

XXVII. ORSZÁGOS TUDOMÁNYOS
DIÁKKÖRI KONFERENCIA

KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki Kar
Budapest
2005. március 21-23.



Származékképzési módszerek összehasonlítása, mikotoxinok gázkromatográfiás meghatározásában

Gyimóthy Balázs, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Torkos Kornél** egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

A mikotoxinok bizonyos gombák – állatokra és emberekre nézve toxikus – másodlagos anyagcseretermékei.

Napjainkban a gombákat igen sokféle módon hasznosítják, például: sajt készítéshez, etanol gyártáshoz, vitaminok, antibiotikumok és hormonok előállításához. Ugyanakkor a gombák jelentős szerephez jutnak a növényi, állati és emberi megbetegedésekben, valamint káros hatást fejthetnek ki az élelmiszereinkre is. Mikotoxin termelő gombák jelenhetnek meg például gabonafélékben (pl. aflatoxin, vagy trichotecének búzában, árpadban, kukoricában...), gyümölcsökben (pl. patulin almában), fűszerpaprikában (pl. aflatoxin, ochratoxin A) és állati eredetű élelmiszereken is.

Mivel a takarmányok és az egyéb élelmiszerek mikotoxin szennyezettségének nem feltétele a látható mennyiségű gomba jelenléte, ezért a káros hatások kiküszöbölése érdekében szükség van a mikotoxinok meghatározására alkalmas, kellően érzékeny analitikai módszerekre. A trichotecének esetén e módszerek legtöbbször gázkromatográfián alapulnak. Az esetek túlnyomó többségében a meghatározáshoz származékképzést is alkalmaznak, ezáltal növelve a trichotecének illékonyágát, és gyakran javítva detektálhatóságukat is.

Tudományos Diákköri munkám során kipróbáltam és összehasonlítottam olyan származékképzési módszereket, melyekkel a trichotecének mérhetőek a nagy érzékenységgel és szelektivitással jellemezhető elektronbefogásos detektor segítségével.

Három származékképző szert alkalmaztam. Ezek közül kettő, a pefluoracil származékot szolgáltató heptafluor-butánsav-anhidrid és a trifluorecetsav-anhidrid. A harmadik a kutatócsoportban már korábban alkalmazott, trimetilszilil származékot szolgáltató N,N-dimetil-karbamid-sav-trimetil-szililészter.

Két nagyságrenddel kisebb kimutatási határt értem el mind a három származékképzési módszer esetén elektronbefogásos detektorral, szemben a korábban lángionizációs- és tömegspektrometriás-detektorral.

Ásvány- és ivóvizek börtartalmának vizsgálata

Bereczki Katalin, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Braun Mihály** egyetemi adjunktus
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A bór egy kivételes és figyelemre méltó elem, nemcsak a kivételes kémiai tulajdonságai miatt, hanem azért is, mert az élőszervezetek számára létfontosságú nyomelem. Különlegessége abban rejlik, hogy a bór hiánya és bór többlete is gondot okozhat az élőlények számára. Az állatok és az emberek esetében is esszenciális, részt vesz a sejtmembrán funkciók és enzimikus reakciók irányításában. A túlzott bevétel is veszélyt jelent, mert a bór akkumulálódik az állatokban és a növényi szövetekben. Potenciális veszélyt jelent, ha az elfogyasztott ételben, ill. ivóvízben nagy a bór koncentrációja. A nagy mennyiségű bór bevétele sorvadást, valamint herebetegségeket okoz.

A dolgozatomban az ásvány- és ivóvizek börtartalmának meghatározásával foglalkozom. Erre azért van szükség, mert az ivóvizek börtartalmának vizsgálatát a korábbi években nem írta elő rendelet és kevés mérési eredmény áll rendelkezésre.

Az ivóvízre vonatkozó európai jogszabály a korábbi hazaiaknál sok területen szigorúbb minőségi előírásai a 201/2001. (X. 25.) Kormányrendelet megalkotásával 2001. november 24-i hatállyal érvényesek. Az ivóvízben lévő bór egészségügyi határértékét 1 mg/l-re, az ásványvízben 5 mg/l-re csökkentették.

Szabolcs-Szatmár-Bereg- és Jász-Nagykun-Szolnok megye ivóvíz-hálózatából vett mintákat, valamint a forgalomban lévő ásványvizeket elemeztük ICP-OES módszerrel. Célunk az volt, hogy gyors és egyszerű módszert optimáljunk a bór koncentrációjának mérésére, mely alkalmas a vízminták börtartalmának meghatározására, valamint az egészségügyi határértéket meghaladó területek feltérképezése és a hatóságok figyelemfelkeltése.

Kémiailag módosított arany nanocsövek fejlesztése molekuláris felismerés céljából

Höfler Lajos, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Gyurcsányi E. Róbert** egyetemi docens
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék

A megfelelő biológiai eredetű ligandumokkal módosított nanocsövek alkalmazása molekuláris felismerésre egy új, rendkívül perspektivikus kutatási területnek tekinthető. A nanocsövek átmérője a makromolekulák méretével megegyező nagyságrendben van, és emiatt ezen molekulák szelektív kötődése a nanocső belső falára, a nanocsövön keresztüli iontranszport jelentős változásával jár együtt. Távlati terveink közé tartozik, hogy jelölés nélküli bioszenzorokat fejlesszünk, biológiai eredetű makromolekulák (DNS szálak, fehérjék, stb.) meghatározására. A detektálás lényege, hogy a nanocsövek belső falához kovalens kötéssel szelektív molekuláris felismerésre alkalmas biomolekulát rögzítünk. Az immobilizált biomolekula szelektív kölcsönhatásba lép a vizsgált minta egy komponensével. A keletkezett komplex, megváltoztatja a nanocső átmérőjét és/vagy a belső felület elektromos töltését. A fellépő változás befolyásolja a nanocső átjárhatóságát különböző marker ionok számára és ezáltal kvalitatív és kvantitatív információt szolgáltat a vizsgált komponensről. Ennek megfelelően munkám során az újonnan bevezetett elv bizonyításával és a mérőrendszer optimalizálásával foglalkoztam, modellként a biotin-avidin rendszert alkalmazva. Bebizonyítottam, hogy megfelelő módosítások (mint például a membránfelületek blokkolása hidrofil sajátságú tiol monoreteggel) után a módszer kimutatási határát akár 10^{-12} M-ig lehet csökkenteni. Az avidin kötődése a biotinhoz rendkívül szelektív, ugyanakkor felléphet a rendszerben más nem specifikus kölcsönhatás, például adszorpció, ami szintén befolyásolhatja a fluxust. Modellvegyületnek a bovin szérum albumint (BSA-66 kDa) használtam. Amíg az avidin (68 kDa) specifikusan kötődik a biotinhoz, a BSA esetében nem lép fel ilyen hatás. A detektálási elv leghatékonyabb felhasználásához szükséges lesz a rendszer miniatürizálása és mikrofluidikai rendszerben való integrálása. Ezirányban megtettem az első lépéseket az áramló oldatos transzport cella bevezetésével. Elvárásainknak megfelelően az áramló oldatos rendszerben körülbelül százszoros érzékenység növekedést értem el a korábban alkalmazott mérőcellákhoz képest.

Kísérleteim bizonyították, hogy a módszer analitikai jellemzői a kísérleti eljárások és eszközök optimalizálásával jelentősen javíthatók és várható, hogy a jövőben alkalmazható lesz biológiai makromolekulák meghatározására.

