezett polipeptidok kontrollálható kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, egységes molekulatömeggel, aminosav szekvenciával, és sztereokémiai szerkezettel. Az így előállított anyagok biodegradálható proteinek, melyek iránt napjainkban egyre nagyobb érdeklődés mutatkozik.*

*A bioszintézishez először kémiai úton DNS oligonukleotidot állítunk elő, amely kódolja az előállítandó fehérje ismétlődő egységének szekvenciáját. A DNS szakaszt bakteriális plazmidba építjük be. Fermentációs úton megfelelő mennyiségű DNS-t állítunk elő, majd enzimatis úton polimerizáljuk az oligonukleotidokat. A különböző polimerizációfokú DNS multimerek közül a kívánt számú ismétlődő egységet tartalmazó származékot beépítjük a gazdasejt (*E. coli*) plazmidjába. Az ily módon előállított klónok fermentáció révén a kívánt proteint szintetizálják.*

*Munkám során az [(AG)<sub>4</sub>PEG]<sub>16</sub> aminosavsorrendű ismétlődő egységeket tartalmazó proteint állítottam elő és tisztítottam. (A képletben A = alanin, G = glicin, P = prolin, E = glutaminsav) A kapott anyagot dialízissel tisztítottam, majd a fúziós végeit brómciánnal hasítottam. A protein primer szerkezetét NMR módszerrel tanulmányoztuk.*

*Munkám további részében az előállított protein kémiai módosítását végeztem. A módosítást a proteint felépítő glutaminsav egységek teszik lehetővé a glutaminsav szabad karboxil csoportjának átalakításával. Kísérleteim során a protein benzil-észter származékát állítottam elő.*

## KLTE 6

KÍSÉRLETEK TERMÉSZETES EREDETŰ DIHIDROIZOKUMARIN-SZÁRMAZÉKOK  
ENANTIOSZELEKTIV ELŐÁLLÍTÁSÁRA

Jerga Ágoston III.évf. vegyész hallgató

Témavezető: Dr. Antus Sándor egyetemi tanár

A természetben előforduló O-heterociklusos vegyületek egyik farmakológiailag is igen értékes alcsoportját a 3,4-dihidroizokumarinok képezik. A növények növekedését is befolyásoló hatásukon túlmenően számos képviselőjüknek van gomba, rovarölő, vérnyomáscsökkentő, rákellenes, valamint számottevő antibiotikus hatása.

Diákköri munkám célja olyan egyszerű enantioszelektív szintézis kidolgozása, melynek segítségével könnyen hozzáférhető kiindulási anyagokból mind az aromás gyűrűn, mind pedig a C-3-as helyzetben változatosan szubsztituált származékok optikai izomerjei előállíthatók. Dolgozatomban az *Aspergillus melleus*-ból izolált (+)-melleinnek (2) fenilacetontól kiinduló szintézisére irányuló kísérleteimet ismertetem.



A szintézis kulcslépése a fenilacetont nátrium-tetrahidrid-borát(III)-as redukciójával nyerhető szekunder alkohol enzimkatalizálta kinetikus rezolválása volt. Az előadásomban további analogonok szintézisééről számolok be, valamint ezen optikailag aktív anyagok kiroptikai sajátságát mutatom be.

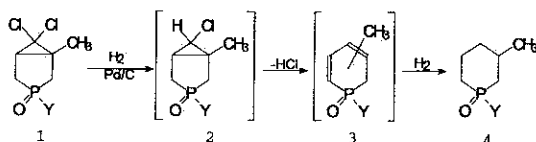
6,6-DIKLÓR-3-FOSZFABICIKLO[3.1.0]HEXÁN-3-OXIDOK KATALITIKUS  
HIDROGÉNEZÉSI REAKCIÓINAK VIZSGÁLATA

Novák Tibor, V. évf., Szerves és bio. vegyipari Szak

Témavezető: Dr. Keglevich György  
BME, Szerves Kémia Technológia Tanszék

A 6,6-Diklór-3-foszfabiciklo[3.1.0]hexán-3-oxidok sokféleképpen hasznosít-hatók más P-heterociklusok előállítására.<sup>1,2</sup>

Egyrészt a diklór-ciklopropán-származékok redukciós reakcióinak tanulmányozása, másrészt újabb heterociklusos vegyületsaládok, illetve ezek néhány képviselőjének előállítására képezte a feladatokat. Dolgozatomban a hidrogénezési reakciókkal kapcsolatos eredményeinkről számolok be. A diklór-karbén adduktok (1) 85-90°C-on és 9bar nyomáson végzett katalitikus hidrogénezése - a már korábban más módon előállított<sup>3</sup> hexahidrofoszfintokat (4) eredményezte<sup>4</sup>. Módszerünk azonban egyszerűbben és jobb termeléssel adja a 4 vegyületet.<sup>4</sup> Javaslatot tettünk a reakció lejátszódására (lásd alább) és kísérleteket végeztünk a monoklór-intermedierek izolálására.



Y = Ph, alkil, alkoxi

A termékek és az intermedierek szerkezetét <sup>31</sup>P, <sup>1</sup>H és <sup>13</sup>C NMR valamint tömegspektroszkópiás módszerekkel azonosítottuk.

#### Irodalom

- 1 Keglevich Gy.: *Synthesis* 1993, 931.
- 2 Keglevich Gy.: *Reviews on Heteroatom Chem.* 14, 119 (1996).
- 3 Keglevich Gy., Kovács A., Újszászy K., Tungler A., Tóth G., Tőke L.: *Phosphorus, Sulfur* 70, 219 (1992).
- 4 Keglevich Gy., Tungler A., Novák T., Tőke L.: *J. Chem. Res.*, nyomdában (1996).

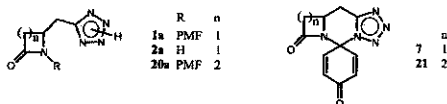
BME 15

*N*-(*p*-METOXI-FENIL)-CSOPORT OXIDÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA TETRAZOLIL CSOPORTTAL HELYETTESÍTETT  $\beta$ - ÉS  $\gamma$ -LAKTÁMOK KÖRÉBEN

Le Thanh Giang, doktoráns

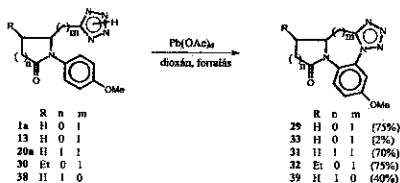
Témavezető: Dr. Fetter József  
BME, Szerves Kémia Tanszék

A Szerves Kémiai Tanszékén a karumonám analogonok szintézise során **1a** CAN-ös reakciókörülmények között a várakozással ellentétben nem eredményezte az *N*-de(*p*-metoxi-fenilezett) terméket (**2a**). Az anomáliát **7** spirovegyület keletkezésével értelmezték, amely más irányú bomlás miatt nem vezetett **2a**-hoz.



A munkánk során megvizsgáltuk **1a** reakcióját különböző reakciókörülmények között CAN-tal, és ezeket az eredményeket összehasonlítottuk a stabilisabb  $\gamma$ -laktámgyűrűt tartalmazó **20a** CAN-os oxidációja során izolált **21** spirovegyület reakcióival. A  $\beta$ - és  $\gamma$ -laktámok analogiája alapján **21** spirovegyület kinyerése, valamint kísérleteink eredményei egyhangúlag támasztották alá a feltételezett reakciómechanizmust.

Korábban megkísérelték **1a**-ból **7**-et  $\text{Pb}(\text{OAc})_4$ -tal dioxánban forralva előállítani, **7** helyett azonban **29**-et nyerték ki 75%-os hozammal.



Az utóbbi reakció kiterjeszhetőségét vizsgálva hasonló kísérleteket végeztünk **13**, **20a**, **30** és **38** modellvegyületekkel. Eddigi tapasztalataink szerint a reakció jól általánosítható, noha az új kötés kialakulása meghatározott szerkezeti feltételeket igényel.

## FLUORESCZENS PEPTIDEK ÉS PEPTIDTÁRAK

Kele Péter IV. biológia-kémia

Témavezető: Sebestyén Ferenc egyetemi docens  
Eötvös Loránd Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék

A peptidtárak sok-komponensű szintetikus peptidkeverékek [1], melyekben a különféle peptidok száma akár sokmillió lehet. A peptidtárakból új, biológiailag aktív peptidok azonosíthatók [2]. Az aktív peptid(ek) azonosítása egyszerűsíthetőnek látszik oly módon, hogy a peptideket különféle színes vagy fluoreszcens jelzéssel látjuk el [3].

Diákköri munkám során ezért egy modellpeptid (Phe-Ala-Val-Leu-Gly) olyan származékait szintetizáltam, amelyek fluoreszcens jelzőmolekulát tartalmaznak. C-terminális jelzőként egy fluoreszcens nem-természetes aminosavat: a DL-2-amino-3-(7-metoxi-4-kumaril) propionsavat (Amp) [4] használtam. A szintézis kezdetén az Amp védett származékát (Boc-Amp) klór-metilézett sztirol/divinil-benzol kopolimer gyantához kapcsol-tam, majd szilárdfázisú Boc-technikával egymás után hozzákapcsoltam a modellpeptidet felépítő aminosavakat. Az N-terminális helyzetben való jelölést úgy hajtottam végre, hogy a pentapeptid hagyományos szilárdfázisú szintézise során az utolsó aminosav (Phe) kapcsolása után a molekulát egy fluoreszcens monokarbonsavval, a 7-hidroxi-kumarin-4-ecetsavval (Hke) acileztem. A peptideket a gyantáról való lehasítás után fordított fázisú nagyhatékonyságú folyadékromatográfiával tisztítottam, fluoreszcenciájukat 366 nm gerjesztési hullámhossznál vizsgáltam. Az Amp-t tartalmazó peptid lila, a Hke-tartalmú pedig élénk kék színben fluoreszkált.

Elkészítettem továbbá egy olyan dekapeptidet, amelynek N-terminális részét Hke-val acilezett [Lys]<sub>5</sub> szekvencia képezi, ezt követi a Phe-Ala-Val-Leu-Gly molekularész. A poláros szekvencia beiktatása a fluoreszcens peptid vízben való oldhatóságának jelentős javulását eredményezte. Folyamatban van mindkét féle fluoreszcens jelöléssel ellátott pentapeptidár szintézise.

[1] a. Á. Furka et al. (1988): Abstr. 14th IUB Congr. Biochem., Prague, Vol 5, p.47.

b. F. Sebestyén et al. (1993): Bioorg. Med. Chem. Lett. 3, 413-419.

[2] M. a. Gallop et al. (1994): J. Med. Chem. 37, 1233-1251.

[3] E. Cămpian et al. (1994): Drug. Development Res. 33, 98-101.

[4] C. G. Knight (1991): Biochem. J. 274, 45-48.

## ELTE 9

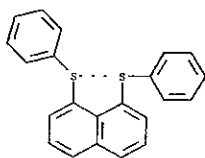
1,8-HELYZETBEN KÉNNEL DISZUBSZTITUÁLT NAFTALINVEGYÜLETEK  
ELŐÁLLÍTÁSA ÉS SZERKEZETÜK VIZSGÁLATA

Nagy Péter, V. évf. vegyész

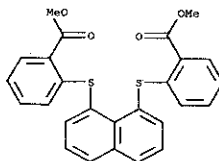
Témavezetők: Dr. Kapovits István, Dr. Kálmán Alajos  
ELTE Szerves Kémia Tanszék

Munkám során célul tűztem ki 1,8-helyzetben kénnel diszubsztituált naftalinszármazékok előállítását és szerkezetvizsgálatát. Az ilyen típusú molekulákban a szubsztituensek a van der Waals sugaraik összegénél (két S esetében 3.7 Å) jóval közelebb kerülhetnek egymáshoz, így az utóbbi időben világszerte intenzíven tanulmányozott "nemkötő" kölcsönhatások jönnek létre közöttük. A szerkezetmeghatározásokat egykristály röntgen diffrakcióval végeztem el.

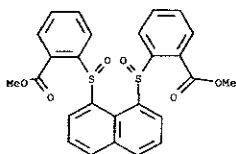
Vizsgálataim célja az alábbi négy molekula szintézise és szerkezetmeghatározása volt.



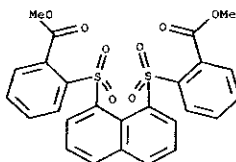
1



2



3



4

## 4-TELÍTETLEN-3-AMINOSZTEROIDOK ELŐÁLLÍTÁSA

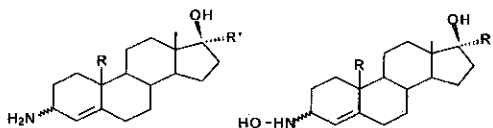
Kámán Judit, V. éves vegyészhallgató

Témavezető: Vincze Irén  
JATE Szerves Kémiai Tanszék

Az aminoszteroidok fontos fiziológiás hatású farmakonok kiindulási anyagai, ezért szükségesek az aminoszteroidok előállítására preparatív léptékű eljárások. Ezek többsége redukív módszer, amelyekkel konjugált telítetlen aminok nem készíthetők, így ezek a vegyületek egyelőre ismeretlenek.

Vizsgálataink kiindulási anyagául a metil-tesztoszteron és a 19-nortesztoszteron oximjait készítettük el. A  $\text{NaBH}_4$  az oximokat nem képes redukálni, de bizonyos átmeneti fémek sói, vagy oxidjai jelenlétében redukáló kapacitása megnő. Mi ilyen adalékként a  $\text{NiCl}_2$ -ot és  $\text{MoO}_3$ -ot választottuk. A redukciókat szobahőmérsékleten és  $-18^\circ\text{C}$ -on végeztük, majd a feldolgozott mintákat HPLC-vel analizáltuk. A HPLC kromatogramok csúcsainak hozzárendelését GC-MS módszerrel végeztük, a tiszta anyagokat  $^1\text{H-NMR}$  spektrummal jellemeztük.

Megállapítottuk, hogy a  $\text{NaBH}_4$ - $\text{MoO}_3$ -os redukciók szobahőmérsékleten csak a hidroxilamin fázisig futnak, míg  $-18^\circ\text{C}$ -on az amin-izomerek képződnek, közöttük telített aminok is. A  $\text{NaBH}_4$ - $\text{NiCl}_2$ -os redukciókban a  $\sigma\pi$ -kötés sértetlen marad és ráadásul a redukció  $-18^\circ\text{C}$ -on sztereoselektív.

R és R' = H, vagy  $\text{CH}_3$ 

. A  $\text{NaBH}_4$ - $\text{NiCl}_2$ -os eljárással további tiszta izomer aminoszteroidokat, a  $\text{NaBH}_4$ - $\text{MoO}_3$ -os redukcióval pedig egyéb hidroxilamino szteroidokat kívánunk készíteni.



JATE 29

**SZTEROID ACETÁTOK SZELEKTÍV DEZACETILEZÉSI ÉS ACILVÁNDORLÁSI  
REAKCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA  $Al_2O_3$ -ON MIKROHULLÁMÚ ENERGIÁKÖZLÉS  
HATÁSÁRA**

Sebők Ferenc, IV. éves vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Schneider Gyula  
JATE, Szerves Kémiai Tanszék

*Irodalmi adatok alapján ismert, hogy a szteroidok oldalláncában található primer acetoxicsoport közepes aktivitású bázisos  $Al_2O_3$ -on, kromatografálás közben viszonylag könnyen szenved hidrolízist. A kromatografálás közben fellépő mellékreakció ugyanakkor lehetőséget kínál olyan részlegesen dezacetileződött származékok előállítására, amelyek más úton nem, vagy csak nagy nehézségek árán készíthetők el.*

*A 16-acetoximetil-3-metoxi-ösztro-1,2,3(10)-trién-17-acetátok lehetséges négy izomerjének szelektív dezacetilezési reakcióját megvizsgáltuk közepes aktivitású  $Al_2O_3$ -on, mikrohullámú energiaközlés hatására. Ezzel a módszerrel lehetőségünk nyílt a különböző térhelyzetű acetoximetil-csoportok dezacetileződésének összehasonlító jellegű tanulmányozására.*

*Megállapítottuk, hogy a transz elrendeződésű 16a-acetoximetil-17b-acetát, valamint a 17b-acetoximetil-17a-acetát esetében a 16-os acetoximetil-csoport hidrolízise következik be, a 17-es acetát változatlan marad.*

*Ugyanakkor a cisz izomerek, így a 16a-acetoximetil-17a-acetát, valamint a 17b-acetoximetil-17b-acetát esetében a 16-os acetoximetil-csoport dezacetileződését, majd ezt követően egy acilvándorlási reakciót figyeltünk meg.*

*Megállapítottuk, hogy mind a dezacetileződés, mind az acilvándorlási reakció időbeli lejátszódása erősen függ a funkcióscsoportok tételyezetétől.*

*A dezacetileződés során keletkezett anyagokat nagynyomású kromatográfiával izoláltuk, szerkezetüket a kromatogramban elfoglalt helyük alapján, valamint spektroszkópiai módszerekkel igazoltuk.*

# KLTE 3

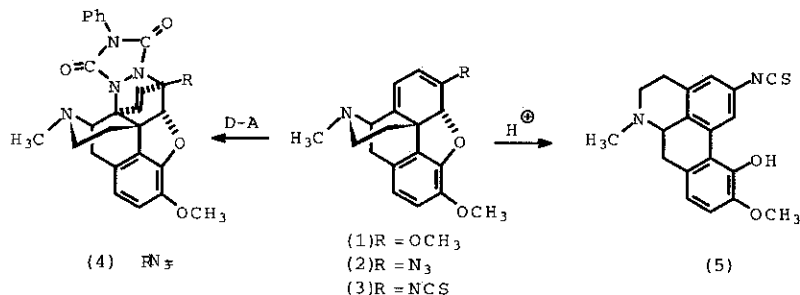
## NITROGÉN TARTALMÚ MORFINÁNDIÉNEK SZINTÉZISE ÉS ÁTALAKÍTÁSA

Czakó Barbara V.é. vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Berényi Sándor  
KLTE Szerves Kémiai Tanszék

A máknövény egyik mellékalkaloidja a diénstruktúrával rendelkező **tebain (1)** ami kitűnő kiindulási anyaga többek között az opiát receptorokra ható áthidalt C-gyűrűs oripavin származékoknak, valamint a dopamin receptorokra ható aporfinvázis vegyületeknek. A Szerves Kémia Tanszéken az elmúlt években módszereket dolgoztak ki a tebainnal analóg szerkezetű, a C-gyűrűben F, Cl, Br, SCN szubsztituenset tartalmazó morfinándiének előállítására és átalakítására.

Célul tűztük ki újabb nitrogén és kéntartalmú szubsztituenset tartalmazó morfinándiének szintézisét és azok Diels-Alder, valamint savkatalizált átrendeződési reakcióinak vizsgálatát.



A 6 $\beta$ -azido-14 $\beta$ -hidroxi-kodein szubsztituíciós és eliminációs reakcióit alkalmazva előállítottuk a 6-azido-6-demetoxi-tebaint (2) ami a vinilazid szerkezete miatt hőre és savra igen érzékenynek bizonyult. Szerkezetét a spektroszkópai adatok mellett az átalakítása révén nyert 6-NCS-dién (3) és Diels-Alder addukt (4) egyértelműen igazolta. A 6-NCS-dién stabilitása lehetővé teszi, hogy savkatalizált átrendeződési reakcióit tanulmányozzuk. Ennek során eddig a 2-NCS-apokodeint (5) sikerült izolálnunk.

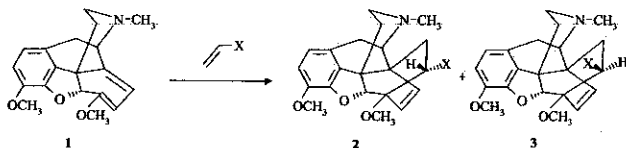
A továbbiakban tervezzük a 7-azido-, ill. a 7-NCS-dién előállítását is.

## KLTE 5

A TEBAIN DIELS-ALDER ADDUKTJAI IZOMERIZÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA  
A  $\beta$ -NEPENTON ELSŐ ELŐÁLLÍTÁSA\*

Garađnay Sándor IV. Vegyész

Témavezető: Dr. Makleit Sándor, Dr. Marton János  
Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék



A tebain (1) és monoszubsztituált etilénszármazékok regio- és diasztereoselektív Diels-Alder reakcióiban általában a  $7\alpha$ -származékok (2) képződnek. A tebain és metil-vinil-ke-ton estében a  $7\alpha/7\beta$  (2; 3 X= COCH<sub>3</sub>) arány 98:2 (un. tevinon, ill.  $\beta$ -tevinon), 1 és fenil-vinil-ke-ton esetében csak  $7\alpha$  származék képződik (2 X= COC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>). 1 és akril-nitril reakciójakor viszont a  $7\alpha/7\beta$  arány (2: X= CN és 3: X= CN) 1:1. A mind elméletileg, mind gyakorlatilag jelentős morfinszármazékok: buprenorfin, diprenorfin, etorfin, dihidroetorfin és alletorfin a 2-es szerkezetű (X= COCH<sub>3</sub>) ketonból állíthatók elő. E vegyületek  $\beta$ -diasztereomerjeinek előállításához és biológiai tulajdonságaik vizsgálatához a 3-as szerkezetű (X= COCH<sub>3</sub> ill. X= COC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)  $\beta$ -tevinon és  $\beta$ -nepenton szükséges. A tevinon és  $\beta$ -tevinon (98:2) elválasztása révén, csak nagymennyiségű kiindulási anyagból nyerhető kellő mennyiségű  $\beta$ -tevinon. Dipoláros apro-tikus oldószereket és csekély nukleofilitással rendelkező bázisokat alkalmazva első ízben sikerült a  $\beta$ -tevinont tevinonból előállítanunk.

Mivel a  $\beta$ -nepenton (3: X= COC<sub>6</sub>H<sub>5</sub>) a Diels-Alder reakcióban nem képződik, a nepenton izomerizációja pedig az általunk tevinonra kidolgozott módon nem következik be, így az alábbi úton jutottunk el az eddig le nem írt  $\beta$ -nepentonhoz: a  $7\alpha$  és  $7\beta$ -nitrilt frakcionált kristályosítással választottuk szét az irodalomban leírt módszer módosításával, majd a  $7\beta$ -nitrilt reagáltattuk fenil-Mg-bromiddal.

\* Az eredmények közzésre előkészítve a Synth. Commun. részére.

VE 6

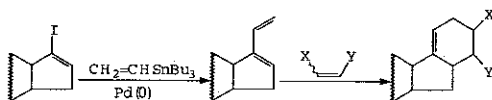
SZTEROIDOK ÁTALAKÍTÁSA KAPCSOLÁSI ÉS DIELS-ALDER REAKCIÓBAN

Jeges György, Mérnöki kar, Vegyészmérnöki szak

Témavezető: Skodáné dr.Földes Rita  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

A szteránvázon alapuló új ötgűrűs származékok gyógyszerkémiailag szempontból érdekes vegyületek kiindulási anyagaiként szolgálhatnak. Egyik lehetőség pentaciklusos szteroidok kialakítására a Stille-féle kapcsolási reakció valamint [4+2] cikloaddíció egymást követő alkalmazása. A reakció első lépésében konjugált kettőskötéseket tartalmazó vegyületeket állítottam elő jód-vinil szerkezeti egységet tartalmazó szteroidok és vinil-tributil-sztannán kapcsolása útján. A keletkezett diéneket továbbalakítottam Diels-Alder reakción keresztül. A termék előállítására több lehetőség kínálkozik:

- a) A homogénkatalitikus kapcsolás után a keletkezett dién tiszta állapotban kinyertem és ezután reagáltattam a dienofil reagenssel.
- b) A dién szintézise után, izolálás nélkül adtam az elegyhez a dienofil partnert.
- c) A harmadik esetben az elegyben mindhárom reakciópartner jelen van (a kiindulási szteroid, vinil-tributil-sztannán, és a dienofil), és a keletkező dién azonnal reagál a jelenlévő dienofil vegyülettel.



Munkám során elsősorban a c) változat alkalmazását vizsgáltam, meghatároztam az optimális reakciókörülményeket, tanulmányoztam a dienofilek reakciókészségét (és ez alapján dienofil erősségi sorrendet állítottam fel). A kísérletek során maleinsavanhidridet, dimetil-acetil-léndikarboxilátot, dietil-maleátot, metil-akrilátot és a fumársav észtereket (dietil- és dimetil-fumarátot) alkalmaztam dienofil partnerként.

Hat vegyületet sikerült nagy szelektivitással előállítani. A többi reakcióban izomerek elegye keletkezett. A vegyületek szerkezetének felderítése  $^1\text{H-NMR}$ ,  $^1\text{H-}^1\text{H COSY}$ , NOE,  $^{13}\text{C-NMR}$ , MS és IR vizsgálatokkal történt.

*JATE 10  
SZTEROID-OXETÁNOK SAVNITRILEKKEL TÖRTÉNŐ GYŰRŰBŐVÜLÉSI REAKCIÓJA*

*Hajnal Andrea, V. éves vegyészhallgató*

*Témavezető: Dr. Schneider Gyula  
JATE Szerves Kémiai Tanszék*

*Minden olyan szerves vegyület, mely potenciálisan karbénium kation képzésére alkalmas, savnitrilekkel erősen savas közegben N-szubsztituált karbonsavamidot képez.*

*Ez a Ritter által felismert reakció a szteroid-epoxidok esetén a transz-1,2-acilamino-szteroid-alkoholok előállítására alkalmas.*

*A szteroid-epoxidok gyűrűfelnyílási reakciója kiterjeszhető volt az ötagú D-gyűrűhöz kondenzált szteroid-oxetánokra is. Ez a módszer lehetőséget kínált az 1,3-acilamino-hidroxi-szteroidok előállítására.*

*A 16 $\beta$ ,17 $\beta$ -epoximetilén-ösztron-3-metil-étert alifás és aromás savnitrilekkel reagáltattuk, főlegben vett BF<sub>3</sub>O(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>-tal. Ennek eredményeként a szteránvázhoz kondenzált dihidrooxazin HBF<sub>4</sub>-sója képződött, ellentétben a várt 1,3-acilamino-hidroxi-szteroiddal. A megfelelő sókból NaHCO<sub>3</sub> oldattal szabadítottuk fel a dihidrooxazin bázisokat. Azt találtuk, hogy a bázisok stabilitása elérő volt. Így az acetonitrillel kapott vegyület mind lúgos, mind savas közegben elbomlott. Ezzel ellentétben a nagyobb szénatomszámú savnitril homológok, és az aromás savnitrilekből készült szteroid-heterociklusok meglepően stabilnak bizonyultak.*

*A kapott vegyületek szerkezetbizonyítása spektroszkópai úton, valamint összehasonlító anyagok készítésével történt.*

## SZTEROIDOK OXIDÁCIÓJA KÁLIUM-PERMANGANÁTTAL

Tömböly Csaba, V. éves vegyész

Témavezető: Vincze Irén  
JATE Szerves Kémiai Tanszék

A szteroidok olefinkötésének oxidációjára - a szteroidok hidrofób jellege miatt -szerves oldószerekben oldódó reagenseket alkalmaznak. Ilyenek a krómtrioxid aminszármazékai, illetve a szerves peroxi-savak. Ezek nagyobb reakciómennyiségek esetén robbanásveszélyesek, illetve a peroxi-savak igen drágák is. Ezért kezdünk foglalkozni az olcsó, de hidrofíl kálium-permanganát felhasználásának lehetőségeivel.

Koronaéterekkel képzett "csupasza" permanganát ion benzolos oldatban kis konverzióval alakította át a koleszterint polárosabb termékekké. Ezeknek a GC-MS vizsgálat szerint a koleszterin-5,6-epoxid, illetve dehidro-koleszterin szerkezetet tulajdonítjuk.

Heterogén fázisban, fázisátvivő katalizátor (TEBA-Cl) jelenlétében végrehajtott reakcióban az olefinkötés vicinális diol-rendszerre alakult, azaz a kolesztán-3,5,6-triol izomerek képződtek. A konverzió itt sem jobb az előző módszerénél.

Ismert az átmeneti-fém sók alkalmazása katalizátorként. Mi Fe(II)- és Zn-sók alkalmazhatóságát vizsgáltuk. FeSO<sub>4</sub> jelenlétében epoxidszármazék képződik, míg ZnSO<sub>4</sub>, mint katalizátor esetén a termékek diketonok (kolesztán-3,6-dion és 5-kolesztén-3,6-dion). A reakciók termelése 30% körül van.

Katalizátor nélküli reakciók pH-függését vizsgálva sikerült savas közegben olyan koncentrációt és savmennyiséget (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) találnunk, amikor a reakció gyors és egyirányú. A koleszterin és a dehidroepiandrosteron, illetve észterek egyaránt 5,6-epoxiddá alakulnak. Az epoxid térállása az alkalmazott sav mennyiségétől függ.

A kidolgozott preparatív értékű, kvantitatív és sztereoselektív oxidációs módszerrel nyert termékeket izoláltuk és jellemeztük. Szerkezetüket sokoldalú jellemzésük mellett autentikus anyaggal való összehasonlítás útján is bizonyítottuk.

JATE 34

## IZOMER 16-METIL-SZTEROIDOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS SZERKEZETIGAZOLÁSA

Tapolcsányi Pál, PhD-ösztöndíjas

Témavezető: Dr. Schneider Gyula  
JATE, Szerves Kémiai Tanszék

*Az alkilezett szteroidok kedvező farmakológiai hatásának felismerése óta számos, a szteránváz különböző helyén metilcsoportot tartalmazó származék szintézise valósult meg. Az irodalmi adatokból kitérünk, hogy amíg az újonnan bevitt metilcsoportnak a vázon elfoglalt helye a szintézismenetből egyértelműen meghatározható, addig a pontos térhelyzete sok esetben bizonytalan maradt.*

*Az irodalomban a 16-metil-17-hidroxi-szteroid izomerek előállításának általános módja a 16 $\alpha$ -metil-17-keto-, illetve a 16 $\beta$ -metil-17-keto-szteroidok redukciója, amely a megfelelő 16 $\alpha$ -metil-17 $\beta$ -hidroxi-, illetve 16 $\beta$ -metil-17 $\beta$ -hidroxi-izomerekhez vezet.*

*Az utóbbi időben bebizonyosodott, hogy a 16-alkil-17-keto-szteroidok a kísérleti körülmények között egyensúlyi izomerizációban vesznek részt, így a belőlük előállított izomerek sokszor keverékeknek bizonyultak.*

*Munkánk során bizonyított konfigurációjú 16-hidroximetil-5-androsztén-3 $\beta$ ,17-diol-izomerek vegyes p-toluolszulfonsav - ecetsav észtereinek komplex-fémhidrides redukcióját végeztük el. A redukció királis szénatomot nem érint, így a kapott 16-metil-5-androsztén-3 $\beta$ ,17-diol-izomerek konfigurációja visszavezethető a kiindulási vegyületekére.*

*A 16-metil-5-androsztén-3 $\beta$ ,17-diol-3,17-diacetát-izometeket etil-acetátban Pd/C jelenlétében hidrogénezünk, amikor a megfelelő 16-metil-5 $\alpha$ -androsztán-3 $\beta$ ,17-diol-3,17-diacetát-epimerekhez jutottunk.*

*Ezeknek a vegyületeknek további szelektív átalakítása lehetőséget adott a megfelelő 16-metil-5 $\alpha$ -androsztán-3-on,17-ol-17-acetát izomerek előállítására is. Az általunk előállított, bizonyított konfigurációjú vegyületek néhány esetben lehetőséget adtak az irodalmi adatok helyesbítésére, illetve az eddig ismeretlen izomerek leírására. Az előállított vegyületek térszerkezetét <sup>1</sup>H-NMR- és <sup>13</sup>C-NMR-spektroszkópiával bizonyítottuk.*

CIKLOALKÁN VÁZAS  $\beta$ -AMINOSAVAK HPLC-S ELVÁLASZTÁSA

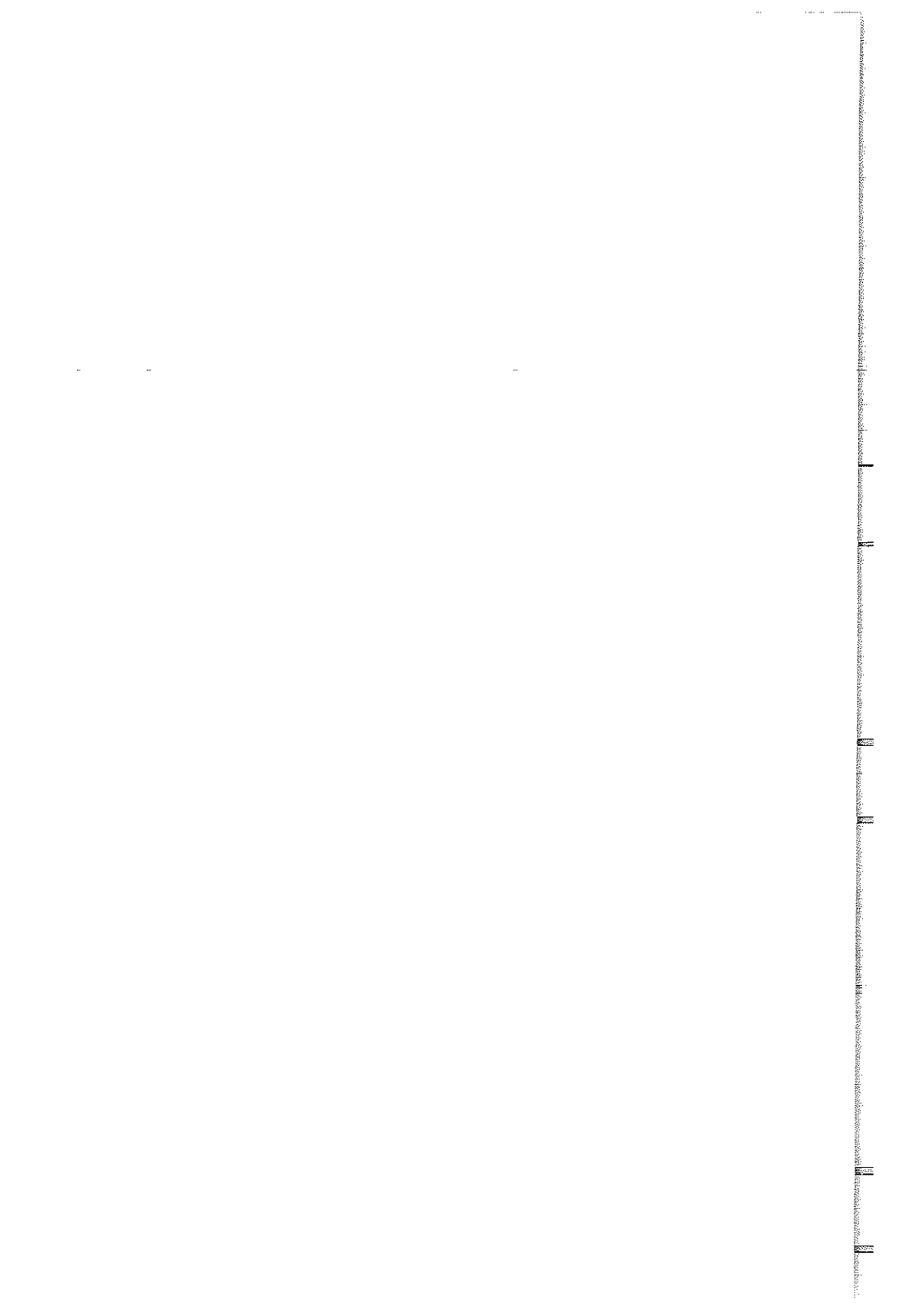
Péter Mária, V. éves vegyész

Témavezető: Dr. Péter Antal  
JATE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

*Az elmúlt években számos kísérletet végeztek aliciklusos  $\beta$ -aminosavak peptidekbe történő beépítésére, hogy azok stabilitását és biológiai aktivitását növeljék. Erre a célra többek között a cisz- és transz-2-amino-1-ciklopentánkarbonsavakat (cisz- és transz-ACPC), a cisz- és transz-2-amino-1-ciklohexánkarbonsavakat (cisz- és transz-ACHC) és a cisz- és transz-2-amino-4-ciklohexén-1-karbonsavakat (cisz- és transz-ACHC-én) is alkalmazták. Ezeket a vegyületeket kondenzáltvázas telített heterociklusok felépítésére is használták, melyek potenciális farmakonok. További alkalmazási lehetőségük, hogy a természetben előforduló peptidek egy  $\alpha$ -aminosavjának  $\beta$ -aminosavra történő cseréjével a hatás nagysága, esetenként a hatás típusa is módosítható és a vegyületek stabilitása növelhető. A gyűrűtagszám változtatása lehetővé teszi a peptid konformációjának módosítását és ezzel receptorok finomszerkezetének meghatározását.*

*Feladatunk a fenti cisz és transz aminosavak enantiomerjeinek elválasztása és az optikai izomerek azonosítása volt. Ehhez két fordított fázisú nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás (RP-HPLC) módszert használtunk fel: egyrészt kolonna előtti származékképzést királis reagensekkel, másrészt királis állófázison történő direkt elválasztást. Az állófázis királis szelektorként koronaétert tartalmazott, a származékképzéshez pedig a 2,3,4,6-tetra-O-acetil- $\beta$ -D-glükopiranozil-izotiocianátot (GITC-reagens) és az 1-fluoro-2,4-dinitrofenil-5-L-alaninamidot (Marfey-reagens) alkalmaztuk. Vizsgáltuk a hőmérséklet, a pH, az áramlási sebesség és a mozgófázis összetétel hatását az elválasztásra.*





### *III. ELMÉLETI ÉS FIZIKAI KÉMIA ALSZEKCIÓ*



### III. Elméleti és fizikai kémia alszekció

<b>Drucker Tamás</b>	<b>BME 4</b>	
<i>DPPC-víz liposzóma rendszer gél fázisainak kátszögű röntgendiffrakciós vizsgálata</i> .....		89
<b>Merényi László</b>	<b>VE 16</b>	
<i>Termodinamikai egyensúlyi diagramok szerkesztése</i> .....		90
<b>Torma Viktória</b>	<b>ELTE 23</b>	
<i>Oxigénredukció vizsgálata aranyelektrodon impedanciaspektroszkópiával</i> .....		91
<b>Baranyi László</b>	<b>JATE 1</b>	
<i>A talaj organo-komplexeinek modellezése agyagásványok szerves felületmódosításával</i> .....		92
<b>Budavári Viktória</b>	<b>JATE 3</b>	
<i>Nafionba ágyazott glükóz-oxidáz enzim elektrokémiai vizsgálata</i> .....		93
<b>Szabó Klára</b>	<b>JPTE 9</b>	
<i>A dimerizáció hatása a metilénkék redoxi- és spektroszkópiai tulajdonságaira</i> .....		94
<b>Kállay Mihály</b>	<b>ELTE 4</b>	
<i>Közepes szénatomszámú fullerének Jahn-Teller torzulásai</i> .....		95
<b>Lázár Armand</b>	<b>ELTE 8</b>	
<i>Fullerénpolimerek STM képeinek számítása egy egyszerű modell alapján</i> .....		96
<b>Csiszár Marika</b>	<b>JATE 6</b>	
<i>C<sub>70</sub> fullerén filmek elektrokémiai vizsgálata</i> .....		97
<b>Szekeres Zsolt</b>	<b>ELTE 17</b>	
<i>Láthatatlan atomok a grafit felszínén</i> .....		98
<b>Fillipcei Genovéva</b>	<b>JATE 8</b>	
<i>Szalicilát adszorpció hatása a kaolinit felületi tulajdonságaira vizes rendszerekben</i> .....		99
<b>Urbán Zita</b>	<b>KLTE 15</b>	
<i>A radioaktív szennyező <sup>60</sup>Co<sup>2+</sup>-ion határfelületi reakciója Ca-montmorillonit agyagásvány modellanyagon</i> .....		100
<b>Hajgató Balázs</b>	<b>BME 8</b>	
<i>Szililének stabilitásának kérdései. A {C<sub>2</sub> H<sub>4</sub> N<sub>2</sub> Si} potenciálfelület vizsgálata</i> .....		101
<b>Kárpáti Tamás, Soós László</b>	<b>BME 11</b>	
<i>Allil-foszfínok és allil-arzínok tér- és elektronszerkezete</i> .....		102
<b>Schenker Ivonn</b>	<b>VE 10</b>	
<i>Norbornén oligomerek molekulamechanikai vizsgálata</i> .....		103
<b>Steiner Csaba</b>	<b>VE 11</b>	
<i>Szteroidok modellezése</i> .....		104

<b>Lagzi István</b>	<i>JATE 23</i>	
<i>A klorit-tetrationát front instabilitásának vizsgálata</i> .....		105
<b>Rosinger Boglárka</b>	<i>JPTE 6</i>	
<i>Vibrációs átmenetek irányítottágának kvantumkémiai vizsgálata</i> .....		106
<b>Kerner Zsolt</b>	<i>ELTE 7</i>	
<i>Izzólámpák impedanciaspektroszkópiája</i> .....		107
<b>Kóta Zoltán</b>	<i>JATE 21</i>	
<i>Fotoszintetikus szervezetek nehézfém stresszre bekövetkező szerkezeti változásainak vizsgálata</i> .....		108
<b>Szorcsik Attila</b>	<i>JATE 31</i>	
<i>Mikroemulziók stabilitása, nanorészecskék előállítása mikroemulziókban</i> .....		109
<b>Hartvig Nóra</b>	<i>JPTE 3</i>	
<i>Energiatranszfer vizsgálata tripaflavin-rodamin B modellrendszeren</i> .....		110
<b>Galamb Szabolcs</b>	<i>VE 20</i>	
<i>Elektronmikroszkópos képek minőségének javítása számítógépes képfeldolgozással</i> .....		111
<b>Dunai Beáta</b>	<i>JATE 7</i>	
<i>Szilika szuszpenziók stabilizálása/destabilizálása kationaktív tenziddel</i> .....		112
<b>Somogyi András</b>	<i>ELTE 12</i>	
<i>Konfidenciatartomány számítása likelihood ratio módszerrel</i> .....		113
<b>Szabados Ágnes</b>	<i>ELTE 13</i>	
<i>Csillapított perturbációszámítás kvázi-degenerált esetben</i> .....		114
<b>Román Hedvig</b>	<i>JPTE 5</i>	
<i>Predomináns vibronikus átmenetek vizsgálata</i> .....		115
<b>Anton Kiss</b>	<i>JATE 40</i>	
<i>Matrices within the Matrix Operator <math>W_{(M1,M2,M3)}</math></i> .....		116
<b>Juhász Gergely</b>	<i>ELTE 3</i>	
<i><math>Ba_{0,95}Ca_{0,05}Fe_{0,8}Co_{0,2}O_{3-x}</math> összetételű perovszkít Mössbauer-spektroszkópiás vizsgálata</i> .....		117

DPPC-VÍZ LIPOSZÓMARENDSZER GÉL FÁZISAINAK KISSZÖGŰ  
RÖNTGENDIFFRAKCIÓS VIZSGÁLATA

Drucker Tamás V. évf.

Témavezető: Dr. Bóta Attila  
BME, Fizikai Kémia Tanszék

*TDK dolgozatom az első lépés a DPPC-víz alapú liposzómák Lb' és Pb' fázisainak kisszögű röntgendiffrakciós szórásképének modellezésében. A szóráselmélet valamint a konkrét rendszerre vonatkozó irodalom tanulmányozása után célszerűnek látszott, hogy a többé-kevésbé gömbhéjából felépülő liposzómákat radiálszimmetrikus rendszerként írjam le. A „hagyma” modellnek nevezett leírás alkalmas tiszta fázisok és átmeneti szerkezetek leírására. Előállítottam homodiszperz és polidiszperz méreteloszlású liposzómák Lb' és Pb' fázisainak elvi szórásgörbéit. Az Lb'«Pb' átmenet lefolyását modelleztem idealizált körülményeket feltételezve. Az alapfázisok kvantitatív leírását az elektronsűrűség radiálszimmetrikus fluktuációjának beépítésével tudtam elérni.*

*A vizsgált rendszer reális körülményeit szándékoztam megismerni, ezért a DPPC-víz rendszert 28°C-os (az Lb' fázisnak megfelelő), 38°C-os (a Pb' fázisnak megfelelő) és 33°C-os (fázisátmeneti pont) hőmérsékleten tanulmányoztam. A fázisátmeneti pont hőmérsékletét különböző hőprogramokkal (fűtéssel 28°C-ról, hűtéssel 38°C-ról ~2°C/perc és 0.037°/perc sebességgel) állítottam be, amelyek jelentősen befolyásolták a kialakuló rétegszerkezetet. Az átmeneti pontban a két alapfázis együttes fellépését valószínűsíthettük, amelyet irodalmi adatok is alátámasztanak. A hagyma modell csak olyan liposzóma szerkezet szórását képes leírni, amelyben radiális irányban látszó rétegszámokban váltakozó Lb' és Pb' szerkezetek fordulnak elő. Ilyen módon az Lb' fázisból az átmeneti pontba melegített illetve Pb' fázisból az átmeneti pontba hűtött rendszer egydimenziós rétegrácsának szórását kvalitatív módon sikerült leírni. Az alapfázisokból kialakult átmeneti struktúrák szórását hibahelyek figyelembevételével tudtam modellezni.*

## TERMODINAMIKAI EGYENSÚLYI DIAGRAMOK SZERKESZTÉSE

Merényi László, V. évf., Környezetmérnöki szak

Témavezető: dr. Kristóf Tamás  
Veszprémi Egyetem, Fizikai Kémia Tanszék

*Egy ismert komponenseket tartalmazó egyensúlyi kémiai rendszer vizsgálatok számunkra érdekes lehet, hogy egyes részecskék valamely intenzív tulajdonságának függvényében hogyan alakul a többi részecske stabilitása. Ez az intenzív tulajdonság rendszerint a kémiai potenciállal arányos aktivitás vagy parciális nyomás. Ha két ilyen részecskét veszünk figyelembe, akkor a grafikus szemléltetés lehetőségét kihasználva megtehetjük, hogy egy koordináta-rendszerben a két tengelyen - racionálisan megválasztott intervallumokon belül - e részecskék változó intenzív mennyiségét ábrázoljuk, és ezek függvényében rajzoljuk fel a részecskék stabilitási tartományait. Ha a tengelyeken a két részecske aktivitásának vagy parciális nyomásának a logaritmusai szerepelnek, akkor bizonyos megszorításokkal élve az egyes stabilitási tartományok konvex sokszögek lesznek a korlátos koordinátasíkon.*

*A kétdimenziós termodinamikai egyensúlyi diagramok szerkesztésére létezik egy gyors és elegáns módszer: a rendszerben felírható sztöchiometriai reakcióegyenletek alapján a tartományoknak csak a határait számoljuk ki. A már ismert szerkesztési alapelvből kiindulva készített, általánosan alkalmazható algoritmus alapján irtam meg PASCAL programnyelvben egy olyan programot, mely többféle típusú termodinamikai egyensúlyi diagram szerkesztésére is alkalmas: szabadon választhatók a koordináták (elektródpotenciál, pH vagy egy részecske aktivitásának logaritmusai), a hőmérséklet, a nyomás és a rendszer összetétele.*

*A program a megadott rendszer részecskéinek elemi összetételét leíró ún. formulamátrix elkészítése után mátrixműveletek segítségével felállítja a rendszer leírásához szükséges ún. teljes kémiai egyenletrendszereket. A reakcióegyenleteket a koordinátasíkon egyenesek reprezentálják. Ezek az egyenesek határozzák meg az egyes részecskesorportok stabilitási tartományait.*

*A program által készített diagramok több tudományterületen (fizikai kémia, analitikai kémia, elektrokémia, geokémia, biokémia, környezetvédelem, stb.) is hasznosíthatók.*

**OXIGÉNREDUKCIÓ VIZSGÁLATA ARANYELEKTRODON  
IMPEDANCIASPEKTROSKÓPIÁVAL**

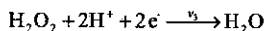
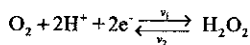
*Torma Viktória IV éves vegyész*

*Témavezető: Láng Győző  
ELTE TTK KTCS, Fizikai-kémiai Tanszék*

*Az oldott oxigén tökéletes eltávolítása az elektrokémiai rendszerekből gyakran a legfontosabb, de egyben legidőigényesebb műveletek egyike. A rendszerben jelenlévő oxigén számos elektrokémiai folyamatban (pl. spontán fémoldódás, korrózió) közvetle-nül is részt vesz, nem is beszélve arról, hogy sok elektrokémiai reakció vizsgálatát az oldott oxigén még nyomnyi mennyiségben is zavarja. Ezért az oxigénredukció kinetiká-jának tanulmányozása elméletileg és gyakorlatilag egyaránt érdeklődésre tart számot.*

*Munkánk célja az aranyon lejátszódó oxigénredukció kinetikai paramétereinek impedanciaspektroszkópiával történő meghatározása volt. Az elektrokémiai impedancia-spektroszkópia az egyik általánosan használt módszer elektródfolyamatok kinetikájának vizsgálatára. Olyan kísérleti összeállítást dolgoztunk ki, amely lehetővé tette az impedancia-spektroszkópia alkalmazásánál felmerülő-részben közismert-méréstechnikai nehézségek kiküszöbölését. Az elektródimpedanciát a frekvencia, a méréshez használt forgó korongelektród fordulatszám, illetve a potenciál függvényében vettük fel nátrium-szul-fát, illetve nátrium perklorát oldatokban. Az oldatok kémhatását pH=2-re állítottuk be.*

*A téma előzményei alapján feltételeztük, hogy a következő reakciómechanizmus érvényes:*



*ahol a  $\text{H}_2\text{O}_2$  oldható köztitermék, tehát el is távozhat a felületről.*

*Előadásomban a kinetikai modell ismertetésén túl bemutatom alkalmazhatóságának korlátait és a mérések alapján becsült kinetikai paramétereket.*



## JATE I

## A TALAJ ORGANO-KOMPLEXEINEK MODELLEZÉSE AGYAGÁSVÁNYOK SZERVES FELÜLETMÓDOSÍTÁSÁVAL

Baranyi László, V. kémia-fizika

Témavezető: Dr. Tombácz Etelka  
József Attila Tudományegyetem Kolloidkémiai Tanszék

*A szerves talajagyasványok, oxid, hidroxid részecskék és a szerves talajkolloidok természetes kölcsönhatásával képződő szerves-ásványi komplexek alapösszetételének és a környezetüktől függő kölcsönhatásának lényegi szerepe van a kialakuló talajszerkezetben.*

*Munkám során célom volt egyes talajalkotó agyagásványok szerves fedésének modellezése. Két különböző szerkezetű agyagásvány, a kaolinit és a montmorillonit szerves felületmódosítását végeztem el. A galluszsav oxidációs és polikondenzációs reakciójával a természetes humuszanyagokkal analóg felületi fedést hoztam létre az ásványok felületén, előállítottam a talajokban fontos szerepet játszó szerves-ásványi komplex modelljét.*

*A szerves fedés hatására a határfelületi tulajdonságokban bekövetkező változások a szintetikusan felületmódosított mintáknál hasonló tendenciát mutatnak, mint természetes talajok esetén. A humuszanyagok lefedik az agyagásvány részecskék mikro- és mezopórusait, így a kis méretű molekulák nem tudnak behatolni a pórusokba. Az agyagásvány részecskék felületi aktív helysűrűségét, a változó, pH-függő felületi töltést jelentősen növeli a humusz fedések jelenléte, hasonlóan a természetes talajokhoz. A szerves fedés hatására egyrészt a nettó proton töltés nulla állapota alacsonyabb pH-k felé tolódik el, másrészt a proton asszociációjával vagy disszociációjával létrejövő töltések mennyisége lényegesen nő. A szintetikus szerves fedés jelenléte a kaolinit és montmorillonit szuszpenziókat szterikusan és elektrosztatikusan stabilizálja, míg annak hiánya esetén az agyagásvány szuszpenziók kolloid stabilitása lényegesen kisebb, a szuszpenziók szerkezete merevebbé válik, a kialakuló fizikai térháló szilárdsága nő.*

JATE 3

NAFIONBA ÁGYAZOTT GLÜKÓZ-OXIDÁZ ENZIM ELEKTROKÉMIAI VIZSGÁLATA

Budavári Viktória V. éves vegyész szakos hallgató

Témavezető: Dr. Novák Mihály  
József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

*Az enzimelekciók termékeinek elektrokémiai átalakítása nagyon kedvező rendszerek kialakítására ad lehetőséget mind az analitika, mind a szintézis számára, mert az enzimelekció specifikus, szelektív és nagy érzékenységű sajátosságait kapcsolja össze az elektrokémiai mérés egyszerű kezelhetőségével. Az enzimelektródok kialakítása és vizsgálata napjainkban az egyik leginkább kutatott terület.*

*Munkám célja az üvegszén elektród felületén Nafion filmbe ágyazott glükóz-oxidáz enzim működésének tanulmányozása volt. Méréseim során az enzimelekcióban képződő hidrogén-peroxidot detektáltam potenciosztatikus módszerrel. Mivel a  $H_2O_2$  oxidációjából származó áram kedvezőbb volt, mint a redukcióé, ezért az előbbit tekintettem az enzim működés mértékének.*

*A polimer rétegbe ágyazott enzim reakciót nemcsak az enzim aktivitása, hanem a glükóz, az oxigén és a hidrogén-peroxid transzportja is befolyásolja. Azt tapasztaltam, hogy a  $H_2O_2$  oxidációs árama arányosan növekszik a filmvastagság és az enzim koncentráció növelésével. A film száradási ideje is befolyásolja a mért áram nagyságát, mivel a kialakuló rétegben módosul a transzport folyamatok sebessége és az enzim környezete. A Nafion rétegben rögzített enzim nem tudja teljes katalitikus aktivitását kifejteni, ha a levegővel telített oldat oxigén mennyisége áll rendelkezésére, szemben a tiszta oxigénnel telített oldattal. Ugyanazon filmmel végzett öt, egymást követő mérésorozat során az áram nagysága nem csökkent, a film kialakításához készített Nafion-enzim oldat egy hónapos tárolása után történő felhasználásakor is csak kis mértékű aktivitás csökkenést tapasztaltam.*

*Ezek a vizsgálatok a Nafion mátrixban rögzített enzim működésének alapvető tulajdonságait tárják fel és alapot szolgáltatnak további vizsgálatainkhoz.*

JPTE 9

**A DIMERIZÁCIÓ HATÁSA A METILÉNKÉK REDOXI-  
ÉS SPEKTROSZKÓPIAI TULAJDONSÁGAIRA**

Szabó Klára, IV. évf. kémia-földrajz szakos hallgató

Témavezető: Dr. Kovács Barna  
JPTE Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

*Munkánk megkezdésekor célunk a metilénké, e jól ismert indikátor és potenciálérzékeny festék redoxi-tulajdonságainak vizsgálata volt. Első eredményeink - valamint a tanszékünkön korábban megkezdett, a festékek egyensúlyi viszonyainak és szerkezetüknek optikai tulajdonságaira gyakorolt hatását célzó kutatások - alapján csakhamar nyilvánvalóvá vált, hogy választott módszerünkkel egyedül nem érünk célt. A metilénké vizes közegben fellépő dimerizációjának potenciometriás vizsgálatakor az irodalomból származó állandók segítségével nem tudtuk eredményeinket kielégítően magyarázni, ezért egyenáramú polarográfiás és spektrofotometriás méréseket végeztünk.*

*A redoxi titrálások során megállapítottuk, hogy a metilénké titrálási görbéjének leírására alkalmazott homogén és inhomogén reakciót egyaránt figyelembe vevő egyenletekkel és a kísérletileg nyert görbék hasonló lefutásúak.*

*Az anionként csak kloridot, nitrátot vagy perklorátot tartalmazó oldatokban egyenáramú polarográfiás méréseket végeztünk. Magasabb metilénké koncentrációknál az előző lépcsőknél negatívabb potenciálon újabb polarográfiás lépcső található. E lépcső megjelenését a közegben dimer formában jelenlévő metilénkével hoztuk kapcsolatba.*

*Spektrofotometriás mérésekből meghatároztuk a metilénké dimer disszociációs állandóját klorid-, nitrát- és perklorátion tartalmú oldatokban. A dimer disszociációs állandók értékei perklorát < nitrát < klorid sorrendben változnak, amely megegyezik az anionok Hoffmeister-sorával.*

*Az a tény, hogy a különböző aniont tartalmazó oldatokban számított dimerizációs állandók között jelentős eltérés van, arra utal, szemben az irodalomban máig is elterjedt nézettel, az ionpárhépződésnek jelentős hatása van e festék dimerizációjára. Méréseink alapján feltehető, hogy a metilénké  $(MKA-MK)^+$ , vagy  $(MKA)_2$  formában dimerizálódik.*

ELTE 4

KÖZEPES SZÉNATOMSZÁMÚ FULLERÉNEK JAHN-TELLER TORZULÁSAI

Kállay Mihály, IV. vegyész

Témavezető: Dr. Surján Péter  
ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék

*A közelmúltban felfedezett fullerének általános jellemzője a magas szimmetria. Több képviselőjük az ikozaéderes pontcsoportba tartozik, amely a létező legmagasabb véges szimmetria a természetben. A nagy szimmetria magyarázza a Jahn-Teller-effektus gyakori fellépését, különösen a molekulák gerjesztett állapotaiban. A fullerének magas élettartamú triplett gerjesztett állapotai UV és ESR spektroszkópiával is vizsgálhatók.*

*Munkánk során az elpárologtatott grafit tömegspektrumában szignifikánsan jelentkező molekulák legstabilisabb, legmagasabb szimmetriájú izomerjeit vizsgáltuk: C<sub>70</sub> (D<sub>5h</sub>), C<sub>60</sub> (I<sub>h</sub>), C<sub>58</sub> (C<sub>3v</sub>), C<sub>56</sub> (T<sub>d</sub>), C<sub>50</sub> (D<sub>5h</sub>). A D<sub>5h</sub> és C<sub>3v</sub> pontcsoportban kettő-, a T<sub>d</sub>-ben kettő- és három-, az I<sub>h</sub>-ban három-, négy- és ötdimenziós irreducibilis reprezentációk vannak, amelyek a Jahn-Teller-effektus lehetőségét rejtik magukban. Célünk a triplett állapotok szimmetriájának meghatározása és a kísérleti eredmények értelmezése volt.*

*A szénklaszterek elektronszerkezetének leírásához a szemempirikus xHUGE modellt alkalmaztuk. Modell Hamilton operátorunk PPP (Pariser-Parr-Pople) típusú p-elektron-operátorból és a s-váz hatását leíró empirikus potenciálból állt. A gerjesztett állapotokat egyszerűen gerjesztett konfigurációkat tartalmazó CI-hullámfüggvénnyel írtuk le (Tamm-Dancoff közelítés). A kívánt pontcsoport adott irreducibilis reprezentációjához tartozó CI-hullámfüggvényt szimmetria-adaptálással, projekciós technika segítségével állítottuk elő. A geometria optimalását a Coulson-féle lineáris kötőhossz-kötésrend összefüggés alapján végeztük. A potenciálfelület Hess-mátrixának analizisével meghatároztuk a stacionárius pontok jellegét (nyeregpont, lokális minimum). Kiszámítottuk a kapott állapotok zérus-tér felhasadását (ZFS).*

*Számításainkat összevetve az ESR mérésekből származó kísérleti ZFS, valamint az optikai spektroszkópiával meghatározható gerjesztési energia adatokkal, asszignáltuk a molekulák legelső triplett állapotát. Eredményeink jól egyeznek a kísérleti adatokkal.*

ELTE 8

FULLERÉNPOLIMEREK STM KÉPEINEK SZÁMÍTÁSA EGY EGYSZERŰ MODELL  
ALAPJÁN

Lázár Armand IV. vegyész

Témavezető: Surján Péter  
ELTE TTK Elméleti Kémiai Tanszék

*A buckminsterfullerénben (C<sub>60</sub>) és annak alkálisóiban a fulleréngömbök képesek a jól ismert Diels-Alder reakcióval analóg módon saját magukkal összekapcsolódni és olyan polimert alkotni, amelyben az egyes monomer egységeket összekötő atomok négyzetes négyes gyűrűt alkotnak. Ilyen polimer szálak (Pekker Sándor (KFKI) és munkatársai állították elő) pásztázó alagútmikroszkópos (STM) vizsgálatokor Bíró P. László (Anyagtudományi Kutató Intézet) érdekes anomáliákat, nevezetesen alagútáram maximumokat észlelt két monomer egység között. Ezeknek az anomáliáknak a magyarázata volt a célunk. Ezért kifejlesztettünk egy egyszerű modellt, amellyel sikerült leírni az alagútáram függését a polimer elektron- és térszerkezetétől és megmagyarázni a fent leírt érdekes jelenséget.*

C<sub>70</sub> FULLERÉN FILMEK ELEKTROKÉMIAI VIZSGÁLATA

Csizsár Marika V. vegyész

Témavezető: Dr. Szűcs Árpád egyetemi docens  
JATE, Fizikai Kémiai Tanszék

A fulleréneket 1985-ben fedezték fel. Ezek molekuláris szilárd anyagok, a szén harmadik allotróp módosulata a grafit és a gyémánt mellett. Tulajdonságaik megismeréséhez az elektrokémiai vizsgálatok is jelentős mértékben hozzájárultak. A legtöbb vizsgálatot a C<sub>60</sub>-ra végezték, mi azonban ezt kiterjesztettük a C<sub>70</sub>-re, a másodikként legnagyobb mennyiségben előforduló fullerénre.

A C<sub>70</sub> fullerén filmek vizsgálatának alapját a C<sub>60</sub>-ra kapott eddigi tapasztalatok és eredmények jelentették. Vezető felületekre (arany és üvegszén elektródokra) leválasztott filmek elektrokémiai sajátosságait vizes oldatokban vizsgáltam. A filmek redukciója ill. oxidációja ciklikus voltammetriás méréssel volt követhető.

A C<sub>70</sub> redukciója Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>- tartalmú oldatokban lejátszódik, a redukciós potenciál az ionok hidratációs szabadentalpiájával párhuzamosan változik. A redukció során kationcserélő sajátágú, M<sub>n</sub>C<sub>70</sub>összegképletű só (M = Li, Na, K) képződik. Ebben a redukált C<sub>70</sub> képezi az ioncserélő mátrixot, ahová a kis méretű alkálifémionok belépnek és kompenzálják a negatív töltést. Feltételezésünk szerint a semleges C<sub>70</sub> a redukció során C<sub>70</sub><sup>3-</sup> ionná alakul. A redukált film vezetővé válik, jó elektród pl. a Fe[EDTA] - Fe[EDTA]<sup>2-</sup> reverzibilis reakcióra, az aszkorbinsav oxidációjára. Aktivitását levegőn való állás során lassan elveszíti. Sem a semleges C<sub>70</sub>, sem a redukált C<sub>70</sub>film nem oxidálható.

A semleges C<sub>70</sub> sötétben szigetelőként, fényrel megvilágítva azonban félvezető elektródként viselkedik. A szilárd C<sub>70</sub>-ben a tiltottsáv-szélesség energiája 1.65 eV-ra becsülhető. Az ún. "flatband" (sima sáv) potenciál felett fotooxidáció, alatta pedig fotoredukció mérhető, azt mutatva, hogy a C<sub>70</sub> "intrinsic" (saját vagy belső) félvezető.

A C<sub>70</sub> diklórmetános abszorpciós spektrumának ill. a C<sub>70</sub> film fotoáram spektrumának összehasonlításával, megállapítható, hogy a C<sub>70</sub> molekulák között nagyon gyenge másodlagos kölcsönhatások működnek a szilárd fázisban.

ELTE 17

## LÁTHATATLAN ATOMOK A GRAFIT FESZÍNÉN

Szekeres Zsolt, II. évf., vegyész

Témavezető: Surján Péter  
ELTE, TTK, KTCS, Elméleti Kémiai Tanszék

Munkánk során a grafit felszínét tanulmányoztuk. A szokásos ábrázolásban a grafit rétegei szigorúan sík, hatszöges rácsokból épülnek fel, a felület pontos szerkezeti viszonyai azonban még vita tárgyát képezik.

A probléma felvetését az indokolja, hogy az elmúlt években számos pásztázó alagútmikroszkópos (STM) és atomi erőmikroszkópos (AFM) felvétel készült a grafit felszínéről. A felvételek tanúsága szerint a szénatomok közül csak minden második látható. A jelenség magyarázatára született eddigi modellekkel szemben egy alternatív megoldást javasolunk. Ötletünk lényege a grafit felületi viszonyainak optimalizálása.

Az erőhatások modellezéséhez a diszperziós kölcsönhatások elméletében már jól bevált Lennard-Jones -féle (6,12 -es) potenciált alkalmaztuk. A számítások (amelyek elvégzésére FORTRAN nyelvű programot írtam) eredményeképpen az adódott, hogy az egységesnek hitt sík két alsíkra bomlik, azaz a szénatomok ezekben az alsíkokban helyezkednek el. Az atomok elrendeződése a különböző kristályszerkezeti pozíciókkal összhangban periodicitást mutat. Az alsíkok távolsága 0.058 Å. Ez kielégítően értelmezi az anomáliás mikroszkópos felvételeket. (Elég nagy klaszter esetén ez a távolság független a klaszter méretétől.)

Modellünk eredményei jól korrelálnak azzal a ténnyel, hogy a grafit interkalációs vegyületeiben ez az effektus nem jelentkezik.

JATE 8

SZALICILÁT ADSZORPCIÓ HATÁSA A KAOLINIT FELÜLETI TULAJDONSÁGAIRA  
VIZES RENDSZEREKBE

Filipcsei Genovéva V. évf. vegyész szakos hallgató

Témavezető: Dr. Tombácz Etelka egyetemi docens  
József Attila Tudományegyetem Kolloidkémiai Tanszék

*A talajokkal, talajkomponensekkel, kölcsönhatással, határfelületi tulajdonságaikkal és a talajszerkezettel kapcsolatos kutatások témakörén belül a nem egységes összetételű szerveitlen és szerves talajalkotók kölcsönhatását egy egyszerű, kémiaiag ismert komponenseket tartalmazó rendszer vizsgálatával közelítettem. Egy aromás oxikarbonsav, a szalicilsav, és egy kettősrétegű agyagásvány, a kaolinit, oldatkörülményektől függő kölcsönhatását, a kaolinit részecskék felületének, határfelületi tulajdonságainak, a szuszpenziók kolloid stabilitásának és szerkezetének változását vizsgálom.*

*A kaolinit felületi töltésállapotának és a részecskék elektromos kettősréteg-szerkezetének pH-függését állandó ionerősség mellett potenciometriás sav-bázis titrálással és elektroforetikus mozgékonyág méréssel jellemeztem. A kaolinit részecskék permanens negatív töltése mellett az  $Al-OH$  felületi helyeken protolitikus folyamatokban a pH-tól függően pozitív vagy negatív töltések alakulnak ki. Ezért a kaolinit felületi töltése és a részecskék mobilitása lényegesen változik a pH-val, gyengén savas pH-tartományban heterokoaguláció játszódik le már  $\sim 0.01$  M elektrolit hozzáadásával. Utóbbit dinamikus fényszórás méréssel igazoltam. A felületi  $Al-OH$  csoportoknak az adszorpció hatására bekövetkező szerkezeti változását spektroszkópiai módszerekkel (FTIR, PAS) igazoltam.*

*Az adszorpciós vizsgálatokból megállapítható, hogy a pH növekedése elősegíti, az indifferent elektrolitok jelenléte nem befolyásolja számottevően a szalicilát adszorpciót. A szalicilát feltehetően az  $Al-OH$  felületi helyeken kötődik meg, így növekszik a részecskék nettó negatív töltése, amelyet az elektroforetikus mobilitás nagymértékű növekedése jelez.*



KLTE 15

**A RADIOAKTIV SZENNYEZŐ  $^{60}\text{Co}^{2+}$ -ION HATÁRFELÜLETI REAKCIÓJA  
Ca-MONTMORILLONIT AGYAGÁSVÁNY MODELLANYAGON**

*Urbin Zita 1996-ban végzett okleveles vegyész*

*Témavezető: Dr. Nagy Noémi*

*Kossuth Lajos Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Izotópkalkalmazási Tanszék*

*Radioaktív szennyezők és talajok kölcsönhatásának tanulmányozása során agyagásványon a  $\text{Co}^{2+}$ -ion határfelületi reakcióját vizsgáltuk radioizotópos nyomjelző módszerrel.*

*Radioaktív szennyezők közül a  $^{60}\text{Co}$ -izotóp vizsgálata azért indokolt, mert az atomerőművek egyes szerkezeti anyagaiból /acél/ a nagy neutronfluxus hatására  $^{60}\text{Co}$ -izotóp keletkezik, mely kemény  $\gamma$ -sugárzó, a környezetre veszélyes anyag. Ugyanakkor a kobalt fontos biogén mikroelem, szerepet játszik a növényi és állati élettevékenységekben.*

*A Ca-montmorillonit/ $^{60}\text{Co}^{2+}$ -ion cserereakciójának pH- és hőmérséklet-függését, valamint a Co-montmorillonit/ $^{60}\text{Co}^{2+}$ -ion- és a Co-montmorillonit/ $^{45}\text{Ca}^{2+}$ -ion pH-függését tanulmányoztuk.*

*A cserefolyamatok mérési pontjainak értékelésére a Langmuir-reprezentációt és a tömeghatás törvényét alkalmaztuk. Az izoterma meredekségéből a felületen lévő aktív helyek számát, míg a tengelymetszetből a kötési energiára jellemző izotomparamétert határoztuk meg.*

*A kettős nyomjelzés lehetővé tette mindkét izotóp  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{45}\text{Ca}$ / egyidejű nyomonkövetését a folyadék- ill. a szilárd fázisban.*

*A  $^{45}\text{Ca}$ -montmorillonit/ $^{60}\text{Co}^{2+}$  cserereakció egyensúlyi állapotjának számítása, lehetőséget adott a  $\text{Co}^{2+}$ -ion és  $\text{Ca}^{2+}$ -ion felületen történő megkötődésének összehasonlítására.*

**SZILILÉNEK STABILITÁSÁNAK KÉRDÉSEI. A  $\{C_2H_4N_2Si\}$  POTENCIÁLFELÜLET  
VIZSGÁLATA**

Hajgató Balázs, V. évf.

Témavezető: Dr. Veszprémi Tamás  
BME, Szervetlen Kémia Tanszék

*A munkám célja volt felkutatni a szililének stabilizálódásának okait, értelmezni az előállított vegyületek fotoelektron-spektrumait és ilyen módon új utat mutatni a preparatív kémikusoknak a stabilis szililének előállítása felé.*

*1.) Vizsgáltam a  $\{C_2H_4N_2Si\}$  potenciálfelületen található 14 gyűrűs izomer relatív stabilitását kvantumkémiai módszerekkel. Valószínű, hogy a Denk és társai által előállított szililén (1,3-bisz(1,1-dimetil-etil)-1,3-diaza-2-szila-4-ciklopentén-2-ilidén) globális minimum az energia-hiperfelületen. Stabilizációja mindenképpen valamilyen nagymértékű konjugáció okozza, és fontos szerepet játszik benne az aromáság is. Stabilis szililének keresésekor mindenképpen hasonló, aromásnak várható vegyületekkel kell foglalkozni.*

*2.) Vizsgáltam a gyűrűs izomerek delokalizációs stbilizációját kötés-szétválasztási és homodezmikus reakciók segítségével. A kötés szétválasztási reakciók és a homodezmikus reakciók nem mutattak jelentős aromás stabilizációt, mivel az öttagú gyűrűkben igen jelentős feszültségek vannak. Ha ezt a feszültséget is figyelembe vesszük, akkor már igen jelentős aromás stabilizációt találunk 1,3-diaza-2-szila-4-ciklopentén-2-ilidén esetén (55,85% a benzol stabilizációjának).*

*3.) Vizsgáltam számított töltéseloszlásaikat és ebből következtettem elektronszerkezeti sajátosságaikra. Megfigyelhető, hogy a vegyületek mindegyikében a szilícium pozitív parciális töltésű. A szililén vegyületekben a szilícium pozitív jellege kisebb, mint a velük analóg szilánokban. A töltések kiegyenlítődése mindenképpen az elektronok delokalizáltságának növekedésére mutat.*

*4.) Értelmeztem az 1,3-bisz(2,2-dimetil-propil)-benzo[d]-1,3-diaza-2-szilaciklopentán-2-ilidén (A) fotoelektron-spektrumát összehasonlítva 1,3-bisz(1,1-dimetil-etil)-1,3-diaza-2-szila-4-ciklopentén-2-ilidénével (B), és elvégeztem pálya-asszignációjukat a számolt adatokkal. A benzokondenzált származék spektruma jól értelmezhető a B vegyület spektruma segítségével. A spektrumokból is következtetni lehet az aromáság jelenlétére.*

BME 11

## ALLIL-FOSZFINOK ÉS ALLIL-ARZINOK TÉR ÉS ELEKTRONSZERKEZETE

Kárpáti Tamás, Soós László V. évf.

Témavezető: Dr. Nyulási László  
BME, Szervetlen Kémia Tanszék

A TDK munka célja mindaddig módszeresen nem vizsgált elemorganikus vegyületek szintézise, ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiai és kvantumkémiai jellemzése. Az  $R-EX_2$  szerkezetű vegyületek ( $R =$  allil- vagy 2-metil-allil-csoport;  $E = P, As$ ;  $X = H, Cl, Br$ ) előállítását prof. J.-C. Guillemin laboratóriumában (Rennes, Franciaország) dolgozták ki, ahol NMR és MS vizsgálatokkal a szerkezeteket is azonosították. Így együttműködés keretein belül lehetőségünk nyílt e bomlékony vegyületek közvetlen szintézisére és fotoelektron-spektroszkópiai (UPS) vizsgálatára.

A BME Szervetlen Kémia Tanszékén folyó korábbi munkák során megállapítást nyert, hogy a nitrogéncsoport nehezebb elemeinek magános elektronpárjai nem konjugálódnak a szomszédos  $\pi$ -rendszerrel például fenil-foszfinokban, és -arzinokban. Hasonló következtetésre vezetett az azafoszfolok és azarazolok, vinil-foszfinok fotoelektron-spektroszkópiai és kvantumkémiai vizsgálata is. Az olefinkötéshez képest  $\beta$ -helyzetben lévő Si, Sn viszont már kölcsönhatásba léphet a  $\pi$ -rendszerrel, ami kihatással van e molekulák legstabilabb konformációjának tér- és elektronszerkezetére is. Ez, az úgynevezett  $\beta$ -effektus, a  $\pi$ -rendszer és az ennek síkjából kiemelkedő heteroatom-szén  $\sigma$ -kötés kölcsönhatásának a következménye.

Dolgozatunkban néhány jellemző modellvegyületen [allil-arzin és allil-foszfin, (2-metil-allil)-arzin, (2-metil-allil)-foszfin, illetve ezek heteroatomon klórozott származékai] tanulmányozzuk a  $\beta$ -effektus energetikai és térszerkezeti hatásait. A molekulák öt lehetséges, közel egyforma energiájú térszerkezete közül a legstabilisabb nem-planáris, melyben ez az effektus maximálisan érvényesülhet. A fotoelektron-spektrumok az utóbbi konformer feltevézésével írhatók le. Ezeket a Koopmans-tétel segítségével értelmeztük. E szerkezetekben a molekula stabilitását nem befolyásoló erős kölcsönhatás figyelhető meg a heteroatom magános párja és a  $\pi$ -rendszer között, amely foszfor, illetve arzén esetén példa nélküli az irodalomban.

## NORBORÉN OLIGOMEREK MOLEKULAMECHANIKAI VIZSGÁLATA

Schenker Ivonn, V. évf. vegyészmérnök

Témavezető: Dr. Bencze Lajos  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék

A norbornén polimerek monomeregységenként egy kettős kötést tartalmazó polipenténamerek. Adott esetben a szerkezeti variációk számát a konformációs lehetőségek és a kettős kötések geometriai izomériája mellett a monomeregység két optikailag aktív szénatomjának különböző kémiai környezete is növeli. A mikroszerkezet és a polimerkémiai tulajdonságainak kvantitatív összefüggései máig tisztázatlanok, noha ezek megismerésével takarékoskodni lehetne a kémiai és technológiai kutatások humán és anyagi erőforrásaival.

Dolgozatom célja az, hogy bemutassa a Cerius<sup>2</sup> program keretein belül, egy gyors és nagy pontosságú molekula grafikai módszer kidolgozását egy jelentős polimer család alaptípusának szisztematikus molekulamechanikai vizsgálatára.

A polimer generáló program csak addíciós polimerizáció modellezésére alkalmas, ezért adaptációját az adott feladatra megfelelő "monomer" könyvtár létrehozásával kellett kezdenünk.

Négy ciklopentilén-vinilén monomer segítségével valamennyi lehetséges polimerszerkezet generálható. Ezek képezik jelenleg a szubsztituálatlan polinorbornén monomer könyvtárát. Konformációelemzésükkel igazoltam, hogy a polimer generálása során a polimer takticitástól függően 120° ill. -120°-os torziós szög rögzítésével a költséges szerkezeti optimalizáció nélkül is minimális energiataromány szerkezethez jutunk.

A vizsgálatokhoz a Cerius<sup>2</sup> Anyagmérnöki Szakértői Rendszert használtam. A számítógépes program SGI Indy munkaállomáson futott.

VE 11

**SZTEROIDOK MODELLEZÉSE**

*Steiner Csaba, V. évf. kémia-számítástechnika szakos tanár*

*Témavezető: Dr. Bencze Lajos  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék*



*A KLORIT-TETRATIONÁT FRONT INSTABILITÁSÁNAK VIZSGÁLATA**Lagzi István, V. évf., kémiai-fizika tanárszakos hallgató**Témavezetők: dr. Tóth Ágota, dr. Horváth Dezső  
József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*A dolgozatom témája egy savkatalizált front kísérleti és numerikus vizsgálata. Egy kémiai frontnál, amely egy autokatalitikus reakció tér- és időbeli lejtátszódása, instabilitásnak nevezzük azt a jelenséget, amikor adott körülmények között, konvekciómentes közegben, a reaktánsok homogén elegybe terjedő planáris front stabilitását elvesztve egy időben és térben változó mintázatot hoz létre. Az így létrejövő felhasadásnak két feltétele van: az autokatalizátornak lassabban kell diffundálnia, mint a reaktánsnak és a kinetikát leíró sebességi egyenletben részrendjének legalább kettőnek kell lennie.*

*Munkám célja azon kísérleti körülmények kidolgozása volt, ahol a planáris front felhasadása észlelhető a savkatalizált klorit-tetrationát reakcióban. A frontreakciót metakrilát-tartalmú poliakrilamid gélben lejtátszatra biztosítható a konvekciómentes közeg, és a metakrilát-tartalom növelésével a hidrogénionok látszólagos diffúzióállandója egyszerűen csökkenthető. A fronti tér- és időbeli viselkedését leíró reakció-diffúzió egyenletekből álló modellt állítottunk fel, melyet numerikusan vizsgáltunk két térbeli dimenzióban. A kapott kísérleti és számolási eredményeket összevetve bemutatjuk, hogy a modell jó egyezést mutat a tapasztalt jelenségekkel és megállapíthatjuk, hogy az általunk vizsgált rendszer az első instabilitást mutató savkatalizált kémiai front.*

JPTE 6

**VIBRÁCIÓS ÁTMENETEK IRÁNYÍTOTSÁGÁNAK  
KVANTUMKÉMIAI VIZSGÁLATA**

Rosinger Boglárka, kémia-matematika szakos tanár

Témavezető : Dr Kunsági-Máté Sándor  
Janus Pannonius Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

*Az abszorpció, a fluoreszcencia folyamatának és a fluoreszcencia polarizációjának elméleti, kvantumkémiai nyomkövetésével a molekulák gerjesztést követő energiavesztési folyamatainak értelmezésére nyílt lehetőség. A vonatkozó vizsgálatok során több fluoeszáló anyag polarizációs spektrumának elméleti előállítására sikerült. Ehhez a molekulák elektronátmenetei és vibrációs átmenetei nagyságának és irányának kvantumkémiai számítására volt szükség, mert a polarizációs spektrumok finomszerkezetét döntően ezek a molekuláris paraméterek határozzák meg. Ennek érdekében a korábban alkalmazott kvantumkémiai programot a vibrációs átmenetek számítására alkalmassá kellett tenni. Az átalakítást közvetlen mérési eredményekkel történő összehasonlítással kívántuk ellenőrizni. Tekintettel arra, hogy az azulén molekula vibrációs átmeneteit polarizált IR-abszorpcióval meghatározták, ezért a számítási módszert ezen a molekulán ellenőriztük. Ecélből a vibrációs átmenetek elméleti számítására fejlesztett és több fluoeszáló anyag polarizációs spektrumának elméleti számítására sikerrel alkalmazott kvantumkémiai módszerrel kiszámítottuk az azulén normálrezgéseikhez tartozó átmenetek jellemző paramétereit. Megállapítottuk, hogy a gerjesztett elektronállapot egyensúlyi konformációjában számított vibrációs átmenetek nagysága - a várakozásnak megfelelően - összességében kisebbek, mint az alapállapokban számítottak. Az átmenetek irányítottságának közelebbi vizsgálata során megállapítottuk, hogy azok a molekula három kitétetett tengelye (hossztengely, rövidebb tengely és a molekula síkjára merőleges tengely) szerint csoportosíthatók. Mivel - dipólátmenetekre szorítkozva - ezen irányok a molekula által elnyelt ill. kibocsátott foton polarizációs síkját egyértelműen kijelölik, ezért a polarizált abszorpcióval kapott eredményekkel összehasonlíthatók. Elméleti eredményeink a kísérleti adatokkal pontosan megegyező eredményre vezettek. Az azulén molekulára nyert és bemutatott eredményeink a polarizációs vizsgálatoknál kerültek felhasználásra.*

## IZZÓLÁMPÁK IMPEDANCIASPEKTROSKÓPIÁJA

Kerner Zsolt, V. évfolyam, vegyész szak

Témavezető: Pajkossy Tamás  
KFKI Atomenergia Kutató Intézet

*A halogénlámpák gyártása során fontos és ellenőrzendő paraméter a töltőgáz nyomása, ugyanis alacsony nyomás esetén a lámpa feketedik, túl nagy nyomás esetén pedig felrobbanhat. A töltőnyomást jelenleg a kész lámpákból vett véletlen minta feltörésével vizsgálják. Munkánk célja roncsolásmentes módszer kidolgozása.*

*Kézenfekvő a lámpa elektromos paramétereinek vizsgálata impedanciaspektroszkópia alkalmazásával. Elméleti megfontolások alapján levezettük a lámpák impedanciafüggvényét. Egy soros ellenállásból és egy párhuzamos ellenállás-kapacitás körből álló egyszerű hálózatra jellemző függvényt kaptunk. Méréseket végeztünk két különböző típusú lámpasorozaton Solartron mérőrendszerrel. (Spektrumokat vettünk fel a fűtő feszültség és a nyomás függvényében.) A spektrumokra jól illeszkedett a levezetett  $R_s$ - $(R_p, C_p)$  modellfüggvény. Az illetékt paraméterek közül  $R_s$  (amely a szál hőmérsékletének függvénye) és a hőmérsékletnek a leadott teljesítmény szerinti parciális deriváltja határozott nyomásfüggést mutatott. Ez azzal magyarázható, hogy a töltőgázon keresztül történő hőtranszport függ a gáz nyomásától.*

*Találtunk tehát olyan mennyiségeket, amelyeken keresztül roncsolás nélkül vizsgálható a töltőgáz nyomása. Meg kell ugyanakkor jegyezni, hogy az impedanciamérés ipari minőségellenőrzési módszerként nem használható, mivel viszonylag lassú és költséges.*