Klorid- és fluoridion indirekt ICP-AES meghatározása

Kovács Máté, V. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Borszéki János** egyetemi docens
VE Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Halmos Pál tudományos főmunkatárs
MTA Analitikai Kémia Tanszéki Kutatócsoport

Napjainkban egyre jobb teljesítményjellemzőkkel rendelkező módszereket követel meg világunk a különböző elemek meghatározására. Leginkább az anionok meghatározása jelent problémát, mint például a fluorid- és kloridioné. Egyre bonyolultabb mátrixú mintákban egyre kisebb kimutatási határral rendelkező módszerek szükségesek, ugyanakkor fontos az elemzések minél rövidebb időtartama is.

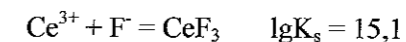
Céлом olyan anion meghatározási rendszerek összeállítása, melyekben az anion mérését valamilyen fémion meghatározására vezetem vissza az által, hogy a feleslegben adagolt fémion segítségével az anion csapadékként megköthető, és a fémion feleslege pedig, atomspektroszkópiái (ICP-AES) analitikai technikával, nagy pontossággal visszamérhető. Ezeknek a meghatározásoknak előnye, hogy kevés zavaró hatás érvényesül, és biztonsággal alkalmazhatók nagy – az egyes ionokra nézve 50-100 mg/l-es – mátrixkoncentráció esetén is.

A kloridion meghatározásához csapadékképző fémionnak az ezüstiont választottam. A meghatározás alapját jelentő reakció:



Kísérleti munkám során optimaltam a mérési paramétereket. A lehetséges zavaró anionok közül mértem a szulfát, foszfát, karbonát, fluoridion jelenlétekor tapasztalható relatív hibát. Módszert dolgoztam ki a bromid és jodidion eltávolítására, mivel ezek az ionok jelentősen zavarják a meghatározást.

A fluoridion meghatározásához a cérium(III)-iont találtam a legeredményesebben használhatónak, mint csapadékképző fémion. A csapadékképzési reakció:



Ennél a meghatározásnál is optimaltam a mérési paramétereket, vizsgáltam különböző pH-jú oldatok elemezhetőségét. Felfigyeltem arra, hogy az elemzés csak szulfátiókon jelenléte esetén sikeres, meghatároztam szükséges minimális koncentrációját a szulfátióknak.

Végül különféle minták klorid- és fluoridion tartalmát határoztam meg.

Ópioidok analitikája

Bónis Anna Zsófia, V. évf. kémia tanár szakos hallgató

Hajzer Barnabás, V. évf. kémia tanár szakos hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Szabó Dénes** egyetemi docens
ELTE Szerves Kémiai Tanszék
Kocsis György mérnök őrnagy
MH-EVI Toxikológiai Kutató Osztály

Magyarország Európai Unióhoz való csatlakozásának idején szerte az országban elterjedt a hír, hogy az Unióba lépve, annak szabályainak megfelelően, nem fogyaszthatunk többé mákos bejglit, mákos tésztát vagy egyéb jelentős mennyiségű máktartalommal bíró, a hazai kultúra részét képező ételeket.

Joggal merült föl a lakosság körében a kérdés, hogy miért nem. Ha eddig szabad volt a mákos ételeket fogyasztani, most miért akarják ezt megtiltani? Erre a kérdésre az a válasz, hogy az Unió országokban már a drogfogyasztás ténye is büntetendő cselekménynek számít. S mivel adott mennyiségű mákos étel fogyasztása után a vizelet morfin és kodein tartalma is meghaladhatja a megengedett szintet, akár egy ártatlan karácsonyi bejglizés után is kellemetlen perceket szerezhet nekünk a hatóság, ha például egy autópályán történő rutin ellenőrzéskor, a kezükben lévő gyorsstesztel bizonyítani tudják a vélt drogbefolyásoltság tényét.

Ezek kapcsán merült fel bennünk egy újabb, de már összetettebb kérdés: Hogyan lehet analitikai vizsgálatokkal egzaktul megkülönböztetni egymástól, a mákos ételt, a természetes -mákszármaszékot fogyasztó drogos, a morfinista és a heroinista személyek vizeletmintáját.

Mivel előzetes vizsgálataink során már beláttuk, hogy a heroinisták egyértelműen kiszűrhetők a többiek közül a 6-MAM (6-monoacetyl-morfin) nevű vegyület miatt, ugyanis ez, csak a szintetikus heroint fogyasztó drogos mintájában található meg, a természetes alapú drogot élvezők mintáiban nincs benne.

Vizsgálataink fő célját tehát egy olyan módszer kidolgozása képezte, aminek a segítségével minél konkrétan ki tudjuk majd szűrni a mákos ételt fogyasztó személy „pozitív” mintáját, a természetes ópiát alapú drogot fogyasztó egyén pozitív vizeletmintájától.

Élettanilag fontos szénhidrátok analízise HPLC elválasztást követő mikroamperometriás detektálással

Bátai Réka, IV. évf. gyógyszerész-hallgató

PTE Általános Orvos Kar

Témavezető: **Dr. Nagy Livia** tudományos munkatárs
MTA-PTE Kémiai Szenzorika Kutatócsoport

A szénhidrátok a bioszféra legelterjedtebb szénvegyületei, biológiai szerepük sokrétű, megtalálhatók mind a növényvilágban, mind az állatvilágban. Analízisükre napjainkig számos módszer került kidolgozásra.

A szénhidrátok szerkezetükből adódóan erősen alkalikus közegben (pH=12) részleges negatív töltéssel rendelkeznek, ezért anioncserés ionkromatográfiával - kereskedelembe beszerezhető oszlopon- elválaszthatók. Az egyes minták szénhidrát komponenseinek analízisére használt, az illető eluens oldat esetében alkalmazható kromatográfiás detektorok hatékonysága nem kielégítő.

Diákköri munkámban az elektrokatalitikus rézelektrod, cukrok kromatográfiás analízisében történő felhasználásával kapcsolatos vizsgálatokat végeztem.

Munkám célja volt olyan hatékonyan működő, egyszerű elektrokémiai detektorcella kifejlesztése, amely cukor komponensek ionkromatográfiás analíziséhez jól használható. Meg kívántam vizsgálni az illető detektor működését lehetővé tevő folyamatot, a detektor működését, továbbá alkalmas analitikai módszer kidolgozásával igazolni kívántam a detektor alkalmazhatóságát.

A rézelektrod felszínén lúgos közegben monomolekuláris réz-(III)-oxid-hidroxid réteg keletkezik, a szénhidrátok elektrokatalitikus oxidációja ezen a rétegen megy végbe. Az oxidálódott termékek nem passziválják az elektródot. Ez teszi lehetővé a rézelektrod amperometriás detektorcellában történő alkalmazását.

Munkámban, fémrészről készített munkaelektrodot tartalmazó detektorcellát készítettem és vizsgáltam annak működését. A detektorcella felépítése újszerű és rendkívül egyszerű. Úgy készül, hogy az elválasztó kolonna nyitott végébe mikrométerű (30 μm átmérőjű) rézhuzal munkaelektrodot vezettem be és a kolonnavéget alkalmasan kialakított hengeres edénybe helyeztem, amely tartalmazta a vonatkozási- és a segédelektrodot is.

A detektálás paramétereit – mérési elektródpotenciált, elektród hosszát- optimáltam. A detektálás hatékonyságát modell cukor elegyeken vizsgáltam.

Ionkromatográfiás módszert dolgoztam ki méz és nektár minták fő komponenseinek analízisére. Virágos növények nektárját analizáltam.

Koronaéter-komplexek vizsgálata termikus analitikai módszerekkel

Bereczki Laura, okl. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki Kar

- Témavezetők: **Dr. Marthi Katalin** tudományos főmunkatárs
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Pokol György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék
- Konzulens: **Dr. Huszthy Péter** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia Tanszék

A molekuláris felismerés jelenségének alapvető szerepe van az életfolyamatok lejátszódásában. Az élő szervezetet felépítő molekulakomplexeket alkotó biomolekulák szerkezeti kialakításuk révén alkalmasak rá, hogy szükség esetén összekapcsolódjanak, illetve a jó működéshez megfelelő egyensúly szerint szétváljanak. Koronaéter-komplexek alkalmasak a fenti a viselkedés modellezésére, illetve mesterséges rendszerekben való felhasználására.

A koronaéter-komplexeken végzett analitikai vizsgálatokhoz DSC (Differenciális Páztázó Kalorimetria), szimultán TG/DTA-MS (Termogravimetria/Differenciális Termikus Analízis-Tömegspektrometria), fűthető tárgyasztalú mikroszkópia (HSM, Hot Stage Microscopy) módszereket alkalmaztunk.

A koronaéter-komplexek olvadáspontja minden esetben magasabb a komplexképző vegyületekénél, de olvadáspontjuk elérése után termikus bomlásuk azonnal megindul, a szabad koronaéterek, illetve ammóniumsók bomlásánál alacsonyabb hőmérsékleten.

A vizsgálatainkhoz használt aromás aminok perklorát sói, valamint ezek komplexei 250 °C körüli hőmérsékleten erősen exoterm folyamatokban bomlanak, melyeket az erősen oxidatív tulajdonságú perklorát anion vált ki.

A piridono-18-korona-6 éter egykristályában röntgendiffrakciós módszerrel egy vízmolekula helyét határozták meg. Termogravimetriás, illetve tömegspektrometriás mérésekkel bizonyítottuk, hogy a koronaéter két molekula kristályvíz megkötésére képes, melyet hevítés hatására egyetlen folyamatban 40 és 80 °C között ad le.

A benzilammónium-perklorát só endoterm folyamatban kristálmódosulatot vált. Az enantiotróp viszonyban álló módosulatok egyensúlyi hőmérséklete 117 °C.

Az oldatban mért komplexstabilitási állandók alapján stabilisabb heterokirális (*R,R*)-dimetilfenazino-18-korona-6 - (*S*)-naftiletillammónium-perklorát komplex a termoanalitikai vizsgálatok alapján legalább három polimorf módosulaton létezik, melyek mindegyike a homokirális (*R,R,R*) komplexnél alacsonyabb olvadáspontú.

Ferde eloszlású környezeti adatok paramétereinek meghatározására szolgáló eljárások összehasonlítása

Fejér Dina, kémia tanár

SZTE Természettudományi Kar

- Témavezető: **Dr. Horváth István** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A környezeti adatok eloszlása nagyfokú inhomogenitást mutat. Gyakoriak a kimutatási határ közelében végzett mérések. Másrészt extra nagy (kiugró) értékek is előfordulnak közöttük. Ilyen eloszlások esetén az átlagos hatás és annak ingadozása a szokásos átlag és korrigált empirikus szórás formulákkal nem jellemezhető. Ezért speciális, az eloszlás ferdeségét feltételező eljárások alkalmazása szükséges. Lognormális, gamma és log-logisztikus eloszlást feltételezésével valós és szimulált adatsorok értékelését és az eredmények kritikai összehasonlításait végeztük el.

Először az adatsorokat lognormális eloszlás alapján értékeltük, mert erre az eloszlásra jól kidolgozott eljárások álltak rendelkezésünkre. A lognormális kezelés előnye az, hogy a mérési eredmények logaritmus normális eloszlású adatsor. A kimutatási határ közelében végzett nagy relatív hibájú mérési adatok elhagyásával (cenzorálással) növelhető az értékelés megbízhatósága. A várható érték és a szórás meghatározása után különböző korrekciós eljárásokkal lehet figyelembe venni az elhagyott adatok által okozott csonkítás hatását. Maximum Likelihood (ML), Restricted ML, torzítással korrigált ML korrekciók után a teljes adatsorra jellemző várható értékhez és szóráshoz juthatunk. Az újradefiniált paraméterekkel lehetőség nyílik elhagyott adatok újraszámolására is.

Szimulált adatok elemzése során azt tapasztaltuk, hogy a számított paraméterek eltérnek az elméleti értékektől. Az eltérés mértéke nő a szórás növekedésével. A korrekciós eljárások ezeken csak kismértékben javítanak. Tapasztalataink szerint a szórás növekedésével exponenciálisan nő a lognormális adatsor ferdesége. Mindebből leszűrhető, hogy olyan további korrekciók szükségesek, amelyek figyelembe veszik az adatsor ferdeségét is.

Meghatároztuk a valós adatsorok lognormális, gamma és log-logisztikus eloszlások alapján számolt várható értékeit, és szórásait. A különböző eloszlások feltételezésével kapott eredmények között vannak olyanok, amelyek eltérése nem jelentős egymáshoz képest. Bizonyára ezek vannak legközelebb a valódi értékekhez.

Nitrit- és nitrátionok meghatározása nyálban kapilláris elektroforézis módszer alkalmazásával

Juhász Péter, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Gáspár Attila egyetemi adjunktus
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

TDK munkámban egy olyan gyors kapilláris zónaelektroforézis (CZE) módszert dolgoztam ki, mellyel a közvetlenül a kapillárisba injektálható nyál nitrit és nitrát tartalma határozható meg. A nitrit és nitrát vizsgálata azért fontos, mert a különböző humánbiológiai minták nitrit/nitrát tartalma különböző betegségekre, egészségügyi állapotra utalhat.

A legtöbb publikált elektroforetikus módszerrel ellentétben nem alkalmaztunk elektroozmotikus áramlást (EOF) módosító adalékot és indirekt UV detektálást. Mivel nagyon gyors anionokat vizsgáltunk, ezért anódirányú detektálást alkalmaztunk, így ezek az anionok a katódirányú EOF ellenében haladnak a detektor felé. Az EOF sebességének változtatása leghatékonyabban a puffer pH-jának változtatásával érhető el, de a pH emellett a nitrit protonálódási folyamataira is hatással van, így befolyásolja annak elektroforetikus mozgékonyágát is. Mivel célunk a minél kisebb analízisidő és minél nagyobb felbontás elérése, 6,8 pH-jú elektrolit alkalmazása tűnt optimálisnak.

A nitrit és nitrát meghatározása során UV spektrofotometriás detektálást alkalmaztam. A nitrit és nitrát meghatározását megkönnyíti, hogy 190 és 225 nm között mindkettőnek jó elnyelése van, ugyanakkor az olyan zavaró anionnak, mint a klorid, 200 nm felett nincs elnyelése. A nitrit és nitrát kimutatási határai 0,14 és 0,21 µg/mL-nek adódtak, a migrációs idők precizitása 1 RSD % alatti, míg a jelterület szórása 2 RSD % alatt volt. A jelterület és a koncentráció között 1 és 100 µg/mL között lineáris a kapcsolat ($R^2 > 0,999$).