JATE 21

**FOTOSZINTETIKUS SZERVEZETEK NEHÉZFÉM STRESSZRE  
BEKÖVETKEZŐ SZERKEZETI VÁLTOZÁSAINAK VIZSGÁLATA***Kóta Zoltán, V. éves vegyész**Témavezető: Dr. Szalontai Balázs  
MTA Szegedi Biológiai Központ, Biofizikai Intézet*

*A sajnálatosan egyre növekvő környezetszennyeződés fokozottan előtérbe állította a növények viselkedésének vizsgálatát a környezeti ártalmak hatására. Ezek közül is kiemelkednek veszélyességüknél fogva a nehézfémek, amelyekből egyre több kerül környezetünkbe. A növények nehézfémek jelenlétére adott stresszválaszainak vizsgálata több szempontból is érdekes. Egyrészt magának a károsodásnak a mechanizmusát deríthetjük fel, másrészt a növények mint jelzőrendszerek segíthetnek más élőlények károsodástól való megvédésében is. A nehézfémek hatására bekövetkező működésbeli és szerkezeti változásokból továbbá újabb felismerésekre juthatunk a fotoszintetizáló szervezetek szerveződését, szerkezetét illetően is.*

*Vizsgálatainkat zöldülő árpán végeztük, melyet az eddig ilyen rendszerben még nem vizsgált ólom hatásának tettünk ki. Céljaink között szerepelt az, hogy megtudjuk, vajon az ólom hat-e a tilakoid membránok szerveződésére és egyéb funkcióira, és ha igen, milyen hatása van és hogyan éri ezt el. Vizsgálati módszerként - gázkromatográfia és UV-VIS spektrofotometria mellett - főként Fourier Transzformációs Infravörös Spektroszkópiát alkalmaztunk, melynek segítségével információkat nyerhetünk mind a membránalkotó lipid, mind a fehérje molekulák szerkezetére vonatkozóan.*

*Az ólom hatásának követése mellett számos általános érvényű megállapítást tettünk a membránszerkezetre illetve a membrán összetevői fizikai állapotának leírására vonatkozóan, ami még inkább nyomatékosítja e módszer kiemelkedő jelentőségét ill. hatékonyságát ilyen jellegű problémák megoldásában.*

MIKROEMULZIÓK STABILITÁSA, NANORÉSZECSKÉK ELŐÁLLÍTÁSA  
MIKROEMULZIÓKBAN

Szorcsik Attila V. éves vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Balázs János egyetemi adjunktus  
József Attila Tudományegyetem, Kolloidkémiai Tanszék

*A nanoméretű részecskék úgy tudományos, mint technológiai szempontból egyre nagyobb jelentőségűek. Köszönhető ez annak, hogy fizikai és kémiai tulajdonságaik jelentős mértékben eltérnek az azonos anyagi minőségű, nagyobb méretű részecskék tulajdonságaitól. Ezen rendhagyó mechanikai, elektromos, mágneses, optikai tulajdonságok a kicsiny méretből és az ebből következő nagy fajlagos felületből erednek. Technológiai felhasználásuk ezért igen sokrétű: pl. alkalmazhatók katalizátorokként, félvezetőként.*

*A nanorészecskék preparálásának több módja lehetséges. Egyik eljárás a mikroemulzióban történő előállítás. A droplet típusú mikroemulziókban lévő szubkolloidális diszkontinuitások mérete az 1-50 nanométer mérettartományba esik. Ezért a reaktánsokat a micelláris magban állítják elő, úgy hogy a két reaktáns tartalmazó rendszert elegyítik. Ennek következtében a mikroemulziókban lévő cseppecskékben a prekursorok reakcióba lépnek egymással.*

*Munkám során azon mikroemulzió típusokat vizsgáltam, amelyek alkalmasak lehetnek nanoméretű részecskék előállítására. Reológiai, abszorpciós spektroszkópiai, dinamikus fényszórás, sűrűség, vezetőképesség mérésével tanulmányoztam a különböző invert droplet, Winsor típusú o/v, v/o és bikontinuus, valamint tenzidmentes mikroemulziókat és mikroemulziós géleket, amelyekben titán izopropoxidból kiindulva szubmikroszkópos részecskéket állítottam elő. Vizsgáltam a  $\text{TiO}_2$  részecskék képződésének kinetikáját a létrejövő  $\text{TiO}_2$  szol, ill. gél tulajdonságait. Ezen rendszerek mikroemulziós gélképzését követtem a stabilitási és a reológiai tulajdonságok vizsgálatával.*

JPTE 3

ENERGIATRANSZFER VIZSGÁLATA  
TRIPAFLAVIN-RODAMIN B MODELLRENDSZEREN

Hartvig Nóra, IV.évf., kémia-biológia

Témavezető : Dr Kunsági-Máté Sándor  
Janus Pannonius Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

Ha két fluoreszkáló anyag közül az egyik (donor) emissziós és a másik (akceptor) abszorpciós spektrumai átfedik egymást, akkor keverékükben a donor gerjesztésekor a donorról az akceptor irányába energiatranszfer jön létre. A tripaflavin és rodamin B keverékoldatok emissziós felületeinek mérésével és a mérések matematikai kiértékelésével a donor (tripaflavin) → akceptor (rodamin B) energiatranszfer határfokát vizsgáltuk. Jelen vizsgálatainkhoz azért választottuk ezt a két anyagot, mert közelebbről kívántuk tanulmányozni azt a speciális esetet, amikor a donor abszorpciós sávjának területén az akceptor abszorpciós spektruma nem zérus. Ennek ugyanis az a következménye, hogy a donor abszorpciós sávjának területén történő gerjesztéskor az akceptor közvetlen gerjesztése is megvalósul, és ez az energiatranszferre nyert adatokat meghamisítja. Állandó  $10^{-4}$  M koncentrációjú tripaflavint és változó koncentrációjú ( $10^{-5}$  M,  $5 \cdot 10^{-5}$  M,  $10^{-4}$  M) rodamin B-t tartalmazó oldatsorozatot készítettünk, - eredményeink későbbi, fluoreszcencia polarizációs vizsgálatokhoz történt felhasználása miatt - 95% glicerint tartalmazó alkoholos oldószerben. A 380 nm - 600 nm-es spektrumtartományban, 5 nm-enként történő gerjesztés mellett felvettük az oldatok emissziós spektrumát. Az így meghatározott oldatonként 45 emissziós spektrumból köbös spine illesztéssel meghatároztuk az emissziós felületeket. A rodamin B emissziója a 380 nm - 500 nm-es spektrumtartományban történő gerjesztéskor két különböző okból jelenik meg. Egyrészt a tripaflavin → rodamin B energiatranszfer miatt, másrészt a rodamin B közvetlen gerjesztésének következtében. A tiszta komponensek abszorpciós spektrumainak és az emissziós felületek maximumainak ismeretében meghatároztuk a kétféle úton gerjesztett rodamin B molekulák számának arányát. Eredményeink a keverékoldatok fluoreszcencia polarizációs spektrumainak értelmezésénél kerültek felhasználásra.

VE 20

**ELEKTRONMIKROSKÓPOS KÉPEK MINŐSÉGÉNEK JAVÍTÁSA SZÁMÍTÓGÉPES  
KÉPFELDOLGOZÁSSAL**

*Galamb Szabolcs vegyész mérnök*

*Témavezető: Dr. Kovács Kristóf  
Veszprémi Egyetem, Nagyműszer Laboratórium*

*A tudományos diákköri dolgozat tárgya egy képfeldolgozó rendszer képességeinek felmérése és az objektív teszteléshez szükséges minőségi mutatók kidolgozása. A feladat megoldásához olyan módszert dolgoztunk ki, amellyel az egyes képjavító eljárások után kapott képek minősége objektíven meghatározható. A módszer az információelméletből ismert entrópia alkalmazásán alapul. Ez a fogalom a termodinamikai definícióhoz hasonlóan a képinformáció rendezetlenségének mértéke. Az entrópiát egyszerű összefüggésekkel a szürkeségi szintek eloszlási hisztogramjából számítottuk.*

*A vizsgálatok elvégzése után megállapítottuk, hogy az entrópia csak megfelelő körülményekkel használható a kitűzött célra. Nem állít fel ugyan mindent átfogó objektív skálát, de az egyes képjavítási eljárásokon belül viszonylag jó eredménnyel alkalmazható a képjavítás eredményességének megítélésére. Az első entrópia jól használható képek optimális vágási helyének meghatározására.*

*A hisztogram, és így az entrópia is helyfüggetlen. Az ebből adódó gondok kiküszöbölésére vezettük be a második entrópia fogalmát. A második entrópia egy, az eredeti képen végigfuttatott  $2 \times 2$ -es mátrixban számítható "első" entrópiák összege. A dolgozatban megvizsgáltuk ezen általunk bevezetett fogalom jellemző tulajdonságait. A második entrópiát ott használhatjuk, ahol az első entrópia már nem tesz különbséget két kép között. Segítségével tovább finomítottuk a képjavító eljárások összehasonlítását.*

*A képek feldolgozására C nyelven megírtuk az ENTROPIA nevű programot. A program képes kiszámítani a képek első és második entrópiáját, valamint automatikusan megállapítja a felvételek binarizálására alkalmas optimális vágási pontot. Ez az eljárás automatikus mennyiségi értékelő programrendszerekbe építve javítja az értékelés pontosságát és megbízhatóságát.*

JATE 7

SZILIKA SZUSZPENZIÓK STABILIZÁLÁSA / DESTABILIZÁLÁSA KATIONAKTIV  
TENZIDDEL

Dunai Beáta V.évf. vegyész szakos hallgató

Témavezető : Dr . Szekeres Márta  
József Attila Tudományegyetem Kolloidkémiai Tanszék

*A talaj fontos alkotói az agyagásványok mellett a különféle szervesetlen fémoxidok. Az ionos tenzidok fémoxidon történő adszorpciójával modellezni tudjuk a különböző természetes szerves anyagok, illetve szerves szennyezőanyagok kölcsönhatását a talajjal, adszorpciójukat a talajalkotókon. Kationos tenzid -dodecil-piridinium-klorid- adszorpcióját vizsgáltam Aerosil 200 szilika felületén. Az adszorpciót befolyásoló tényezők közül a pH - és az elektrolitkoncentráció hatását vizsgáltam. Az adszorpció mennyiségi viszonyait az izotermákkal, az adszorpciós réteg kialakulásának folyamatát és a rétegek szerkezetét az elektrokinetikai potenciál változása valamint a szuszpenziók folyásgörbéi alapján jellemeztem.*

*A kísérleti eredmények arra utalnak, hogy az első és a második adszorpciós réteg két, egymást követő lépcsőben alakul ki. Az első lépcsőben az adszorbens hidrofíll felülete a tenzid adszorpciója révén fokozatosan egyre inkább hidrofóbbá válik, maximális hidrofóbítást elérve az első adszorpciós réteg teljes kiépülésével. Második lépcsőben elkezdődik a második adszorpciós réteg kialakulása, amikor a felület ismét hidrofíllé válik a tenzidionok fordított orientációjú adszorpciója révén. A szilárd felület hidrofíll / hidrofóbb jellege jelentős mértékben befolyásolja a szuszpenzió stabilitását. A reológiai mérések során a folyásgörbékből kapott folyáshatár értékek változásával jól nyomon követhető ez a jellegváltozás. A maximális folyáshatárértéket annál az egyensúlyi tenzidkoncentrációnál kaptam amelynél a különböző ionerősségnél mért adszorpciós izotermák közös metszéspontja van. A tenzidadszorpció révén bekövetkező elektrokinetikai potenciál változást- állandó pH értéken és változó ionerősségnél - az elektroforetikus mozgékonyág mérésével követtem nyomon. A reológiai és a mobilitás mérések eredményeivel próbáltam igazolni az adszorpciós réteg kiépülésének kétlépcsős elméletét.*

ELTE 12

KONFIDENCIA TARTOMÁNY SZÁMÍTÁSA LIKELIHOOD RATIO MÓDSZERREL

Somogyi András, V. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Keszei Ernő  
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Radiológiai Tanszék

*A feladat konfidenciatartomány számítása a sokdimenziós paraméterterben. A likelihood ratio módszer lényege, hogy az adott szignifikanciaszinthez tartozó konfidenciatartomány pontjaira az eltérésnégyzetösszeg függvény értéke kisebb vagy egyenlő egy bizonyos értéknél. A kritikus érték egyenlő az eltérésnégyzetösszeg minimális értékének és az F-eloszlásnak a szignifikanciaszinthez tartozó kritikus értékének szorzatával. A feladat többváltozós függvény gyökeinek keresésére vezethető vissza.*

*Az eltérésnégyzetösszeg függvény szigorúan monoton növekvő tulajdonságát felhasználva, a gyökkeresést a minimumpontból kiinduló félegyenesek mentén lehet elvégezni. A monotonitást a konvergenciakritériumok előállításánál is figyelembe véve, csökkenteni lehet az iterációs lépések számát.*

*A konfidenciatartomány kétdimenziós metszetének a közelítő alakja ellipszis. A gyökkeresés irányait speciális forgatási képlettel kell meghatározni, hogy a megtalált gyökök eloszlása az ellipszis kerülete mentén egyenletes legyen. Ezen forgatás elvégzéséhez az ellipszis nagytengelyének nagysága és helyének ismerete szükséges, amely adatok számítása analitikus geometriai eszközök segítségével történik.*

*A program jelenlegi verziója két paraméter által kifesztített párhuzamos alterekben keres és talál konfidencia tartományt.*

ELTE 13

CSILLAPÍTOTT PERTURBÁCIÓSZÁMÍTÁS  
KVÁZI-DEGENERÁLT ESETBEN

Szabados Ágnes, IV. vegyész

Témavezető: Surján Péter  
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Kémiai Tanszék

Sajátértékproblémák megoldására széleskörűen alkalmazott módszer a Rayleigh-Schrödinger (RS) perturbációszámítás. A  $\hat{H} + \lambda \hat{W}$  alakban felvett operátor sajátértékei

$\sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l E_i^{(l)}$  végtelen sorként állnak elő, ahol  $E_i^{(l)}$  az  $i$ -edik sajátérték  $l$ -edrendű korrekciója. A másod- és magasabbrendű korrekciók nevezőjében megjelennek a nulladrendű probléma ( $\hat{H}$ ) sajátértékeinek különbségei (gerjesztési energiák). Ha valamelyik gerjesztési energia zérus, az ún. degenerált perturbációszámítás alkalmazható. Ha egy gerjesztési energia nagyon kicsi, de nem nulla, a degenerált perturbációszámítás nem alkalmazható, a nemdegenerált képlet viszont irrédikusan nagy sajátérték korrekciókat ad.

Hogy ilyen ún. kvázi-degenerált esetben ne kapjunk nullához közeli nevezői, a másodrendű képletben szereplő minden sajátérték különbséghez egy korrekciós tagot adtunk (csillapítás). Ezeket úgy választottuk, hogy a javasolt képlet egy kétállapotú degenerált rendszer esetén egzakt megoldást adjon. Eljárásunk tetszőleges rendre általánosítható és olyan méretkonzisztens képletet ad eredményül, ami nagy gerjesztési energiák határesetében a szokásos formulába megy át, kvázi-degenerált esetben pedig megbízható eredményt ad.

A javasolt módosítást mátrixdiagonalizálási és kvantumkémiai példákon teszteltük. Vizsgáltuk a hidrogén-, a fluor-, és a metánmolekula disszociációját, és kimutattuk, hogy az új perturbációs képlet - a hagyományosakkal szemben - helyesen adja vissza a disszociációs görbék lefutását.

## PREDOMINÁNS VIBRONIKUS ÁTMENETEK VIZSGÁLATA

Román Hedvig, IV.évf., kémia-matematika

Témavezető : Dr. Kunsági-Máté Sándor

Janus Pannonius Tudományegyetem, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

Az abszorpciós spektrumokból - az elektronátmenetek különböző okokból történő kiszélesedése miatt - a molekulák vibronikus átmenetei egyértelműen nem határozhatók meg. Spektroszkopiai megfontolások alapján a tiszta elektronátmenettel kombinálódó vibrációs átmenetek rotációs kiszélesedése Gauss típusú eloszlásfüggvénnyel közelíthető. A vibronikus átmenetek - így a Gauss-függvények - számát azonban elvi megfontolások nem korlátozzák. Kvantumkémiai vizsgálatokkal meghatározható ugyan a lehetséges független rezgéstípusok - normálmódusok - száma, azonban a felharmonikusok rendjére vonatkozóan nincsenek megkötések. Matematikai szempontból pedig minél több összetevőt alkalmazunk, annál pontosabban reprodukálhatjuk az előállítandó függvényt - esetünkben az abszorpciós spektrumot. A molekula szerkezete és konformációja által meghatározott nagysággal és iránnyal rendelkező vibronikus átmenetek számának és helyének (frekvenciájának) meghatározásához független mérési módszerként a fluoreszcencia polarizációs spektrumok használhatók.

Jelen munkánkban egy olyan eljárás felépítése és számítógépes adaptációja volt célunk, mely az egységes rendszerbe foglalt abszorpciós, fluoreszcenciás és fluoreszcencia polarizációs mérőhelyek által szolgáltatott adatok felhasználásával a fotogerjesztés folyamatában résztvevő domináns vibronikus átmenetek helyét és nagyságát meghatározza. A nemlineáris paraméterbecslési eljárások áttekintésével kiválasztottuk és az abszorpciós és fluoreszcencia polarizációs spektrumok egyidejű közelítésére alkalmassá tettük a Gauss-Newton-Marquardt módszert. A gyors konvergencia biztosítása érdekében kidolgoztunk egy, a kezdeti feltételeket a fluoreszcencia polarizációs spektrumok feldolgozása alapján automatikusan meghatározó eljárást. Kidolgozott és programozott módszerünket fluoreszkáló festékek (tripflavin és rodamin B, valamint keverékeik) oldatának abszorpciós és fluoreszcencia polarizációs spektrumain mutatjuk be.



*JATE 40*

*MATRICES WITHIN THE MATRIX OPERATOR  $W_{(M_1, M_2, M_3)}$*

*Anton Kiss, V.évf., vegyész*

*Témavezető : -  
Babes-Bolyai Egyetem, Kémiai Intézet*

*Ba<sub>0,95</sub>Ca<sub>0,05</sub>Fe<sub>0,8</sub>Co<sub>0,2</sub>O<sub>3-δ</sub> ÖSSZETÉTELŰ PEROVSKIT  
MÖSSBAUER-SPEKTROSKÓPIÁS VIZSGÁLATA*

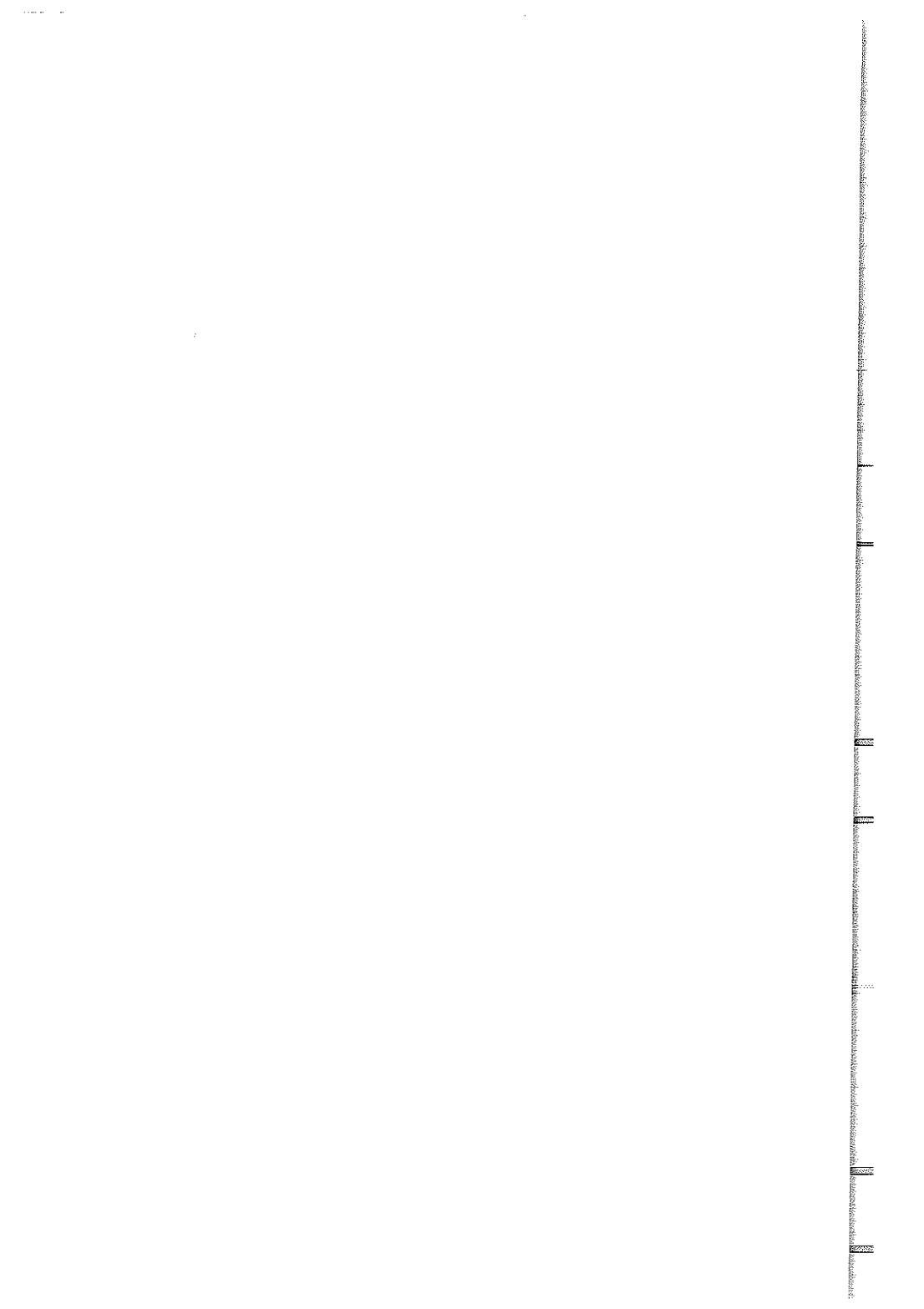
*Szerző: Juhász Gergely*

*Témavezető: Homonnay Zoltán  
ELTE TTK, Kémia Tanszékcsoport, Magkémia Tanszék*

*A Ba<sub>0,95</sub>Ca<sub>0,05</sub>Fe<sub>0,8</sub>Co<sub>0,2</sub>O<sub>3-δ</sub> összetételű perovszkitok nagy szén-dioxid abszorpciós és szelektív katalitikus képességekkel rendelkeznek, amelyek megértéséhez a szerkezetalkotó ionok elektromos és mágneses környezetének vizsgálata kulcsfontosságú. A Mössbauer-spektroszkópia éppen erre nyújt lehetőséget. Méréseim célja egy konkrét perovszkit (Ba<sub>0,95</sub>Ca<sub>0,05</sub>Fe<sub>0,8</sub>Co<sub>0,2</sub>O<sub>3-δ</sub>) szerkezetére vonatkozó adatok gyűjtése volt.*

*A Mössbauer-spektroszkópiában használatos transzmissziós technikával a vas atomok, emissziós technikával a kobaltatomok környezetét vizsgáltam. A spektrumok egyrészt az eredeti, másrészt szén-dioxiddal ill. metánnal kezelt mintákról készültek szobahőmérsékleten és folyékony levegő hőmérsékletén. A spektrumok kiértékelése során a kapott eredményeket az irodalmi adatok fényében próbáltam értelmezni.*

*Sikerült megállapítani, hogy a Ba<sub>0,95</sub>Ca<sub>0,05</sub>Fe<sub>0,8</sub>Co<sub>0,2</sub>O<sub>3-δ</sub>-ban a kobalt és vasatomok erősen eltérő környezettel rendelkeznek, amelyek oka a két elem eltérő kémiai tulajdonságaiban keresendő. Az oxigénvakanciák képződésével párhuzamosan egy mágneses kölcsönhatás is megjelenik az anyagban, amely szobahőmérsékleten relaxációs effektusokat eredményezett. Alacsony hőmérsékleten azonban a spektrumok tanulsága szerint egy rendezett hib szerkezet alakul ki, amivel párhuzamosan a relaxáció megszűnik. Bebizonyosodott, hogy a szén-dioxid abszorpció egy hasonló rendezett hib szerkezetet eredményez, míg a metános hőkezelés hatására a minta redukálódik, és az eddigiektől teljesen eltérő hib szerkezetet alkot.*



## *IV. REAKCIÓKINETIKA ÉS KATALÍZIS ALSZEKCIÓ*



.....

IV. Reakciókinetika és katalízis alszekció

<b>Varga Mónika</b>	<i>JATE 36</i>	
<i>Pd-Zr ötvözetek termikus és katalitikus vizsgálata</i> .....		123
<b>Farkas Gabriella</b>	<i>BME 5</i>	
<i>Enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezések</i> .....		124
<b>Gulyás Henrik</b>	<i>VE 3</i>	
<i>Új típusú vízoldható monotercier foszfinok szintézise és homogénkatalitikus alkalmazásuk</i> .....		125
<b>Kis Attila</b>	<i>JATE 18</i>	
<i>Adszorbeált azometán bomlása és CH<sub>3</sub>-gyök előállítása Rh(111) felületen</i> .....		126
<b>Hrivnák Béla</b>	<i>JATE 13</i>	
<i>Réteges szerkezetű anyagok kitémasztása savas és bázikus közegben</i> .....		127
<b>Szathmáry Mónika</b>	<i>JATE 30</i>	
<i>Alumínium tartalmú magadiit szintézise és kitémasztása szerves ionokkal</i> .....		128
<b>Lente Gábor</b>	<i>KLTE 8</i>	
<i>A szulfiton vas (III)-katalizált autooxidációja</i> .....		129
<b>Jordán Sándor</b>	<i>JATE 15</i>	
<i>Az infravörös spektroszkópia kinetikai alkalmazhatósága. Az aldolkondenzáció vizsgálata</i> .....		130
<b>Tuba Róbert</b>	<i>VE 14</i>	
<i>2,2,6,6-Tetrametil-piperidil-1-oxil szabadgyök és oktakarbonil- dikobalt reakciójának kinetikai vizsgálata</i> .....		131
<b>Nagygyóry Szilveszter, Visegrádi András</b>	<i>BME 18</i>	
<i>A Belouszov-Zsabotyinszkij oszcilláló reakció mechanizmusának vizsgálata</i> .....		132
<b>Volford András</b>	<i>BME 25</i>	
<i>A platina mint 'klorit szelektív elektród' klórdioxid alapú oszcillációs reakciókban</i> .....		133
<b>Major Andrea, Siska Andrea</b>	<i>JATE 24</i>	
<i>A reaktánsok kezdeti koncentrációinak hatása a klorit-tetratonát front sebességére</i> .....		134
<b>Fráter Zoltán</b>	<i>JATE 9</i>	
<i>Alkoholok oxidációja oxigénnel</i> .....		135



*Pd-Zr ÖTVÖZETEK TERMIKUS ÉS KATALITIKUS VIZSGÁLATA**Varga Mónika, V. vegyész**Témavezető: Dr. Molnár Árpád  
JATE, Szerves Kémiai Tanszék*

*A heterogén katalitikus kutatásokban nagy érdeklődés övezi az amorf ötvözeteket, amelyeket mint katalizátorokat, illetve katalizátor prekursorokat alkalmaznak. Kutatásaink során mi azt tanulmányoztuk, hogy a különböző, az irodalom alapján választott előkezelések hogyan befolyásolják a gyorshűtéssel előállított PdZr<sub>3</sub> amorf ötvözet szerkezetét és katalitikus tulajdonságait. A választott előkezelések: HF-os oldás, oxidáció és ezeket követő redukció voltak. A katalizátorok szerkezetének jellemzésére DSC, XRD és mikrokolorimetriás módszereket alkalmaztunk, a katalitikus aktivitás és szelektivitás meghatározásához ciklohexén és fenil-acetilén folyadékfázisú, atmoszférikus nyomáson történő hidrogénezését vizsgáltuk.*

*Az előkezeléseknek a PdZr<sub>3</sub> amorf ötvözet felületére gyakorolt hatását XRD mérésekkel követtük. Azt tapasztaltuk, hogy a HF-oldat hatására az amorf ötvözet Zr-tartalma lecsökkent, míg Pd-tartalma változatlan maradt, az oxidációs előkezelés következtében pedig a PdZr<sub>3</sub> mindkét komponense oxidálódott, de az oxidációt követő redukció során csak a Pd redukálódott. A DSC vizsgálatok azt mutatták, hogy a HF-os oldás és az oxidáció drasztikus változásokat eredményezett a kiindulási ötvözet tömbfázisában is.*

*A katalitikus tulajdonságok vizsgálata során meghatározzuk a kiindulási amorf ötvözet, a különböző előkezelésekkel kapott katalizátorok és összehasonlíthatóként Pd-fólia, átkristályosított PdZr<sub>3</sub> és Pd/BaSO<sub>4</sub> aktivitását és szelektivitását. Megfigyeléseink szerint az eredeti amorf ötvözet aktivitása és szelektivitása elmarad mind a Pd-fóliáétól, mind a Pd/BaSO<sub>4</sub> katalizátorétól, de az alkalmazott előkezelések megnövelik aktivitását, viszont szelektivitását csak az oxidáció képes kismértékben javítani.*



BME 5

## ENANTIOSZELEKTÍV HETEROGÉN KATALITIKUS HIDROGÉNEZÉSEK

Farkas Gabriella, V. évf.

Témavezető: Dr. Tungler Antal  
BME, Szerves Kémiai Technológiai Tanszék

A természetben előforduló optikailag aktív vegyületek rendszerint csak az egyik enantiomer formájában fordulnak elő. A sztereoselektív reakciók nagy előnye, hogy segítségükkel nemcsak alapanyagot, hanem néhány nagy veszteséggel járó tisztítási és elválasztási feladatot is megtakaríthatunk.

TDK dolgozatomban vizsgáltam izoforon ill. etil-piruvát modellvegyületek enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezését 14,15-dihidrovinpocetin és 10,11-dihidrocinkonidin ill. 10,11-dihidrocinkonin királis módosítók alkalmazásával.

Vizsgáltam két módosító együttes hatását, mind izoforon hidrogénezésében Pd/C hordozós katalizátoron ill. Pd korom katalizátoron, mind pedig etil-piruvát hidrogénezésében Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ill. Adams-platina katalizátoron.

A hordozós és a hordozó nélküli katalizátorok a különböző módosítókkal és szubsztrátumokkal eltérő módon viselkedtek, ebből arra következtethetünk, hogy az enantiodifferenciálás meghatározó lépései a katalizátor felületén játszódnak le.

## ÚJ TÍPUSÚ VÍZOLDHATÓ MONOTERCIER FOSZFINOK SZINTÉZISE ÉS HOMOGÉNKATALITIKUS ALKALMAZÁSUK

Gulyás Henrik, Ph.D./I

Témavezető: Dr. Bakos József egy. docens  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

Vízoldható monotercier foszfinok egy új típusának szintézisútját dolgoztam ki. Az új foszfinokban  $-\text{OSO}_3^-$  csoport biztosítja a vízoldhatóságot. Kialakítása párhuzamosan történik a nemkötőpár-ürespálya típusú koordinációra alkalmas foszforatomot tartalmazó funkciócsoport kialakításával. A módszer lényege ciklikus szulfátok lítium-difenil-foszfiddal történő reakciója.

A ciklikus szulfátok kötésfelhasításának mechanizmusát az optikailag aktív (1R,3S)-1-metil-3-(difenil-foszfino)-butil-hidrogén-szulfát lítiumsó előállításával és  $^3\text{P}$ -NMR vizsgálatával tanulmányoztam. Abból a célból, hogy tanulmányozhassuk a ligandumban lévő alkállanc hosszának a katalitikus tulajdonságokra kifejtett hatását előállítottam a  $\text{Ph}_2\text{P}(\text{CH}_2)_n\text{OSO}_3\text{Li}$  típusú foszfinok két képviselőjét.

Az új ligandumok figyelemre méltó tulajdonsága, hogy amfifil karakterűek, vízben és szerves oldószerekben egyaránt jól oldódnak.

Vizsgáltam az (1R,3S)-1-metil-3-(difenil-foszfino)-butil-hidrogén-szulfát lítiumsó különböző körülmények között kialakuló ródiumpkomplexeit  $^1\text{H}$ - és  $^3\text{P}$ -NMR módszerekkel. Két négyzetes planáris  $[\text{Rh}(\text{COD})\text{P}_2]^+$  és  $[\text{Rh}(\text{COD})\text{PCL}]^+$ , valamint egy oktaéderez komplex  $[\text{RhH}_2\text{P}_2\text{S}_2]^{3+}$  szerkezetét azonosítottam.

Sztirolt és 1-oktént hidroformileztem vizes/szerves kétfázisú rendszerben  $[\text{Rh}(\text{COD})\text{Cl}]_2$ -ből és a szintetizált felületaktív szulfát-félészterekből álló katalizátorrendszerrel. A foszfinok  $\text{Rh}(\text{I})$ -komplexe aktív hidroformilező katalizátornak bizonyult. Sztirol viz/toluol kétfázisú hidroformilezésénél a kemoselektivitás 100%, a regioselektivitás az elágazó láncú termékre nézve 91% volt. Bár a (1R,3S)-1-metil-3-(difenil-foszfino)-butil-hidrogén-szulfát lítiumsó királis ligandum, optikai indukciót nem tapasztaltam. 1-Oktén hidroformilezésénél a normál és elágazó láncú aldehidek aránya különböző körülmények között ~ 1.4 volt és kismértékű izomerizációt tapasztaltam. Igazoltam, hogy a katalizátor kis aktivitás csökkenéssel visszanyerhető.

JATE 18

**ADSORBEÁLT AZOMETÁN BOMLÁSA ÉS CH<sub>3</sub>-GYÖK  
ELŐÁLLÍTÁSA RH(111) FELÜLETEN**

Kis Attila V. éves vegyész

témavezető: Dr. Kiss János Dr. Solymosi Frigyes  
MTA Reakciókinetikai Tanszéki Kutatócsoport, Szeged

*A metil- (CH<sub>3</sub>) és más szénhidrogén-gyökök felületi tulajdonságainak ismerete nagy segítséget nyújt a katalitikus úton végbemenő szénhidrogén-reakciók mechanizmusának tisztázásához. A metil-halogenidek (főként CH<sub>3</sub>I) disszociatív kemiszorpciójából származó CH<sub>3</sub>-gyök fémgyökristály felületeken történő felületi reakciójáról viszonylag nagyszámú ismeret gyűlt össze. A bomlásból származó koadszorbeált elektronegatív halogén azonban jelentősen befolyásolhatja a keletkezett metilcsoport kémiai viselkedését.*

*A halogénmentes CH<sub>3</sub>-képződés egyik lehetséges prekuzora az azometán (CH<sub>3</sub>-N=N-CH<sub>3</sub>). Ezt a homogén gázkinetikában alkalmazott technikát kívánjuk alkalmazni ultravákuum körülmények között működő elektronspektroszkópiai módszerek együttes alkalmazásával in situ felületkémiai vizsgálatokra. Jelen munkában röviden ismertetjük a CH<sub>3</sub>-gyök előállításra szolgáló, folyamatosan fejlődő segédberendezést, melynek révén sikerült a felületen kizárólag metil-gyökre jellemző abszorpciós sávot (2920 cm<sup>-1</sup>) kimutatni reflexiós abszorpciós infravörös spektroszkópiával (RAIRS).*

*A metilcsoport kémiai viselkedésének leírásához nélkülözhetetlen az alkalmazott fém és a prekuzor kölcsönhatásának vizsgálata. Ezért tanulmányoztuk az azometán adszorpcióját (90 K) és bomlását reflexiós infravörös (RAIRS), Auger-elektron (AES) és Termikus Deszorpciós (TPD) spektroszkópiával.*

*Vizsgálati eredményeinket összevetve megállapítható, hogy az azometán termikus hatásra rövid élettartamú felületi köztüterméken (formaldehid metil-hidrazon) keresztül alakul tovább CH<sub>2(a)</sub> és N<sub>(a)</sub> termékeket eredményezve. Eredményeink alapján az azometán termikus bomlásának mechanizmusára vonatkozó megoldási javaslattal állunk elő.*

## RÉTEGES SZERKEZETŰ ANYAGOK KITÁMASZTÁSA SAVAS ÉS BÁZIKUS KÖZEGBEN

Hrivnák Béla, IV. éves vegyész hallgató

Témavezető: dr Kiricsi Imre egyetemi tanár  
József Attila Tudományegyetem, Szeged, Alkalmazott Kémiai Tanszék

A réteges szerkezetű anyagok nagy része két csoportba sorolhatóak be. A kationcserélők legjellemzőbb képviselői a szmektit típusú agyagásványok. Ebből a csoportból a legbelsőbban a montmorillonit tulajdonságait tanulmányozták. Kimutatták, hogy ezen anyagok lemezkéit kationnal, a kation méretétől függő mértékben ki lehet támasztani. Az anioncserélő réteges szerkezeteket legjellemzőbben a réteges kettőshidroxidok csoportján tanulmányozhatjuk. Ezek közül leggyakrabban a hidrotalcit típusú anyagokat vizsgálták. Az anionokat kicserélve, az anion méretétől függő mértékben a rácsítok eltávolíthatóak egymástól.

Az aminosavak, mivel amino- és karboxil-csoportot egyaránt tartalmaznak amfoter jellegűek. Lúgos oldatban az aminosav anionos, savas oldatban kationos formában van jelen. Munkánk célja, hogy az aminosavakkal a réteges szerkezeteket sikeresen kitámasztva, katalitikus hatású anyagokat állítsunk elő.

Munkánkban L-fenil-alanint, L-tirozint, amino-vajsavat, 6-NH<sub>2</sub>-kapronsavat, amino-kapronsavat használtunk. A Na-montmorillonitot, illetve Zn-Al-hidrotalcitot ezekkel az aminosavakkal támasztottuk ki. A felhasznált aminosavak mind neutrálisak, tehát izoelektromos pontjuk pH 4.8-6.3 közé esik. Ezért a kitámasztásokat kationos esetben pH 4-nél, anionos esetben pH 8-nál végeztük el.

Az interkalált anyagokat 70°C-on, levegőn szárítottuk és fizikai módszerekkel jellemeztük. Infravörös-spektroszkópiás módszerrel ellenőrizzük, hogy a kitámasztott anyagok megtartották-e réteges szerkezetüket. Ezt röntgendiffrakciós eljárással is bizonyítottuk, illetve meghatároztuk a minták rétegtávolságát. A hőmérséklet emelésére lejátszódó tömegvesztési folyamatokat derivatográfias módszerrel követtük.

Eredményeink szerint mind a montmorillonit, mind a hidrotalcit rétegeit sikerült egymástól eltávolítani. Azt tapasztaltuk, hogy a rétegtávolságok változása nagyobb volt a hidrotalcit esetében, mint a montmorillonitban. Tehát az aminosavak lúgos közegben, anionos pilléreként nagyobb rétegtávolság növekedést okoznak, mint savas közegben kationos pilléreként.

JATE 30

## ALUMÍNIUM TARTALMÚ MAGADIIT SZINTÉZISE ÉS KITÁMASZTÁSA SZERVES IONOKKAL

Szathmáry Mónika IV. éves vegyész

Témavezetők: Dr. Kiricsi Imre egyetemi tanár, Fudala Ágnes PhD hallgató  
József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

A kristályos szilikátok csoportjába tartoznak a rétegszilikátok, ezen belül mi konkrétan a magadiittal foglalkozunk. A magadiit ( $\text{Na}_2\text{Si}_{14}\text{O}_{29} \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ ) vizet tartalmazó ásvány, melynek szerkezete  $\text{SiO}_4$  tetraéderekből álló rétegekből épül fel. Röntgendiffrakciós mérések alapján kimutatták, hogy a bázislaptávolság reverzibilisen variálható a hidratáció/dehidratáció fokával. A nátrium-magadiit rétegei olyan terminális oxigéneket tartalmaznak, melyek negatív töltését nátrium-ionok kompenzálják. Ezek az ionok lecserélhetők protonokra,  $\text{Ca}^{2+}$ -ionokra, vagy szerves kationokra. A száraz minta ioncserekapacitása 60 mekv/100g. Alkilammónium-ionok cseréjével a magadiit bázislaptávolsága növelhető.

Magadiitot könnyen szintetizálhatunk hidrotermális körülmények között. A természetes és szintetikus magadiit is alkalmazható mint ioncserélő, molekuláris szűrő, vagy adszorbens (mivel duzzadásra képes). Katalitikus célokra azonban az eddig ismert irodalom szerint csak módosított változata válhat alkalmassá.

A természetes rétegszilikát a keletkezési helytől függően tartalmazhat alumíniumot szennyezőként, nem pedig a kristályrács alkotóelemeként. Ezért, még a szintézis során alumíniumot juttatunk be a szerkezetbe. Kétféleképpen szintetizáltunk Al-tartalmú magadiitot hidrotermális körülmények között. Az egyik szintézis során az alumíniumot oxid, a második szintézisnél hidroxid formájában adtuk a rendszerhez. Ezzel a minták ioncserekapacitását próbáltuk növelni, valamint az alumínium beépítésével savas centrumokat generálni, melyet különböző mérésekkel ellenőriztünk.  $^{23}\text{Na}$  és  $^{29}\text{Si}$  MAS NMR technikával azonosítottuk a Si koordinációját a magadiitban. Benzol és a piridin adszorpcióját infravörös spektroszkópiás módszerrel követtük. A bázislaptávolságok növeléséhez szerves kvaterner ammóniumsókat használtunk. Az alumíniumot tartalmazó magadiit alkalmazható katalitikus célokra, adszorbensként és ioncserélőként egyaránt.