A módszer optimalizálását követően humán nyálminták elemzését végeztük el. A nitrit és nitrát mennyisége a mintavételezett nyálmintákban időben egyre kisebb. A nitrát mennyisége gyorsabban csökken, mint a nitrité, mivel a nyálban élő baktériumok a nitrátot nitritté redukálják. Kb. 90 perccel a mintavétel után a nitrit és nitrát jele teljesen eltűnik, míg a módszerünkkel szintén meghatározható, és a nyálban viszonylag nagy mennyiségben megtalálható tiocianát jele nem változik. A mintavételezést követően a nyálmintákhoz azonnal NaOH-t adtunk és a mérésig hűtőben tároltuk, hogy a nyálban élő baktériumokat elpusztítsuk, és a nitrit/nitrát mennyiségét megőrizzük.

A kidolgozott módszerrel különböző betegektől, dohányos és nem dohányos személyektől a szájüreg különböző helyeiről, illetve nyálmirigyekből (pl. a Wharton-vezetékéből, illetve a Stenon-vezetékéből) vett mintákat elemeztük, ily módon a kapilláris elektroforézist nyálminták orvosi diagnosztikai vizsgálatára tettük alkalmassá.

Szulfonamidmaradványok meghatározása állati eredetű készítményekből fordított fázisú folyadékkromatográfia – UV detektor (RP-HPLC-DAD) rendszeren

Tölgyesi László, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: Dr. Tolokán Antal folyadékkromatográfiai részlegvezető
Dr. E. Wessling Kémiai Laboratórium
Dr. Torkos Kornél egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A dolgozat célja, hogy bemutassa hét szulfonamid (Szulfanilamid, Szulfadiazin, Szulfamerazin, Szulfatiazol, Szulfapiridin, Szulfadimidin, Szulfadimetoxin) és a Dimetridazol szimultán meghatározását izomszövetből nagy hatékonyságú fordított fázisú folyadékkromatográfiai módszerrel és diódasoros detektálással (RP-HPLC-DAD). A dolgozat szemlélteti a kidolgozott módszer munkafázisait.

A kérdéses vegyületek oldószeres extrakciója az izomszövetből etil-acetáttal történik, melyet a szilárd fázisú extrakciós tisztítási lépés követ. Az izolált vegyületek elválasztására Zorbax™ Eclipse XDB-C₈ (4,6x150 mm, 5 µm) típusú oszlopot és gradiens elúciót alkalmaztam 0,8 ml/perc áramlási sebesség mellett. A mobil fázis 50 mM-os nátrium-acetát puffer (pH=4,5) és acetonitril elegye. Az elválasztott vegyületeket 270 nm (szulfonamidok) és 320 nm-en (Dimetridazole) detektáltam. Az injektált mintatérfogat 50,0 µl.

A kifejlesztett módszer teljesítőképessége megfelel az Európai Unió által előírt határértéknek (0,1 ppm).

Kulcsszavak: szulfonamid, dimetridazol, szermaradék meghatározás, MRL, folyadékkromatográfia, élelmiszeranalitika, kemoterapeutikum

A famotidin polimorfájának komplex analitikai vizsgálata

Német Zoltán, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Pokol György** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék
Ifj. Dr. Szántay Csaba főosztályvezető helyettes
Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Rt. Kutatási Analitikai Főosztály

Az utóbbi években a gyógyszerhatóanyagok polimorfája rohamosan növekvő szerepet játszik a gyógyszeripari kutatás-fejlesztés és minőségbiztosítás területén. A módosulatok megfelelő analitikai kontrolljának biztosítása több szempontból is nagyon fontos, a feladat pedig komoly kihívást jelent, hiszen adott polimorf rendszer esetében nem feltétlenül ismert *a priori* módon a különböző analitikai módszerek megbízhatósága, és előfordulhat, hogy maga a mérés, vagy a mintaelőkészítés is befolyásolja a polimorf összetételt.

Vizsgálatom tárgya a Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Rt. szabadalma által védett famotidin volt. A hatóanyag két módosulata monotróp rendszert alkot: az **A** módosulat a termodinamikailag minden hőmérsékleten stabil, míg a **B** kinetikai értelemben kedvezményezett forma.

Feladatom egyrészt az alkalmas analitikai módszerek (IR, Raman, XRPD, DSC, ssNMR) famotidinre vonatkozó főbb jellemzőinek felderítése volt, ezek birtokában pedig annak megállapítása, történik-e változás a polimorf összetételben a gyógyszer technológiai folyamatok során. A kérdésnek különös jelentőséget kölcsönözött, hogy spanyol kutatók nemrégiben a fenti módszerek közül legérzékenyebbnek bizonyult DSC vizsgálatok alapján a famotidin polimorf átalakulásáról számoltak be nagy nyomás és porítás hatására.

A porítás, nagynyomású préselés és mikronizálás hatását vizsgálva a DSC eredmények valóban nagyfokú **B**→**A** átalakulásra utaltak. Ezen tapasztalatoknak azonban az IR, Raman és XRPD vizsgálatok ellentmondtak.

Megállapítottam, hogy a polimorf átalakulás valójában nem elsősorban mechanikai hatásra, hanem a DSC mérés során a mechanokémiailag aktivált mintát ért hő hatására játszódik le. A **B**→**A** konverzió feltételezhetően olvadékból való átkristályosodás és olvadáspont közeli szilárd-szilárd átalakulás formájában egyaránt történik.

Vizsgálataim egyértelműen rávilágítottak arra, hogy a famotidin polimorf módosulatai esetében a DSC-t különösen körültekintő módon kell alkalmazni, és a polimorf összetételre vonatkozó megállapítások csak a megfelelő analitikai módszerek együttes és körültekintő alkalmazásának birtokában tekinthetők megalapozottnak.

Formamiddal interkalált kaolinok komplex analitikai vizsgálata

Vágvölgyi Veronika, okl. vegyészmérnök

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Kristóf János** egyetemi tanár
VE Analitikai Kémia Tanszék

Az agyagásványok szerkezetének, reaktív tulajdonságainak szisztematikus vizsgálatát széleskörű ipari felhasználásuk, valamint a természetben (pl. talajban) található agyagásványok és szerves komponensek között lejátszódó kölcsönhatások megismerése indokolja.

Munkám a Veszprémi Egyetem Analitikai Kémia Tanszékén folyó – a kaolinit ipari hasznosítási lehetőségeit vizsgáló - kutatásokhoz illeszkedik, melynek célja a különböző előfordulásokból származó, felületmódosított (mechanokémiailag aktivált illetve interkalált) kaolinit szerkezetének, stabilitásának vizsgálata.

Kísérleti munkám során kétfajta előfordulásból (Szeg, Zettlitz) származó kaolinit mintát vizsgáltam formamid interkalációs reagens segítségével. A mechanokémiailag aktivált, interkalált kaolinit minták tanulmányozásához termoanalitikai, tömegspektrometriai, röntgendiffrakciós és diffúz reflexiós Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiai módszereket alkalmaztam.

A kísérleti munkám célja az agyagásvány-szervesanyag komplex termikus stabilitásának és öregedésének vizsgálata, melynek során a másfél év alatt végbemenő szerkezeti átalakulásokat figyeltem meg; valamint a mechanokémiailag aktiválással kombinált termikus deinterkaláció hatásainak vizsgálata volt.

A vizsgálatok eredményeiből a következő konklúziók vonhatók le:

A szuperaktív centrumok elsősorban a mechanokémiailag kezelt és a termikus deinterkaláció kombinációjának következtében kialakuló szerkezeti rendezetlenségnek köszönhetőek. Ha az őrlést vagy a termikus deinterkalációt csak egymagában alkalmazva sikerülne kialakítani szuperaktív centrumot, akkor a minta képes lenne a levegőből CO₂-ot adszorbeálni, ami itt nem áll fenn.

A röntgendiffrakciós eredmények szerint az őrlési idővel csökken az interkalációs képesség. A DRIFT-spektrumok tanulmányozása során megfigyelhető, hogy a másfél éves, 6h-ig őrlött, formamiddal interkalált minta spektruma erősen hasonlít az eredeti (nem interkalált) minta spektrumához. Ez azt igazolja, hogy 6h őrlés után a kaolinit szerkezet teljes delaminációja megy végbe.

Összességében megállapítható, hogy a termoanalitikai, röntgendiffrakciós illetve DRIFT-spektroszkópiai módszerek együttes alkalmazásával a kétfajta előfordulásból származó, különböző módon módosított felületű kaolinit minták komplex analitikai vizsgálata végezhető el. A megfigyelt jelenségek (és azok részletesebb tanulmányozása) a módosított felületű kaolinok ipari adszorbensként való alkalmazása szempontjából kiemelkedő fontosságúak.

Aranyosgerend kútvezeinek minőségi elemzése

Mezei Amália, IV. évf. kémia tanár szakos hallgató

BBTE Kémia és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Darvasi Jenő** egyetemi docens
BBTE Analitikai Kémiai Tanszék

Víz nélkül nem képzelhető el az élet semmilyen formája, semmiféle ipari tevékenység, s éppen ezért a víz az ember életében minden időben nagy szerepet játszott. Falun, az emberek ivóvízként a kútvizet használják, ezért a dolgozat témájaként ezek vizsgálatát választottuk. Az emberek által használt víz eleget kell tegyen bizonyos kémiai, fizikai és organoleptikus tulajdonságoknak. A STAS 1342-91 szabvány szerint az ivóvíz színtelen, szagtalan, átlátszó, oxigénben gazdag és kórokozó baktériumoktól mentesnek kell lennie. Ezeket a tulajdonságokat a víz fizikokémiai analízisével lehet meghatározni

A dolgozatban Aranyosgerend kútvezeinek Li, Na, K, Ca, Mg, Cd és Pb tartalmát, valamint pH értékét határoztuk meg. A vízmintákat a falu három körzetének összesen tíz magánkútjából gyűjtöttük össze. A minták pH-jának meghatározása után a vizeket előzőleg sósavval kezelt polietilén palackokban gyűjtöttük, az EPA által előírt szabványeljárás alapján [1]. A mintákat a helyszínen 1-2 mL tömény sósavval megsavanyítottuk ($\text{pH} < 2$), a meghatározásig pedig jégszekrényben, 4°C -on tároltuk.

A pH-mérés **Merck Neutrolit** típusú indikátorpapírral illetve diffrakciórácsos reflektancia-spektrofotométerrel történt. Az atomspektroszkópiás meghatározásokat egy **HEATH-701** egycsatornás, monokromátoros (**HEATH EU-700**) lángspektrométerrel végeztük. A nehézfémek meghatározása (Cd, Pb) voltametriás eljárással, stripping analízissel történt. A mérési adatokat egy adatgyűjtő lapon keresztül számítógépbe tápláltuk és megfelelő program alapján dolgoztuk fel.

A felhasznált vegyszerek analitikai tisztaságúak voltak. Az etalon oldatok elkészítéséhez 1000 mg/L töménységű törzsoldatokat illetve azok hígításához kétszer desztillált vizet használtunk.

A felhasznált indikátorpapír 5-10 pH tartományban volt alkalmazható és színskálája 0.5 pH értéként volt kalibrálva. A pontosság javítására az indikátor papírokat konkvá diffrakciórácsos reflektancia-spektrofotométerrel mértük le (0/45 mérési geometria), és a színparaméterek alapján (CIE-Lab) kalibráltuk a pH-értékeket.

Az alkálifémeket atomemissziós eljárással, míg a földfémeket atomabszorpciós eljárással határoztuk meg, minden elem esetében az előzőleg optimalizált kísérleti körülmények között. A mennyiségi meghatározásokat a kalibrációs görbe és a standard addíciós eljárással végeztük el.

[1] Cleseri, L. S., Greenberg, A. E., Trussel, R. R., Eds., *Standard Methods for examination of water and wastewater*, 17th Edition, APHA-AWWA-WPCF (1989)

Xantinszármazékok arany(III)-kloriddal való reakciója és kimutatása

Tunyogi Tünde, V. évf. gyógyszerész hallgató

KGYE

Témavezetők: **Dr. Dinya Zoltán** egyetemi tanár
DE Szerves Kémia Tanszék
Dr. Bodoki Endre egyetemi tanársegéd
KGYE

A mikrokémiai reakciók segítségével mikro-grammnyi mennyiségű, hasonló szerkezettel rendelkező gyógyszerhatóanyagok könnyen megkülönböztethetőek kristályformájuk alapján.

A teofillin, a teobromin és a koffein a gyógyászatban legelterjedtebb xantinszármazékok.

Munkám során ezen anyagok arany(III)-klorid jelenlétében kapott kristályait optikai mikroszkóppal vizsgáltam.

A megfelelő szerkezet továbbtanulmányozása érdekében kísérleteimet infravörös spektroszkópiai vizsgálatokkal is kiegészítettem. A kapott spektrumok eltérést mutatnak a standard teofillin és koffein spektrumához viszonyítva.

A teofillin esetében röntgen-diffrakciós vizsgálatra alapozva új komplex vegyületet kaptam.

Eredményeim alapján a mikrokémiai tesztek könnyen felhasználható xantinszármazékok esetén, melyek arany(III)-kloriddal könnyen kimutathatóak.

Baromfi lábtőcsontok analízise

Seff Amália-Laura, IV. évf. kémia tanár szakos hallgató

BBTE Kémia és Vegyészmérnöki kar

Témavezetők: **Dr. Darvasi Jenő** egyetemi docens
BBTE Analitikai Kémiai Tanszék
Dr. Kékedy-Nagy László egyetemi docens
BBTE Analitikai Kémiai Tanszék

Az analitikai kémiával és ezen belül a nyomelemanalitikával szemben támasztott követelmények növekedése, és az automatizálás elterjedése, az utóbbi években fokozta a mintaelőkészítés jelentőségét. A mintavételnek és a mintaelőkészítésnek döntő fontossága van a helyes mérési eredmények szempontjából. Az egyik legkorszerűbb mintafeltárást a mikrohullámú berendezések biztosítják. A mikrohullámú feltárást, amely az utóbbi években terjedt el, ma az egyik leghatásosabb és leggyorsabb módszerként alkalmazzák.

A bemutatott dolgozatban azt vizsgáltuk, hogy mennyire térnek el egymástól a különböző módon feltárt baromfi csontminták nehézfém meghatározásai illetve, hogy az egyes helységekből mennyire mutatkozik meg a nehézfém-tartalom a baromfi lábtőcsontokban. Munkánk során baromfi csontmintákat tártunk fel homokfürdőn, illetve a MAXIDIGEST MX 350 nyílt mikrohullámú berendezéssel és a MLS- 1200 MEGA teflonbombával. A csontminták különböző helységekből származtak (Magyarfenes, Mezőkirályfalva, Harasztkerék, Szatmárnémeti és Lanka). A nehézfémeket ICP-QES spektrométerrel, stripping analízissel és atomabszorpciós spektrométerrel határoztuk meg.

A méréseket Veszprémben, a Veszprémi Egyetem Analitikai Kémia Tanszék és a Babes-Bólyai Tudományegyetem kémiai és Vegyészmérnöki Kar Analitikai Kémiai Tanszék laboratóriumaiban végeztük.