## A SZULFITION VAS(III)-KATALIZÁLT AUTOOXIDÁCIÓJA

Lente Gábor V. éves vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Fábíán István egyetemi docens

Kossuth Lajos Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A szulfition vas(III) által katalizált autooxidációja fontos szerepet játszik a környezeti kémiaiban, mert a savas esők keletkezésének fő forrása. Ezen rendszer kinetikai és egyensúlyi tulajdonságait már részletesen vizsgálták. A kinetikai tapasztalatok értelmezésére részletes mechanizmust is javasoltak, amely jól tükrözi a reakció főbb jellegzetességeit.<sup>1</sup> Azonban a mechanizmus csak 2,5-es pH-ra és nagy szulfiteleslegre érvényes. A modell fejlesztéséhez további kísérleti adatokra van szükség. Az irodalomban egymásnak ellentmondó vélemények alakultak ki a vas(III)-szulfito-komplexek számáról és összetételéről.

A jelen munkában a monoszulfito komplex kinetikai szerepének tisztázása céljából a vas(III)-szulfid reakciót stopped-flow és spektrofotometria módszerekkel vizsgáltuk nagy vas(III)-felesleg mellett. Meglepően összetett időbeli változást tapasztaltunk. Azonos reakciókoncentrációk és pH esetén is jelentősen különböző kinetikai görbékét kaptunk a reakcióindítás módjának változtatásával. Az első kísérletsorozatban azonos pH-jú reakciókat kevertünk össze, míg egy másik sorozatnál a reakciók pH-ja különböző volt. A különbség a reakcióelegy kezdeti összetételének változásával magyarázható.

A reakció kezdeti szakaszában az abszorbancia-idő görbék vas(III)-monoszulfito-komplex stopped-flow időtartománynál gyorsabb képződését mutatják. A következő szakaszban a  $Fe_2(OH)_2^{4+}$  és szulfition közötti komplexképződés megy végbe, amelyet az irodalomban még nem írtak le. Ezen komplex egyensúlyi és kinetikai sajátosságait tanulmányoztuk.

<sup>1</sup> C. Brandt, I. Fábíán, R. van Eldik *Inorg. Chem.* 1994, 33, 687-701

JATE 15

AZ INFRAVÖRÖS SPEKTROSKÓPIA KINETIKAI ALKALMAZHATÓSÁGA.  
AZ ALDOLKONDEZÁCIÓ VIZSGÁLATA

Jordán Sándor V. éves vegyész

Témavezetők: Dr. Berkesi Ottó és Peintler Gábor  
József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, Szeged

Számos spektroszkópiai eljárás lehetővé teszi reakciók közvetlen, beavatkozás nélküli követését is. A Fourier-transzformációs (FT) készülékek megjelenésével az infravörös tartomány is alkalmassá vált kvantitatív mérésekre, így időben változó folyamatok vizsgálatára is.

Diákköri munkám során az infravörös tartomány kinetikai alkalmazhatóságát vizsgáltam Bio-Rad FTS-65/896 FT-IR spektrométeren; mérőrendszert építettünk ki folyadékkinetikai vizsgálatokhoz. A megvalósítható kísérleti körülmények és a mechanizmus ismertsége szempontjából a nátrium-etilát katalizálta aldolkondenzáció vizsgálata látszott megfelelőnek.

Az aldehidek mindenféle külső hatásra érzékeny anyagok. Az adott körülmények között az aldehid lehetséges mellékreakciói miatt a jelen levő anyagok azonosítására és a tisztaság ellenőrzésére gázkromatográfiás, FT-IR, FT-Raman,  $^1\text{H}$ - és  $^{13}\text{C}$ -FT-NMR módszereket alkalmaztunk.

Az aldolkondenzáció primer mérési eredményein alapkinetikai számításokat végeztünk: kezdeti sebességek módszere, első-, másod- és harmadrendű, valamint konzekutív reakciók integrált sebességi egyenletének illesztése. Ezen módszerek egyike sem alkalmas a rendszer egyértelmű leírására, a kinetikai görbék összetett mechanizmusra hordoznak információt.

Az egyes hullámszám és idő adatokhoz tartozó abszorbanciamátrixon ranganalízist végeztünk az elnyelő részecskék számának és a mért adatok pontosságának meghatározására. Mechanizmus keresésére szimulációval kombinált nemlineáris paraméterbecslő eljárást alkalmaztunk.

Az FT-IR spektrométerrel történő reakciófelület előállítására pozitív eredménnyel szolgált. A mérési adatok reprodukálhatók, a kísérleti abszorbanciák hibája megfelelő (~1%) kinetikai mérések kivételére.

2,2,6,6-TETRAMETIL-PIPERIDIL-1-OXIL SZABAD GYÖK ÉS OKTAKARBONIL-DIKOBALT REAKCIÓJÁNAK KINETIKAI VIZSGÁLATA

*Tuba Róbert IV. éves környezetmérnök szakos hallgató*

*Témavezető: Dr. Ungváry Ferenc egyetemi tanár  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék*

*E diákkörös munka célja a homogén katalízisben széles körben alkalmazott oktakarbonil-dikobalt kettős arculatának mélyebb megismerése a 2,2,6,6-tetrametil-piperidil-1-oxil (TEMPO) szabad gyökkel képződő (TEMPO)Co(CO)<sub>2</sub> komplex keletkezési mechanizmusának feltárásán keresztül. Az oktakarbonil-dikobalt kettős arculata abban nyilvánul meg, hogy termikus reakcióban egyrészt a kobalt-kobalt kötés disszociációjával kis egyensúlyi koncentrációban tetrakarbonil-kobalt gyök képződik, másrészt pedig egy szén-monoxid ligandum kilépésével ugyancsak kis egyensúlyi koncentrációban szabad koordinációs helygel rendelkező heptakarbonil-dikobalt is képződik. Az oktakarbonil-dikobalt kémiai reakciói feltételezhetően e kis koncentrációban jelenlévő de viszonylag nagy reakciókészségű vegyületeken keresztül következnek be.*

*A TEMPO szabad gyökkel szén-monoxid gáz fejlődéssel járó komplex képződést a tetrakarbonil-kobalt gyök és a TEMPO reakcióján keresztül képzelik. A diákköri munka során elvégzett kinetikai vizsgálat feltárta, hogy a komplex képződés nemcsak az elképzelt módon, hanem a szén-monoxid koncentrációjától függő úton valószínűleg a heptakarbonil-dikobalton keresztül is lejátszódik. A kísérleti eredmények úgy értelmezhetőek, hogy a TEMPO szabad gyök párhuzamosan megvalósuló kétféle sebességhatározó lépésben kötést létesít a reakcióelegyen jelenlévő tetrakarbonil-kobalt és a feltételezhetően ugyancsak jelenlévő trikarbonil-kobalt gyökkel. A kísérleti eredmények azt valószínűsítik, hogy a két reakcióképes karbonil-kobalt gyök a heptakarbonil-dikobalt prekursorból képződik. Ezt a lehetőséget eddig még nem ismerték fel és lehet, hogy több ipari jelentőségű kobaltkatalizált reakció mechanizmusában is szerepet játszik.*



BME 18

**A BELOUSZOV-ZSABOTYINSZKIJ OSZCILLÁLÓ REAKCIÓ MECHANIZMUSÁNAK  
VIZSGÁLATA**

Nagygyörgy Szilveszter, V. évf., Szerves és bio. vegyipari Szak  
és Visegrády András, IV.évf., Biomérnöki Szak

Témavezető: Dr. Noszticzius Zoltán  
BME, Kémiai Fizika Tanszék

TDK dolgozatunkban a Belouszov-Zsabotyinszkij (BZ) oszcilláló reakció egy igen érdekes és bonyolult részrendszerét vizsgáltuk. A malonsav, illetve bróm-malonsav Ce(IV) általi oxidációját. Fő célunk ezen reakciók mechanizmusának tisztázása és a köztitermékek azonosítása volt. A reakciókban különféle szerves savak keletkeznek, a végtermék pedig CO<sub>2</sub> és hangyasav.

A munka során sokféle analitikai módszert alkalmaztunk a színreakcióktól a kromatográfias eljárásokig. A Kémiai Fizika Tanszéken néhány évvel ezelőtt építettünk egy mérőrendszert, melynek segítségével a különböző reakciókban keletkező CO<sub>2</sub> mennyiségét lehetett nyomon követni. A rendszert átalakítva alkalmassá tettük a gázfejlődés sebességének vizsgálatára is.

Megállapítottuk, hogy a reakció sztöchiometriája függ a beadagolás sebességétől, ezen keresztül a reakció sebességétől is. Reakciósebességfüggő sztöchiometriát találtunk az oldatreakcióban. Ezután kimértük a reakciók sztöchiometriáját Ce(IV) feleslegnél illetve a szerves szubsztrát feleslegénél is. A kimért sztöchiometria alapján mechanizmus javaslatokat állítottunk fel a két. Kromatópsavas próbával kimutattunk formaldehidet és metanolt a reakciótermékek között.

Később Marburgban HPLC mérésekkel igazolták, hogy a metanol és a formaldehid nem lehetnek a hangyasav prekursorai. Minden valószínűség szerint tehát, a gyökrekombinációs reakciók mellett kell még olyan reakcióútnak lennie, amely gyorsan CO<sub>2</sub> és hangyasav végtermékekhez vezet. Dolgozatunk végén felvázolunk egy olyan reakció rendszert, mely eddigi mérési eredményeinkkel jó összhangban van, és azokat magyarázni képes.

*A PLATINA MINT 'KLORIT SZELEKTÍV ELEKTÓD' KLÓRDIOXID ALAPÚ  
OSZCILLÁCIÓS REAKCIÓKBAN*

*Volford András, V. évf., Szerves és bio. vegyipari Szak*

*Témavezető: Dr. Wittmann Mária  
BME, Kémiai Fizika Tanszék*

*TDK munkám során a nemlineáris dinamika fontos témakörével, az oszcillációs reakciók vizsgálatával foglalkoztam. Az oszcilláló reakciók közül a Chlorine dioxide - Iodine - Acetone (CIA) reakciót vizsgáltam, és ennek kapcsán a jód és klór különböző oxidációs fokú vegyületeire kalibráltam a Pt elektródot. Megállapítottam, hogy az elektród potenciálját a rendszerben lévő sokféle redox rendszer közül gyakorlatilag egyedül a klórdioxid-klorit redoxpár határozza meg, és az elektród potenciáloszcillációi így főként a klorit ion koncentráció változásait tükrözik (mivel a  $\text{ClO}_2$  csak lassan fogy). A klorit ionoknak az oszcillációs reakció szempontjából fontos, ilyen kis koncentrációban történő szelektív mérésére eddig egyáltalán nem volt lehetőség.*

*A mérések során egy újfajta oszcillációs rendszert fedeztem fel: a jodidbefolyásos CIA reakciót. Mivel ez a reakció a CIA rendszer egy egyszerűbb változata, segítségével közelebb kerülhetünk a reakció mechanizmusának megértéséhez.*

*Kezdetben háromféle mechanizmus modellel szimuláltam a CIA és a jodidbefolyásos CIA reakciókat: a Citri-Epstein, Lengyel-Rábai-Epstein egyesített modellel (CE-LRE); a Lengyel-Rábai-Epstein egyszerűsített modellel (LRE); és a Lengyel-Li-Kustin-Epstein modellel. Később azonban a CE-LRE modellt elhagytam és a többi modellt pedig új reakcióval egészítettem ki. Ennek segítségével sikerült a rendszer viselkedését mégjobban leírni. Különböző szempontok alapján természetesen hol az egyik, hol a másik modell írja le jobban a valóságot, azt azonban mindenképpen ki kell emelnünk, hogy a LRE modell egyszerűsége ellenére is mennyire jól közelíti a rendszer kvalitatív viselkedését.*

*Végül az elért eredmények további hasznosításával kapcsolatban két dolgot érdemes megjegyezni. Egyrészt a klorit ion direkt potenciometriás mérése lehetővé teszi a már meglévő modellek tökéletesítését vagy akár új modell felállítását is. Másrészt az új oszcillációs rendszer a jodid befolyatás igen kis változására is reagál, ami érzékeny és rendkívül specifikus analitikai módszert alapját képezheti.*

JATE 24

*A REAKTÁNSOK KEZDETI KONCENTRÁCIÓINAK HATÁSA  
A KLORIT-TETRATIONÁT FRONT SEBESSÉGÉRE*

*Major Andrea és Siska Andrea, IV. évf., vegyész szakos hallgatók*

*Témavezetők: dr. Horváth Dezső, dr. Tóth Ágota  
József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Munkánk során egy savkatalizált frontreakció kísérleti és numerikus vizsgálatával foglalkoztunk. A kémiai front egy autokatalitikus reakció időben és térben való lejátszódása, ahol a térbeli változást a reakció transzportfolyamattal (esetünkben kizárólag diffúzióval) történő kölcsönhatása okozza. Ezek a kémiai frontok terjedési sebességükkel jellemezhetők, melyek a komponensek diffúzióállandóinak és – a reakciók sebességi egyenletein keresztül – kezdeti koncentrációinak a függvénye.*

*A klorit- és tetracionátionok között kis klorit-feleslegben lejátszódó reakció már ismert reakciósebességi egyenletét alapul véve egy kétváltozós modellt (a két változó a tetracionátion és az autokatalizátor hidrogénion koncentrációja) állítottunk fel. A modellt egy térbeli dimenzióban a CVODE integrálócsomag felhasználásával numerikusan oldottuk meg. A kapott megoldásokból meghatároztuk a frontsebességet és kifejeztük a diffúzióállandók aránya és a reakciók sztöchiometriai arányának függvényében.*

*Kísérleteinket konvekciómentes közegben, poliakrilamid gélben, játszottuk le, melynek során a kezdeti koncentrációk változtatásával határoztuk meg a front terjedési sebességének változását képfeldolgozó-rendszer segítségével.*

*A kísérleti eredményekre a numerikus vizsgálat során kapott függést alkalmazva megállapíthatjuk, hogy az általunk felállított modell jól leírja a front terjedési sebességét, és a kétváltozós modell alkalmazható a tetracionát-klorit front leírására.*

## ALKOHOLOK OXIDÁCIÓJA OXIGÉNNEL

Fráter Zoltán, V. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Zsigmond Ágnes egyetemi docens  
JATE, Szerves Kémia Tanszék

*Környezetvédelmi és energetikai szempontból is egyre fontosabbá válnak a szelektív és mellékterméket nem termelő kémiai folyamatok. A szerves vegyületek oxidációs reakciói azonban általában magas hőmérsékleten mennek végbe, ritkán szelektívek és az alkalmazott oxidálószerekből képződő melléktermékek szennyezik a környezetet. Emiatt fontosak az olyan reakciórendszerek kifejlesztésére irányuló kutatások, amelyek lehetővé tehetik a szerves vegyületek oxidációját, enyhe körülmények között (lehetőleg szobahőmérsékleten), molekuláris oxigén segítségével.*

*Különböző alkoholok aldehidekké ill. ketonokká történő szelektív oxidációjára valószínűsíthető, hogy egy olyan katalitikus ciklus segítségével, amelyik sok tekintetben hasonlít az élő szervezetekben működő enzimekhez. A katalitikus rendszer három komponensből áll:*

- a ruténium komplex,  $\text{RuCl}(\text{OAc})(\text{PPh}_3)_3$
- a hidrokinon
- a Co-szalofén, azaz az  $N,N'$ -bisz(szalicilidén)-o-feniléndiamin kobaltkomplexe.

*A katalitikus ciklus során a Ru-komplex aldehiddé oxidálja az alkoholt. A Co-szalofén képes a levegő oxigénjét aktiválni és a hidrokinont benzokinonná oxidálni. A benzokinon oxidálja a redukálódott Ru-komplexet, a képződő hidrokinont a Co-szalofén ismét oxidálni tudja. A reakció 20 °C-on, atmoszferikus nyomáson megy végbe. Ez gazdasági szempontból előnyös, és az alacsony hőmérséklet miatt a mellékreakciók szerepe is alárendelt. A reagens ( $\text{O}_2$ ) és a melléktermék, a víz, egyaránt környezetbarát vegyületek.*

*A reakció kivitelezése jelentősen egyszerűsíthető a homogén reakciórendszer heterogenizálása révén. A heterogenizált katalizátorok ugyanis a reakció végén egyszerű szűrővel eltávolíthatók a reakcióelegyből és szárítás után újra felhasználhatók.*

*Sikeresen valószínűsíthető, hogy a Co-szalofén Y típusú zeolitba történő beépítését a "ship-in-the-bottle" típusú szintézis révén. Az ily módon előállított immobilizált katalizátorok aktívnak bizonyultak a hidrokinon benzokinonná történő oxidációjában és ennek alapján sikeresen alkalmazni tudtuk különböző alkoholok (benzil-alkohol, allil-alkohol, fahéjalkohol) aldehiddé történő oxidációjában.*



## V. KOORDINÁCIÓS KÉMIA ALSZEKCIÓ

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24  
25  
26  
27  
28  
29  
30  
31  
32  
33  
34  
35  
36  
37  
38  
39  
40  
41  
42  
43  
44  
45  
46  
47  
48  
49  
50  
51  
52  
53  
54  
55  
56  
57  
58  
59  
60  
61  
62  
63  
64  
65  
66  
67  
68  
69  
70  
71  
72  
73  
74  
75  
76  
77  
78  
79  
80  
81  
82  
83  
84  
85  
86  
87  
88  
89  
90  
91  
92  
93  
94  
95  
96  
97  
98  
99  
100  
101  
102  
103  
104  
105  
106  
107  
108  
109  
110  
111  
112  
113  
114  
115  
116  
117  
118  
119  
120  
121  
122  
123  
124  
125  
126  
127  
128  
129  
130  
131  
132  
133  
134  
135  
136  
137  
138  
139  
140  
141  
142  
143  
144  
145  
146  
147  
148  
149  
150  
151  
152  
153  
154  
155  
156  
157  
158  
159  
160  
161  
162  
163  
164  
165  
166  
167  
168  
169  
170  
171  
172  
173  
174  
175  
176  
177  
178  
179  
180  
181  
182  
183  
184  
185  
186  
187  
188  
189  
190  
191  
192  
193  
194  
195  
196  
197  
198  
199  
200

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24  
25  
26  
27  
28  
29  
30  
31  
32  
33  
34  
35  
36  
37  
38  
39  
40  
41  
42  
43  
44  
45  
46  
47  
48  
49  
50  
51  
52  
53  
54  
55  
56  
57  
58  
59  
60  
61  
62  
63  
64  
65  
66  
67  
68  
69  
70  
71  
72  
73  
74  
75  
76  
77  
78  
79  
80  
81  
82  
83  
84  
85  
86  
87  
88  
89  
90  
91  
92  
93  
94  
95  
96  
97  
98  
99  
100  
101  
102  
103  
104  
105  
106  
107  
108  
109  
110  
111  
112  
113  
114  
115  
116  
117  
118  
119  
120  
121  
122  
123  
124  
125  
126  
127  
128  
129  
130  
131  
132  
133  
134  
135  
136  
137  
138  
139  
140  
141  
142  
143  
144  
145  
146  
147  
148  
149  
150  
151  
152  
153  
154  
155  
156  
157  
158  
159  
160  
161  
162  
163  
164  
165  
166  
167  
168  
169  
170  
171  
172  
173  
174  
175  
176  
177  
178  
179  
180  
181  
182  
183  
184  
185  
186  
187  
188  
189  
190  
191  
192  
193  
194  
195  
196  
197  
198  
199  
200  
201  
202  
203  
204  
205  
206  
207  
208  
209  
210  
211  
212  
213  
214  
215  
216  
217  
218  
219  
220  
221  
222  
223  
224  
225  
226  
227  
228  
229  
230  
231  
232  
233  
234  
235  
236  
237  
238  
239  
240  
241  
242  
243  
244  
245  
246  
247  
248  
249  
250  
251  
252  
253  
254  
255  
256  
257  
258  
259  
260  
261  
262  
263  
264  
265  
266  
267  
268  
269  
270  
271  
272  
273  
274  
275  
276  
277  
278  
279  
280  
281  
282  
283  
284  
285  
286  
287  
288  
289  
290  
291  
292  
293  
294  
295  
296  
297  
298  
299  
300  
301  
302  
303  
304  
305  
306  
307  
308  
309  
310  
311  
312  
313  
314  
315  
316  
317  
318  
319  
320  
321  
322  
323  
324  
325  
326  
327  
328  
329  
330  
331  
332  
333  
334  
335  
336  
337  
338  
339  
340  
341  
342  
343  
344  
345  
346  
347  
348  
349  
350  
351  
352  
353  
354  
355  
356  
357  
358  
359  
360  
361  
362  
363  
364  
365  
366  
367  
368  
369  
370  
371  
372  
373  
374  
375  
376  
377  
378  
379  
380  
381  
382  
383  
384  
385  
386  
387  
388  
389  
390  
391  
392  
393  
394  
395  
396  
397  
398  
399  
400  
401  
402  
403  
404  
405  
406  
407  
408  
409  
410  
411  
412  
413  
414  
415  
416  
417  
418  
419  
420  
421  
422  
423  
424  
425  
426  
427  
428  
429  
430  
431  
432  
433  
434  
435  
436  
437  
438  
439  
440  
441  
442  
443  
444  
445  
446  
447  
448  
449  
450  
451  
452  
453  
454  
455  
456  
457  
458  
459  
460  
461  
462  
463  
464  
465  
466  
467  
468  
469  
470  
471  
472  
473  
474  
475  
476  
477  
478  
479  
480  
481  
482  
483  
484  
485  
486  
487  
488  
489  
490  
491  
492  
493  
494  
495  
496  
497  
498  
499  
500  
501  
502  
503  
504  
505  
506  
507  
508  
509  
510  
511  
512  
513  
514  
515  
516  
517  
518  
519  
520  
521  
522  
523  
524  
525  
526  
527  
528  
529  
530  
531  
532  
533  
534  
535  
536  
537  
538  
539  
540  
541  
542  
543  
544  
545  
546  
547  
548  
549  
550  
551  
552  
553  
554  
555  
556  
557  
558  
559  
560  
561  
562  
563  
564  
565  
566  
567  
568  
569  
570  
571  
572  
573  
574  
575  
576  
577  
578  
579  
580  
581  
582  
583  
584  
585  
586  
587  
588  
589  
590  
591  
592  
593  
594  
595  
596  
597  
598  
599  
600  
601  
602  
603  
604  
605  
606  
607  
608  
609  
610  
611  
612  
613  
614  
615  
616  
617  
618  
619  
620  
621  
622  
623  
624  
625  
626  
627  
628  
629  
630  
631  
632  
633  
634  
635  
636  
637  
638  
639  
640  
641  
642  
643  
644  
645  
646  
647  
648  
649  
650  
651  
652  
653  
654  
655  
656  
657  
658  
659  
660  
661  
662  
663  
664  
665  
666  
667  
668  
669  
670  
671  
672  
673  
674  
675  
676  
677  
678  
679  
680  
681  
682  
683  
684  
685  
686  
687  
688  
689  
690  
691  
692  
693  
694  
695  
696  
697  
698  
699  
700  
701  
702  
703  
704  
705  
706  
707  
708  
709  
710  
711  
712  
713  
714  
715  
716  
717  
718  
719  
720  
721  
722  
723  
724  
725  
726  
727  
728  
729  
730  
731  
732  
733  
734  
735  
736  
737  
738  
739  
740  
741  
742  
743  
744  
745  
746  
747  
748  
749  
750  
751  
752  
753  
754  
755  
756  
757  
758  
759  
760  
761  
762  
763  
764  
765  
766  
767  
768  
769  
770  
771  
772  
773  
774  
775  
776  
777  
778  
779  
780  
781  
782  
783  
784  
785  
786  
787  
788  
789  
790  
791  
792  
793  
794  
795  
796  
797  
798  
799  
800  
801  
802  
803  
804  
805  
806  
807  
808  
809  
810  
811  
812  
813  
814  
815  
816  
817  
818  
819  
820  
821  
822  
823  
824  
825  
826  
827  
828  
829  
830  
831  
832  
833  
834  
835  
836  
837  
838  
839  
840  
841  
842  
843  
844  
845  
846  
847  
848  
849  
850  
851  
852  
853  
854  
855  
856  
857  
858  
859  
860  
861  
862  
863  
864  
865  
866  
867  
868  
869  
870  
871  
872  
873  
874  
875  
876  
877  
878  
879  
880  
881  
882  
883  
884  
885  
886  
887  
888  
889  
890  
891  
892  
893  
894  
895  
896  
897  
898  
899  
900  
901  
902  
903  
904  
905  
906  
907  
908  
909  
910  
911  
912  
913  
914  
915  
916  
917  
918  
919  
920  
921  
922  
923  
924  
925  
926  
927  
928  
929  
930  
931  
932  
933  
934  
935  
936  
937  
938  
939  
940  
941  
942  
943  
944  
945  
946  
947  
948  
949  
950  
951  
952  
953  
954  
955  
956  
957  
958  
959  
960  
961  
962  
963  
964  
965  
966  
967  
968  
969  
970  
971  
972  
973  
974  
975  
976  
977  
978  
979  
980  
981  
982  
983  
984  
985  
986  
987  
988  
989  
990  
991  
992  
993  
994  
995  
996  
997  
998  
999  
1000

V. Koordinációs kémia alszekció

<b>Török Ibolya</b>	JATE 35
<i>Imidazolgyűrűt tartalmazó polidentát ligandumok fémkomplexeinek egyensúlyi és szerkezetvizsgálata</i> .....	141
<b>Ágoston Csaba Gábor</b>	KLTE 1
<i>Diszulfidcsoportot tartalmazó peptidszármazék átmenetifém komplexeinek egyensúlyi vizsgálata</i> .....	142
<b>Bóka Beáta</b>	KLTE 2
<i>Metionin tartalmú tripeptidek átmenetifém komplexei</i> .....	143
<b>Kilyén Melinda</b>	JATE 38
<i>A nitrazepam, oxazepam átmenetifémekkel alkotott komplex vegyületei</i> .....	144
<b>Enyedy Éva Anna</b>	KLTE 4
<i>Ca(II)- és Mg(II) ionok kölcsönhatása hidroxámsavakkal</i> .....	145
<b>Szabó Miklós</b>	VE 12
<i>Egymagvú alkil- és acil-kobalt-trikarbonil-foszfin komplexek szerkezeti jellegzetességei</i> .....	146
<b>Szakács Zoltán</b>	ELTE 15
<i>A glutation mikrospeciációja és kiroptikai tulajdonságai</i> .....	147
<b>Szllágyi Magdolna, Nagy Zoltán</b>	KLTE 12
<i>A palládium (II)-tioéter kölcsönhatást tartalmazó rendszerek egyensúlyi viszonyai</i> .....	148
<b>Szatura Ágnes , Szintay Gergely</b>	VE 13
<i>A cink- és a réz-tetrafenil-porfirin fotofizikai és fotokémiai tulajdonságainak összehasonlítása</i> .....	149
<b>Hegedűs Csaba</b>	VE 4
<i>Új királis foszfin-foszfit ligandumok szintézise</i> .....	150
<b>Deák Andrea</b>	JATE 37
<i>Új bisz-triazén ligandumok Co(II) és Cu(II) komplexeinek előállítása és jellemzése</i> .....	151
<b>Jankovics Hajnalka</b>	JATE 14
<i>N-acetil aminosavak trifenilón(IV) komplexeinek előállítása és szerkezetvizsgálata</i> .....	152
<b>Slobodan B. Gađurić</b>	JATE 39
<i>Cationic lead(II) chloride and bromide complex formation in molten Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 4,7H<sub>2</sub>O</i> .....	153





IMIDAZOLGYŰRŰT TARTALMAZÓ POLIDENTÁT LIGANDUMOK FÉMKOMPLEXEINEK  
EGYENSÚLYI ÉS SZERKEZETVIZSGÁLATA

Török Ibolya, V. évf. vegyész

Témavezető: Dr. Gajda Tamás

József Attila Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

*A metalloproteinek szerkezetét, tulajdonságait alapvetően befolyásolhatja az ún. oldallánci donorcsoportok koordinációja. Ebből a szempontból az imidazol gyűrű az egyik legfontosabb donorcsoport, hiszen kivételesen stabil fémkötő helyet biztosít a fiziológiás pH tartományban, s nagyszámú metalloproteinben a hisztidil-egységek imidazol gyűrűi alkotják részben vagy teljes egészében az aktív centrum(ok) koordinációs helyeit. Az egyszerűbb, kis molekulatömegű modellvegyületek egyensúlyi és szerkezetvizsgálata sok esetben jelentékeny hozzájárulást adhat a metalloenzimek működési mechanizmusának vizsgálatához. Az ilyen jellegű kutatások mintegy két évtizede egyre növekvő számú publikációt eredményeznek. További szerkezeti analóg keresése érdekében vizsgáltuk két, több imidazol gyűrűt tartalmazó poli-dentát ligandum - a bis(1,1'-imidazol-2-il)(4-imidazol-4(5)-il-2-aza-bután (Biüb) ill. az N,N'-dihisztidil-etiléndiamin (Dhen) - koordinációs sajátosságait potenciometriásan és spektroszkópiás (UV-VIS, ESR, CD, NMR) módszerekkel.*

*A vizsgált ligandumok meglepően alacsony pK értékekkel rendelkeznek, ami hidrogén-hidas szerkezet kialakulásával s a ligandumok többszörösen pozitív töltésével magyarázható. Mindkét ligandum Cu(II) komplexeinek potenciometriás vizsgálata egy- ill. többmagvú részecskék képződését egyaránt mutatta. A képződött komplexek azonosítása ill. szerkezetük meghatározása céljából spektroszkópiás vizsgálatokat végeztünk (UV-VIS, CD, ESR), melyek megerősítették a feltételezett komplexek képződését. Mindkét ligandum esetében egy rendkívül stabilis Cu<sub>2</sub>L<sub>2</sub> dimer keletkezik a semleges pH-tartományban. A dimer két központi fémionja a Dhen komplex esetén jóval távolabb helyezkedik el egymástól mint a Biüb komplexében, amit ESR spektrumuk is tükröz.*

## KLTE 1

DISZULFIDCSOPORTOT TARTALMAZÓ PEPTIDSZÁRMAZÉK ÁTMENETIFÉM  
KOMPLEXEINEK EGYENSÚLYI VIZSGÁLATA

Ágoston Csaba Gábor V. kémia-fizika

Témavezetők: Dr. Várnagy Katalin tudományos munkatárs

Dr. Sóvágó Imre egyetemi tanár

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszéke

A Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszéken hosszabb ideje folyik a kéntartalmú aminosavak és peptidok átmenetifém komplexeinek egyensúlyi vizsgálata, melynek elsődleges célja annak megismerése volt, hogy a diszulfidhid hogyan befolyásolja a ligandumok komplexképződési folyamatait. A korábban vizsgált vegyületek (oxidált-glutation, D-penicillamin-diszulfid, L-ciszteinil-glicil-diszulfid) átmenetifém-ionokkal képezett komplexeinél fémion-kén kölcsönhatás nem volt kimutatható. A glicil-L-ciszteinil-diszulfid esetén a diszulfidhid kedvező helyzete lehetőséget teremthet a kénatomok koordinálódására. Méréseink során ezen ligandum  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Pd}^{2+}$ -ionokkal képezett komplexeit vizsgáltuk. A ligandumok protonálódási állandóit és a törzskomplexek stabilitási állandóit pH-potenciometriás mérésekkel határoztuk meg, a komplexek szerkezetéről spektrofotometriás vizsgálatokkal kaptunk felvilágosítást. A kapott eredmények alapján megállapíthatjuk:

- A  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ -ionok esetén fémion-diszulfidkén kölcsönhatás nem jön létre.

- A  $\text{Cu}^{2+}$ -ion esetén diglicinszerű koordináció feltételezhető. Kis pH-n az amino- és karboxilcsoport koordinálódik, nagyobb pH-n a peptidnitrogén deprotonálódása és koordinálódása játszódik le. A ligandum szimmetrikus szerkezete és mérete azonban az egyszerű dipeptidoktól eltérő összetételű komplexek képződését eredményezte, fémfelesleg esetén a kétmagvú részecskék jelenléte a meghatározó. Ugyanakkor  $\text{Cu}^{2+}$  esetében fémion-kén kölcsönhatás nem mutatható ki.

A  $\text{Ni}^{2+}$ -ion esetén a koordináció nem diglicinszerű, a peptidnitrogén deprotonálódása és koordinációja nem játszódik le, hanem a ligandum az amino- és a karboxilcsoporton keresztül kötődik a fémionhoz. Az így kialakuló nagytagszámú hurok képes stabilizálni a kialakuló 1:1 összetételű komplexet. Egyúttal megakadályozza a fémion-kén kölcsönhatás kialakulását.

A  $\text{Pd}^{2+}$ -ion esetén a hidrolízis még fémfelesleg esetén is visszazorol, a fémion valamennyi koordinációs helye be van töltve. Ez  $\text{Pd}^{2+}$ -diszulfidkén kölcsönhatásra utal, a részletes kiértékeléshez azonban további vizsgálatok szükségesek.

## METIONIN TARTALMÚ TRIPEPTIDEK ÁTMENETIFÉM KOMPLEXEI

Bóka Beáta IV. kémia-fizika

Témavezetők: Dr. Várnagy Katalin tudományos munkatárs

Dr. Sóvágó Imre egyetemi tanár

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerveitlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Molekulán belül különböző számban és helyzetben metionint tartalmazó tripeptidek Cu(II) és Ni(II)-ionnal alkotott komplexeit tanulmányoztuk pH-potenciometriás és spektrofotometriás módszerrel. Azt vizsgáltuk, hogy a tioétercsoport jelenléte és molekulán belüli helyzete hogyan befolyásolja a komplexképződést, és létre jön-e a kialakuló komplexben kén-fémion kölcsönhatás.

A metionil oldallánc jelenléte a tripeptidben nem befolyásolja lényegesen a komplexképződési folyamatot. A komplexek összetétele megegyezik, s a stabilitási állandók sem térnek el nagymértékben a triglicinnél leírtaktól. Ezen adatok nem jelzik a kén koordinálódását. Spektrofotometriás módszerrel azonban sikerült a tioéterkén-fémion kölcsönhatást kimutatni.

A Cu(II)-ionnál valamennyi ligandum esetén a 290-320 nm-es hullámhossztartományban megfigyelhető egy töltésátviteli sáv, ami a Cu-S kölcsönhatásnak tulajdonítható. Ezen sáv megjelenése a Met rész helyzetétől függően más-más komplex képződésével pár-huzamosan figyelhető meg. Ha a metionin N-terminális csoport a molekulában, akkor az  $[MA]^+$ , ha C-terminális csoport, akkor az  $[MAH_2]$ , míg ha a második aminosav szekven-cia, akkor az  $[MAH_1]$  komplexben alakul ki kölcsönhatás. Tehát a Cu-S kölcsönhatás a tioétercsoportot tartalmazó ligandumok esetén csak akkor jön létre, ha az egyéb-ként koordinálódó donorcsoportok által kialakított térbeli szerkezet ezt lehetővé teszi.

A Ni(II)-komplexek esetén csak N-terminális metionil részt tartalmazó ligandum esetén figyeltünk meg töltésátviteli sávot, amely a Ni(II)-S kölcsönhatás kialakulására utal. Ha a metionin a 2. ill. 3. aminosav-szekvencia a molekulában, akkor a S koordinálódása az  $[MAH_2]$  komplexben jöhetne létre, ekkor azonban a spektrumban megjelenik a Ni-peptidnitrogén töltésátviteli sáv, amely a Ni-S átmenethez tartozó hullámhosszhoz közel esik, és geometriaváltás is bekövetkezik, így a spektrális változásokból a vizsgált kölcsönhatásra vonatkozó következtetéseket nem vonhatunk le.

JATE 38

*A NITRAZEPAM, OXAZEPAM ÁTMENETIFÉMEKKEL ALKOTOTT  
KOMPLEX VEGYÜLETEI**Kilyén Melinda, magiszteri hallgató**Témavezető: Dr. Forizs Edit**Konzulens: Dr. Labádi Imre**BBT, Szervetlen Kémia Tanszék, Kolozsvár**JATE, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék Szeged*

*Az 1,4-benzodiazepin típusú molekulák élettani hatással rendelkeznek, s azokat mint nyugtató és altatószerek régóta alkalmazzák a gyógyászatban is. Megfigyelték, hogy az élőszervezetekre gyakorolt hatásuk megnő bizonyos fémionok jelenlétében. Ezek a megfigyelések alapján keletkezett az igény, hogy a biológiailag aktív vegyületekkel foglalkozzunk mint liganandumokkal, azaz vizsgáljuk azok komplexkéimiai viselkedését.*

*Munkánk során nitraxepam és az oxaxepam  $ML_2X_2$  típusú komplexeit tanulmányoztuk. Vizsgálataink célja az volt, hogy az előállított komplexek szerkezetét felderítsük. Ennek érdekében tanulmányoztuk a komplexek összetételét, IR-, Raman-, spektrumait, mágneses viselkedését.*

*Feltételezhető, hogy a fémionok a N(1) atomon keresztül kapcsolódnak a liganandumokhoz.*

*A  $CuOx_2X_2$  ( $X= DL, Br$ ) komplexek szilárd állapotban monomerek, pszeudotetraéderez szimmetriával rendelkeznek. A  $CuOx_2Br_2$  komplex esetén megállapítható egy enyhe rombikus torzulás is.*

## Ca(II)- ÉS Mg(II)- IONOK KÖLCSÖNHATÁSA HIDROXÁMSAVAKKAL

Enyedy Éva Anna IV. vevyész

Témavezető: Dr. Farkas Etelka  
Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A mikroorganizmusok által szintetizált hidroxámsavcsoportot tartalmazó vegyületek (sziderofórok) szerepe a Fe(III) tárolásában, szállításában ma már jól ismert. Úgyszintén ismert a hidroxámsavak számos biológiai hatása magasabb rendű élőlényekre is. Tekintettel a hidroxámsavcsoport(ka)t tartalmazó vegyületek kifejezett komplexképző hajlamára, (különösen az oxigén donorokat kedvelő fémionok képeznek stabilis komplexeket), a biológiai hatásuk és a komplexképződés közötti korreláció nyilvánvaló.

A Tanszéken már jó néhány létfontosságú és toxikus fémion hidroxámsavakkal képzett komplexeit vizsgálták. A Ca(II) és Mg(II)-ionok azonban eddig nem kerültek elő a várható kis stabilitás miatt. Tekintettel azonban arra, hogy az élő szervezetbe hidroxámsavak bekerülhetnek -pl. gyógyszerként alkalmazott formában- hosszú időn ke-resztül nagy mennyiséggel terhelhetik a szervezetet; felmerül a kérdés, hogy a kis stabilitás ellenére a hidroxámsav típusú ligandum Ca(II)-t és Mg(II)-t üríthet-e.

Vizsgálatainkban modell ligandumként az acetohidroxámsavat és az  $\alpha$ -alanin-hidroxámsavat alkalmaztuk, továbbá a Desferal nevű gyógyszer hatóanyagaként szereplő trihidroxámsav típusú sziderofórt, a desferrioxamin B-t, és ez utóbbi vegyülethez két dihidroxámsav modellt. Alkalmazott módszer a pH-metria volt, és a kísérleti eredményeket a Tanszéken kifejlesztett PSEQUAD nevű programmal értékeltük.

Megállapítottuk, hogy a Ca(II)-és Mg(II)-ionok hidroxámsavakkal való komplex-képzése pH 7 felett indul, jelentős átfedésben a szabad ligandum deprotonálódásával. Monohidroxámsavaknál csak MA típusú komplexre tudunk stabilitási állandót meghatározni, a további komplexképződés, -ha egyáltalán van-, pH-effektus hiányában nem határozható meg. Érdekes eredmény, hogy a desferrioxamin B MAH típusú komplexében a kalcium(II) esetében csupán egy, a magnézium(II)-nál pedig két hidroxámsavcsoport koordinálódását feltételezhettük, valószínűleg ennek szterikus okai vannak. Ezt látszik alátámasztani azon eredmény is, hogy a két hidroxámsavcsoportot egymástól távolabb tartalmazó dihidroxámsav esetében az adatok mind a két funkcióscsoport koordinációjára utalnak.