A tejszír zsírsavösszetételének vizsgálata

Szabó Kinga, III. évf. élelmiszeripari mérnök hallgató

Gegő István, III. évf. élelmiszeripari mérnök hallgató

Sapientia EMTE Műszaki és Humántudományok Kar

Témavezetők: **Salamon Rozália Veronika** gyakornok
Sapientia EMTE Csíkszeredai Kar
Dr. Csapó János egyetemi tanár
Kaposvári Egyetem, Kémiai Intézet,
Sapientia EMTE Csíkszeredai Kar

Kutatásunk célja az Erdélyben honosult holstein-fríz F_1 keresztezettek, szimentáli és német tarka szarvasmarhafajták tejszír zsírsavösszetételének analitikai elemzése és a fajták közti különbségek és azonosságok vizsgálata. A mintákat előkészítés után (lipidextrakció, származékképzés (BF_3)-bór-trifluoridos átészterezés) gáz-kromatográffal (GC) elemeztük. Az eredményeket statisztikailag értékeltük. A fajták között csak bizonyos zsírsavak (palmitinsav, olajsav, sztearinsav, mirisztinsav, elaidinsav) között találtunk jelentős eltérést, a tej zsírsavösszetételét tekintve. Táplálkozástudományi szempontból a vizsgált zsírsavak tekintetében mindhárom fajta tejszírja azonos értékűnek tekinthető. Vizsgálati eredményeinket összehasonlítva a Nyugat-Európából és Észak-Amerikából származó adatokkal megállapíthatjuk, hogy az adott tartási és takarmányozási viszonyok között az erdélyi eredmények a szakirodalmi adatokkal gyakorlatilag teljesen megegyeznek.

A mitózis és meiózisos szaporodás közti átmenet szabályozásának modellezése hasadó élesztőben

Tóth Attila, okl. biomérnök

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Novák Béla** egyetemi tanár
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék
Dr. Csikász-Nagy Attila egyetemi adjunktus
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

A XXI. század poszt-genomikus sejtbiológiájának nagy kihívása annak felderítése, hogy az élőlényeket felépítő molekulák miképp működnek egy élő, szaporodó sejtet. A sejteket irányító bonyolult fehérje-hálózatok működésének megértésében hatékony segítséget jelenthetnek a matematikai modellek. Munkám a hasadó élesztő aszexuális és szexuális szaporodása közti átmenet vizsgálatára irányult. A '70-es évek fiziológiai kísérleteinek eredményeitől a legmodernebb DNS chip analízisekből nyert információkig számos forrásra támaszkodtam. Ezek felhasználásával elkészítettem a meiózis iniciálását szabályozó molekuláris hálózat matematikai modelljét, majd számítógépes szimulációk és fázissík analízis segítségével vizsgáltam azt. A modell dinamikai tulajdonságainak elemzésével rámutattam arra, hogy a mitózis és a meiózisos szaporodás közti átmenet szabályozása két enzim antagonisztikus kölcsönhatásán alapul. Magyarázatot adtam a szabályozási hálózat több mutánsának viselkedésére.

Parmezán sajtok összehasonlító vizsgálata D- és L-aminosav tartalmuk alapján

Kiss Katalin, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Simonné dr. Sarkadi Livia** egyetemi docens
BME Biokémiai és Élelmiszerteknológiai Tanszék

A parmezán sajt (Parmigiano-Reggiano) eredeti hazája Olaszország. A kereskedelmi forgalomban azonban számos máshol előállított termék is megtalálható e minőséget jelentő név alatt. Kémiai összetételének pontos ismerete ezért táplálkozás-élettani szerepe mellett, minőségbiztosítási (eredetvédelmi) szempontok miatt is nagy jelentőséggel bír. Kutatómunkám célja különböző helyekről származó és eltérő technológiával készített parmezán sajtok minősítése volt L-aminosav összetételük és szabad D-aszparaginsav (D-Asp), valamint D-glutaminsav (D-Glu) tartalmuk alapján. Mivel a parmezán sajt igen nagy átmérőjű (46 cm), ezért egy szeletét négy részre osztva vizsgáltam, így lehetőségem nyílt az aminosav eloszlás tanulmányozására is a sajtokban.

A szabad L-aminosavakat perklórsavas extrakcióval nyertem ki a mintákból. A fehérjékben kötött L-aminosavakat p-toluol-szulfonsavas hidrolízissel szabadítottam fel. Az L-aminosav tartalom minőségi és mennyiségi meghatározást automatikus aminosav analízissel végeztem. A szabad D-aminosav tartalom meghatározása o-ftálaldehid és l-tio- β -D-glükóz reagensekkel történő diasztereomer párképzés után, fordított fázisú nagy hatékonyságú folyadékkromatográfiával történt.

A vizsgált 9 parmezán sajt összes L-aminosav tartalma 221,98 és 446,25 mg/g sajt között változott, és jellemző különbségeket mutatott mind a származási hely, mind a gyártási idő szerint. A gyártási hiba kimutatására a kéntartalmú metionin bizonyult alkalmasnak.

A parmezán sajtok jellegzetes szabad L-aminosav mintázattal rendelkeztek, szabad aminosav tartalmuk 36,28 és 82,07 mg/g sajt között változott. A legjellemzőbb szabad aminosavak a glutaminsav, a prolin, a lizin, a leucin és a szerin voltak. A hagyományos és a biosajtok a szabad arginin és ornitin tartalomban különböztek leginkább.

A D-aminosavak közül a szabad D-Asp és D-Glu mennyisége az érlelési idő függvényében nőtt a sajtokban. A D/L aszparaginsav arány alkalmasnak látszik a technológiai különbségek kimutatására. A D/L glutaminsav arány a Parmigiano-Reggiano sajtok érlelési idejével mutatott szoros kapcsolatot.

Az eredményeim azt mutatták, hogy a szabad L-aminosav tartalom, a D/L aszparaginsav és a D/L glutaminsav arány jó paramétereknek ígérkeznek a parmezán sajtok minősítéséhez.

Az α -kazein, a MAP2c és a p21(CIP1) rendezetlen fehérjék in vivo modell-rendszerben végzett szerkezetvizsgálata

Szász Csilla, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Tompa Péter** tudományos főmunkatárs
MTA SzBK Enzimológiai Intézet

A molekuláris biológia általánosan elfogadott nézete szerint a fehérjefunkció alapvető feltétele a jól definiálható 3D-os szerkezet. Mára azonban szükségessé vált ennek a szerkezet-funkció nézetnek az újragondolása, mivel az utóbbi évtizedben számos fehérjéről illetve fehérjeszakasról derült ki, hogy natív körülmények között, funkcionális állapotban sem rendelkezik jól definiált térszerkezettel, inkább a globuláris fehérjék denaturált állapotaihoz hasonlít. E szerkezeti sajátóságot mutató rendezetlen fehérjék nagy családjába tartozik például a p21^{Cip1}/p27^{Kip1}, α -kazein, NACP (α -synuclein), MAP2/tau, kalpasztatin, a prion fehérje N-terminális doménje, vagy számos transzkripció faktor transzaktivátor doménje. A rendezetlen fehérjék szerkezetének illetve funkciójának kutatását számos tényező indokolja. A rendezetlenség, mint általános jelenség eddigi vizsgálatát azonban kritikával illetjük azon az alapon, hogy az alacsony koncentrációk mellett kivitelezett in vitro vizsgálatok mesterséges környezetet teremtenek a fehérjéknek, ahol ezek rendezetlen szerkezetet mutatnak. A fehérjék fiziológiás körülmények között megvalósuló szerkezeti állapotának tanulmányozásához azonban figyelembe kell venni az élő sejt belsejében uralkodó igen magas makromolekula koncentráció (200-400 g/l) hatásait is. Ez a "crowding" hatás in vitro körülmények között nem jelentkezik, mivel a koncentráció itt nem magasabb, mint 1-10 g/l. A crowding azonban meglepően nagy hatást okoz a makromolekulák kölcsönhatásainak, illetve feltekeredésének sebességi és egyensúlyi állandójában. Fontos tehát megvizsgálni, hogy milyen mértékű konformáció-változást okoz a crowding hatás rendezetlen fehérjék esetében.