## VE 12

**EGYMAGVÚ ALKIL- ÉS ACIL-KOBALT-TRIKARBONIL-FOSZFIN KOMPLEXEK  
SZERKEZETI JELLEGZETESSÉGEI**

Szabó Miklós, V. évf., vegyészmérnök

Témavezető: Dr. Bencze Lajos  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék

*A fémorganikus kémiában homogén katalizátorként gyakran használnak kobalt-karbonil vegyületeket. Az egymagvú, kobalt központi komplexek gyakran aktív oxo-szintézis katalizátorok és intermedierek, ezért tanulmányozásuk mind gyakorlati, mind pedig elméleti kémiai szempontból igen hasznos lehet.*

*Az ötszörösen koordinált egymagvú kobalt komplexek közül azokat vizsgáljuk, melyek a három karbonil ligandum mellett legalább egy foszfin ligandumot és egy Co-C szigma kötésű ligandumot is tartalmaznak. Munkánk során az említett vegyületek csoportosításával és szerkezeti sajátosságaik feltárásával foglalkoztunk azzal a céllal, hogy minél jobban segítsük a gyakorlati kísérleti munkát, illetve más elméleti kémiai jellegű számítások számára pontos képet adjunk szerkezeti jellegzetességeikről.*

*24 röntgenszerkezetet vizsgáltunk meg, többségük alkil, jobbára ecetsavszármazék (észter), illetve acil és formil származék. Elkészítettük a szakirodalomban fellelhető röntgenszerkezetek kristálykémiai jellegű vizsgálatát, továbbá megvizsgáltuk a kristályon belüli intermolekuláris kölcsönhatások, illetve a molekulaszerkezetben felfedezhető intramolekuláris hidrogénkötés kialakulásának lehetőségét. Pontos statisztikai elemzést készítettünk a központi kobalt atom környezetében lévő atomtávolságokra és kötőszögekre.*

*A szerves, jobbára alkil-, acil- vagy formil csoport és a foszfin ligandum egymással átellenes, axiális pozícióban helyezkednek el. Azokban a kristálycellákban, amelyekben a molekulák középpontos szimmetria szerint rendeződnek el, és trifenil-foszfin ligandumot tartalmaznak, a foszfin révén királissá váló molekulák enantiomerjei a kristálycellában általában párokban helyezkednek el. Néhány geometriai adat, mint (pl.:Co-C) kötéstávolságok vagy a szögek nagysága, az induktív és mezomer effektusok hatásával jól értelmezhető, így ismert molekulaszerkezetek esetén mérete nagy pontossággal becsülhető. Molekulagrafikai és kvantumkémiai bizonyítékokkal támasztottuk alá az inter- és intramolekuláris hidrogénkötések jelenlétét.*

*A GLUTATION MIKROSPECIÁCIÓJA  
ÉS KIROPTIKAI TULAJDONSÁGAI*

*Szakács Zoltán, IV. éves vegyész*

*Témavezetők: Dr. Noszál Béla és Nyíri Judit  
ELTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék  
SOTE Gyógyszerészi Kémiai Intézet*

*A g-glutamil-ciszteinil-glicin (glutation, GSH) a szervezet oxidatív stressz elleni védelmében nélkülözhetetlen tripeptid. Antioxidáns hatását tiolátcsoportjának diszulfidá alakulása útján fejt ki. A tiolátcsoport elektronsűrűsége egyaránt mértéke a csoport oxidálhatóságának és bázicitásának, mindkettő függ a környező csoportok protonáltsági állapotától.*

*A különböző protonáltsági állapotú részecskék és átalakulási egyensúlyaik jellemzésének módszere a mikrospeciáció, mely a sav-bázis tulajdonságok szubmolekuláris leírását nyújtja.*

*Biológiai jelentősége miatt a glutation sav-bázis tulajdonságaival számos munka foglalkozik. Nincsenek irodalmi adatok azonban az oxidált alak, a GSSG karboxilátjainak mikroállandóira, valamint nem ismertek a GSH protonáltsági állapottal és a kötődési képességekkel is összefüggő kiroptikai jellemzői. Vizsgálataink a fenti két területre, valamint a GSH amino- és tiolátcsoportjának mikrospeciációs adatai meghatározására irányultak.*

*A GSSG aminocsoportjairól megállapítottuk, hogy egymástól függetlenül protonálódnak, a megfelelő makroállandók eltérése a "statisztikus esetnek" felel meg. Kimutattuk, hogy háromnál több csoportos molekula esetén származékvegyület használata nélkül valamennyi mikroállandó akkor sem határozható meg, ha az összes csoport pH-függő protonáltsági móltörtjével rendelkezünk. NMR-pH titrálásból négy mikroállandót, valamint további négy mikroállandó kombinációt kaptunk karboxilátokra.*

*A GSH kiroptikai tulajdonságainak jellemzésére felvettük a különböző pH-jú oldatok CD-spektrumait, majd NMR-ből kapott mikroállandók felhasználásával kiszámítottuk a két karboxilátcsoport moláris ellipticitás értékeit.*



KLTE 12

**A PALLÁDIUM(II)-TIOÉTER KÖLCSÖNHATÁST TARTALMAZÓ  
RENDSZEREK EGYENSÚLYI VISZONYAI**

Szilágyi Magdolna *V. matematika-kémia*  
Nagy Zoltán *V. matematika-kémia*

Témavezető: Dr. Sóvágó Imre egyetemi tanár

*Munkánk során a Pd(II)-tioéter kölcsönhatást tartalmazó rendszerek egyensúlyi viszonyait vizsgáltuk. Vizsgálataink a Pd(II) fehérje oldallánc között kialakuló kölcsönhatásra irányultak, ezért méréseink során olyan Pd komplexeket vizsgáltunk, amelyekben a Pd(II) 3 koordinációs helye már telített volt.*

*A stabilitási állandó meghatározását közvetett potenciometrikus mérésekkel végeztük, amelyre azért volt szükség, mivel a tioéter-koordináció nem jár pH változással. A kompetíciós méréseket több segédligandummal is elvégeztük, amelyekre vonatkozó stabilitási állandók szakirodalomban megtalálhatók. A titrimetriás méréseket NMR vizsgálatokkal is kiegészítettük. Az így nyert eredményekből kiderül, hogy a Pd(II) környezete döntően befolyásolja a keletkező tioéterkomplex stabilitását. A tioéter koordináció a PtPdCl esetén a legerősebb. Ezt követi a Pd(GlyGly) és a Pd(dien) kb. azonos log $\beta$  értékekkel. Ezeknél kisebb stabilitású komplexet képez a Pd(terpy), míg a legkisebb a stabilitás a Pd(GlyMet) esetén.*

*Ezeket az eredményeket az NMR vizsgálatok nagyon jól alátámasztják, amelyeket Pd(dien)-nel és Pd(terpy)-vel végeztünk el. Pd(dien) esetén a méréseket N-acetil-metionin-amiddal is elvégeztük, ahol a stabilitási állandó értéke a töltéscsere miatt kicsit alacsonyabb. Az egyébként tapasztalható nagy különbségeket okozhatja egyrészt a ligandumok nagy térkitöltése, de más tényezőket is figyelembe kell venni. A koordinációs szférában elhelyezkedő szoft karakterű donatoratomok, aromás rendszerek lecsökkentik a fémion szoft tulajdonságát, míg a hard tulajdonságú ligandumok ellentétes hatást váltanak ki.*

*Míndezek alapján egy tioéterligandum jelenléte nem mindig azonos hatást válthat ki az egyensúlyi rendszer összetételére vonatkozóan.*

**A CINK- ÉS A RÉZ-TETRAFENIL-PORFIRIN FOTOFIZIKAI ÉS  
FOTOKÉMIAI TULAJDONSÁGAINAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA**

*Szatura Ágnes és Szintay Gergely, 1996-ban végzett Angol-Kémia szakos tanárok.*

*Témavezető: dr. Horváth Attila  
Veszprémi Egyetem, Általános és Szerveetlen Kémia Tanszék*

*Munkánk célja a paramágneses réz- (CuTPP), és a diamágneses cink-tetrafenil-porfirin (ZnTPP) fotofizikai sajátosságainak feltárása és összevetése valamint fotokémiai reakcióinak vizsgálata, különös tekintettel a nitrogén tartalmú szerves bázisokkal alkotott komplexképződési reakcióikra. Kísérleteink során abszorpciós és lumineszcenciás spektroszkópiát valamint lézer villánófényt fotolízist alkalmaztunk.*

*Méréseink egyértelműen igazolták, hogy a ZnTPP, a vizsgált valamennyi nitrogén tartalmú szerves bázissal mind alap, mind pedig gerjesztett állapotban komplexképződés közben reagál. A piridin származékok esetén jól nyomon követhető a pozitív indukciós effektus valamint a szterikus hatás érvényesülése. A ZnTPP-D komplexek képződési állandóinak és koordinálódó molekulák (D) donor erősségének sorrendje azonos.*

*Felvettük a gerjesztett állapotú, triplett  $^3\text{ZnTPP}$  elnyelési szinképét és megállapítottuk, hogy kis ZnTPP koncentrációknál elsőrendű, nagy ZnTPP koncentrációknál pedig, a T-T annihíláció következtében, részben másodrendű kinetikai törvény szerint tűnik el a triplett részecske.*

*A nitrogén tartalmú donor molekulák jelenlétében felvett szinképek azt mutatták, hogy e donor molekulák koordinációját a paramágneses CuTPP központi atomjához nagyságrendekkel kisebb komplexképződési állandó jellemzi, mint a ZnTPP hasonló reakcióit.*

*Meghatároztuk néhány nitrogén tartalmú molekula és a gerjesztett állapotú  $^3\text{CuTPP}$  között lejátszódó reakció sebességi együtthatóját. Megállapítottuk, hogy a sebességi együttható értéke a reaktáns donicitásától függ.*

*Az elvégzett munka előkészületnek tekinthető egy bonyolultabb rendszer vizsgálatához, hiszen ezen porfirinek a rákos sejtek pusztításához megfelelő ágenseknek bizonyulnak, így a későbbiekben érdemes a DNS megfelelő szegmenseivel képzett komplexek vizsgálatát.*

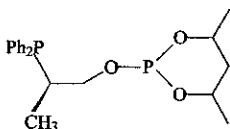
## ÚJ KIRÁLIS FOSZFIN-FOSZFIT LIGANDUMOK SZINTÉZISE

Hegedüs Csaba, Ph.D./I

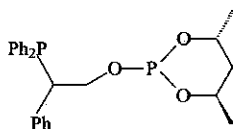
Témavezető: Dr. Bakos József egy. docens  
Veszprémi Egyetem, Szerves Kémia Tanszék

A hidroformilezés a C=C kötés funkcionálizálásának az egyik leggyakrabban használt módszere. A katalizátor királis módosítására kifejlesztett királis vegyületek többsége aril- vagy alkil-foszfin származék. Kevesebb munka jelent meg a foszfin-foszfit ligandumok alkalmazásáról. Az olefinek aszimmetrikus hidroformilezéséhez a leggyakrabban használt királis katalizátorok a difoszfin-Rh(I), difoszfin-Pt(II), difoszfit-Rh(I) és a foszfin-foszfit-Rh(I) komplexek.

Munkám során új királis foszfin-foszfit ligandumok előállításával és tulajdonságainak vizsgálatával foglalkoztam. A hidroxifoszfinokból klór-dioxafoszforinán származékkal új foszfin-foszfit ligandumokat, (R)-1-[(4R,6R)- és (R)-1-[(4S,6S)-4,6-dimetil-1,3,2-dioxafoszforinán-2-iloxi]-2-metil-2-(difenil-foszfino)-etánt (1), továbbá (R)- és (S)-1-[(4R,6R)-4,6-dimetil-1,3,2-dioxa-foszforinán-2-iloxi]-2-fenil-2-(difenil-foszfino)-etánt (2) szintéziseltünk.



1



2

Új módszert fejlesztettünk ki vegyes kétfogú ligandumok előállítására. Optikailag aktív epoxidok (epoxi-sztirol, epoxi-propán) nukleofil gyűrűnyitási reakciójában hidroxifoszfin származékokat nyertünk. Ezen intermedier termékek és optikailag tiszta klór-foszfitok reakciójával nyertük a foszfin-foszfit vegyületeket. Az új vegyületek szerkezetét  $^1\text{H}$ -,  $^{31}\text{P}$ -,  $^{13}\text{C}$ -NMR spektroszkópia adatai alapján igazoltam.

A ligandumok katalitikus tulajdonságának a meghatározása végett platina- és ródium katalizált sztirol hidroformilezést hajtottunk végre.

JATE 37

**ÚJ BISZ-TRIAZÉN LIGANDUMOK Co (II) ÉS Cu (II) KOMPLEXEINEK ELŐÁLLÍTÁSA  
ÉS JELLEMZÉSE**

*Deák Andrea, V. éves kémia-fizika szakos hallgató*

*Témavezető: Venter Monica és Dr. Forizs Edit  
Babes-Bolyai Tudományegyetem*

*A dolgozatban bemutatásra kerülnek újonnan előállított bisz-triazén ligandumok.*

*IR-színképek, tömegspektrumok alapján igazoltuk a ligandumok szerkezetét. Előállítottuk az (1), (3) ligandumok Co(II) és Cu(II)-komplexeit. Az IR-spektrumok alapján megállapítható, hogy a bisz-triazén ligandum deprotonált formában található ezekben a komplexekben és a (NNN) sáv eltolódásából, arra következtetünk, hogy kétfogú ligandumként viselkedik.*

*Az ESR-spektrumok igazolják, hogy a Cu(II) és Co(II)-komplexek síknégyszetes szerkezetűek, az utóbbinál enyhe rombukus torzulás lép fel. Ugyancsak ezek a spektrumok rámutatnak, hogy ezek a bisz-triazén komplexek két központi fém atomot tartalmaznak.*

JATE 14

*N-ACETIL AMINOSAVAK TRIFENILÓN(IV) KOMPLEXEINEK  
ELŐÁLLÍTÁSA ÉS SZERKEZETVIZSGÁLATA*

*Jankovics Hajnalka V. éves matematika-kémia szakos hallgató*

*Témavezető: Dr. Nagy László docens és Buzás Norbert tud. munk. társ.  
JATE, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

*A klinikai gyakorlatban az ónorganikus komplexekkel végzett kemoterápiás kezelés fontossága ezen vegyületek jelentős tumorelles aktivitása egyre nő. Gielen és mtsai. az elmúlt tíz évben számos ónorganikus komplexet állítottak elő, és többek az aminosav-származékok dibutilón(IV) komplexeit aktívnak találták számos humán ráksejt tenyészet ellen. Vizsgálataik másik fő iránya a különböző fenilón(IV) származékok antitumor aktivitásának tanulmányozása volt, melynek során a trifenilón(IV)-el képzett származékok találták különösen aktívnak.*

*A fentiek folytatásaként célul tűztük ki, hogy a korábban hordozómolekulaként megfelelőnek bizonyult N-acetil aminosavakat, mint ligandumokat használva előállítsuk ezek trifenilón(IV) komplexeit és tanulmányozzuk szerkezetüket ill. a későbbiekben antitumor aktivitásukat is.*

*Munkánk során öt különböző aminosavszármazék komplexét állítottuk elő. A kiindulási anyagok és a termékek FTIR- és néhány esetben Raman spektrumaiából következtettünk a lehetséges koordinációs helyekre a komplexekben. Az N-acetil-glicin komplexét tömegspektrometriás módszerrel is tanulmányoztuk, amely egyértelműen bizonyította a komplex általunk is várt trifenilón:ligandum = 1:1 összetételét. A termékekben az ón(IV) lokális szimmetriájának meghatározásához az  $^{119}\text{Sn}$  Mössbauer spektroszkópiás mérések adatait összevetettük a PQS (parciális kvadrupólus felhasadás) elmélet felhasználásával számított adatokkal, és így választottuk ki a legvalószínűbb szerkezeti izomereket. Multinukleáris ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{119}\text{Sn}$ ) NMR vizsgálatok eredményei is megerősítették a Mössbauer és IR vizsgálatokból levont következtetéseket.*

CATIONIC LEAD(II) CHLORIDE AND BROMIDE COMPLEX FORMATION IN MOLTEN  
 $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4.7\text{H}_2\text{O}$

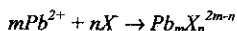
Slobodan B. Gadžurić, IV, Chemistry

Supervisor: István J. Zsigrai  
 Institute of Chemistry, Faculty of Science, University of Novi Sad  
 Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad

The formation of "polynuclear" complexes of the type  $\text{Pb}_m\text{X}_n^{2m-n}$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{SCN}$ ) is known to occur in aqueous solutions and in solid phase. In spite of this, investigations of the complex formation between lead(II) and halide ions in molten salt media mainly concern formation of  $\text{PbX}^+$ ,  $\text{PbX}_2$  and higher anionic complexes. Only a few papers on the formation of cationic lead(II) halide complexes in molten  $(\text{K},\text{Na})\text{NO}_3$  have been reported.

Previous studies of the lead(II) halide complex formation in aqueous melts were performed in the presence of an excess of halide over lead(II) or with nearly equal halide and lead(II) concentration yielding stability constants for  $\text{PbX}^+$ ,  $\text{PbX}_2$ ,  $\text{PbX}_3^-$  etc.

The present study aims to formation of cationic complexes  $\text{PbX}^+$  and  $\text{Pb}_2\text{X}^{3+}$ . The formation of lead(II) chloride and bromide complexes in molten  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4.7\text{H}_2\text{O}$  has been studied by emf and solubility measurements. The emf measurements were performed at 50, 60, 70 and 80°C by use of the  $\text{Ag}/\text{AgX}$  electrodes. From the measured emf the stability constants  $\beta_{mn}$  for the process



were determined. Due to the low lead(II) halide solubility, the emf measurements were carried out at low solute concentrations, yielding stability constants only for  $\text{PbX}^+$  and  $\text{PbX}_2$ . Therefore, the solubility measurements of solid  $\text{PbX}_2$  in the presence of an excess of lead(II) nitrate ( $c_{\text{Pb}} \geq c_{\text{X}^2}$ ) were applied to obtain the stability constants for  $\text{Pb}_2\text{X}^{3+}$  and the solubility product of solid  $\text{PbX}_2$ . The thermodynamic parameters  $\Delta H^\circ$  and  $\Delta S^\circ$  for the dissolution of  $\text{PbX}_2$  and for the stepwise formation of the complexes  $\text{PbX}^+$  and  $\text{Pb}_2\text{X}^{3+}$  were estimated from the temperature dependence of  $\Delta G^\circ = -RT \ln K_{mn}$ . The thermodynamic parameters are compared with literature data for diluted aqueous solutions and for anhydrous and aqueous melts.



*VI. BIOKÉMIA, BIOTECHNOLÓGIA, AGROKÉMIA ALSZEKCIÓ*







VI. Biokémia, biotechnológia, agrokémia alszekció

<b>Csikász-Nagy Attila, Györffy Béla</b>	<b>BME 2</b>	
<i>A hasadó élesztő sejtciklusának matematikai modellezése</i> .....		159
<b>Sárossy Gábor</b>	<b>BME 22</b>	
<i>A wee1 és a cdc25 gén szerepe a hasadó élesztő mitózis méretekontrolljában</i> .....		160
<b>Kupihár Zoltán</b>	<b>JATE 22</b>	
<i>Bázikus oligonukleotid-foszforamidátok</i> .....		161
<b>Mihala Nikolett</b>	<b>ELTE 26</b>	
<i>Kettős specificitású biokonjugátumok szintézise</i> .....		162
<b>Hodosi Etelka</b>	<b>BME 10</b>	
<i>Hazai sajtok jellemzése biológiailag aktív N-tartalmú komponensei alapján</i> .....		163
<b>Pászt Éva</b>	<b>BME 21</b>	
<i>Natív cellulóz hozzáférhetőségének változása cellulolitikus enzimekkel szemben, előzetes reaktív színezés után</i> .....		164
<b>Hegedüs Gyöngyvér</b>	<b>BME 9</b>	
<i>Immunoanalitikai (ELISA) rendszer kidolgozása és alkalmazása növényi hormonok kimutatására</i> .....		165
<b>Vágási Mónika</b>	<b>BME 24</b>	
<i>Inert felületen a baktériumok kötődését stimuláló gének meghatározása Escherichia coli modellen</i> .....		166
<b>Tobisch Zsuzsanna</b>	<b>ELTE 22</b>	
<i>Akutfázis fehérjék kvantitatív meghatározása HepG2 sejtek felülcsúzóijából ELISA módszerrel</i> .....		167
<b>Kriván Emese</b>	<b>JATE 20</b>	
<i>Vezető polimerek spektroelektrokémiai vizsgálata</i> .....		168
<b>Csalátri Judit</b>	<b>KÉE 1</b>	
<i>A környezetszennyező nehézfém ionok hatásának vizsgálata az izommunka anaerob szakaszára</i> .....		169



*A HASADÓ ÉLESZTŐ SEJTCIKLUSÁNAK MATEMATIKAI MODELLEZÉSE**Csikász-Nagy Attila és Gyórfly Béla, IV. évf., Biomérnöki Szak**Témavezető: Dr. Novák Béla  
BME, Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék*

*Dolgozatunkban a Schizosaccharomyces pombe hasadó élesztőnél a sejtosztódás és a sejtnövekedés összehangolásával foglalkozunk. Feladatunk az volt, hogy régi sejt-fiziológiai kísérletek eredményeit modellezzük a Novák-Tyson modell segítségével.*

*Fantes & Nurse részletesen vizsgálták a hasadó élesztő méretkontrollját a tápanyagforrás változtatásával biztosított különböző növekedési sebességeknél és azok közti átmenetek során (shift kísérletek). A vizsgált kísérletek két csoportra oszthatók aszerint, hogy a sejtek számukra kedvezőbb illetve kedvezőtlenebb körülmények közé kerültek. A sejt szám idő diagrammokról kiszámoltuk egy-egy sejt sejtciklusbeli pozícióját valamint azt, hogy a shift hatására elmozdultak-e és ha igen akkor milyen mértékben a sejtciklusukban. A kapott serkentéseket és késleltetéseket a sejtciklusbeli pozíció függvényében ábrázoltuk.*

*Ezek után a Novák-Tyson modellel számoltuk azt, hogy különböző pozícióban lévő sejtek hogyan reagáltak a környezeti paraméterek változtatására. Itt is ábrázoltuk a kapott serkentéseket és késleltetéseket a sejtciklusbeli pozíció függvényében.*

*Az eredményeket értékelve megállapítottuk, hogy a modell megfelelően képes leírni a valóságot, sőt azt is megállapítottuk, hogy a mitózisos méretkontroll nem a korábban feltételezett 0,7-es sejtciklus pozícióban hat, hanem jóval ez előtt, körülbelül 0,25-0,35-ös sejtciklus pozícióban.*

BME 22

**A WEE1 ÉS A CDC25 GÉN SZEREPE A HASADÓ ÉLESZTŐ MITÓZIS  
MÉRETKONTROLLJÁBAN**

Sárossy Gábor, V. évf.

Témavezető: Sveiczter Ákos  
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

*TDK dolgozatomban az *S. pombe* sejtciklusát vizsgáltam, időkihagyásos mikrofotográfiaival. Ezzel a módszerrel a sejtek méretének időbeli változását lehet nyomon követni. A vizsgálat eredményeivel a sejtciklus modell egyes lépéseit szerettem volna igazolni.*

*A vizsgálatok során a figyelem a *cdc2* géntermékre terelődött, amely egy ciklin nevű, periodikus fehérjével egy inaktív komplexet képez (pre-MPF). Ezt a *cdc25* nevű fehérje képes aktív állapotba hozni, mellyel szemben a *wee1* inhibitor hat. A *cdc25* aktivátor és a *wee1* inhibitor működése jelenti a mitózis beindításának sebességmeghatározó lépését, tehát itt érvényesülnek a szabályozásra hatással levő különböző. Az aktív MPF közvetlen és közvetett utakon már képes a mitózis beindítására.*

*Az egy populációban élő sejtek a környezeti feltételeket is figyelembe véve home-osztázist alakítanak ki, vagyis egy jellemző méretnél és adott ciklusidővel osztód-nak. A méretkontroll lényege, hogy a sejt csak kitüntetett értéknél osztódhat, és az ettől eltérő méreteknek a ciklus folyamán kompenzálniuk kell a különbséget. A *Schizosach-charomyces pombe* vad típusú sejtjeinél a méretkontroll a mitózisba lépés előtt hat.*

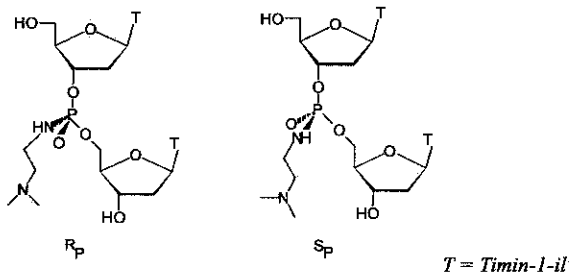
*Dolgozatomban azt a feltevést szerettem volna bizonyítékokkal alátámasztani, misze-rint a mitózis méretkontroll a *wee1* vagy a *cdc25* génterméken keresztül hat. Ehhez két duplamutánt, a *Dcdc25wee1.50-t* és a *Dcdc25cdc2.3w-t* hasonlítottam össze. Annak eldöntésére, hogy a kettő közül mégis melyik van hatással a méretkontrollra, a *Dcdc25cdc2.3w* duplamutánt vizsgáltam. Ennél ugyanis a *wee1* géntermék működés-képes, a *cdc25* viszont a másikkhoz hasonlóan ki van vágva. A kísérleti adatok szerint itt működik a méretkontroll. Ez csakis a *wee1-gyel* lehet összefüggésben, tehát elmondható, hogy a *wee1* géntermék szükséges a mitózis méretkontroll létezéséhez, és annak egyik végrehajtó eszköze lehet. Érdekes jelenség volt megfigyelhető a *Dcdc25wee1.50* mutánsnál: a sejtek kaotikus viselkedése a populáció csoportokra bomlását eredményezte, s a méretkontroll hiánya ellenére egy viszonylagos homeosztázist biztosított.*

## BÁZIKUS OLIGONUKLEOTID-FOSZFORAMIDÁTOK

Kupihár Zoltán, I.PhD hallgató

Témavezető : Dr. Bottka Sándor  
MTA SZBK Növénybiológia

A szintetikus módosításokat hordozó oligonukleotidokat a közelmúltban kidolgozott molekuláris biológiai és terápiás alkalmazások a figyelem középpontjába állították. A lebontó enzimeknek ellenálló, jó membrán-áthatoló képességgel rendelkező és ugyanakkor a bázispárképzés specificitását megőrző származékok előállítására irányuló kutatás világszerte komoly erőket mozgósított. Munkánk e törekvéshez kapcsolódik : olyan származék előállítására törekedünk, melyben az eredetileg savas internukleotid-foszfátot semleges ill. bázikus csoporttá konvertáljuk.



Az ábrán bemutatott dimer foszforamidátot többlépéses oldatfázisú szintézis során a H-foszfónát kapcsolás módosított változatának felhasználásával alakítottuk ki. Az  $R_p$  és  $S_p$  diasztereoizomereket preparatív adszorpciós kromatográfia segítségével külön-külön izoláltuk. Ezek 5'-védett-3'-foszforamidit származékait felhasználva szilárd hordozón alternáló foszforamidát-foszfodiészter vázat tartalmazó oligonukleotidokat állítottunk elő. A sztereospecifikus módon kialakított új vegyületeket MS és NMR spektroszkópia segítségével karakterizáltuk, és vizsgáltuk a szubsztituensnek a DNS duplex képzésére kifejtett befolyását.

Az eddigi vizsgálatok alapján az új vegyülettípus alkalmas lehet a génextpresszió antiszenz típusú gátlására.

ELTE 26

## KETTŐS SPECIFICITÁSÚ BIKONJUGÁTUMOK SZINTÉZISE

Mihala Nikolett V. vegyész

Témavezető : Dr. Hudecz Ferenc

Dr. Mező Gábor

ELTE-MTA Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport

*A vírusok burokféhérréje több olyan peptidszakaszt tartalmaz, amelyek ellena-nyagválasz kiváltására alkalmasak. A szintetikus vakcinák kialakítása során ezért célszerű olyan vegyületek előállítására, amelyekben csupán a hatás kiváltásáért elsősorban felelős epitópok nagyszámú kópiái vannak jelen. Ennek érdekében kétféle bizonyítottan immu-nogén hatású peptid epitópot kapcsoltunk elágazó láncú szintetikus polipeptidekhez. Az eltérő szerkezeti epitóp peptid hordozóhoz való egyértelmű kapcsolása megköveteli, hogy a konjugálás a kétféle peptid esetében különböző funkciócsoportokon keresztül történjen. Például az egyik peptidet amidkötéssel, a másikat diszulfidhid kialakításával kapcsolhatjuk a hordozóhoz. A diszulfidhid kötés kialakítására széles körben alkalmazott reagensek (SPDP, MBS) a hordozó és a peptid közé ékelődve nem tették lehetővé a közvetlen hordozó-S-S-peptid típusú vegyületek előállítását. Ezt küszöböl-heti ki a S-3-nitro-piridinszulfenil-cisztein Cys(Npys) alkalmazása, ugyanis ez az aktivált SH-csoportot tartalmazó vegyület egy másik cisztein tiol-csoportjával diszulfidhid kötést alakít ki.*

*Munkám során a Herpes simplex vírus D1 glikoprotein 9-21 és 276-284 régiókból származó peptideket konjugáltam a Cys(Npys)-származék segítségével különböző elágazó láncú polipeptidekhez. Mindkét epitóp peptid szintézise (C<sup>276</sup>SALLEDPVG<sup>284</sup>-NH<sub>2</sub>, C<sup>9</sup>LKMADPNRFRGKD<sup>21</sup>-NH<sub>2</sub>) szilárd fázison, (MBHA-gyanta) Boc/Bzl technikával történt. Előállítottam (először az irodalomban) az elágazó láncú polipeptidek Cys(Npys) származékait; vizsgáltam a szubsztitúciót befolyásoló néhány tényezőt (oldószer, kapcsolószer) és az Npys-csoport stabilitását a kapcsolási és a hasítási körülmények között. Tesztpptideket alkalmazva kísérleteket végeztem diszulfidhídon keresztül létrejövő kötés optimális reakciófeltételeinek kidolgozására, majd kapcsoltam a HSV 276-284 epitóp peptidet a hordozó molekulához. A kötés kialakulásának eredményességét UV abszorbanancia és aminosav analízis mérésekkel ellenőriztem.*

HAZAI SAJTOK JELLEMZÉSE BIOLÓGIAILAG AKTÍV N-TARTALMÚ KOMPONENSEI  
ALAPJÁN

Hodosi Etelka, doktoráns

Témavezető: Simonné dr. Sarkadi Livia  
BME, Biokémia és Élelmiszertechnológiai Tanszék

*A biogén aminok vizsgálata az élelmiszeripari termékekben egyre nagyobb hangsúlyt kap napjainkban. Ezek a vegyületek az élelmiszerekben a szabad aminosavak dekarboxilálásával keletkeznek és mérgezési tüneteket válthatnak ki az erre érzékeny egyéneknél. Az ételintoleranciában szenvedő betegek száma hazánkban is növekedő számot mutat.*

*A nemzetközi irodalomban számtalan közlemény olvasható a sajtok fogyasztása után bekövetkezett mérgezési tünetekről. A hazai sajtok esetén kevés adat található erre vonatkozóan.*

*Munkám során a sajtok biogén amin tartalmának változását vizsgáltam a sajtkészítés technológiai folyamatát nyomon követve, valamint adatokat gyűjtöttem a kereskedelmi forgalomban kapható érett sajtok elemzésével. A mennyiségi meghatározáshoz az ioncserés oszlopkromatográfiás módszert alkalmaztam.*

*Eredményeim alapján megállapítható, hogy a technológiai lépések során nyomon követhető a biogén aminok keletkezése és mennyiségük növekedése. A sajtokban nagy mennyiségben fordul elő tiramin, hisztamin és putreszcin. Ez bizonyítéka annak a feltevésnek, hogy a sajt készítése során felhasznált starter kultúrák aminosav dekarboxiláz aktivitással rendelkeznek. Az érett sajtok esetén talált koncentráció tartományok szintén alátámasztják az előbbi megállapítást.*

*Összegzésként elmondható, hogy a felmérő kutatást kívánatos tovább folytatni a hazai sajtok körében és kísérletet tenni a starter kultúrák megváltoztatására a biogén aminok keletkezésének a visszaszorítása érdekében.*



BME 21

NATÍV CELLULÓZ HOZZÁFÉRHETŐSÉGÉNEK VÁLTOZÁSA CELLULOITIKUS  
ENZIMEKKEL SZEMBEN, ELŐZETES REAKTÍV SZÍNEZÉS UTÁN

Pászt Éva, doktoráns

Témavezetők: Dr. Víg András, Dr. Réczey Istvánné  
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék,  
és Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

Munkám során ipari cellulózzal, pamuttal és négy reaktív színezékekkel dolgoztam. Kísérleti eredményeim alapján megállapítható, hogy a szálhoz kovalensen kötött színezékek csökkentik az enzim depolimerizáció hatékonyságát. A pamuton kötött színezékek koncentráció növelésével egyre nő a színezékek enzimhatás-gátló viselkedése. A legkisebb (0.1%) és a legnagyobb (15%) színezéktartalmú szövet lebonthatósága (konverzió) között színezéktől függően 30-70% eltérés van. Ahogy növekedett a megkötött színezék mennyisége a szálon (esetleg a színezékmolekulák beépülésével létrejött keresztkötések egyidejű kialakulásával), úgy egyre csökkent a színezett rendszerben az enzimmel bontható gliukozidos kötések hozzáférhetősége. Az ipari cellulóz és a pamut enzim lebontásakor mért konverziókat értékelve megállapítható, hogy a pamuton lényegesen kisebb konverzió érhető el, mint az ipari cellulóz-zon. Ennek valószínű oka a két minta kezdeti átlagpolimerizációs foka közti különbség.

Ha a színezett pamutszövetek enzim lebontással oldhatóvá vált hányadán kötött színezékkoncentráció és a hagyományos kénsavas lebontással meghatározott színezékkoncentráció értékeket összevetjük megfigyelhető, hogy az enzim módszerrel kapott koncentráció értékek magasabbak, mint a kénsavas módszerrel. Ez azzal magyarázható, hogy a színezés során a színezékmolekulák a számukra hozzáférhető amorf tartományban kötődtek meg nagyobb részben, amely amorf tartomány az enzim számára is jobban hozzáférhető és ezt tudja lebontani. Az is megállapítható, hogy a cellulózhoz kötött reaktív színezékek koncentrációjának növekedésével egyre csökkent a színezett rendszer hozzáférhetősége az enzim számára. Ennek következtében a növekvő színezékkoncentrációval csökkent az enzim lebontással oldható fázis illetve az oldhatatlanul maradt fázis színezékkoncentrációi közti fajlagos különbség. Tehát ilyen fokú depolimerizációval csak a nagyobb színezék mennyiséget tartalmazó amorf részi és a kristályos rész hozzáférhető felületét sikerült lebontani.

BME 9

**IMMUNOANALITIKAI (ELISA) RENDSZER KIDOLGOZÁSA ÉS ALKALMAZÁSA NÖVÉNYI  
HORMONOK KIMUTATÁSÁRA**

*Hegedűs Gyöngyvér V. évf.*

*Témavezetők: Dr. Székács András, Dr. László Elemér  
BME, Mezőgazdasági Kémia Technológia Tanszék*

*A kísérletek célkitűzése az volt, hogy egyes növényi hormonokra, a zeatin-ribozidra (ZR) és az izopentenil-adenozinra (IPA) optimalizáljuk egy kifejlesztés alatt álló immunanalitikai kvantitatív kimutatási módszert, majd a kimutatási paramétereket a rutin felhasználás számára rögzítsük. Emellett a kimutatást a gyakorlatban, növényi könnyezési nedv (xylemnedv) mintán is alkalmazni kívántuk.*

*Két citokinin családra végeztem el az ELISA teszt optimalizálását. A mikrotálcák érzékenyítési koncentrációjának fokozatos változásával meghatároztam a kimutatási érzékenység optimális értékét. A két hormon eltérő módon reagált az érzékenyítési koncentráció csökkentésére, bár a titerértékek nagyságrendje egyik hormon esetében sem változott. A titerérték a ZR esetében az érzékenyítés csökkenésével párhuzamosan, enyhén emelkedett, míg az IPA esetében ilyen tendencia nem mutatkozott. A kísérletek alapján meghatároztam, optimális érzékenyítés melletti titer és  $IC_{50}$  értékeket rendre meghatároztam. Az optimális érzékenyítési koncentrációk mellett a ZR és az IPA esetében is egy-egy lemezen megvizsgáltam hat-hat különböző időpontban vett szérum titrálását, majd gátolását. A kísérletek az egyik hormon szérumjai között sem mutattak számottevő eltérést.*

*A két kidolgozott módszer előnye a hormoncsaládok specifikus viselkedése, mely az immunanalitikai eljárás határozott előnye más analitikai módszerekhez (pl.HPLC) képest. A keresztreakciók eredményeképpen elmondható, hogy a ZR-ra érzékenyített lemezen a ZR mellett esetleg előforduló IPA a célhormon kimutatását nem zavarja (ez fordítva is igaz). A ZR-ra érzékenyített lemez kizárólag a zeatinra és a zeatin-ribozidra mutat számottevő érzékenységet. Az IPA-ra érzékenyített lemezen elvégzett keresztreaktivitási vizsgálatok azt mutatták, hogy az IPA-ra és a 2-IP-re az érzékenység közel azonos, a módszer zeatinra és zeatin-ribozidra egyáltalán nem érzékeny, s számottevő keresztreakciót csak a kinetinnel (6,8%) és a benzil-adeninnel (3,5%) mutat. A vizsgálatok alapján látható, hogy a standard módszer laboratóriumi körülmények között jól alkalmazható.*

BME 24

*INERT FELÜLETEN A BAKTÉRIUMOK KÖTŐDÉSÉT STIMULÁLÓ GÉNEK  
MEGHATÁROZÁSA ESCHERICHIA COLI MODELLEN**Vágási Mónika, V. évf., Biológus mérnök Szak**Témavezető: Dr. Csikor Zsolt  
BME, Vegyészkari Fejlesztő Laboratórium*

*A dolgozat az 1996-os tanévben a Franciaországi Lyoni INSA-n történt féléváthallgatásom során született. A kutató munkát a Mikroorganizmusok Molekuláris Genetikája Tanszék kutató laboratóriumában végeztem, Philippe Lejeune professzor vezetésével.*

*A biofilmek gyakorlati jelentősége sokrétű. Egyrészt a biológiai szennyvíztisztításban a megfelelő baktériumok segítségével biofilmes baktériumágyat hozhatunk létre és a mikroorganizmusok segítségével szerves anyag lebontást végezhetünk. Másrészt viszont a biofilmek kialakulásának káros hatása is lehet, ha például a csatornában elszaporodó baktériumokra vagy az orvosi műszereken és legfőképpen az emberi szervezetbe beültetett protéziseken elszaporodó mikroorganizmusokra gondolunk.*

*A munka célja olyan gének felkutatása, izolálása és lokalizálása volt amelyek szerepet játszanak a baktériumok felszíni kötődésében. Első lépésben a felületi kötődés létrejöttét stimuláló géneket inaktívtáztuk egy speciális profág, a Mu dX a gazdabaktériumba való beiktatása révén.*

*Második lépésben kidolgoztunk egy festési módszert (kristály ibolya festés) melynek segítségével ki tudtuk szelektálni a nem kötődő baktériumokat. Hat ilyen mutáns nem tapadó baktériumot sikerült izolálnunk.*

*Végül a bejuttatott Mu dX génszekvencia pontos helyét próbáltuk meghatározni a nem tapadó E. coli mutánsok kromoszómáján. Két mutáns esetében sikerült lokalizálni a Mu dX pontos helyét, így néhány a kötődésben résztvevő gén helyzetét is lokalizáltuk.*

*Egy teljesen más jellegű munkával is foglalkoztunk. Azt akartuk megtudni, hogy a baktériumok felülethez való kötődésében van-e szerepe az oxigén jelenlétének. Azt az eredményt kaptuk, hogy aerob körülmények között is kialakul biofilm (bár kevésbé stabil és vastag). Ez olyan szempontból tekinthető fontos előrelépésnek, hogy korábbi cikkek alapján azt feltételezték, hogy az anaerob állapot beállta stimulálta a primer biofilm képzéshez szükséges géneket.*

AKUTFÁZIS FEHÉRJÉK KVANTITATÍV MEGHATÁROZÁSA HEPG2 SEJTEK  
FELÜLSZÓJÁBÓL ELISA MÓDSZERREL

Tobisch Zsuzsanna

Témavezető: Bósze Szilvia, tudományos segédmunkatárs,  
dr. Hudecz Ferenc a kémia tudományok doktora, tudományos tanácsadó

Eötvös Loránd Tudományegyetem  
Természettudományi Kar, Kémiai Tanszékcsoport

A citokinek multifunkcionális szolubilis hatóanyagok, amelyek fontos szerepet játszanak a sejtek közötti kommunikáció megvalósulásában. A célsejtekre specifikus receptoraikon keresztül hatnak. Az interleukin-6 molekula ezen fehérjecsalád egyik képviselője. A molekula 185 aminosavból álló elsődleges szerkezete ismert, receptorkötődésben szerepet játszó régiói viszont nem. A fehérjében eddig elsősorban pont- és deléciós mutációk segítségével - két olyan, az N- illetve C-terminális közelében elhelyezkedő régiót valószínűsítettek, amelyeknek szerepük lehet a fehérje receptorkötődésében. Az interleukin-6 egyéb funkciói mellett fontos szerepet játszik a máj által termelt akutfázis fehérjék szintézisének szabályozásában. Célünk az N-terminális régióon belül az interleukin-6 hatás kiváltásáért felelős szakasz lokalizálása a fehérje és a szintetikus peptidok májsejtek fibrinogén termelésére gyakorolt hatásának összehasonlításával. Ennek érdekében olyan átlapoló peptidokat készítettünk, amelyek lefedik az IL-6 19-43 régióját. A funkcionális vizsgálatokat HepG2 sejteken (humán hepatoma sejtvonal) végeztük, összehasonlítva a peptidok hatását a spontán illetve interleukin-6 indukálta fibrinogén szintézisre. Ily módon a sejteket 10-16-10-12 mol koncentrációban kezeltük peptidokkal önmagukban, valamint 1 órás peptidokkal történt előinkubálás után interleukin-6 fehérjével. 24 óra múltán a sejtek felülszójából mértük a fibrinogén mennyiségét ELISA tesztekkel. A kezdeti eredmények azt mutatják hogy a peptidok koncentrációfüggő módon képesek a HepG2 sejtek fibrinogén termelő képességét befolyásolni. A hatás mértéke a kérdéses peptid 19-43 régióon belüli elhelyezkedésétől függ.

JATE 20

## VEZETŐ POLIMEREK SPEKTROELEKTROKÉMIAI VIZSGÁLATA

*Kriván Emese, V. éves vegyész hallgató**Témavezető : Dr. Visy Csaba egyetemi tanár  
József Attila Tudományegyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Az elektromos vezetés és a szerves polimerek (műanyagok) együttes említése mintegy húsz évvel ezelőtt még paradox gondolatnak tűnt. Ma már ismerünk vezető polimereket, ezek közé tartozik a polipirrol is. Jelen munkánkban célként tűztük ki a vezető polipirrol elektrokémiai előállítását a monomer vizes oldatának oxidációjával, továbbá a vezető film tulajdonságainak spektroelektrokémiai vizsgálatát.*

*Az elektrokémiai oxidáció során a monomerből gyökkationok keletkeznek, amelyek egymáshoz kapcsolódva elvileg folytonosan konjugált polimert adnak. A képződő film színes, redoxi átalakulásait színváltozás kíséri. Így mind az elektrokémiai polimerizáció, mind a film átalakításai spektrofotometriásan követhetők. A vezető állapotban képződő polimer elektroneutralitását az oldat anionjai biztosítják. Az általunk alkalmazott anion a dodecilszulfát (DS), az irodalom alapján a filmben immobilizált, általa kiváló vezetési sajátságú film készíthető.*

*Kísérleteinkben azt vizsgáltuk, hogy a film sajátságai hogyan függenek az oxidáció paramétereitől (áramsűrűség, DS koncentráció). Az áramsűrűség hatását vizsgálva megállapítottunk egy határértéket, amely alatt nem eredményes az elektropolimerizáció. A kiindulási monomeroldat DS koncentrációját változtatva meghatároztunk egy koncentrációtartományt, amelynek alkalmazása esetén spektrális tulajdonságok alapján optimális filmhez jutunk. A vezető film redoxi sajátságait – stabilitási és reverzibilitási szempontból – különböző aniontartalmú oldatokban vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy a polipirrol/NaDS film redoxi átalakítása során a feltételezett köztitermék kialakulása spektrális úton is követhető.*

*A KÖRNYEZETSZENNYEZŐ NEHÉZFÉM IONOK HATÁSÁNAK  
VIZSGÁLATA AZ IZOMMUNKA ANAEROB SZAKASZÁRA*

*Csalári Judit IV. éves okleveles élelmiszeripari mérnök*

*Konzulens: Dr. Kosáry Judit egyetemi tanár  
Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem Kémia és Biokémi Tanszék*

*A környezetszennyezés mértéke, ezen belül a nehéz fém ionok mennyisége, az egész világon, így Magyarországon is egyre nő. Ezek a nehéz fémek általában nem egyenként, hanem különböző kombinációkban fordulnak elő.*

*A környezeti szennyezés visszaszorításának egyik eszköze a környezetszennyező anyagok egészségileg még nem ártalmas környezeti koncentrációjának, mint határértéknek megállapítása, ennek állandó ellenőrzése és betartása. E határértékek megszábasához elengedhetetlenül szükséges a nehéz fém ionok biológiai hatásainak, illetve azok biokémiai hátterének ismerete. A biokémiai hatások általában az egyes enzimekre gyakorolt aktiválással vagy gátlással jellemezhetők a legjobban. Az enzimaktivitás befolyásolhatósága modellkísérletekben végzett enzimkinetikai vizsgálatokkal igen jól megállapítható.*

*Eddig igen sok enzimet vizsgáltak meg ebből a szempontból, de az esetek túlnyomó többségében a méréseket kizárólag egyetlen fém ion, illetve egy fém ion és egy környezetet szennyező szerves vegyület kombinációjával végezték több, fém ion egyidejű jelenlétében végzett vizsgálatokról csak elvéve számoltak be.*

*Munkám során laboratóriumi körülmények között végzett enzimkinetikai mérésekkel vizsgáltam a környezet szennyező nehéz fém ionok, elsősorban a réz, kadmium, nikkel, kobalt és a króm ionok, valamint azok különböző kombinációinak hatását az izomműködés anaerob szakaszára, elsősorban a glikolízis kulcsenzimére, a foszforfruktokinázra, valamint a laktát dehidrogenázra. Megvizsgáltam, hogy az eredmények milyen kapcsolatban állnak azokkal az irodalmi adatokkal, amelyeket az egyes fém ionokra közöltek.*



## VII. KÉMIAI TECHNOLÓGIA ALSZEKCIÓ







VII. Kémiai technológia alszekció

<b>Kassai Csaba</b>	<b>BME 12</b>	
<i>Racém alkoholok O, O'-dibenzoil-2R,3R- borkősavval képzett komplexen keresztül történő resolválása, a komplexek termoanalitikai és röntgendiffrakciós vizsgálata</i> .....		175
<b>Katona Zoltán</b>	<b>BME 13</b>	
<i>Mandulásav-észterek resolválása koordinációs komplexek alkalmazásával</i> .....		176
<b>Csesztrégi Tamás, Erdődi Gábor</b>	<b>ELTE 1</b>	
<i>Poli(éter-szulfon) kémiai módosítása</i> .....		177
<b>Bozsó Zsolt</b>	<b>JATE 2</b>	
<i>Hexánizomerek elválasztása zeolitokon</i> .....		178
<b>Horváth Anita</b>	<b>JATE 12</b>	
<i>Szelektív oxidációs reakciók tanulmányozása titán-szilikalit katalizátorokon</i> .....		179
<b>Szabó Edit</b>	<b>ELTE 14</b>	
<i>Ferroelektromos folyadékkristály elegyek vizsgálata</i> .....		180
<b>Kis Gábor, Szabó Csongor</b>	<b>VE 7</b>	
<i>Motorolaj adalékok szinergizmusának vizsgálata</i> .....		181
<b>Hoffmann Eufrozina Andrea</b>	<b>JATE 11</b>	
<i>Alkylaromás vegyületek lánc- és átalakítási reakciói zeolitikatalizátorokon</i> .....		182
<b>Rozmanitz Péter</b>	<b>JATE 28</b>	
<i>Indiummal és galliummal módosított mikropórusos katalizátorok szerepe a könnyű szénhidrogének átalakításaiban</i> .....		183
<b>Abonyi János</b>	<b>VE 1</b>	
<i>Szakaszos polimerizációs reaktor szabályozása Fuzzy-szabályozóval</i> .....		184



**RACÉM ALKOHOLOK O,O'-DIBENZOIL-2R,3R-BORKŐSAVVAL KÉPZETT KOMPLEXEN  
KERESZTÜL TÖRTÉNŐ RESZOLVÁLÁSA, A KOMPLEXEK TERMOANALITIKAI ÉS  
RÖNTGENDIFFRAKCIÓS VIZSGÁLATA**

*Kassai Csaba V.évf. Szerves és bio. vegyipari Szak*

*Témavezetők: Dr. Kozma Dávid, Dr. Fogassy Elemér  
BME, Szerves Kémiai Technológia Tanszék*

*Dolgozatomban királis alkoholok O,O'-dibenzoil-2R,3R-borkősavval képzett komplexein keresztüli resolválását vizsgáltam, valamint a keletkezett komplexek termoanalitikai (TG,DTG,DSC) és röntgendiffrakciós vizsgálatával foglalkoztam.*

*A dibenzoil-borkősavat mindeztáig csak bázikus karakterű vegyületek resolválására alkalmazták resolváló ágensként, racém alkoholok közvetlen komplexképzéses, származék nélküli resolválása nemcsak elméleti szempontból lehet érdekes, de gyakorlati szempontból is, mivel ezidáig a DBBS-nál lényegesen drágább ágensekkel volt lehetséges ezen alkoholok komplexképzésen alapuló resolválása.*

*Vizsgálataim alapján úgy találtam, hogy míg a modellvegyületként kiválasztott négy alkohol közül egyik sem képez kristályos komplexet a borkősavval, addig a dibenzoil-borkősavval mindegyik stabilis komplexet képez, és miután a komplexképzés sztereospecifikus, így a dibenzoil-borkősav alkalmas racém alkoholok resolválására.*

*Racém alkoholok és dibenzoil-borkősav reagáltatásával kapott alkohol-dibenzoil-borkősav komplexek termoanalitikus vizsgálatát is elvégeztem.*

*A TG és a DTG vizsgálatok szerint a komplexek mindegyikében 1:1 molarányban van jelen az alkohol és a komplexképző.*

*Egykristály-röntgendiffrakcióval a mentolos komplex szerkezetét sikerült meghatározni, a stabilis kristályszerkezet kialakulását ebben az esetben a hidrofób kölcsönhatások is segítik.*

*Ezen új resolválási eljárásra találmányi oltalmat kértünk [Kozma D., Fogassy E., Kassai Cs.: 3546/95 alapszámú magyar találmányi bejelentés], valamint az előzetes eredményeket a Chemical Communications-ben ismertettük [Kozma D., Böcskei Zs., Kassai Cs., Simon K., Fogassy E.: J. Chem.Soc. Chem.Comm., 753 (1996)].*

BME 13

**MANDULASAV-ÉSZTEREK RESZOLVÁLÁSA KOORDINÁCIÓS  
KOMPLEXEK ALKALMAZÁSÁVAL**

Katona Zoltán, okl. vegyészmérnök

Témavezetők: Mravik András, Dr. Fogassy Elemér  
BME, Fizikai Kémia Tanszék, Szerves Kémiai Technológia Tanszék

*A királis vegyületek optikai izomerjeinek előállítására számos iparilag is alkalmazott megoldás született. A Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Technológia Tanszékén Mravik András vezetésével - host-guest komplex- (ill. tartarát-só) képzésével - sikeresen megoldottuk egyes racém karbonsavszármazékok enantiomerjeinek elválasztását a (-)-O,O'-dibenzoil-L-borkósav savanyú- és semleges kalcium sóját felhasználva.*

*Az irodalom szerint a racém mandulasavat királis bázissal resolválták. A mandulasav-észterek egyik antipódját enantio-szelektív redukcióval optikailag nagy tisztaságban állították elő. Munkám során megvizsgáltam, hogy a racém mandulasav metil-, etil-, benzil- és fenetil észterének antipódjait el lehet-e választani a kalcium-hidrogén-(2R,3R)-O,O'-dibenzoil-tartaráttal enantio-szelektíven képzett komplexein keresztül.*

*A kristályos komplexek eltérő mértékben oldódnak etanolban. Előállításakor oldószer-elegyek alkalmazása kedvezőbb stabilitású, oldhatóságú komplexeket eredményezett. A komplexképzés közegének változtatása befolyásolta a Ca-hidrogén-(2R,3R)-O,O'-dibenzoil-tartarát fémionjával koordinálódott enantiomerek számát és az enantioszelektivitást.*

*A racém metil-mandelátot etanol-aceton oldószerkeletben képzett Ca-hidrogén-(2R,3R)-O,O'-dibenzoil-tartarát-2(metil-(R)-(-)-mandelát) komplexen keresztül resolváltam. A komplexből -amelyben az enantio-szelektivitást magyarázó koordinatív- és hidrogén-kötések alakulnak ki- egyszeri átkristályosítás után optikailag tiszta metil-(R)-(-)-mandelátot nyertem jó termeléssel. A komplexképzés anyalugjából a tükörképi enantio-merhez jutottam. A kísérletorozatban a többi észter resolválhatóságát is bizonyítottam. A komplexek szerkezetére termoanalitikai vizsgálatok eredményeiből következtettem.*

*A módszer egyik felhasználási területe:  $\alpha$ -hidroxisavak resolválása észter-származékon keresztül. Az enantiomer-elválasztás során olcsó resolváló ágenszt használtam fel. Az eredmények beilleszthetők a kutatócsoportban korábban felismert és vizsgált új enantiomer-elválasztási módszerek sorába.*

## POLI(ÉTER-SZULFON) KÉMIAI MÓDOSÍTÁSA

Szerzők: Csesztregi Tamás, Erdődi Gábor

Témavezető: Máthé Árpád

ELTE TTK Kémiai Technológiai és Környezetkémiai Tanszék

A membránképző polimerek kémiai módosításával lehetőség nyílik a membránok jellemzőinek javítására. Vizes fázisok elválasztásánál a membrán szűrletteljesítménye javítható a hidrofilitás növelésével, hidrophil csoportok beépítésével. Munkánk során poli(éter-szulfon)-on  $(-[-C_6H_4-SO_2-C_6H_4-O-]_n)$  végeztünk ilyen típusú átalakításokat. Más poliszulfonokon végzett kísérletek szerint a hidrofilizálás egyik legjobb módszere karboxilcsoportok beépítése a molekulába, azonban a fenti polimeren még nem valósítottak meg ilyen átalakítást annak rendkívüli stabilitása miatt. A karboxilcsoportok bevitelét két különböző módon próbáltuk megvalósítani: litiálást követő  $CO_2$ -os bontással, illetve a brómozott származék nitrilezését követő hidrolizissel. A brómozott származékból litiáláson keresztül szintén karbonsav készíthető.

Az első reakciótú legfőbb akadálya, hogy a polimer nem oldódik a litiáláshoz használatos éterekben illetve szénhidrogénekben. Azonban THF és hexametil-foszforsavamid 1:1 arányú elegyében oldva a polimert, majd ezt  $-30\text{ }^\circ\text{C}$ -on THF-nal hígítva  $-70\text{ }^\circ\text{C}$  hőmérsékletű polimeroldatot kaphatunk, amely a szokásos módon litiálható, majd reakcióba vihető széndioxiddal. Az ezt követő hidrolízis után térhálóosodás nélkül kapjuk a PESU karboxilezett származékát.

A közvetett módszernél először a brómozási lépést vizsgáltuk. A brómszubsztitúció során degradáció is lejátszódik, melyre a MALDI-TOF technikával felvett tömegspektrumok utalnak. (Ezen felvételekből hasznos információkhoz jutottunk a kiindulási anyag összetételét illetően is.) Az NMP-s oldatban CuCN-dal végzett Br-CN csere során a hőmérséklet emelésével előtérbe kerül a dehalogéneződés, amely a termékek Br-tartalmából és IR spektrumából látható. A nitrilezett származék hidrolízisét kénsavval végeztük szulfolános oldatban. A szulfolán alkalmas oldószer a polimer nitrálásához is, melyet  $100\%HNO_3$ - $25\%$ óleum elegyével sikerült megvalósítanunk.

## HEXÁNIZOMEREK ELVÁLASZTÁSA ZEOLITOKON

Bozsó Zsolt 5. éves vegyész hallgató

Témavezetők: Dr. Halász János, Dr. Kiricsi Imre, Dr. Tasi Gyula  
József Attila Tudományegyetem, Szeged, Alkalmazott Kémiai Tanszék

*Kitűnő adszorpciós tulajdonságuknak köszönhetően a szintetikus zeolitokat elterjedten használják ipari elválasztási folyamatokban, különösen gázelegyek szétválasztásában. A hagyományos adszorbensektől eltérően a zeolitok porúsrendszere egy-séges. A porúsbejáratok méreteik alapján határolják be azokat a molekulákat, amelyek adszorbeálódni képesek. Ezért a zeolitokat olyan elegyek szétválasztására használják, mint amilyen az izotópkeverékek, izomerkeverékek vagy kémiailag nagyon hasonló molekulák keverékei. Az adszorbeálódó molekula mérete és alakja mellett más faktorok is befolyásolják a hatékony adszorpciót. Ilyenek a zeolit csatornáiban, üregeiben elhelyezkedő kationok mérete, polarizáló ereje és természetesen a hőmérséklet és a nyomás.*

*Feladatunk tisztázni kívánja annak tanulmányozását, hogy a mordenit mellett ZSM-5 típusú zeolitból is készítsünk olyan változatot, amellyel a 2,3-dimetil-bután, 3-metil-pentán elegy szétválasztható. Érdemes hangsúlyozni, hogy mindkét izomer kritikus molekula-átmérője közel azonos, 0.56 nm, s mindkettő befér az említett zeolitokba. Ez teszi ezt az elválasztási folyamatot érdekessé.*

*A K,Na-mordenit és a K,Na-ZSM5 előállítására is, a zeolitok Na-formájából, folyadék-fázisú ioncserevel történt. A mérésekhez 47 cm hosszú, 2 mm belső átmérőjű kvarc kolonnát használtam, amit Na-mordenitből 2,07 g 0,5 mm, K,Na-mordenitből 1,97 g 0,325 mm, K,Na-ZSM-5-ből 2,24 g 0,325 mm átlagos szemcseméretű töltettel töltöttem meg.*

*Megállapítottuk, hogy a Na-mordenit nem alkalmas a kitűzött elválasztási feladat megvalósításához.  $K^+$  becserélése a zeolitba nagymértékű javulást eredményezett. A kapott adatok tükrözik azokat az alapvető adszorpciós sajátosságokat, amelyeket egy adszorbenssel töltött oszlopnak mutatnia kell. Azt tapasztaltuk, hogy K,Na-mordeniten a hőmérséklet csökkentésével tudunk teljes szeparációt elérni, míg K,Na-ZSM-5 zeoliton nem volt elválasztási probléma. Bizonyítottuk, hogy nem a porusok átmérőjében a  $Na^+$ - $K^+$  ioncsere folytán bekövetkező esetleges csökkenés a fő oka annak, hogy ilyen magas hőmérsékleten hexánizomereket zeoliton szét lehet választani.*

SZELEKTÍV OXIDÁCIÓS REAKCIÓK TANULMÁNYOZÁSA  
TITÁN-SZILIKALIT KATALIZÁTOROKON

*Horváth Anita, V. éves vegyész hallgató*

*Témavezető: dr. Halász János docens  
József Attila Tudományegyetem, Szeged, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*Napjainkban egyre nő az igény a szintetikus kémia számos területén olyan zeolit- és más mikropórusos katalizátorok iránt, amelyekkel speciális céltermékek állíthatók elő. A rácsalkotó atomok izomorf helyettesítésével széles körben foglalkoznak; az ily módon előállított katalizátorok közül például a titán-szilikalit számos szelektív oxidációs reakcióban eredményesnek bizonyult. Az irodalom azonban nem egységes annak megítélésében, hogy a módosított zeolitok aktivitása milyen felületi centrumhoz rendelhető.*

*Vizsgáljuk a titán-tartalmú ZSM-5 szerkezetű zeolitikatalizátorokat a n-hexán hidrogén-peroxiddal történő átalakításában. Az oxidációt az adott reakcióidő letelte után a termékek és a kiindulási szubsztrát gázkromatográfiás analízisével követtük, a hidrogén-peroxid koncentrációjának változását spektrofotometriás úton határoztuk meg.*

*Az irodalommal teljes összhangban a reakció eredményeként 2- és 3-hexanol illetve 2- és 3-hexanon képződését tapasztaltuk, bizonyítva ezzel a katalizátor szelektív tulajdonságát. A kísérleti körülményektől függően különböző arányban kaptunk alkoholokat és ketonokat, ezek arányával jellemezhető a reakciórendszer.*

*A munka igazi célja azonban az volt, hogy a katalizátorok aktiválásakor alkalmazott kiégetési hőmérséklet befolyásolja-e az oxidációs reakció jellemzőit. Megállapítottuk, hogy a hőkezelés hőmérsékletétől függően a termékszelektivitások eltérnek, tehát feltételezhető, hogy nem a szerkezetbe teljesen (izomorf helyettesítőként) beépülő titán a katalitikus centrum, hanem a hőmérséklet hatására onnan részben "kilökődött", de még nem azonosított felületi alakulat.*

*A további kiindulási anyagok (ciklo-hexán, 2-metil-pentán, n-heptán) hidrogén-peroxidos oxidációjában kapott eredmények is bizonyítják, hogy a katalizátor hőkezelésének hőmérséklete befolyásolja a kemo- és/vagy regio szelektivitást.*



## ELTE 14

## FERROELEKTROMOS FOLYADÉKKRISTÁLY ELEGYEK VIZSGÁLATA

Szabó Edit I. doktoranda

Témavezető: Fodorné Dr. Csorba Katalin és Dr. Varga Imre\*  
 MTA-KFKI Szilárdtestfizikai Kutatóintézet, \*Eötvös Loránd Tudományegyetem

Napjainkban használatos kijelzők nematikus folyadékkristályt tartalmaznak mátrix anyagként. Azonban ezek nagy hátránya, hogy kapcsolási idejük 3-100 ms. Tulajdonságuk javítására új, gyors kapcsolású kijelzőket kívánnak kifejleszteni, amelyek ferroelektromosságot mutatnak, és  $\mu$ s nagyságrendű időtartam alatt követik az elektromos tér változását. Munkám célja, gyors kapcsolású kijelzőkben felhasználható többkomponensű ferroelektromos folyadékkristály elegyek előállítása és azok termikus tulajdonságainak tanulmányozása volt. Ezen elegyeknek szobahőmérséklet körüli széles hőmérséklet-tartományon belül enantiotróp királis szmektikus C fázissal valamint kristály-királis szmektikus C\*- királis szmektikus A\*- királis nematikus N\*-izotróp fázisszekvenciával azaz:



kell rendelkezniük.

Vizsgálataimhoz öt királis és két akirális folyadékkristályt használtam fel.

Az (S)-[4-(2-klór-3-metil-butanoil-oxi)-fenil]-4'-n-oktil-oxi-benzoát és deciloxi analógját felhasználva két komponensű elegyeket készítettem több koncentrációban. Majd a két anyag eutektikus elegyét felhasználva háromkomponensű elegyeket állítottam elő különböző koncentrációban alkalmazva az összetevőket. Vizsgáltam a folyadékkristályok törzsének változtatásával a kapott fázisszekvenciát.

A 4-n-alkoxi-fenil-4-n-alkoxi-benzoát homológ sor két tagjának elegyítésével újabb kétkomponensű elegyeket készítettem, melyekhez különböző királis komponenseket adtam többféle koncentrációban. Így tizenhét különböző összetételű két, három és négykomponensű elegyet állítottam elő és tanulmányoztam a ferroelektromos tulajdonságok megjelenését.

Az általam vizsgált tizenhét királis és akirális, különböző tömegszázalékos elegyek közül nyolc, szobahőmérséklet körüli széles hőmérséklet-tartományban SmC\* fázissal és a kívánt fázisszekvenciával rendelkezett, amelyeken további fizikai vizsgálatokat végeztünk.

## MOTORLAJ ADALÉKOK SZINERGIZMUSÁNAK VIZSGÁLATA

Kis Gábor és Szabó Csongor, IV. évfolyam, vegyészmérnöki szak

Témavezető: Dr. Bartha László docens  
Veszprémi Egyetem, Ásványolaj és Széntechnológiai Tanszék

*Az utóbbi évtizedekben a személy és haszongépjármű motorok nagy fejlődésen mentek keresztül. A mai adalékkutatás egyik célja, hogy az alkalmazott különböző kémiai szerkezetű adaléktípusok kölcsönhatásait megismerve és kihasználva minél hatékonyabb adalékkompozíciókat alakítsunk ki. Diákköri munkánk során különböző típusú adalékok olajoldatban létrejövő kölcsönhatásainak vizsgálatával és ezen kölcsönhatásoknak a fémfelületek közötti kenési viszonyokat befolyásoló következményeinek vizsgálatával foglalkoztunk.*

*A különböző adalékok között kialakult és a molekulák asszociációját eredményező kölcsönhatást viszkozitás mérésekkel igazoltuk. Az adalék kompozíciókat Fourier Transzformációs Infravörös spektroszkópiás módszerrel is tanulmányoztuk. A stabilitásvizsgálatokat a gyakorlati igénybevételnek megfelelő körülmények között, a kopásvizsgálatokat négygolyós készüléken végeztük. A kopásfelületek morfológiai és összetételi jellemzőit scanning elektronmikroszkóppal határoztuk meg.*

*Az FTIR vizsgálatokkal igazoltuk, hogy világosan kimutatható kölcsönhatás alakult ki a szukcinimidek és a cink-dialkil-ditio-foszfát (ZnDDP) között. A mérési eredményekből arra következtettünk, hogy a ZnDDP mind hőstabilitás vizsgálat, mind mechanikai nyírásstabilitás vizsgálat során stabilizálta az előzőleg kialakult asszociátumokat.*

*A mai egyre szigorodó környezetvédelmi előírások miatt a fejlesztéseknél a fémtartalmú adalékok alkalmazásának erőteljes csökkentésére törekednek. Az eredmények alapján ezt a fejlesztést azonban csak óvatosan lehet végrehajtani, mivel a ZnDDP igen hasznos tulajdonságú adaléknak bizonyult és a felhasználásával készített korszerű adalékolt motorolajok képesek kielégíteni a mai fejlett motorkonstrukciók kenőolajokkal szemben támasztott követelményeit.*

## JATE 11

ALKILAROMÁS VEGYÜLETEK LÁNC- ÉS ÁTALKILÉZÉSI REAKCIÓI  
ZEOLITKATALIZÁTOROKON

Hoffmann Eufrozina Andrea, V. éves vegyész hallgató

Témavezető: Dr. Halász János docens  
József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

Számos fontos intermedier állítható elő alkilaromás vegyületek katalitikus lánc-alkilezésével. Ilyen például a *p*-xilol és 1-butén reakciójában képződő 1-(*p*-tolil)-2-metilbután, amely gyűrűzáródási reakcióval 2,6 dimetil-naftalinná alakítható. Ez utóbbi vegyület felhasználható folyadék-kristályok készítésére, vagy dikarbonsavvá oxidálva a polikondenzációs műszálgártás egyik lehetséges alapanyaga.

A fő alkilezési reakció mellett azonban számolnunk kell különböző átalakulási reakciók fellépésével is, amelyek a termékszelektivitást csökkenthetik.

Munkánk során *p*-xilol 1-buténnal történő alkilezését tanulmányoztuk. A vizsgálatokhoz Na/NaY bázikus katalizátort használtunk, amelyett "in situ" állítottunk elő, NaN<sub>3</sub>-dal impregnált NaY azidtartalmának hőbontásával. Ez a katalizátor rendkívül érzékeny a levegő O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, és H<sub>2</sub>O tartalmára, ezért a méréseket inerti (N<sub>2</sub> gáz) atmoszférában végeztük. A katalitikus reakciót állóágyas és Berty-típusú reaktorokban valósítottuk meg 100-350 °C hőmérséklettartományban, atmoszférikus és közepes nyomáson. A fellépő átalakulási folyamatokat toluol és etilbenzol Na/NaY-on végbemenő reakciójával modelleztük, összehasonlítva ezt a NaY és a HY katalizátorokon lejátszódó reakciókkal. A termékelegyet gázkromatográfiásan analizáltuk. A katalizátorokat derivatográfiás, röntgen diffrakciós, IR, ESR, <sup>23</sup>Na NMR mérésekkel jellemeztük.

A kapott eredmények azt mutatják, hogy az alkalmazott kísérleti körülmények mellett bázikus katalizátoron az alkilezés kis konverzióval, de nagy szelektivitással valósítható meg. Valószínűsíthető továbbá, hogy a Na/NAY-on csekély mértékben végbemenő átalakulási reakciók nem a felületi bázisos aktív helyeken mennek végbe, hanem a "maradék" Brönstedt savcentrumokon.

JATE 28

**INDIUMMAL ÉS GALLIUMMAL MÓDOSÍTOTT MIKROPÓRUSOS KATALIZÁTOROK  
SZEREPE A KÖNNYŰ SZÉNHIIDROGÉNEK ÁTALAKÍTÁSAIBAN**

Rozmanitz Péter, V. éves vegyész hallgató

Témavezető: dr. Halász János docens, dr Kiricsi Imre egyetemi tanár  
József Attila Tudományegyetem, Szeged, Alkalmazott Kémiai Tanszék

*A könnyű szénhidrogének célszerű felhasználási lehetősége az oligomerizációs-ciklizációs-aromatizációs reakciólépések során kialakuló komponensek előállítására, melyek azután motorhajtóanyagként, vagy szerves vegyipari köztermékként kerülnek értékesítésre. Ezek a reakciók csak katalizátorok jelenlétében mennek végbe megfelelő szelektivitással, és ezekben a reakciókban a módosított zeolitok és a kitémasztott szerkezetű rétegszililikátok lehetnek hatásosak.*

*A diákköri munka folyamán folyadék-, illetve szilárdfázisú-ioncserével állítottunk elő indium és gallium tartalmú ZSM-5 szerkezetű zeolitokat, illetve indium és gallium tartalmú Keggin-ionokkal kitémasztott montmorillonitokat.*

*A katalizátorokon a következő fizikai-kémiai vizsgálatokat végeztük el: fajlagos felületet határoztunk meg nitrogén adszorpcióval, infravörös spektrumokat vettünk fel, derivatográfiás és röntgendiffrakciós vizsgálatokat végeztünk.*

*A fenti vizsgálatok eredményeiből megállapítottuk, hogy az alkalmazott ioncsere és hőkezelési körülmények mellett lehetőség van az átmenetifém-ion beépülésére a ZSM-5 eredeti szerkezetének megtartása mellett.*

*A katalizátorok aktivitását impulzus működésű mikroreaktorral a n-hexán oligomerizációs-ciklizációs-aromatizációs reakciójában vizsgáltuk. A megfelelő aktivitású katalizátorokat folyamatos működésű differenciális reaktorban részletesen is tanulmányoztuk, ezzel lehetőség nyílt az optimális reakciókörülmények meghatározásán túl a mechanizmus részleteinek elemzésére is.*

## VE I SZAKASZOS POLIMERIZÁCIÓS REAKTOR SZABÁLYOZÁSA FUZZY -SZABÁLYOZÓVAL

*Abonyi János, V. évfolyam, vegyészmérnöki szak*

*Témavezetők: dr. Szeifert Ferenc, dr. Nagy Lajos  
Veszprémi Egyetem, Vegyészmérnöki Kibernetika tanszék*

*A korszerű folyamatirányító rendszerek elterjedésével a szakaszos technológiák ismételtlen az érdeklődés előterébe kerültek. Előnyük elsősorban rugalmas szerkezetükben jelentkezik. A gyors adaptációs készség ára viszont a nehéz irányítási problémák sorozatban való megjelenése (sorrendi vezérlések, instacioner állapot, stb.).*

*A dolgozat e problémák közül a szakaszos polimerizációs reaktorok hőmérséklet szabályozásával foglalkozik. Az ilyen típusú technológiák hőmérséklet szabályozása gyakran bonyolult, mivel a rendszer fizikai, kémiai tulajdonságai, mint például a hőkapacitás, viszkozitás, reakciósebesség változnak a reakció periódus során.*

*Munkánkban egy habosított polisztirol előállítására alkalmas szakaszos technológia lokális szintű hőmérséklet szabályozására Takagi-Sugeno fuzzy szabályozó algoritmusokat fejlesztettünk ki. A megoldást két szabályozó algoritmussal hasonlítottunk össze: a hagyományos PID szabályozással és egy a priori prediktor-korrektor elven működő szabályozóval.*

*A szabályozási algoritmusokat a MATLAB szimulációs szoftver környezetébe beépített C nyelven írt szimulátor és a MATLAB Simulink, Fuzzy és Optimization Toolbox-ok segítségével valósítottuk meg, illetve teszteltük.*

*Tapasztalataink szerint a hagyományos szabályozástechnikai megoldások (PID algoritmus, adaptáció) Takagi - Sugeno fuzzy struktúrába leképezhetők, illetve tovább fejleszthetők, ugyanis a szabályozó működését jellemző teljesítményindex 5 - 20 %-os javulását érték el a készített fuzzy szabályozók alkalmazásával.*

*Az ilyen típusú Takagi - Sugeno alkalmazás megfelelő eszköz lehet ott, ahol a már működő szabályozási algoritmust szeretnék felváltani egy jobb, hatékonyabb, nemlineáris szabályozási algoritmussal, és nem áll rendelkezésre elegendő a priori információ modell alapú szabályozó létrehozásához.*

***IX. KÖRNYEZETI KÉMIA ÉS KÖRNYEZETTECHNOLÓGIA  
ALSZEKCIÓ***

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24  
25  
26  
27  
28  
29  
30  
31  
32  
33  
34  
35  
36  
37  
38  
39  
40  
41  
42  
43  
44  
45  
46  
47  
48  
49  
50  
51  
52  
53  
54  
55  
56  
57  
58  
59  
60  
61  
62  
63  
64  
65  
66  
67  
68  
69  
70  
71  
72  
73  
74  
75  
76  
77  
78  
79  
80  
81  
82  
83  
84  
85  
86  
87  
88  
89  
90  
91  
92  
93  
94  
95  
96  
97  
98  
99  
100  
101  
102  
103  
104  
105  
106  
107  
108  
109  
110  
111  
112  
113  
114  
115  
116  
117  
118  
119  
120  
121  
122  
123  
124  
125  
126  
127  
128  
129  
130  
131  
132  
133  
134  
135  
136  
137  
138  
139  
140  
141  
142  
143  
144  
145  
146  
147  
148  
149  
150  
151  
152  
153  
154  
155  
156  
157  
158  
159  
160  
161  
162  
163  
164  
165  
166  
167  
168  
169  
170  
171  
172  
173  
174  
175  
176  
177  
178  
179  
180  
181  
182  
183  
184  
185  
186  
187  
188  
189  
190  
191  
192  
193  
194  
195  
196  
197  
198  
199  
200  
201  
202  
203  
204  
205  
206  
207  
208  
209  
210  
211  
212  
213  
214  
215  
216  
217  
218  
219  
220  
221  
222  
223  
224  
225  
226  
227  
228  
229  
230  
231  
232  
233  
234  
235  
236  
237  
238  
239  
240  
241  
242  
243  
244  
245  
246  
247  
248  
249  
250  
251  
252  
253  
254  
255  
256  
257  
258  
259  
260  
261  
262  
263  
264  
265  
266  
267  
268  
269  
270  
271  
272  
273  
274  
275  
276  
277  
278  
279  
280  
281  
282  
283  
284  
285  
286  
287  
288  
289  
290  
291  
292  
293  
294  
295  
296  
297  
298  
299  
300  
301  
302  
303  
304  
305  
306  
307  
308  
309  
310  
311  
312  
313  
314  
315  
316  
317  
318  
319  
320  
321  
322  
323  
324  
325  
326  
327  
328  
329  
330  
331  
332  
333  
334  
335  
336  
337  
338  
339  
340  
341  
342  
343  
344  
345  
346  
347  
348  
349  
350  
351  
352  
353  
354  
355  
356  
357  
358  
359  
360  
361  
362  
363  
364  
365  
366  
367  
368  
369  
370  
371  
372  
373  
374  
375  
376  
377  
378  
379  
380  
381  
382  
383  
384  
385  
386  
387  
388  
389  
390  
391  
392  
393  
394  
395  
396  
397  
398  
399  
400  
401  
402  
403  
404  
405  
406  
407  
408  
409  
410  
411  
412  
413  
414  
415  
416  
417  
418  
419  
420  
421  
422  
423  
424  
425  
426  
427  
428  
429  
430  
431  
432  
433  
434  
435  
436  
437  
438  
439  
440  
441  
442  
443  
444  
445  
446  
447  
448  
449  
450  
451  
452  
453  
454  
455  
456  
457  
458  
459  
460  
461  
462  
463  
464  
465  
466  
467  
468  
469  
470  
471  
472  
473  
474  
475  
476  
477  
478  
479  
480  
481  
482  
483  
484  
485  
486  
487  
488  
489  
490  
491  
492  
493  
494  
495  
496  
497  
498  
499  
500  
501  
502  
503  
504  
505  
506  
507  
508  
509  
510  
511  
512  
513  
514  
515  
516  
517  
518  
519  
520  
521  
522  
523  
524  
525  
526  
527  
528  
529  
530  
531  
532  
533  
534  
535  
536  
537  
538  
539  
540  
541  
542  
543  
544  
545  
546  
547  
548  
549  
550  
551  
552  
553  
554  
555  
556  
557  
558  
559  
560  
561  
562  
563  
564  
565  
566  
567  
568  
569  
570  
571  
572  
573  
574  
575  
576  
577  
578  
579  
580  
581  
582  
583  
584  
585  
586  
587  
588  
589  
590  
591  
592  
593  
594  
595  
596  
597  
598  
599  
600  
601  
602  
603  
604  
605  
606  
607  
608  
609  
610  
611  
612  
613  
614  
615  
616  
617  
618  
619  
620  
621  
622  
623  
624  
625  
626  
627  
628  
629  
630  
631  
632  
633  
634  
635  
636  
637  
638  
639  
640  
641  
642  
643  
644  
645  
646  
647  
648  
649  
650  
651  
652  
653  
654  
655  
656  
657  
658  
659  
660  
661  
662  
663  
664  
665  
666  
667  
668  
669  
670  
671  
672  
673  
674  
675  
676  
677  
678  
679  
680  
681  
682  
683  
684  
685  
686  
687  
688  
689  
690  
691  
692  
693  
694  
695  
696  
697  
698  
699  
700  
701  
702  
703  
704  
705  
706  
707  
708  
709  
710  
711  
712  
713  
714  
715  
716  
717  
718  
719  
720  
721  
722  
723  
724  
725  
726  
727  
728  
729  
730  
731  
732  
733  
734  
735  
736  
737  
738  
739  
740  
741  
742  
743  
744  
745  
746  
747  
748  
749  
750  
751  
752  
753  
754  
755  
756  
757  
758  
759  
760  
761  
762  
763  
764  
765  
766  
767  
768  
769  
770  
771  
772  
773  
774  
775  
776  
777  
778  
779  
780  
781  
782  
783  
784  
785  
786  
787  
788  
789  
790  
791  
792  
793  
794  
795  
796  
797  
798  
799  
800  
801  
802  
803  
804  
805  
806  
807  
808  
809  
810  
811  
812  
813  
814  
815  
816  
817  
818  
819  
820  
821  
822  
823  
824  
825  
826  
827  
828  
829  
830  
831  
832  
833  
834  
835  
836  
837  
838  
839  
840  
841  
842  
843  
844  
845  
846  
847  
848  
849  
850  
851  
852  
853  
854  
855  
856  
857  
858  
859  
860  
861  
862  
863  
864  
865  
866  
867  
868  
869  
870  
871  
872  
873  
874  
875  
876  
877  
878  
879  
880  
881  
882  
883  
884  
885  
886  
887  
888  
889  
890  
891  
892  
893  
894  
895  
896  
897  
898  
899  
900  
901  
902  
903  
904  
905  
906  
907  
908  
909  
910  
911  
912  
913  
914  
915  
916  
917  
918  
919  
920  
921  
922  
923  
924  
925  
926  
927  
928  
929  
930  
931  
932  
933  
934  
935  
936  
937  
938  
939  
940  
941  
942  
943  
944  
945  
946  
947  
948  
949  
950  
951  
952  
953  
954  
955  
956  
957  
958  
959  
960  
961  
962  
963  
964  
965  
966  
967  
968  
969  
970  
971  
972  
973  
974  
975  
976  
977  
978  
979  
980  
981  
982  
983  
984  
985  
986  
987  
988  
989  
990  
991  
992  
993  
994  
995  
996  
997  
998  
999  
1000



IX. Környezeti kémia és környezettechnológia alszekció

<b>Jávorszky Eszter</b>	<i>ELTE 2</i>	
<i>Poliaromás szénhidrogének meghatározása ipari szennyvizekből</i>		189
<b>Takáts Zoltán</b>	<i>ELTE 20</i>	
<i>Klórozott benzolszármazékok vizsgálata talaj- és talajvízmintákban</i>		190
<b>Román Rénáta, Somló Edina</b>	<i>ME 1</i>	
<i>Miskolc levegőtisztasági helyzete</i>		191
<b>Buchert Eszter, Kóczán Katalin</b>	<i>JPTE 1</i>	
<i>A Dráva nem védett holtágainak vízminőségi állapot felvétele</i>		192
<b>Nényei Árpád</b>	<i>VE 8</i>	
<i>A légköri szennyeződés terjedésének szimulációja állandó és változó viszonyok mellett, környezeti sugarterhelés becslése</i>		193
<b>Csász Katalin</b>	<i>VE 2</i>	
<i>Környezetbarát flokkulálószer alkalmazása ivóvíztisztításban</i>		194
<b>Doleschall Fruzsina, Járosi László, Kiss Katalin</b>	<i>BME 3</i>	
<i>Közreműködés atomerőművi szilárd radioaktív hulladék minősítésében</i>		195
<b>Várkonyi Zoltán</b>	<i>VE 15</i>	
<i>A mecseki uránbánya zagytározóinak rekultivációs elemzése</i>		196
<b>Chikán Viktor</b>	<i>JATE 5</i>	
<i>Az allil-alkohol adszorpciójának és reakcióinak vizsgálata Y-fau típusú zeolit katalizátoron</i>		197
<b>Kollár Tibor</b>	<i>JATE 19</i>	
<i>Halogéntartalmú szénhidrogének bomlása Y-zeolitokon</i>		198
<b>Lenkei Tünde, Mikó Éva, Szőnyi Mónika</b>	<i>BME 17</i>	
<i>Környezetkímélő ételmiszeripari technológiák</i>		199
<b>Márki Edit</b>	<i>BME 16</i>	
<i>Regenerálható SO<sub>2</sub>-abszorpció töltött oszlopon</i>		200
<b>Kazinczy Béla</b>	<i>ELTE 5</i>	
<i>A nikkell és a vanádium kémiai formáinak minőségi és mennyiségi analízise olajtüzelésű erőmű környékén vett szállópor mintákban</i>		201
<b>Méhn Dóra</b>	<i>JATE 25</i>	
<i>Nitrogén-oxidok ZSM-5-alapú zeolitikatalizátorokon történő bomlásának vizsgálata</i>		202
<b>Tamási Anikó</b>	<i>JATE 32</i>	
<i>Kétfémes zeolitikatalizátorok (Pt/CuZSM-5 és Pt/CoZSM-5) előállítása és jellemzése</i>		203
<b>Illés Krisztina , Illés Szabolcs</b>	<i>VE 5</i>	
<i>Cianidion fotooxidációja TiO<sub>2</sub> félvezetőkön</i>		204





ELTE 2

POLLIAROMÁS SZÉNHYDROGÉNEK MEGHATÁROZÁSA IPARI SZENNYVIZEKBŐL

Jávorszky Eszter, V. vegyész

Témavezető: dr. Torkos Kornél  
ELTE TTK, Kémiai tanszékcsoport, Általános és Szervetlen Tanszék

*Alumíniumkohók szennyvizének poliaromás szénhidrogén (PAH) tartalmát határoztam meg. Az alumíniumkohóban úgy keletkeznek PAH-ok, hogy az elektródok kötőanyagául kátrányt használnak, melyet azután kiegészítenek. Az égés során keletkezett füstöt vizes mosón vezetnek keresztül. Ezt a vizet és a kohó környékén lévő talajvizet vizsgáltam.*

*A PAH-ok meghatározása több lépésből áll. A mintaelőkészítést és a mérést nemzetközileg is szabványosították. Ellentétben ezen módszerek nagy oldószerigényével, egy olyan újfajta extrakciót végeztem, a szilárd fázisú mikroextrakciót (SPME), melyhez nincs szükség oldószerre, gyors és kevés mintát igényel (10,0 ml).*

*Az USA Environmental Protection Agency (EPA) listáján szereplő 14 PAH-ot mértem. A SPME folyamatának a lényege, hogy egy meghatározott vastagságban (esetemben 30 mm) poli(dimetil-sziloxán)-nal borított kvarcszára (fiberbe) a szerves komponensek feldúsulnak. Mivel a PAH-ok nem illékonyak, ezért immerziós technikát alkalmaztam. Az egyensúly beállta után a fiberen adszorbeált anyagokat a gázkromatográf injektorában termikusan deszorbeálom.*

*A vizsgálandó anyagokra EPA-tól származó individuális standardok álltak a rendelkezésemre. A metanolos törzsoldatelegy és kétszer desztillált víz segítségével a lángionizációs detektor (FID) válaszejét kalibráltam. Az adszorpció szobahőmérsékleten történt.*

*Az öt mintából összesen nyolc PAH-ot tudtam kimutatni, 1-10 mg/l koncentráció tartományban.*

ELTE 20

**KLÓROZOTT BENZOLSZÁRMAZÉKOK VIZSGÁLATA  
TALAJ- ÉS TALAJVÍZMINTÁKBAN**

Takáts Zoltán, IV. vegyész

Témavezető: dr. Torkos Kornél

ELTE TTK, Kémiai Tanszékcsoport, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

A munka célja a Budapesri Vegyiművek által két Baranya megyei helyszínen (Hidas ill. Garé község közelében) okozott, veszélyes hulladéknak minősülő klórbenzol szennyezés felszámolása kapcsán felmerülő analitikai problémák megoldása volt. Ez magába foglalta a megfelelő mintatárolási, illetve -előkészítési, és mérési eljárások kidolgozását is. Az eljárásokkal szemben igen sok követelmény merült fel a pontosságot, idő- és anyagigényt, illetve az alkalmazhatóságot illetően.