Kísérleteim során in vitro modell-rendszerben tanulmányoztam a crowding hatást az α -kazein, a MAP2c és a p21^{Cip1} rendezetlen fehérjéken, melyek híg pufferben rendezetlen szerkezetet vesznek fel. A crowding közeget szintetikus anyagokkal (Ficoll, dextrán) modelleztem, 400 g/l koncentrációban. A crowding okozta konformáció-változást fluoreszcencia spektroszkópia és cirkuláris dikroizmus spektroszkópia segítségével vizsgáltam.

Eredményeim azt jelzik, hogy a crowding a rendezetlen fehérjék konformációjára csak igen kis mértékű hatást gyakorol, vagyis ezen fehérjék szerkezeti rendezetlensége valószínűleg lényeges funkcionális tulajdonságuk.

Glükózaminoglikánok antioxidáns hatásának összehasonlító vizsgálata

Könczöl Árpád, IV. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Balogh György Tibor** kutató-vegyészmérnök
Richter Gedeon Rt. Technológiai Fejlesztési Laboratórium II.

A glükózaminoglikánok (GAG) (Hialuronan; Kondroitin szulfát A; C; Heparin, stb.) jellemzően N-acetil-glükózamin vagy N-acetil-galaktózamin és D-glükuronsav diszacharid egységekből felépülő mukopoliszacharidok. A hialuronant kivéve mindhárom GAG cukorlánc különböző mértékben szulfatált. A GAG-ok főként emlősök kötőszövetekben (extracelluláris mátrix elemei) vannak jelen, ily módon rendkívül sok fiziológiai folyamatban vesznek részt.

A biológiai rendszerek metabolizmusában és homeosztázisának fenntartásában központi jelentőségű gyökös mechanizmusú folyamatok (immunválasz kialakulása, gyulladásos folyamatok, lipid peroxidáció, enzimek dezaktiválódása, DNS sérülései, elektrontranszport rendszer működése) megismerésére és kontrollálásának lehetséges eszközeire (antioxidánsok) fókuszálódik a jelenkor biokémiai kutatásainak jelentős hányada. Napjainkban a GAG-ok szabadgyökös folyamatokban játszott szerepére irányuló kutatások főként a hialuronanra koncentrálnak, bár a kondroitin szulfát és heparin antioxidáns hatásáról is vannak ismereteink. Ennek ellenére GAG-ok antioxidáns jellegét együttesen vizsgáló és összehasonlító tanulmány még nem született. Figyelembe véve fiziológiai jelentőségüket és fokozott terápiás alkalmazásukat, fontosnak tartottuk az összehasonlító kísérletek elvégzését.

Vizsgálatainkban az élettani szempontból legfontosabb négy GAG-nak (Hialuronan, Kondroitin szulfát A és C, illetve Heparin), illetve a hialuronan különböző molekulaméretű fragmenseinek három különböző reaktív ágenssel (hidroxil gyök, peroxinitrit gyökion, és peroxil gyök) szembeni antioxidáns hatását in vitro modellrendszerekben vizsgáltuk. Ezen felül a GAG-ok antioxidáns hatásának mechanizmusát a szulfatált GAG-ok szabadgyökökkel szembeni reakciója során a gyöktámadás hatására felszabaduló szulfát mennyiségének változásán keresztül is vizsgáltuk.

Eredményeink alapján a fenti GAG-ok antioxidáns hatásának igazolásán, illetve összehasonlításán túlmenően ezen molekulák gyökfelszabadulással járó kórképekben betöltött lehetséges szerepét is igyekeztünk pontosítani.

A búza sikéralkotó polipeptidek szintézisének vizsgálata HPLC technikával

Guóth Adrienn, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Lásztity Radomir** emeritusz professzor
BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék

Már a korai kutatások eredményei is alátámasztották, hogy a búza sütőipari minőségének alakulásában a szem tartalékfehérjéből keletkező sikér játssza a főszerepet. Az utóbbi évek kutatásai azonban rávilágítottak, hogy a genetikailag azonos összetételű sikérek reológiai tulajdonságai évről-évre változnak. Feltételezésünk szerint a probléma oka, hogy a fehérjék polimerizációs mechanizmusát és kölcsönhatásait több tényező is befolyásolja, azonban az erre vonatkozó ismeretek hiányosak. Jelen kutatási projektünk a fenti kérdés részletes vizsgálatára irányul. A dolgozatban összefoglalt munka két részfeladat megoldását célozta a tárgykörben: RP-HPLC elválasztási módszerek adaptációjával, illetve fejlesztésével megoldani a gliadinok és a kis- és nagy molekulatömegű glutenin alegységek (LMW- és HMW-GS) megbízható elválasztását, és tanulmányozni a sikérképző polipeptidek *in vivo* szintézisét, sorrendjét és dinamikáját.

A kísérleti munka során ismert HMW-GS összetételű búzafajtából (GK Őthalom) a virágzást követő 12. naptól aratásig 2-3 naponként vett mintákat vizsgáltam.

Vizsgálataim során a következőket állapítottam meg:

A gliadinok RP-HPLC vizsgálatához sikeresen adaptáltam módszert, fejlesztettem tovább és optimaltam. A búza sikérfehérjéi érés közbeni változásait vizsgálva megállapítottam, hogy az érés folyamán mind a gliadin-, mind a glutenin-szintézis időbeli lefutása kétlépcsős. Az egyes fehérjecsoportok egyedi változása nem kiegyensúlyozott, a gliadinok közül először a legkisebb hidrofóbicitású (ω -gliadin) frakció jelenik meg, aminek mennyisége az érés során kevésbé változik. A többi frakció fehérjéi csak napokkal később mutathatók ki, viszont mennyiségük gyorsan növekszik. Az LMW-GS-ek már az érés igen korai szakaszában kialakulnak, a HMW-GS-ek megjelenése később történik. A HMW-GS-ek közül először a Dy alegység jelenik meg, de néhány nap múlva már valamennyi alegység típus jelen van a fejlődő magban. A gluteninek és gliadinok érés közbeni változásait együtt tekintve megerősítettem, hogy az irodalomban is leírt módon (Kaczowski és mtsai., 1987) az LMW-GS-ek és a gliadinok szintézise a virágzás után korábban kezdődik, mint a HMW glutenin alegységeké, melyek egyszerre szintetizálódnak.

Új lehetőség a csontritkulás terápiájában: Kalcium- és foszfátionok bejuttatása osteoporoticus helyekre elektroforetikus eljárással

Gomez Izabella, V. évf. általános orvostan hallgató

DE Általános Orvosi Kar

Témavezető: **Dr. Pap Lajos** emeritusz professzor
DE Szervetlen és Analitikai Kém. Tanszék Környezetanal. Csoport

A csontritkulás kezelésére jelenleg alkalmazott terápiák sok esetben hatékonyak bizonyultak, de továbbra sem megoldott a csontot felépítő anyagok megfelelő helyre történő bejuttatása. A per os, ill. parenterális kezeléseknél ugyanis gyakran előfordul, hogy a Ca éppen olyan helyekre épül be, ahol a kóros kalcium felhalmozódással jellemezhető „csontcsőrök” vannak. Kutatómunkánk célja, hogy olyan hatékony és fájdalommentes eljárást dolgozzunk ki, mellyel célzottan, a csontritkulásos területre lehet kalciumot és foszfátot iontoforetikus eljárással bejuttatni.