Első lépésként gázkromatográfiás analitikai módszert dolgoztam ki a vegyületsoporra. Optimalizáltam a mérés körülményeit a lehető legjobb elválasztás érdekében. A detektálás MS, FID vagy ECD technikával történt.

Második lépésben a szakirodalom és saját ötleteim felhasználásával a mintaelőkészítés optimális módját dolgoztam ki, amellyel a vizsgálandó komponensek vízminta esetén 1, talajminta esetén 10 ppt koncentrációtól kvantitatíve analizálhatók. (A vizsgált minták szennyezőanyag koncentrációja a talajmintákban 100ppb-100ppm, a vízmintákban 1ppt-10ppm tartományban volt.) Vízminták analizésénél L/L extrakciót, immerziós és headspace SPME-t, talajmintáknál EPA 625 szabvány szerinti extrakciót, Soxhlet extrakciót és szilárd fázisra átdolgozott purge&trap extrakciót alkalmaztam.

Ezen eredmények segítségével olyan komplex analitikai eljárásrendszert állítottam össze, amellyel ismeretlen összetételű talaj- és talajvízminta klórozott benzolszármazék (vagy hasonló vegyületsoport) tartalma rutinszerűen és igen nagy pontossággal meghatározható.

*MISKOLC LEVEGŐTISZTASÁGI HELYZETE**Román Renáta, Somló Edina IV. évf kohómérnöki szak**Témavezetők: Dr. Raisz Iván és Dr. Lénárt László  
Miskolci Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék*

*Miskolc levegőtisztasági helyzetéről a meteorológiai tényezők és a sajátos földrajzi elhelyezkedés figyelembevételével próbáltunk képet alkotni. Az utóbbi évek mind élesebben vetik fel a környezetvédelem területén a levegő tisztaságának kérdését. Mivel az elmúlt években Miskolcon az ipar meghatározó szerepet töltött be, így óhatatlanul felmerül a kérdés, hogy a termelői tevékenység hogyan befolyásolta a város levegőjének minőségét.*

*Munkánk célja az volt, hogy Miskolc példáján keresztül összefüggéseket állapítsunk meg a légszennyező anyagok koncentrációja, a meteorológiai paraméterek és néhány üzem területi elhelyezkedése között. Mindezek mellett még figyelembe vettük a közlekedés járműforgalmától függő, valamint a lakosság tüzelési típustól függő légszennyező hatását is.*

*A város területén elhelyezkedő hat monitoring állomás havi adatai alapján vizsgáltuk a levegőben lévő szennyező anyagok koncentrációját. A légszennyező komponensek közül a nitrogén-monoxid, a nitrogén-dioxid, a kén-dioxid és a szén-monoxid koncentrációjával, illetve a portartalommal foglalkoztunk. Ezen, illetve a meteorológiai adatok alapján készítettünk diagramokat, amelyekből magunk vontunk le következtetéseket.*

*A meteorológiai tényezők figyelembevételével megállapítható, hogy például a nitrogén-monoxid koncentrációja a napsütéses órák számával és így a hőmérséklettel, valamint a párányomással fordított arányban áll. Az elmúlt évek eredményeit összevetve a mérési adatokkal úgy tűnik, hogy Miskolc levegőminősége nitrogén-dioxid és kén-dioxid szempontjából javult. Ez azonban az ipari termelés visszaesésével magyarázható és nem a környezetvédelem hatékony tevékenységének következménye.*

*Mivel eddig más, hasonló jellegű felmérés és értékelés nem történt a városra vonatkozóan, így segítségül szolgál a Polgármesteri Hivatal Környezetvédelmi Osztályának munkájában.*

JPTE 1

**A DRÁVA NEM VÉDETT HOLTÁGAINAK VÍZMINŐSÉGI  
ALAPÁLLAPOT FELVÉTELE**

*Buchert Eszter IV. biológia - német, Kóczán Katalin V. biológia*

*Témavezetők: Dr. Majer József, Horváth Győző  
Janus Pannonius Tudományegyetem, Ökológia és Állatföldrajzi tanszék*

*Vizsgálatainkat a Duna-Dráva Nemzeti Park határain kívül eső, de ahhoz közel fekvő, a Dráva folyóval többé-kevésbé kapcsolatban álló holtágakon végeztük.*

*7 holtágban ( Mattyi-tó, Hótedra, Dázsonyi-tó, Majláth-pusztai horgásztó, Zaláta, Vájás, Felsőszentmárton-Mrtvica) mértük a vizek alapállapotára jellemző kémiai összetevőket, úgy mint: vezetőképesség, pH, oldott oxigéntartalom, összkeménység, karbonátkeménység, biológiai oxigénigény, kálium, kalcium, nátrium, magnézium, szulfát, klorid, karbonát, hidrokarbonát-, nitrít-, nitrát-, ammónium-, klorofill-a tartalom.*

*A kapott adatok alapján megszerkesztettük a vizek Maucha-féle csillagdiagrammját, és jellemeztük halobitásuk, szaprobitásuk és trofitásuk alapján.*

*A vizek túlnyomórészt Ca-Mg-hidrogénkarbonát iontípusúak, jellegük a vezetőképességük alapján béta-oligohalobikus és alfa-oligohalobikus között ingadozik. Összsótartalmuk a Dráva folyóénál jóval magasabb. Trofitás szempontjából a Hótedra vize a legjobb állapotú, míg a Mattyi-tóban erős eutrofizáció van folyamatban. Trofitási és szaprobitási értékeket figyelembe véve a Mattyi-tó és a Majláthpusztai-horgásztó a legszennyezettebbek, itt a legnagyobb mértékű a horgásztevékenység és a partmenti degradáció.*

*További vizsgálatokra van szükség annak megállapítására, hogy e szennyeződések alkalmi jellegűek vagy pedig hosszú távon fennállóak.*

*Eredményeink alapján azt a következtetést vontuk le, hogy Duna-Dráva Nemzeti Park területén kívül eső holtágak között is van védelemre érdemes. Az egyes holtágak esetleges későbbi védetté nyilvánítására, ezzel együtt állapotuk javítására benyújtandó javaslat alátámasztására és kidolgozására természetesen további monitoring vizsgálatokra van szükség.*



## VE 2

## KÖRNYEZETBARÁT FLOKKULÁLÓSZER ALKALMAZÁSA IVÓVÍZTISZTÍTÁSBAN

Csösz Katalin, V. évfolyam, Környezetmérnöki szak

Témavezető: dr. Dencs Béláné  
Veszprémi Egyetem, Vegyipari Művelési Tanszék

*A Balaton menti települések ivóvizük egy részét a tó vizének felhasználásával biztosítják. Jelenleg az ivóvíztisztítás derítési lépésében szintetikus flokkulálószereket (segédderítőszereket) alkalmaznak a lebegő anyagok és az algák eltávolítására. Nyár végi algavirágzások idején ezek mennyiségét növelni kell a megfelelő tisztítás érdekében; ez viszont megnöveli a tisztított vízben maradó vegyszer mennyiségét, ami egészségügyileg kifogásolható. A Veszprémi Egyetem Vegyipari Művelési Tanszékén egy kutatócsoport foglalkozik természetes alapú flokkulálószerek kifejlesztésével. Ezek a keményítő alapú flokkulálószerek kiküszöbölhetnék ezt a problémát; így lehetőség nyílna az eddig használt vegyszerek helyettesítésére.*

*A tanszék munkatársai laboratóriumi kísérletekben vizsgálták az általuk kifejlesztett GREENFLOC 213 anionos flokkulálószerszert ülepítési tulajdonságait, majd üzemi kísérletet kezdeményeztek a DRV balatonfüredi telepén. Ebbe a munkába kapcsolódtam be én is. A kísérletre októberben került sor, ekkor az eddig használt poliakrilamid származékot az új szerrel helyettesítették. A kísérlet során az üzemben előírt üzemeltetési paraméterek mérésén túl 2 óránként mértük a derített víz zavarosságát, naponta a nyersvíz zavarosságát, a nyers- és a derített víz algakoncentrációját, KOI-ját és a derített víz maradék alumínium tartalmát.*

*A mérési eredményeket összehasonlítottuk az üzemi kísérletet megelőző hónap eredményeivel. Megállapítottuk, hogy a flokkulálószerszer képes volt a korábban használt segédderítőszer helyettesítésére, és pozitív eredményeket kaptunk az algaeltávolítást illetően is, a keményítő alapú szer ezen a területen hatékonyabbnak bizonyult.*

*A kísérlet bebizonyította, hogy a GREENFLOC 213 alkalmas lehet a segédderítőszer kiváltására, azonban további kísérletekre volna szükség, hogy más üzemi körülmények között is bizonyítható legyen a jó tisztítási hatásfok.*

**KÖZREMŰKÖDÉS ATOMERŐMŰVI SZILÁRD RADIOAKTÍV  
HULLADÉK MINŐSÍTÉSÉBEN**

*Doleschall Fruzsina, Járosi László, Kiss Katalin, IV. évf.*

*Témavezetők: Dr. Gresits Iván, Dr. Ormai Péter  
BME, Fizikai Kémia Tanszék, Paksi Atomerőmű Rt.*

*Munkánk egy azóta már bevezetett ipari eljárás részletes kutatási eredménye.*

*Dolgozatunk témája napjaink egyik igen égető kérdése, a nukleáris ipar és kutatások által termelt hulladékok elhelyezése. Mi a paksi atomerőműben keletkezett kis- és közepes aktivitású hulladékok minősítésével kapcsolatban végeztünk vizsgálatokat, méréseket gamma-spektroszkópiás módszerrel.*

*A radioaktív hulladékok mérésekor információkat tudunk szerezni egy radioaktív hulladékkal teli hordó belsejéről, azaz arról, hogy milyen és mekkora aktivitású izotópok vannak benne. Ezáltal a megfelelő hulladék elhelyezés kellő biztonsággal megtervezhető, és végre is hajtható a későbbiekben.*

*A Paksi Atomerőmű RT. egy új magas színvonalú, csúcstechnikát képviselő hordóminősítő berendezést vásárolt ennek megvalósítása érdekében, melyhez hasonló berendezés a világ csak néhány atomerőművében üzemelt eddig. Ezzel a rendszerrel mértünk általunk összeállított modell hordókat, tanulmányozva így az új mérés technika előnyeit és hiba határait.*

*Vizsgálatainkkal, méréseinkkel adatokat szolgáltatottunk az erőműnek, de emellett megismerhettük és elsajátíthattuk egy az ipari csúcstechnikát képviselő mérőberendezés működtetését és működési elvét.*



## VE 15

## A MECSEKI URÁNBÁNYA ZAGYTÁROZÓINAK REKULTIVÁCIÓS ELEMZÉSE

Várkonyi Zoltán, V. évfolyam, környezetmérnök szak

Témavezető: Dr. Kanyár Béla tanszékvezető egyetemi tanár,  
Veszprémi Egyetem, Radiokémia Tanszék

*A Mecseki Ércbányászati Vállalat (MÉV) uránbányászati tevékenységének a kormányhatározat szerint 1997-ben várható megszűnése következtében szükségessé válik az ércbányászattal és -feldolgozással kapcsolatos területek rekultivációja. A MÉV 1992 óta végzi a meddőhányók környezettől történő elszigetelését, a jelenleg is folyó ércátermelés miatt azonban a potenciálisan lényegesen nagyobb lakossági sugárterhelést okozó zagytározók rekultiválása még nem kezdődött el. Ez tehát ma egy olyan radioaktív környezeti szennyeződés, amely felszámolásáról végleges döntés még nem született, ezért nem érdektelen megvizsgálni a lehetséges alternatívákat.*

*A megfelelő rekultivációs eljárásnak megfelelően csökkentenie kell a sugárzási szinteket, meg kell akadályoznia a felszín alatti vizek elszennyeződését, emellett biztosítania kell az élőhelyek visszaállítását, a tájbaillesztést. A tudományos kutatómunka során az egyes fedési alternatívák esetén kialakuló lakossági sugárterhelést számítógépes szimulációs program segítségével a kivitelezést követő ezer évben modelleztük. A fedőréteg vastagságának meghatározásakor figyelembe vettük, hogy a MÉV területén nagy mennyiségben áll rendelkezésre rekultiválatlan meddőérc, amelynek alsó fedőréteggént történő felhasználása csökkenti a rekultiváció költségeit.*

*Az elemzés kimutatta, hogy a fedőréteg legalább 1 m vastag kell, hogy legyen, amelyben a meddőérc tartalom nem haladhatja meg a 10%-ot. A fizikai fedést követő növényesítéshez erdei fenyővel, mezei juharral elegyes fekete fenyő állomány telepítését találtuk optimálisnak.*

*Az elvégzett költség-haszon elemzés alapján megállapítottuk, hogy az ICRP sugárterhelés miatt bekövetkező egészségkárosodásból származó költségre vonatkozó ajánlását alapul véve a befektetés megtérülése mintegy 130 éven belül várható. Az elvégzett elemzés várhatóan felhasználásra kerül a MÉV rekultivációra vonatkozó végleges döntésének meghozatalakor.*

JATE 5

**AZ ALLIL-ALKOHOL ADSZORPCIÓJÁNAK ÉS REAKCIÓINAK VIZSGÁLATA  
Y-FAU TIPUSÚ ZEOLIT KATALIZÁTORON**

*Chikán Viktor IV. éves vegyészhallgató*

*Témavezetők: Dr. Kiricsi Imre egyetemi tanár, Dr. Halász János docens  
József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék*

*Az allil-alkohol Y-típusú (elsősorban HY) zeoliton végbemenő reakcióit már többben tanulmányozták, de eddig nem történt infravörös-spektroszkópiás adszorpciós és katalitikus komplex vizsgálat. Ezen hiátus pótlására vizsgáltuk ezt a reakciót HY, NaY és KOH-dal impregnált Y zeoliton impulzusreaktorban, továbbá adszorpcióját tanulmányoztuk infravörös-spektroszkópiás módszerrel.*

*Az infravörös-spektroszkópiás mérésekből kiderült, hogy a felületen adszorbeált allil-alkohol mennyisége az idő függvényében csökken, tehát HY-FAU zeoliton reakcióba lép, melynek felületén 200 és 300 °C-on 1-propanolt vagy izopropanolt valószínűsítettünk átmeneti terméként.*

*Az impulzusreaktorban végzett katalitikus mérések alapján megállapítható, hogy a HY és NaY hasonló termékeloszlást ad. Ez annak tulajdonítható, hogy mind a két különböző ionokat tartalmazó mintában találhatóak Brønsted- és Lewis-savcentrumok eltérő arányban ugyan, de a reakció kezdeti stádiumában ezek hatása érvényesül. A mérésekből kiderült, hogy az első néhány impulzus főleg propént eredményez. Ezekben a katalizátorokon acetone és benzol is keletkezik, melyek szelektivitása a reakció során maximum görbe (3-7 impulzus körül) szerint változik. Bázikus jellegű katalizátoron ezek a reakciók nem játszódnak le. Nagy impulzusszámoknál az oxigéntartalmú vegyületek mennyisége (1-propanol, izopropanol és akrolein) megnőtt. HY-FAU zeoliton az impulzussorozat vége felé az izopropanol vált szignifikánssá, míg NaY-FAU zeoliton az akrolein. Az akrolein képződése nem a Brønsted savcentrumokhoz rendelhető, ami a NaY és HY szelektivitási különbségből látható. Véleményünk szerint a propén képződése a felületi Brønsted sav centrumokhoz rendelhető mégpedig úgy, hogy allil-kationon keresztül felületi oligomerek képződnek és ezek bomlása propénképződést eredményez.*

## JATE 19

## HALOGÉNTARTALMÚ SZÉNHYDROGÉNEK BOMLÁSA Y-ZEOLITOKON

Kollár Tibor, IV. éves vegyész hallgató

Témavezetők: Dr. Kiricsi Imre egyetemi tanár, Kónya Zoltán PhD hallgató  
József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

*A Montreali egyezmény szerint 1996 január 1-től tilos minden olyan anyag gyártása és felhasználása, amely károsítja a Földet körülvevő ózompajzsot. Így egyre inkább előtérbe kerül a meglévő és az 1995-ben még legyártott, de fel nem használt freonok megsemmisítésének problémája. Néhány, a megsemmisítésre kidolgozott technológiai megoldás már ismert. Ezek közül az elégetés vagy heterogén katalitikus bontás látszik a legegyszerűbben kivitelezhetőnek (a katalizátor nélküli elégetés hatalmas energia szükséglete miatt azonban a heterogén katalitikus eljárás kidolgozása feltétlenül szükséges).*

*A zeolitkatalizátorok freonok bontásában megfelelő aktivitással rendelkeznek, azonban élettartamuk nem kielégítő. Ezt a kedvezőtlen tulajdonságot különböző ionoknak a zeolit ioncserepozícióiba történő becserélésével lehet javítani. Vizsgálataink célja az volt, hogy megismerjük a zeolitok sav-bázis tulajdonságának hatását a freonok bontási reakcióira és ezáltal közelebb kerüljünk ezen katalizátortípus gyors dezaktiválódásának megértéséhez.*

*Munkánk során  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ,  $\text{CHClF}_2$  ill.  $\text{CF}_4$  gázok adszorpcióját vizsgáltuk NaY illetve az ebből ioncserevel előállított CuY, CrY és HY zeolitokon infravörös-spektroszkópiás módszerrel. A savasság döntő volta egyértelműen bebizonyosodott, de jelentős különbségek mutatkoztak a különböző átmenetifémiont tartalmazó zeolitok aktivitásában is.*

## KÖRNYEZETKIMÉLŐ ÉLELMISZERIPARI TECHNOLÓGIÁK

*Lenkei Tünde, Mikó Éva, V.évf., Szónyi Mónika, IV.évf.*

*Témavezető: Nagy József*

*Budapesti Műszaki Egyetem, Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék*

*A dolgozat környezet kimélő élelmiszeripari technológiákkal, ezen belül a tej- és húsi-pari hulladékok melléktermékek- mint környezetszennyezők- hasznosításának lehetőségeivel foglalkozik. A tejipar és húsipar környezetvédelemmel kapcsolatos kérdései két szakterület szerint vizsgálhatók:*

*1. Víz és szennyvízgazdálkodás: A húsipar az egész élelmiszeripar területén belül a legjelentősebb vízszennyező. A legnagyobb gondot a húsipari szennyvizek lebegőanyag-tartalma, a zsirtartalom és az ammóniatartalom jelenti. A tejipar is igen jelentős vízszennyező iparágnak tekinthető a tejipari szennyvizek gyors rothadóképessége, kitűnő baktérium tápoldat jellege miatt.*

*a.) Szennyvizek csökkentésének lehetőségei: mezőgazdasági célú hasznosítás (előntözés), előtisztító rendszer építése*

*b.) Szennyvíziszap hasznosíthatósága: komposztálás, injektálás, égetés.*

*2. Hulladékgazdálkodás és melléktermék feldolgozás: A tejiparban az író a vajgyártás mellékterméke, amely 1t vajra számítva kb. 1200 l, a tejszín mennyiségének 50-60%-a. A savó a sajt- és a túrógyártás mellékterméke, a feldolgozott tej 70-90%-át adja.*

*A sovány tej nem tekinthető teljes mértékben mellékterméknek, mivel a tej valamennyi alkotórészét tartalmazza, ezért feldolgozása elengedhetetlen. Tejipari mellék-termékeket a jelentős fehérje, zsír, tejcukor és ásványi anyag tartalom figyelembe vételével takarmányozásra: író, savópor, soványtej, emberi fogyasztásra: savóittal, tejfehérje-koncentrátum, sajt, túró, ipari célra: tejcukor, kazeingyártás használhatjuk.*

*A húsipari hulladékok, melléktermékek közül legjelentősebbek: vér, szőr, bőr, szaruképletek, csont, gyomor, belsőségek, bél. Nagy fehérjetartalmuk következtében szinte valamennyi húsipari hulladék, melléktermék felhasználható takarmányozási célra. Emellett hasznosítható a csont zselatin, vagy enyv-előállítására, a bél ragasztott bél előállítására, valamint a gyomor és belsőségek ipari kenőmájás készítmények előállítására és gyógyszeralapanyagként is.*

REGENERÁLHATÓ  $\text{SO}_2$ -ABSZORPCIÓ TÖLTÖTT OSZLOPON

Márki Edit, okl. vegyészmérnök

Témavezető: Békássy dr. Molnár Erika, Bágyi István  
KEÉ, Élelmiszeripari Műveletek és Gépek Tanszék  
BME, Vegyipari műveletek Tanszék

A kén-dioxid kinyerésére napjainkban alkalmazott nagyipari eljárások az olcsó reagenst felhasználó, nem regenerálható abszorpciós eljárásokat alkalmazzák. Ezek hátránya, hogy a reakció során keletkezett termékeknek csak kis részét tudja az ipar feldolgozni, nagyobb részét deponálni kell. Az abszorpció jelentősége a gáztisztítás és a szigorodó környezetvédelmi előírások miatt nő. Az általam alkalmazott regenerálható abszorpciós eljárás lényege, hogy a reagens az abszorpció után újra felhasználható, mert a regenerálás során a kén-dioxid nagy töménységben kihajtható az oldatból. Munkám célja:

- A Raschig-gyűrűvel töltött oszlop hidrodinamikai tulajdonságainak vizsgálata és a hőmérséklet hatásának mérése levegő/nátrium-citrát pufferoldattal.
- Műveleti paraméterek, valamint a nátrium-citrát pufferoldat-összetétel hatásának tanulmányozása a hidrodinamikára és a kén-dioxid abszorpcióra.
- Megmértem a töltött oszlop hidrodinamikáját (nyomáscsökkenését és folyadék hold up-ját) a folyadék és a gázterhelés széles tartományában nátrium-citrát pufferrel és vízzel. Az eredményeket matematikai modellben foglaltam meg.
- A folyadék és a gáz bemenő hőmérsékletének változtatásával mértem az abszorpció szempontjából lényeges hőmérsékleti viszonyokat, azaz a folyadék és a gáz hűlését az oszlopban, valamint a kolonna hőmérsékletprofilját. Korrelációkat dolgoztam ki a folyadék és levegő hűlésének, illetve az oszlophőmérséklet műveleti paraméterektől való függésének számítására.
- Levegő- $\text{SO}_2$  gáz keverékével és nátrium-citrát pufferrel különböző műveleti paraméterek mellett mértem a töltött abszorber határfokát. Változtattam a gáz és a folyadék áramát, az oszlophőmérsékletet, a gáz és a folyadék összetételét. A  $\text{SO}_2$  kinyerési határfokát a fenti paraméterek függvényében matematikai modellben foglaltam meg, melyben a mérés során változtatott paraméterek szerepelnek.
- Előkísérleteket végeztem a pufferoldat regenerálására.

**A NIKKEL ÉS A VANÁDIUM KÉMIAI FORMÁINAK MINŐSÉGI ÉS MENNYISÉGI ANALÍZISE  
OLAJTÜZELÉSŰ ERŐMŰ KÖRNYÉKÉN VETT SZÁLLÓPOR MINTÁKBAN**

*Kazinczy Béla VI. (V.) évf. vegyész*

*Témavezető: Dr. Zárny Gyula tanszékvezető egyetemi tanár  
ELTE Természettudományi Kar Kémiai Technológiai és Környezetkémiai Tanszék*

*Diákéletem munkám során a százhalombattai Dunamenti Erőmű Rt. működése során keletkező és az Állami Népegészségügyi és Tisztiorvosi Szolgálat (ÁNTSZ) által Százhalombattán vett környezetszennyező porok teljes toxikus-elem-analízisét és a bennük nagy mennyiségben előforduló nehézfémek — a nikkel és a vanádium — minőségi és mennyiségi jellemzését végeztem el.*

*A szállóport a KS 302-es típusú kaszkád impaktoros mintavevő készülékkel gyűjtötték össze, mely a 0,2 µm-esről a 16 µm-esig terjedő aerodinamikai átmérő tartományban, nyolc fokozatban tette lehetővé a szemcsék szétválasztását.*

*Az analitikai vizsgálatokat induktív csatolású plazmasugárforrással ellátott optikai emissziós spektrométerrel végeztem. A kémiai forma meghatározását, azaz a speciestek beazonosítását röntgen diffrakciós vizsgálatokkal valósítottam meg.*

*Küldülő anyagként az erőmű kéménye előtt elhelyezett elektrostatikus porleválasztóból származó pormintát vizsgáltam, amely nagy tömegben állt rendelkezésre. A vanádium és a nikkel koncentrációja ebben az anyagban 4,7 illetve 1,2 tömeg% (szénfémre számítva). Kémiai formájukat tekintve a fő vanádium komponens a vízoldható vanadilsulfát, míg a nikkel elsősorban nikfelsulfátként van jelen.*

*A szállóporok vizsgálatához a fentiek figyelembe vételével szelektív kioldási eljárást dolgoztam ki. Ennek során a szűrőtön és az impaktor teflon tárcsáin felfogott anyagot desztillált vízzel, 0,2 M-os ammónium-acetáttal illetve 0,2 M-os ammónium-oxaláttal, 0,2 M-os komplexonnal, 2 M-os sósavval, 1:1 hígítású salétromsavval és királyvízzel kezeltem. Megállapítottam, hogy a szállópor mintákban a vanádium kimutatható mennyiségben csak a 0,01-0,15 µm-es szemcseméretű frakcióban van jelen, mégpedig vízoldható formában (feltehetőleg vanadilsulfátként). A belégzés szempontjából a vanádium szennyezés a kritikus mérettartományba esik. A nikkel a 0,16-0,3 µm-es szemcseméret-tartományban nikfelsulfátként, míg a legfinomabb frakcióban vízoldható nikfelsulfátként van jelen.*

*Megnyugtató eredményként megállapíthatom, hogy a "teljes" nikkel és vanádium koncentráció a vizsgált időszakban nem haladta meg a jelenleg szabványban rögzített egészségügyi határértéket. Mivel ezek a határértékek az egyes nehézfémek teljes mennyiségére vonatkoznak és nem pedig azok egyes kémiai formáira vannak kiszámítva, ezért fontos volna, hogy — az eltérő toxikus hatások miatt — a közeli jövőben ezeket az európai és magyar normákat majd az elemek egyes kémiai formáinak mennyiségére állapítsák meg. Ez a vizsgálat is ezen távlati célok elérését szolgálja.*

JATE 25

**NITROGÉN-OXIDOK ZSM-5 ALAPÚ ZEOLITKATALIZÁTOROKON  
TÖRTÉNŐ BOMLÁSÁNAK VIZSGÁLATA***Méhn Dóra, V. éves biológia-kémia szakos hallgató**Témavezetők: Dr. Halász János docens, Dr. Schöbel György adjunktus  
József Attila Tudományegyetem, Szeged, Alkalmazott Kémiai Tanszék*

*A nitrogén egyes oxidjai - elsősorban a NO és a NO<sub>2</sub> - a sok más, emberi tevékenység révén keletkező környezetszennyező anyag közé sorolhatók. A főként az energiatermelés során kibocsátott égéstermékekben megjelenő, de a belsőégésű motorok kipufogógázában is fellelhető nitrogén-oxidok átalakítása, s az erre alkalmas katalizátorok kifejlesztése fontos környezetvédelmi feladat.*

*Az egyszerű oxidációs, majd nemesfém tartalmú katalizátorok után a figyelem a nitrogén-oxidok oxidatív atmoszférában történő redukciója felé fordult, melyre az ioncserélt zeolit katalizátorok alkalmazása nyújthat lehetőséget. Ezek közül leghatásosabbnak a réz-ioncserélt ZSM-5 katalizátor bizonyult.*

*Munkánk során a nitrogén-oxidok réz-ioncserélt ZSM-5 katalizátoron történő bomlását tanulmányoztuk sztatikus cirkulációs reaktorban, tömegspektrometriás analízissel. A hagyományos, folyadékfázisú ioncserével készített, megközelítőleg 5% réztartalmú katalizátor mellett H-ZSM-5 zeolit szilárd fázisú ioncseréjével előállított katalizátorokat vizsgáltunk.*

*A derivatográfias, röntgendiffraktometriás és infravörös-spektroszkópiás vizsgálatok bizonyítják, hogy az ioncsere során a katalizátor megtartja az eredeti ZSM-5 struktúráját.*

*Katalitikus vizsgálataink igazolták, hogy a szilárd fázisú ioncserével készített minta képes a N<sub>2</sub>O bontására gázállapotú oxigén keletkezése mellett, továbbá redukált formájában a NO és NO<sub>2</sub> bomlása is lejátszódik.*

*Megállapítottuk, hogy a NO bomlási reakciójában alacsonyabb hőmérsékleten a folyadék fázisban ioncserélt, magasabb hőmérsékleten viszont a szilárd fázisú ioncserével nyert zeolit aktívabb.*

JATE 32

**KÉTFÉMES ZEOLITKATALIZÁTOROK (Pt/CuZSM-5 és Pt/CoZSM-5) ELŐÁLLÍTÁSA ÉS  
JELLEMZÉSE**

Tamási Anikó V. éves vegyészhallgató

Témavezető: dr. Halász János docens, dr. Kiricsi Imre egyetemi tanár  
József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék, Szeged

*A gépjárművek kipufogó gázai, erdőművi füstgázok és a salétromsav üzemi véggázok nagy mennyiségben tartalmaznak környezetre káros nitrogén-oxidokat, melyeknek katalitikus átalakítása szempontjából - az eddig meglévő eredmények alapján - a különböző hordozóra vitt Pt illetve a CuZSM-5 és a CoZSM-5 katalizátorok alkalmasnak mutatkoznak. Célunk egyesített kétfémes katalizátorok, Pt/CuZSM-5 és Pt/CoZSM-5 előllítása, fizikai kémiai jellemzése, a későbbiekben pedig a katalizátorok aktivitásának vizsgálata a NO<sub>x</sub> reakciókban (bontás, redukció oxidatív közegben).*

*A CoZSM-5 és CuZSM-5 katalizátorokat NaZSM-5-ből kiindulva vizes fázisú ioncserével állítottuk elő. Az ioncsere fok meghatározása után a katalizátorokra 1:1 mól arányban számított mennyiségű [Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]Cl<sub>2</sub> komplexet impregnáltunk. A Pt-komplex redukálását két féle módszerrel végeztük, oldatfázisban NaBH<sub>4</sub>-es reakcióval, illetve gázfázisban H<sub>2</sub> áramban történő redukcióval. Az eljárás minden lépésében képződött zeolit mintákat fizikai kémiai vizsgálatokkal karakterizáltuk.*

*A derivatográfias, röntgendiffraktometriai és infravörös-spektroszkópiai vizsgálatok bizonyítják, hogy a katalizátorok megtartják eredeti ZSM-5 struktúrájukat, és az átmenetifém-ionok az ioncsere pozíciókat foglalják el.*

*A különböző eljárással készített katalizátorokon a Pt diszperzitás fokát a BET felület mérésével jellemezzük. (A Scanning Elektron Mikroszkópos vizsgálatok jelenleg folynak.)*

*A katalizátorok savasságának meghatározását teszt-reakció segítségével végezzük, az n-butének kettős kötés izomerizációját vizsgálva.*

*Az előállított kétfémes katalizátorok az eddig elvégzett vizsgálatok alapján bizonyíthatóan kétfémes jellegűek, és megfelelő savassággal rendelkeznek ahhoz, hogy esetlegesen alkamasak legyenek az NO<sub>x</sub> átalakítására szolgáló eljárások katalizátoraként.*



**CIANIDION FOTOOXIDÁCIÓJA  $\text{TiO}_2$  FÉLVEZETŐN**

*Illés Krisztina és Illés Szabolcs V. évf. Vegyészmérnök hallgatók*

*Témavezető: Dr. Horváth Attila egyetemi tanár  
Veszprémi Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Tanszék*

*A félvezető fém-oxidok fotokatalitikus hatását két-három évtizede ismerik. A  $\text{TiO}_2$  anatóz módosulatát rendkívül hatékonyak találták a CN ionok fotodegradációjára. Korábban azt észlelték, hogy a CN ion oxidációját követő hidrolízis eredményeként  $\text{CO}_2$  és  $\text{NH}_3$  képződik. Néhány évvel ezelőti Hendrix és munkatársai mutattak rá, hogy az oxidáció nitrácionon keresztül egészen nitrátonig mehet a fotolízis körülményeitől függően.*

*Kísérleteink célja a fotokatalitikus cianid oxidáció optimalizálása és a reakció mechanizmusának megismerése.*

*A kísérleteket egy  $3 \text{ dm}^3$  hasznos térfogatú belső cirkulációs fotoreaktorral végeztük. Ferrioxalát aktinométerrel meghatároztuk a reaktor térfogategységébe időegység alatt belépő fény mennyiségét. Ezt követően vizsgáltuk a pH, a gázösszetétel és a katalizátor mennyiségének hatását, és elvégeztük a lehetséges köztermékek fotolízisét. A kísérleti eredmények alapján javaslatokat teszünk a reakció mechanizmusára és az optimális paraméterek beállítására.*

*X. KÉMIAI SZAKMÓDSZERTAN ALSZEKCIÓ*

1  
2  
3  
4  
5  
6  
7  
8  
9  
10  
11  
12  
13  
14  
15  
16  
17  
18  
19  
20  
21  
22  
23  
24  
25  
26  
27  
28  
29  
30  
31  
32  
33  
34  
35  
36  
37  
38  
39  
40  
41  
42  
43  
44  
45  
46  
47  
48  
49  
50  
51  
52  
53  
54  
55  
56  
57  
58  
59  
60  
61  
62  
63  
64  
65  
66  
67  
68  
69  
70  
71  
72  
73  
74  
75  
76  
77  
78  
79  
80  
81  
82  
83  
84  
85  
86  
87  
88  
89  
90  
91  
92  
93  
94  
95  
96  
97  
98  
99  
100



X. Kémiai szakmódszertan alszekció

<b>Szubi Erika</b>	<i>BGYTF 1</i>	
<i>Számítógépes oktatóprogram készítése (szénvegyületek)</i> .....		209
<b>Tóth Antal Attila</b>	<i>BGYTF 2</i>	
<i>Számítógépes oktatóprogram készítése és alkalmazhatóságának vizsgálata</i> .....		210
<b>Szabados Zsuzsa</b>	<i>JPTE 8</i>	
<i>A környezeti hatások szemléltetése. Kísérletgyűjtemény</i> .....		211
<b>Michielutti Anita, Schmidt Róbert</b>	<i>JPTE 2</i>	
<i>Környezetbarát szemlélet alakítása a kémia eszközeivel a 13-14 éves tanulóknban</i> .....		212



*BGYTF 1*

**SZÁMÍTÓGÉPES OKTATÓPROGRAM KÉSZÍTÉSE (SZÉNVEGYÜLETEK)**

*Szuhi Erika IV. évf. biológia-kémia tanár*

*Témavezető: Sarka Lajos  
Bessenyei György Tanárképző Főiskola Kémia Tanszék*

*Mint biológia-kémia szakos hallgatótól kissé távol áll tőlem a matematika és a számítástechnika, de egy számítástechnika speciálkollégium keretében megismerkedve néhány alapvető programozási ismerettel úgy döntöttem, hogy TDK munka keretében oktatóprogramot készítek és vizsgálom az alkalmazhatóságának lehetőségeit. Az IBM PC gépekre készült programok között alig találtam olyat, melyet szívesen alkalmaznék a tanítási órán, s ez megerősítette elhatározásomat.*

*Választott témám a Szénvegyületek.*

*Munkám célja az volt, hogy a szakirodalomból összegyűjtött bőséges ismeretanyag rendszerezése után kiválasztva egy anyagrészt, azt feldolgozzam oktatóprogram keretében, majd vizsgáljam ennek alkalmazhatóságát az órákon.*

*A szénvegyületek témakörön belül a szénhidrogéneket választottam és dolgoztam ki részletesen, mert ezek azok az alapvegyületek, melyekből a többi levezethető. Ezek biztonságos ismerete jó alapot nyújt a tanulóknak a vegyületcsoport egészének elsajátításához, s ezek ismerete hozzátartozik az alpműveltséghez.*

*Dolgozatomban ismertetem a szakirodalmi kutatásaim eredményét, majd bemutatom az elkészített programot, és javaslatot teszek annak alkalmazására.*

*Véleményem szerint a számítógép nagy segítségére lehet a tanároknak és a tanulóknak a kémia tanítása/tanulása során.*

## BGYTF 2

SZÁMÍTÓGÉPES OKTATÓPROGRAM KÉSZÍTÉSE ÉS ALKALMAZHATÓSÁGÁNAK  
VIZSGÁLATA

Tóth Antal Attila okl. biológia-kémia tanár

Témavezető: Sarka Lajos  
Bessenyei György Tanárképző Főiskola Kémia Tanszék

*A tanulás és tanítás folyamán felhasznált eszközök között mindig megjelentek az adott kor technikai szintjét tükröző 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. Kutatásaim során sajnos nagyon kevés oktatóprogrammal találkoztam, melyet alkalmazni lehetne a kémia tanításában. Ezért döntöttem úgy, hogy TDK dolgozatom témájaként oktatóprogram készítését választom, s különböző módszerekkel vizsgálom a számítógép kémia órai alkalmazhatóságának lehetőségeit és eredményességét. Programom témája a nyersvas- és acélgéártás. Célja, hogy megkönnyítse ennek az anyagnak a tanítását és elsajátítását. A program bemutatja:*

- a nyersvasgéártást,
- a főbb acélgéártási eljárásokat (Siemens -Martín, Bessemer - Thomas, Linz - Donawitz),
- az anyaggal kapcsolatos fontosabb fogalmakat,
- a vassal kapcsolatos néhány érdekességet.

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

*Előnye, hogy*

- a lényegyet kiemelve, rendszerezve mutatja be a nyersvas- és acélgéártást;
- 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.

*A program kipróbálására már három alkalommal is sor került. A tapasztalatokat, vizsgálataim eredményeit bemutatom és elemzem a dolgozatban, s mellékletként három óravázlatot is közlök a tanórai alkalmazás lehetőségeire.*

*A programmal és a felhasználási lehetőségeket bemutató segédanyagokkal mintát kívánok adni a kollégáknak a számítógép kémia órán történő alkalmazására.*

A KÖRNYEZETI HATÁSOK SZEMLÉLTETÉSE  
KÍSÉRLETGYŰJTEMÉNY

Szabados Zsuzsa IV. éves kémia szakos főiskolai hallgató

Témavezető: Dr. Erdősi Ferencné e. adjunktus  
Janus Pannonius Tudományegyetem Analitika és Szerkezeti Kémia Tanszék

*A környezetvédelem, a környezetkultúrára nevelés fontos, globális probléma. Az is nyilvánvaló, hogy a természettudományos tárgyakhoz áll a legközelebb, de nincs olyan területe az oktatásnak, ahová ne lehetne beépíteni. Erőltetett dolgokkal nem érhetünk célt, de nyitott szemmel járva sok - sok ötletet találhatunk, amivel színesebbé tehetjük a tananyagot, másrészt mélyíthetjük a globális gondolkodást.*

*Talán nincs már messze az az idő, amikor egy szakköri foglalkozáson találkozhatnak a gyerekek a matematika, a kémia, a biológia, a történelem, a nyelv, stb. közös ismereteivel. Hiszem, hogy a környezeti és az egészséges életmódra neveléssel már fiatal korban olyan probléma-érzékenységet alakíthatunk ki tanulóinkban, ami elegendő motivációt nyújt későbbi életükre. Am eközben soha ne felejtjük el, hogy a természettudományok alapja mindig is a kísérlet volt. A kémia oktatása kötelezővé teszi a kísérletek végzését és végeztetését. Használjuk ki ezt a lehetőséget és ne sajnáljuk az időt az előkészítésre.*

*Dolgozatomban - a teljesség igénye nélkül - néhány olyan, a környezeti nevelés vagy az egészségnevelés témakörébe tartozó kísérletet gyűjtöttem össze, ami biológia és kémia szakköri foglalkozásokon egyaránt felhasználható és jól kiegészítik a tananyag során elsajátítható elméleti ismereteket. Elsősorban a gyakorlati kivitelezhetőségre fordítottam a nagyobb figyelmet. Ha bemutatjuk vagy elvégeztetjük ezeket a kísérleteket, mindig fektessünk nagy hangsúlyt arra, hogy a tapasztalatok megbeszélésekor ne tegyünk különbséget biológiai vagy kémiai probléma között. Tekintsük összetett problémaként a feladatra adandó válaszokat és a gyerekektől is ezt várjuk el.*

*Am igen fontos, hogy ne a kémia ellen legyünk környezetvédők, hanem emeljük ki, hogy milyen nagy szükség van a kémiára, de átgondoltan, nem ész nélkül kell mindenit kemizálni. Minden általános- és középiskolás halljon a veszélyekről, de kutassuk a megoldás útját. Legyen igényük tanulóinknak saját testük karbantartására is, hiszen egy szennyezett világban még jobban oda kell figyelnünk, hogy mi kerül a "kémia konyhájába".*



JPTE 2

**KÖRNYEZETBARÁT SZEMLÉLET ALAKÍTÁSA  
A KÉMIA ESZKÖZEIVEL A 13-14 ÉVES TANULÓKBAN**

*Michielutti Anita és Schmidt Róbert, III. évfolyam, matematika-kémia szak*

*Témavezetők: Dr. Erdősi Ferencné<sup>1</sup>, egyetemi adjunktus*

*Dr. Halblender Anna<sup>2</sup>, szakvezető tanár*

*<sup>1</sup>JPTE, Analitikai és Szerkezeti Kémia Tanszék*

*<sup>2</sup>JPTE II.számú Gyakorló Általános Iskola*

*Célunk az, hogy egy programot állítsunk össze a 13-14 éves korosztály számára, mellyel helyes irányba tereljük gondolkodásukat, illetve hozzáállásukat a környezetükhöz. Szeretnénk egy teljes egységet elkészíteni, amelyet jól lehet használni, mind szakköri órákon, mind pedig az iskolai órákon. Lehetőségeink azonban korlátozottak, a téma terjedelme rendkívül nagy, vonatkozásai igen szerteágazók, ezért csak néhány "foltra" szeretnénk rávilágítani, ezzel is szorgalmazva azt, hogy akadnak néhányan, akik bekapcsolódnának a munkába. A dolgozatunkban részletesebben foglalkoznánk a levegő szennyezettségét befolyásoló tényezőkkel, melyet statisztikai adatok gyűjtése és értelmezése során mutatnánk be. Különös tekintettel az üvegházhatásra, a SO<sub>2</sub>-, NO<sub>2</sub>- és a NO-szennyezésre. Ennek kapcsán elengedhetetlenül meg kell említenünk a savas esők keletkezését, és a környezetre gyakorolt hatását.*

*A levegőszennyezés után a talaj állapotáról is szeretnénk szót ejteni. Itt részletesen kitérnénk az ólomszennyezésre és annak kimutatására, radioaktív hulladékok bekerülésére a talajba, valamint a talajszennyezők növényekben való megjelenésére pl. primőrök vizsgálata (NO<sub>3</sub>-tartalom). Ennek kapcsán feltétlenül szólni kell a hulladékok kezeléséről és hasznosításáról, valamint a szelektív hulladékgyűjtésről.*

*A harmadik egységet képezné a természetes vizek szennyeződése. Végül, de nem utolsó sorban mindezekhez a vizsgálatokhoz használt, ma már egyre elterjedtebb és a NAT-ban is szereplő ún. gyorseszteszketek szeretnénk bemutatni, mellyel gyorsan és egyszerűen képet kaphatunk környezetünk jelenlegi állapotáról.*

*Az így összegyűjtött anyagot színes kísérletekkel szeretnénk alátámasztani, mellyel a szóban forgó korosztály könnyen megfogható, cselekvésre készíthető, és amelyek segítik a nevelő munkát.*

*XI. SZERVETLEN KÉMIA ALSZEKCIÓ*



XI. Szervetlen kémia alszekció

<b>Nagy Barnabás</b>	<b>VE 17</b>	
<i>Fázisátalakulás vizsgálata a <math>\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-K}_2\text{O-CaO-P}_2\text{O}_5\text{-F}</math> üveggerámia rendszerben</i>		217
<b>Zenkovics Ferenc</b>	<b>VE 18</b>	
<i>Vas adalék hatása az <math>\text{YBa}_2(\text{Cu}_{3-x}\text{Fe}_x)\text{O}_y</math> összetételű szupravezető kerámiák tulajdonságára</i>		218
<b>Sallai Mónika , Weisz Márta</b>	<b>VE 9</b>	
<i>Közlekedési balesetek izzólámpamaradványainak mikroszkópos vizsgálata</i>		219
<b>Petrohán Krisztina</b>	<b>KLTE 9</b>	
<i>Fémion indukált amid-NH deprotonálódás a 2-hidroxi-hippursav VO(IV) komplexében</i>		220
<b>Sztáray Bálint</b>	<b>ELTE 19</b>	
<i>Magánospár-kölcsönhatás konformációfüggése As-As és Sb-Sb kötésű fémorganikus vegyületekben</i>		221
<b>Kirácsi Mónika</b>	<b>JATE 17</b>	
<i>A Fourier transzformációs rezgési spektroszkópia egy lehetséges orvosi alkalmazása: Vesekövek osztályozása</i>		222
<b>Tarczay György</b>	<b>ELTE 21</b>	
<i><math>\text{TiCl}_4\cdot 2\text{L}</math> komplexek (L: piridín, pirazin, triazin) szerkezete és bomlása</i>		223
<b>Rosta Edina</b>	<b>ELTE 11</b>	
<i>A <math>(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Zr}(\text{BH}_4)_2</math> tér- és elektronszerkezetének vizsgálata</i>		224



FÁZISÁTALAKULÁS VIZSGÁLATA A  $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-K}_2\text{O-CaO-P}_2\text{O}_5\text{-F}$  ÜVEGKERÁMIA  
RENDSZERBEN

Nagy Barnabás III. évf. Anyagmérnöki szak

Témavezető: Dr. Szabó István

Veszprémi Egyetem, Mérnöki Kar, Szilikát- és Anyagmérnöki Tanszék

A munka célja fogpótláshoz használható előnyös tulajdonságú üvegkerámiák kifejlesztése során a megfelelő vizsgálati módszerek kiválasztása és alkalmazása volt. A dolgozat egy  $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-K}_2\text{O-CaO-P}_2\text{O}_5\text{-F}$  összetételű üvegkerámia-rendszer vizsgálatával foglalkozik. A téma időszerűségét az adja, hogy a biokompatibilis üvegkerámiákat egyre szélesebb körben alkalmazzák fogpótlásoknál. Az ilyen típusú üvegkerámiák nukleációjának és kristályosodási tulajdonságainak a megismerése elősegíti új fogpótló anyagok kidolgozását. A vizsgált minták az International Commission on Glass tudományos szervezet, Technical Committee 7 "Nucleation, crystallization, glass ceramics" szakbizottságában nemzetközi együttműködéssel folyó munka keretében készültek.

A TC 7 szakbizottság munkájába bekapcsolódva elektronmikroszkópi, röntgen-diffraktométeres, termoanalitikai és mikrokeménység vizsgálatokat végeztünk. A minták röntgenfluoreszcens analízissel meghatározott kémiai összetételű nyersanyagból termikus kezeléssel készültek. A termikus kezelés  $850\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $900\text{ }^\circ\text{C}$  és  $1150\text{ }^\circ\text{C}$ -on egy óra időtartammal történt. A szintereléssel kapott mintadarabokat megőrölve a port  $1000\text{ }^\circ\text{C}$ -os 1 min. ideig tartó hőkezeléssel pasztillázták. A diákköri munka keretében ezek vizsgálatára került sor.

Megállapítottuk, hogy a különböző koncentrációjú HF oldattal más-más időtartamig savazott pasztillák felülete a szinterelési hőmérséklet függvényében eltérő szerkezeti felépítést mutat. A hőkezelés  $1150\text{ }^\circ\text{C}$ -os hőmérséklete eredményezte a legjobb kémiai ellenállóképességű üvegkerámiát. A szinterelés előtti porminta és a pasztilla röntgen-diffraktométeres elemzéssel meghatározott röntgenaktív fázisainak intenzitásértékei a hőmérséklet növekedésével változnak, mégpedig mind a leucit, mind az apatit  $900\text{ }^\circ\text{C}$ -on a legnagyobb. Az üveg minta termoanalitikai vizsgálata alapján meghatároztuk a transzformációs hőmérsékletet ( $500\text{ }^\circ\text{C}$ ) és a kristályosodási maximumok ( $800\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $840\text{ }^\circ\text{C}$ ) hőmérsékletét. Összehasonlító vizsgálatokat végeztünk a hevítőmikroszkóppal mérhető jellemző lágyulási hőmérsékletek és a termoanalitikai vizsgálatok eredményei alapján. A késztermék minőségét Vickers keménység méréssel ellenőriztük. Megállapítottuk, hogy a hőkezelés hőmérsékletének növekedésével növekszik az üvegkerámia keménysége.

A vizsgálatok eddigi eredményei arra engednek következtetni, hogy a vizsgált üvegkerámia rendszer irányított kristályosításával egy leucit és apatit fázisokat tartalmazó üvegkerámia állítható elő. A üvegkerámia tulajdonságainak vizsgálatára alkalmazott módszerek és berendezések segítségével jól nyomonkövethetők a kristályosított anyag alkalmazása szempontjából fontos műszak jellemzők.

VE 18

VAS ADALÉK HATÁSA AZ  $YBa_2(Cu_{3-x}Fe_x)O_y$  ÖSSZETÉTELŰ  
SZUPRAVEZETŐ KERÁMIÁK TULAJDONSÁGÁRA

Zenkovics Ferenc III. évf. Műszaki menedzser szak

Témavezető: Eniszné dr. Bódogh Margit  
Veszprémi Egyetem, Mérnöki Kar, Szilikát- és Anyagmérnöki Tanszék

A nagyhőmérsékletű szupravezetők felfedezése (1986) óta számos kísérlet történt ezen anyagok fizikai tulajdonságainak javítására, továbbá a nagyhőmérsékletű szupravezetés mechanizmusának tisztázására vonatkozóan. A leggyakrabban vizsgált Y-Ba-Cu-O rendszer esetén az egyes alkotó elemek más elemekkel történő teljes vagy részleges helyettesítése révén módosítani lehet a szupravezetési tulajdonságokat, így a gyakorlati felhasználási igényekhez jobban igazodó minőségű szupravezetők állíthatók elő.

Dolgozatom célja az  $YBa_2Cu_3O_x$  szupravezető esetén a réz vassal történő részleges helyettesítésekor ( $YBa_2Cu_{3-x}Fe_xO_y$ , ahol  $x = 0,2 - 2,0$ ) a vas szupravezető kristályrácsba való beépülésének, és ennek a szupravezetési tulajdonságokra gyakorolt hatásának vizsgálata volt.

A szupravezető mintákat szilárdfázisú reakcióval állítottam elő a hidraulikusan préselt pasztillák hőkezelése révén.

Röntgendiffrakciós módszerrel meghatároztam a kapott anyagok fázisösszetételét, a szupravezető fázis rácsparamétereit, s ezek változása alapján vizsgáltam a vas  $YBa_2Cu_3O_x$  kristályszerkezetbe való beépülését, s ennek a mikroszerkezetre és a fizikai tulajdonságokra ( $J_c$ ,  $T_c$ , porozitás) gyakorolt hatását.

Megállapítottam, hogy a kisebb vastartalmú mintáknál a Fe szilárdoldatot alkotva beépül az  $YBa_2Cu_3O_x$  kristályrácsba. Ekkor nem alakul ki vastartalmú kísérő fázis, viszont az ortorombos szupravezető fázis mellett jelentős mennyiségű tetragonális szimmetriájú van jelen. 950 °C-os égetés esetén az  $YBa_2Cu_{3-x}Fe_xO_y$  kristályrácsba maximálisan  $x = 0,2 - 0,4$  mennyiségű vas épülhet be a röntgendiffrakciós vizsgálatok alapján. Ennél nagyobb vastartalmú mintáknál megjelennek a vastartalmú kísérő fázisok ( $Ba_2Fe_2O_5$ ,  $Fe_2O_3$ ,  $BaFe_2O_4$ ), ugyanakkor a hagyományos szupravezetőknél gyakori kísérő anyagok ( $Y_2BaCuO_5$ ,  $BaCuO_2$ ) mennyisége csökken.

Az  $YBa_2Cu_{3-x}Fe_xO_y$  kristályrácsba beépült ( $x = 0,2 - 0,4$ ) vas a mágneses szuszceptibilitás alapján meghatározott  $T_c$  értéket lényegesen nem befolyásolja ( $T_c = 94 - 95$  K), ugyanakkor a szupravezető kristályok mérete csökken, ami a  $J_c$  értékének csökkenését eredményezi, annak ellenére, hogy a vas adalékolás a minták porozitásának csökkenéséhez vezet.

A vizsgálati eredmények alapján tehát az Y-Ba-Cu-O bázisú szupravezetőknél a réz vassal történő részleges helyettesítése nem célszerű áramvezetési célokra szolgáló szupravezető anyagok előállításánál, ugyanakkor szóba jöhet a mágneses technikai célokra való felhasználás, ami viszont további vizsgálatokat igényel.

## KÖZLEKEDÉSI BALESETEK IZZÓLÁMPAMARADVÁNYAINAK MIKROSZKÓPOS VIZSGÁLATA

Sallai Mónika, Weisz Márta, III. évf. vegyészmérnök

Témavezető: Dr. Kovács Kristóf  
Veszprémi Egyetem, Nagyműszer Laboratórium

*A fénymikroszkóp és a pásztázó elektronmikroszkóp jelentős igazságügyi, bünyügyi technikai alkalmazási területe a közlekedési balesetek után annak tisztázása, hogy az izzók égtek vagy sem. Ugyanis gyakori az a védekezés, hogy "azért mentem neki, mert nem láttam, nem égett a lámpája" vagy "elvakított a fényszórója". Bizonyítani kell, hogy a balesetben sérült autó, motorkerékpár, kerékpár fényszórója, helyzet- ill. irányjelzője égett-e.*

*Ezeket a vizsgálatokat a volframszál anyagi tulajdonságainak ismeretében lehet elvégezni. A lámpa fényét ugyanis a 2300-2700 °C hőmérsékleten izzó volframspirál adja, amelyet a lámpaburában található vákuum vagy védőgáz véd az oxidációtól. Ez alapján a volfram izzószál különböző külső hatásokra különféle deformációval illetve töréssel reagál hőmérséklettől függően, így megkülönböztethetünk hideg vagy meleg töréseket.*

*A vizsgálathoz további segítséget adhat - az üvegbúra eltörése esetén - az izzószálra kerülő idegen anyagok (például az üvegtörmelék) vizsgálata is.*

*Ezen vizsgálatokat optikai és pásztázó elektronmikroszkóppal végeztük el. Az, hogy melyik esetben melyik módszert választottuk ki, attól függött, hogy éppen mi volt a kérdés. Későbbiekben a dolgozatunkban mindkét módszert alkalmazzuk, az eredményeket pedig fényképfelvételekkel is illusztráljuk.*

*Az általunk bemutatott módszerek alkalmazása vitás esetekben megkönnyítheti az igazságügyi és vegyész szakértők munkáját.*



KLTE 9

FÉMION INDUKÁLT AMID-NH DEPROTONÁLÓDÁS A  
2-HIDROXI-HIPPURSAV VO(IV) KOMPLEXÉBEN

Petrohán Krisztina IV. matematika-kémia szakos hallgató

Témavezető: Dr. Kiss Tamás egyetemi tanár, Dr. Buglyó Péter egyetemi tanársegéd  
Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Munkánk során az oxovanádium(IV) ion és 2-hidroxi-hippursav közötti kölcsönhatást tanulmányoztuk vizes oldatban pH-potenciometriás, illetve spektrális módszerekkel. Meghatároztuk az adott rendszerben képződő részecskék stabilitási állandóit, sztöchiometriáját, és a spektrális adatokkal való összevetés alapján javaslatot tettünk a képződő részecskék legvalószínűbb szerkezetére.

Megállapítottuk, hogy a fém-ligandum rendszerben VOAH, VOA, VOAH<sub>1</sub>, VOAH<sub>2</sub>, VOAH<sub>1</sub>, VOAH<sub>2</sub> összetételű részecskék képződnek, szerkezetükre a kelátgyűrűs kötémód a jellemző.

Eredményeink alapján arra következtethetünk, hogy a szalicilglicin fenolátcsoportja, ellentétben pl. a glicilglicin terminális aminocsoportjával, megfelelő koordinációs hely (horgony donorcsoport) ahhoz, hogy elősegítse a peptid-amid VO(IV) indukálta deprotonálódását és koordinálódását.

Vizsgáltuk különböző O-donor ligandumok (glikolsav, szalicilsav, tiron) hatását is a szalicilglicin vanádium-kötő képességére. A kapott eredményeket a vegyes komplexek képződését általánosan befolyásoló tényezőkkel ( statisztikus, sztérikus tényezők, töltésemlegesítőds) értelmeztük.

MAGÁNOSPÁR-KÖLCSÖNHATÁS KONFORMÁCIÓFÜGGÉSE As-As  
ÉS Sb-Sb KÖTÉSŰ FÉMORGANIKUS VEGYÜLETEKBEN

Sztáray Bálint, IV. vegyész

témavezetők: Szepes László és Szalay Péter  
ELTE, Általános és Szerveitlen Kémiai Tanszék

A hidrazinban és szubsztituált származékaiiban a szomszédos N-atomok magános párjai döntő mértékben befolyásolják a molekulák sztereokémiai tulajdonságait. Ha a két magános pár között jelentős a kölcsönhatás, akkor a pályák szimmetrikus ( $n_+$ ) és antiszimmetrikus ( $n_-$ ) kombinációjának az energiája különböző. Jelen munkában a tetrametil-hidrazin arzén- és antimonalógjának elektronszerkezetét és rotációs izomériáját tanulmányoztuk.

Cowley és Dewar vizsgálatai alapján a  $Me_4P_2$  és a  $Me_4As_2$  fotoelektron-spektrumában észlelhetők mind az anti, mint pedig a gauche konformerhez rendelhető sávok. Az ő interpretációjuk szerint az első három sáv közül az első és a harmadik az anti konformer  $n_-$  és  $n_+$  pályáihoz, míg a második a gauche konformer fel nem hasadt magános párjaihoz rendelhető. A  $Me_4Sb_2$  általunk felvett és publikált HeI fotoelektron-spektruma spektruma a foszfor- és az arzénanalógok spektrumához nagyon hasonlít.

Kvantumkémiai módszerekkel részletesen vizsgáltuk a  $Me_4Sb_2$  és a  $Me_4As_2$  tér- és elektronszerkezetét. Teljes geometriaoptimalást végeztünk mindkét molekulára HF, valamint az elektronkorrelációt is figyelembe vevő MBPT(2) és CCSD szinten. Sikeresült elméletileg igazolni a két konformer létezését, a számított geometriai adatok az elektrondiffrakciós vizsgálatok eredményeivel jól egyeznek. Mindkét vegyület esetében kiszámítottuk a torziós koordinátához tartozó teljes potenciális-energia görbét, valamint az As-As, illetve Sb-Sb kötéstávolság torziótól való függését is. Az ionizációs energiákat a napjainkban legfejlettebbnek számító EOMIP-CC módszerrel határoztuk meg.

A kapott eredmények alapján el kellett vetni a fotoelektron-spektrumok Dewar-elmélet szerinti értelmezését, hiszen mindkét molekulánál a gauche-konformációban is jelentős mértékű magánospár-felhasadást tapasztaltunk. Ennek megfelelően a spektrumok első három sávjának új asszignációja a következő: Az első és harmadik sáv valóban az anti konformerhez tartozik, a gauche konformer  $n_+$  pályája a Cowleyék által publikáltnak megfelelően a második sávhoz tartozik, míg az  $n_-$  pályának az intenzív első sáv által fedett, így nem észrevehető csúcs felel meg. Ezáltal a konformerek gyakoriságára az arzénvegyület esetében az eredeti asszignáció alapján meghatározott arány helyett a CCSD szinten számoltval jól egyező értéket kaptunk.

A Dewar-féle elmélet szerint a gauche-konformáció közelében a magános párok felhasadásának igen kicsinek kell lenni. Mivel a spektrumok új besorolása alapján ez nyilvánvalóan nem fedi a valóságot, a jelenség értelmezéséhez figyelembe kellett venni a nitrogén és a csoportban található többi atom elektronszerkezete közötti különbségeket. Az általunk adott magyarázat figyelembe veszi a magános pároknak a csoportban lefelé haladva egyre növekvő s-pálya karakterét. Sikeresült kvantumkémiai módszerekkel alátámasztani ezt az elméletet, a számított s-pálya részvétel jól magyarázza a tapasztalt jelenséget.

JATE 17

**A FOURIER TRANSZFORMÁCIÓS REZGÉSI SPEKTROSKÓPIA EGY LEHETSÉGES  
ORVOSI ALKALMAZÁSA:  
VESEKÖVEK OSZTÁLYOZÁSA**

Készítette: Kiricsi Mónika IV. éves vegyészhallgató

Témavezető: Dr. Berkesi Ottó  
József Attila Tudományegyetem Fizikai Kémiai Tanszék, Szeged

*A klinikai gyakorlatban Magyarországon a vesekövek jellemzésére szinte kizárólag csak egy, optikai mikroszkópra és klasszikus kémiai analitikai módszerekre alapozott eljárást alkalmaznak, amely viszonylag hosszadalmas és nem mindig kielégítő pontosságú, nagy gyakorlati igényel.*

*Azt, hogy a rezgési spektroszkópiák (infravörös- és Raman spektroszkópia) kellő információt nyújtanak a kövek összetételéről, már korán felismerték, alkalmazásuk azonban bizonyos nehézségekbe ütközött. Bár a hagyományos infravörös-spektroszkópiai módszereknek (tablettás vagy diffúz reflexiók stb.) sok új kőalkotó azonosítása köszönhető, a minták megkívánt előkészítése olyan beavatkozást jelent, amely egyrészt megváltoztatja az eredeti szerkezetet, illetve a szinképből nem spektrális jelenségeket okozhat. A Raman spektroszkópia alkalmazásának a kövek szerves komponensei vetettek gátat, mivel fluoreszcenciájuk lehetetlenné tette a hagyományos, látható tartományban sugárzó lézerek használatát. A Fourier-transzformációs-(FT)-spektroszkópia fejlődése, napjainkban megfelelő eszközöket biztosít a mérések elvégzéséhez, a minta roncsolása nélkül. A NIR gerjesztés bevezetése alkalmassá tette az FT-Raman spektroszkópiát natív minták vizsgálatára is. A fotoakusztikus detektálás a közép-infravörös tartományban lehetővé teszi a makroszkópikus nagyságú részecskék szinképeinek felvételét. A minták diszperzitása nem befolyásolja a szinképet.*

*Munkánk során viszonylag nagyszámú, különböző típusú vesekő összetételének meghatározását és morfológiai jellemzését végeztük el. Emellett a klinikai eljáráshoz forgalmazott standard-ok párhuzamos vizsgálata is megtörtént. A méréseket egy Bio-Rad FT-Raman, egy FTS65A/896 FT-IR spektrométeren MTEC200 fotoakusztikus detektor alkalmazásával végeztük.*

*Eredményeink azt mutatják, hogy az FT-Raman szinképek önmagukban alkalmasak valamennyi rendelkezésünkre álló kőalkotó azonosítására, sőt lehetőséget látunk kvantitatív analitikai eljárás kidolgozására. A módszer alkalmas a kövek morfológiai jellemzésére is, ami lehetőséget ad az orvosnak arra, hogy a terápiára megbízhatóbb támpontok alapján tegyen javaslatot.*

$TiCl_4$  \* 2L KOMPLEXEK (L: piridin, pirazin, triazin) SZERKEZETE ÉS BOMLÁSA

Tarczay György IV. Vegyész

Témavezető : Szepes László

ELTE Általános és Szerveetlen Kémiai Tanszék

A  $TiCl_4$  N-tartalmú heteroaromás ligandumokkal alkotott komplexei régóta ismert, több szempontból is érdekes, ennek ellenére viszonylag keveset tanulmányozott vegyületek. A  $TiCl_4$  piridinnel alkotott komplexét Ziegler-Natta katalizátorként alkalmazva nagyobb aktivitás érhető el, mint a  $TiCl_4$  esetén. Ezt a komplexet sikeresen alkalmaztuk prekurzorként titán-karbid CVD-vel (Chemical Vapor Deposition; kémiai gőzfázisú rétegleválasztás) történő előállítására. Mind a titán(IV)-nitrid, mind a titán-karbid kiváló mechanikai tulajdonsággal rendelkezik, a titán(IV)-nitrid-karbid pedig várhatóan keménységében felülmúlja ezt a két anyagot. A piridines komplex helyett — hasonló kísérleti körülmények között — pirazinos illetve triazinos komplexet (N/C arány növelése) használva nem sikerült keménybevonatot előállítani. Ez az érdekes kísérleti tapasztalat indította el bennünket e komplexek szerkezetének és bomlásának vizsgálata irányába.

A komplexeket elemanalitikai, molekulaspektroszkópai (hőmérsékletfüggő UPS és IR, távoli-IR, MS, NMR) és termoanalitikai (TG, DSC) módszerekkel vizsgáltuk. Az irodalmi adatok és az elemanalitikai vizsgálatok szerint a  $TiCl_4$  és a ligandum aránya 1:2 (a triazin esetében az 1:1 arányú komplex is ismert). Korábbi XRD eredmények alapján a ligandumok transz orientációjúak (az erre vonatkozó IR adatok ellentmondásosak). Eddigi vizsgálatainknak megfelelően (MS, UPS, IR) gőzfázisban a komplex nem figyelhető meg egyértelműen, csak a megfelelő ligandum és független  $TiCl_4$  molekula jelenik meg. Ennek ellenére jelentős különbség adódott a piridines illetve a másik két komplex spektrumaiban. Előbbi esetben ugyanis jóval nagyobb mennyiségű HCl jelentkező gáz(gőz)fázisban, amely a  $TiCl_4$  redukciója miatt jelentős előny a CVD-s felhasználásban. Ez a különbség a TG és DSC illetve a szilárd fázisú, hőmérsékletfüggő IR vizsgálatoknál még szembetűnőbb. Az utóbbi két ligandum esetén további hátrányt jelent 1:1 arányú lineáris szerkezetek kialakulásának a lehetősége.

A különböző termikus viselkedés okát a komplexek és a ligandumok eltérő szerkezetében kereshetjük. A pirazinos és a triazinos komplexben — a ligandum báziserősségének megfelelően — gyengébb Ti—N és erősebb Ti—Cl kötés alakul ki. Ezt a megfelelő IR nyújtási frekvenciák is alátámasztják. Így a piridines komplexben már szobahőmérsékleten is gyenge hidrogénkötésszerű kapcsolat alakulhat ki a Cl és a piridin  $\alpha$ -hidrogénje közt, ami már alacsony hőmérsékleten is HCl kilépéséhez vezethet. A másik két komplexnél ez csak magasabb hőmérsékleten (jóval a szublimáció megindulása fölött) következhet be. (Ezen következtetések bizonyítására azonban további vizsgálatokat kell végezni, pl. TG-MS, hőmérsékletfüggő távoli-IR).

Ezek alapján a titán(IV)-nitrid-karbid bevonatok előállítását CVD-vel a pirazinos (esetleg a triazinos) komplexből magasabb mintabeeresztési hőmérsékleten érdemes megpróbálni. Célserűbb azonban olyan komplexekkel próbálkozni, ahol ez a hidrogénkötésszerű kapcsolat a ligandum szerkezetéből adódóan kialakulhat, de nincs lehetőség lineáris szerkezetek létrejöttére (pl. cianopiridin, piridazin stb.).

*A*  $(C_3H_5)_2Zr(BH_4)_2$  TÉR- ÉS ELEKTRONSZERKEZETÉNEK  
VIZSGÁLATA

Rosta Edina, II. vegyész

Témavezetők: Sztáray Bálint és Szepes László  
ELTE, Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

*A tetrahidridoborát csoport átmenetifém komplexekben egy-, két- és háromfogú ligandumként szerepelhet. Ez a többi ligandum, valamint a központi atom méretétől, és a fém atom elektronszerkezetétől függ. A tetrakis-tetrahidridoborató-cirkónium(IV) komplexben a borohidrid három hidrogénnel kapcsolódik. Ha az egyik ligandumot ciklopentadienilre cseréljük, akkor az eddigi vizsgálatok szerint a borohidrid kapcsolódása nem változik.*

*Jelen munkában a bisz-ciklopentadienil-bisz-tetrahidridoborató-cirkónium(IV) tér- és elektronszerkezetét vizsgáltam. Az irodalomban a szerkezetére vonatkozóan konkrét adatok nincsenek, korábbi IR-vizsgálatok alapján a két hidrogénhidas szerkezetet valószínűsítették a három hidrogénhiddal szemben. A vegyület elektronszerkezetét Zanathy László vizsgálta, de az általa felvett He(I) fotoelektron-spektrumot kvantumkémiai számítások hiányában csak hozzávetőlegesen lehetett értelmezni.*

*A vegyület szerkezetének meghatározása céljából ab initio Hartree-Fock számításokat végeztem teljes geometriaoptimalással, szimmetriamegkötések nélkül. A kvantumkémiai számításokhoz Ahlrichs és munkatársai Turbomole programját használtam. Kezdeti geometriának három hidrogénhidas szerkezetet adtam meg. A geometriaoptimalás mintegy hatvan lépés után konvergált, a végső geometria a két hidrogénhidas komplexnek felel meg. Ez az eredmény az infravörös spektrumok által valószínűsített szerkezetet erősíti meg.*

*A vegyületet irodalmi módszerrel előállítottam, majd felvettem a komplex fotoelektron-spektrumát He(I) és He(II) fotonenergiaánál is. A He(I)-spektrum az irodalmival jól egyezik, de a nagy intenzitású UV-forrásnak köszönhetően annál lényegesen jobb minőségű. A fotoelektron-spektrum alacsony energiájú tartománya három jól elkülönülő sávrendszerre osztható. A felvett spektrumokat összehasonlítva megállapítható, hogy a legalacsonyabb ionizációs energiához tartozó sávok relatív intenzitása többszöröse nő a He(II)-spektrumban. Ezen kívül a második széles sáv alakja is megváltozik. Általánosan elfogadott tény, hogy a d-karakterű molekulapályák fotoionizációs hatáskeresztmetszete He(II) fotonenergiaánál jelentősen megnő. Az ionizációs energiák és a d-karakter alapján az első sáv a ciklopentadienil-cirkónium kötéshez tartozik. Mivel a Zr  $d^0$  elektron konfigurációjú, a d-karakter a koordinált Cp-elektronoknak tulajdonítható.*

*A spektrum másik két sávjának hozzárendeléséhez és a fenti asszignáció megerősítéséhez az ab initio molekulapályákra Mulliken-féle populációanalízist végeztünk. Ezek a számítások a kvalitatív képpel jól egyeznek, és lehetővé tették a sávok pontos hozzárendelését.*

*A vegyület szilárd fázisú térszerkezetének meghatározására röntgendiffrakciós vizsgálatot végeztünk. A mért szerkezet a számított térszerkezettel viszonylag jó egyezést mutat, a Zr-B távolság alapján kéthidrogénhidas szerkezet valószínűsíthető.*

**A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekciójában résztvevő**

**INTÉZMÉNYEK**

<i>BABEŞ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM, Kolozsvár</i>	<i>JATE(Babeş-Bolyai)</i>
<i>BESSENYEI GYÖRGY TANÁRKÉPZŐ FŐISKOLA, Nyíregyháza</i>	<i>BGYTF</i>
<i>BUDAPESTI MŰSZAKI EGYETEM, Budapest</i>	<i>BME</i>
<i>EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM, Budapest</i>	<i>ELTE</i>
<i>ESZTERHÁZY KÁROLY TANÁRKÉPZŐ FŐISKOLA, Eger</i>	<i>EKTF</i>
<i>JANUS PANNONIUS TUDOMÁNYEGYETEM, Pécs</i>	<i>JPTE</i>
<i>JÓZSEF ATTILA TUDOMÁNYEGYETEM, Szeged</i>	<i>JATE</i>
<i>KERTÉSZETI ÉS ÉLELMISZERIPARI EGYETEM, Budapest</i>	<i>KÉE</i>
<i>KOSSUTH LAJOS TUDOMÁNYEGYETEM, Debrecen</i>	<i>KLTE</i>
<i>MISKOLCI EGYETEM, Miskolc</i>	<i>ME</i>
<i>PÉCSI ORVOSTUDOMÁNYI EGYETEM, Pécs</i>	<i>JPTE/POTE</i>
<i>ÚJVIDÉKI EGYETEM, Újvidék</i>	<i>JATE(Újvidék)</i>
<i>VESZPRÉMI EGYETEM, Veszprém</i>	<i>VE</i>

**A XXIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia  
Kémiai és Vegyipari Szekciójába pályamunkát benyújtók**

**NÉVSORA**

<i>Abonyi János</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE1</i>
<i>Ágoston Csaba Gábor</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE1</i>
<i>Balázs Barbara</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME1</i>
<i>Baranyi László</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE1</i>
<i>Bóka Beáta</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE2</i>
<i>Bozsó Zsolt</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE2</i>
<i>Buchert Eszter</i>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>	<i>JPTE1</i>
<i>Budavári Viktória</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE3</i>
<i>Buzder-Lantos Lajos</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE4</i>
<i>Chikán Viktor</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE5</i>
<i>Czakó Barbara</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE3</i>
<i>Csalári Judit</i>	<i>Kertészeti és Élelmiszeripari Egyetem</i>	<i>KÉE1</i>
<i>Csesztregi Tamás</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE1</i>
<i>Csikász-Nagy Attila</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME2</i>
<i>Csiszár Mária</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE6</i>
<i>Csőszt Katalin</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE2</i>
<i>Deák Andrea</i>	<i>Babes-Bolyai Tudományegyetem</i>	<i>JATE37</i>
<i>Doleschall Fruzsina</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME3</i>
<i>Drucker Tamás</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME4</i>
<i>Dunai Beáta</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE7</i>
<i>Enyedy Éva Anna</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE4</i>
<i>Erdődi Gábor</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE1</i>
<i>Farkas Gabriella</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME5</i>
<i>Filipcsei Genovéva</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE8</i>
<i>Fogassy Katalin</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME6</i>
<i>Fráter Zoltán</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE9</i>
<i>Gadžuric, Slobodan B.</i>	<i>Újvidéki Egyetem</i>	<i>JATE39</i>
<i>Galam Szabolcs</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE20</i>
<i>Garadnay Sándor</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE5</i>
<i>Gerencsér János</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME7</i>
<i>Gulyás Henrik</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE3</i>
<i>Győrffy Béla</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME2</i>
<i>Hajgató Balázs</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME8</i>
<i>Hajnal Andrea</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE10</i>
<i>Hartvig Nóra</i>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>	<i>JPTE3</i>
<i>Hegedűs Csaba</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE4</i>
<i>Hegedűs Gyöngyvér</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME9</i>
<i>Hodosi Etelka</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME10</i>
<i>Hoffmann Eufrozina Andrea</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE11</i>
<i>Horváth Anita</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE12</i>
<i>Horváth György</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME14</i>
<i>Hrivnák Béla</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE13</i>

<i>Illés Krisztina</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE5</i>
<i>Illés Szabolcs</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE5</i>
<i>Jankovics Hajnalka</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE14</i>
<i>Járosi László</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME3</i>
<i>Jávorszky Eszter</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE2</i>
<i>Jeges György</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE6</i>
<i>Jerga Agoston</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE6</i>
<i>Jordán Sándor</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE15</i>
<i>Juhász Gergely</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE3</i>
<i>Kállay Mihály</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE4</i>
<i>Kámán Judit</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE16</i>
<i>Kárpáti Tamás</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME11</i>
<i>Kassai Csaba</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME12</i>
<i>Katona Zoltán</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME13</i>
<i>Kazinczy Béla</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE5</i>
<i>Kele Péter</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE6</i>
<i>Kerner Zsolt</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE7</i>
<i>Kilyén Melinda</i>	<i>Babeş-Bolyai Tudományegyetem</i>	<i>JATE38</i>
<i>Kiricsi Mónika</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE17</i>
<i>Kis Attila</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE18</i>
<i>Kis Gábor</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE7</i>
<i>Kiss Katalin</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME3</i>
<i>Kiss, Anton</i>	<i>Babeş-Bolyai Tudományegyetem</i>	<i>JATE40</i>
<i>Kissné Németh Enikő</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE19</i>
<i>Kóczán Katalin</i>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>	<i>JPTE1</i>
<i>Kollár Tibor</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE19</i>
<i>Kóta Zoltán</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE21</i>
<i>Köntös Zoltán</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME14</i>
<i>Krecz Ágnes</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE7</i>
<i>Kriván Emese</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE20</i>
<i>Kupihár Zoltán</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE22</i>
<i>Lagzi István</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE23</i>
<i>Lázár Armand</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE8</i>
<i>Le Thanh Giang</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME15</i>
<i>Lenkei Tünde</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME17</i>
<i>Lente Gábor</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE8</i>
<i>Macsári István</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME7</i>
<i>Major Andrea</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE24</i>
<i>Márki Edit</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME16</i>
<i>Méhn Dóra</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE25</i>
<i>Merényi László</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE16</i>
<i>Michelutti Anita</i>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>	<i>JPTE2</i>
<i>Mihala Nikolett</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE26</i>
<i>Mikó Éva</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME17</i>
<i>Mogyorósi Károly</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE26</i>
<i>Nagy Barnabás</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE17</i>
<i>Nagy Péter</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE9</i>
<i>Nagy Tamás</i>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>	<i>JPTE4</i>
<i>Nagy Zoltán</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE12</i>



Nagygyörgy Szilveszter	Budapesti Műszaki Egyetem	BME18
Nényei Árpád	Veszprémi Egyetem	VE8
Novák Tibor	Budapesti Műszaki Egyetem	BME19, BME20
Pápai Zsuzsa	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE10
Pászt Éva	Budapesti Műszaki Egyetem	BME21
Péter Mária	József Attila Tudományegyetem	JATE27
Petrohán Krisztina	Kossuth Lajos Tudományegyetem	KLTE9
Rákó János	Kossuth Lajos Tudományegyetem	KLTE10
Román Hedvig	Janus Pannonius Tudományegyetem	JPTE5
Román Renáta	Miskolci Egyetem	ME1
Rosinger Boglárka	Janus Pannonius Tudományegyetem	JPTE6
Rosta Edina	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE11
Rozmanitz Péter	József Attila Tudományegyetem	JATE28
Sallai Mónika	Veszprémi Egyetem	VE9
Sárossy Gábor	Budapesti Műszaki Egyetem	BME22
Schenker Ivonn	Veszprémi Egyetem	VE10
Schmidt Róbert	Janus Pannonius Tudományegyetem	JPTE2
Sebők Ferenc	József Attila Tudományegyetem	JATE29
Siska Andrea	József Attila Tudományegyetem	JATE24
Sógor Csilla	Kossuth Lajos Tudományegyetem	KLTE11
Somló Edina	Miskolci Egyetem	ME1
Somogyi András	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE12
Soós László	Budapesti Műszaki Egyetem	BME11
Steiner Csaba	Veszprémi Egyetem	VE11
Szabados Ágnes	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE13
Szabados Zsuzsanna	Janus Pannonius Tudományegyetem	JPTE8
Szabó Csongor	Veszprémi Egyetem	VE7
Szabó Edit	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE14
Szabó Klára	Janus Pannonius Tudományegyetem	JPTE9
Szabó Miklós	Veszprémi Egyetem	VE12
Szakács Zoltán	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE15
Szarvas Szilvia	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE16
Szathmáry Mónika	József Attila Tudományegyetem	JATE30
Szatúra Ágnes	Veszprémi Egyetem	VE13
Szekeres Zsolt	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE17
Szieberth Dénes	Budapesti Műszaki Egyetem	BME23
Szilágyi Magdolna	Kossuth Lajos Tudományegyetem	KLTE12
Szintay Gergely	Veszprémi Egyetem	VE13
Szlávik Zoltán	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE18
Szorcsik Attila	József Attila Tudományegyetem	JATE31
Szőnyi Mónika	Budapesti Műszaki Egyetem	BME17
Sztáray Bálint	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE19
Szui Erika	Bessenyei György Tanárképző Főiskola	BGYTF1
Szurómi Endre	Kossuth Lajos Tudományegyetem	KLTE13
Takács Zoltán	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE20
Tamási Anikó	József Attila Tudományegyetem	JATE32
Tapolcsányi Pál	József Attila Tudományegyetem	JATE34
Tarcsay György	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE21
Tobisch Zsuzsanna	Eötvös Loránd Tudományegyetem	ELTE22

<i>Tomori Tünde</i>	<i>Eszterházy Károly Tanárképző Főiskola</i>	<i>EKTF1</i>
<i>Torma Viktória</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE23</i>
<i>Tóth Antal Attila</i>	<i>Bessenyei György Tanárképző Főiskola</i>	<i>BGYTF2</i>
<i>Tömböly Csaba</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE33</i>
<i>Török Ibolya</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE35</i>
<i>Török János</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE14</i>
<i>Tuba Róbert</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE14</i>
<i>Urbán Zita</i>	<i>Kossuth Lajos Tudományegyetem</i>	<i>KLTE15</i>
<i>Vágási Mónika</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME24</i>
<i>Varga Jenő</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE24</i>
<i>Varga Mónika</i>	<i>József Attila Tudományegyetem</i>	<i>JATE36</i>
<i>Varga Zoltán</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE19</i>
<i>Várkonyi Zoltán</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE15</i>
<i>Végvári Ákos</i>	<i>Janus Pannonius Tudományegyetem</i>	<i>JPTE10</i>
<i>Virág István</i>	<i>Eötvös Loránd Tudományegyetem</i>	<i>ELTE25</i>
<i>Visegrády András</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME18</i>
<i>Volford András</i>	<i>Budapesti Műszaki Egyetem</i>	<i>BME25</i>
<i>Weisz Márta</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE9</i>
<i>Zenkovics Ferenc</i>	<i>Veszprémi Egyetem</i>	<i>VE18</i>





**Béremendi Cementgyár**

**Béremend, Pf. 20, Tel/Fax: 72/474-510**

**Szövetségben a természettel**

© 1998 Béremendi Cementgyár. Minden jog fenntartva. A képek a gyár honlapjáról származnak.