Kísérleteink során kalcium-bentonitot tartalmazó pakolást készítettünk, az ebben lévő Ca^{2+} -ok bőrön keresztüli bejutását vizsgáltuk *in vitro*, valamint megkíséreltük a Ca^{2+} - és a PO_4^{3-} -ionok szimultán csontba juttatását egy általunk tervezett, ún. „deszkamodell” elektrolizáló berendezéssel. Az emberi szervezet modellezésére a kopasztott sertésbőrt, zsír-, izom- és csontszövetet tartalmazó rendszert találtuk legcélszerűbbnek. A kalcium- és foszfátionok bejuttatása elektroforetikus módszerrel történt. Az elektródokra felkent pakolásból speciális lökötő egyenáram hatására bekövetkezett ionvándorlást vizsgáltuk a fenti sertés szövetekben. Az egyes szövetrétegekből vett minták mikrohullámmal segített roncsolását követően lángatomabszorpciós technikával mértük a kalciumion, illetve spektrofotométerrel a foszfátion koncentrációváltozást.

Módszerünkkel a bőrön és a lágyrészekben keresztül a kalciumionok kiemelkedően jó, a foszfátionok megfelelő határfokkal jutottak be a csontba, annak kalcium-, illetve foszfátion tartalmát szignifikáns mértékben megnövelve. Az alkalmazott elektroforetikus eljárásunk eredményeként a vizsgált csontszövet kalciumkoncentrációja közel 1,8-szorosára nőtt meg. A kapott értékek szerint ezzel egyidejűleg sikerült az általunk előállított foszfát anyagrendszer bejuttatnunk.

Módszerünk előnye, hogy a kalciumot és a foszfátot célzottan, a csontritkulásos területre lehet bejuttatni, amennyiben a fenti eljárást a beteg azon testrészén alkalmazzuk, ahol előzetesen osteoporosist állapítottak meg.

A sejtosztódás szabályozásának egy reakciókinetikai modellje

Kapuy Orsolya, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Novák Béla** egyetemi tanár
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék
Dr. Gyórfy Béla tudományos munkatárs
MTA-BME Molekuláris Hálózatok Dinamikája Kutatócsoport

A sejtek szaporodását szabályozó molekulák egy bonyolult hálózatot alkotnak, melynek dinamikus viselkedése határozza meg a sejtek legalapvetőbb tulajdonságát, az önreprodukciós képességet. A biológiai evolúció következményeként ugyanaz a szabályozási hálózat irányítja a legegyszerűbb egysejtű élőlények és a többsejtű szervezetek sejtjeinek szaporodását is. Ennek következtében a sejt szaporodás szabályozásának problémáját az emberi sejteknél sokkal egyszerűbb egysejtű élőlényekkel (pl. élesztősejtek) is vizsgálni lehet. Az így kapott eredmények pedig bizonyítottan jól alkalmazhatók a fejlettebb sejtekre is. A sejtek osztódásának szabályozását legjobban a hasadó élesztőnél ismerjük, melynek sejtjei harántfal (szeptum) képzés révén válnak ketté. Éppen ezért, a hasadó élesztősejtek osztódását szabályozó hálózatot **szeptációt iniciáló hálózatnak** (röviden **SIN**) szokás nevezni.

Kidolgoztam egy egyszerű reakciókinetikai modellt a SIN-re, és annak viselkedését számítógépes szimulációval vizsgáltam. Megállapítottam, hogy a SIN az adaptációs hálózatok tulajdonságával rendelkezik, mert stacionárius állapotban nem aktiválódik a mitózist szabályozó Cdc2/Cdc13 protein-kináz semmilyen értékére sem. Ezzel szemben átmenetileg aktiválódik, amikor a Cdc2/Cdc13 aktivitás hirtelen csökken, ami a sejt mag osztódását követően játszódik le. Ez a kapcsolat magyarázza a sejtosztódás függését a mitózis előzetes lejátszódásától.

A SIN modelljét beépítettem a DNS replikáció és a mitózis szabályozását leíró modellbe, és így egy olyan reakciókinetikai modellt készítettem, amely leírja mindhárom sejtciklus esemény szabályozását. Számítógépes szimulációs vizsgálatokkal igazoltam, hogy a modell a sejtosztódás időbeli szabályozásának megfelelő leírását adja nemcsak normális, hanem különböző mutáns sejteknél is.

Az epidermolysis bullosa simplex betegség genetikai hátterének vizsgálata

Sajó Ráchel, IV. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kárpáti Sarolta** intézetvezető egyetemi tanár
SE-ÁOK Bőr- Nemikórtani és Bőronkológiai Klinika
Dr. Csikós Márta klinikai orvos
SE-ÁOK Bőr- Nemikórtani és Bőronkológiai Klinika
Bóna Annamária laboratóriumi vegyész
SE-ÁOK Bőr, Nemikórtani és Bőronkológiai Klinika
Konzulens: **Dr. Sveiczter Ákos** egyetemi docens
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

Munkánk során a SE-ÁOK Bőr- Nemikórtani és Bőronkológiai Klinikán megforduló és a vizsgálatokhoz hozzájáruló epidermolysis bullosa simplexben (EBS) szenvedő betegek keratin 5 (*KRT5*) és keratin 14 (*KRT14*) génjeinek mutációt vizsgáltuk a betegség genetikai hátterének felderítése, a genotípus-fenotípus korrelációt pontosabb megismerése, valamint a mutációkat tartalmazó adatbázis újabb eredményekkel való bővítése érdekében.

A vizsgálatok során a betegek és egészséges családtagjaik perifériás véréből DNS-t izoláltunk. Ezt követően a *KRT5* gén esetében a gén összes exonját polimeráz láncreakció (PCR) segítségével amplifikáltuk, majd a termékeket konformáció szenzitív gélben végzett heteroduplex analízissel (CSGE) válogattuk. A shift pozitív exonok szekvenciáit egy tisztítási eljárás után automata szekvenálással határoztuk meg. A mutációk verifikálása restrikciós endonukleázokkal történt. A *KRT14* gén esetében a funkcionális gén mellett egy pszeudogén is található. Mivel a pszeudogén szekvenciája nagy mértékben megegyezik a funkcionális génnel, így PCR során mindkettő amplifikálódna. A pszeudogén sokszorozódásának megakadályozására a DNS-t restrikciós endonukleázokkal hasítottuk. Így a pszeudogén rövidebb szegmensekre vágódott, míg a funkcionális gén ép maradt. Ezután a PCR-t és az azt követő reakciókat ugyanúgy kiviteleztük, mint a *KRT5* gén esetében.

Eddigi eredményeink: három az EBS-ben szenvedő betegnél és családtagjaiknál azonosítottuk a fenotípust okozó mutációt. Ebből kettő új, az irodalomban még nem ismert mutáció (*KRT14* génben L136Q, *KRT5* génben R331G), a harmadik pedig egy japán család esetében kimutatott eltérés volt (*KRT5* génben E170K). A többi beteg esetében a genetikai vizsgálatok még folyamatban vannak.

**Konformációsán gátolt endomorfín peptidek
receptorkötődésének vizsgálata**

Páhi Barbara Annamária, okl. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Szűcs Mária** tudományos tanácsadó
MTA SZBK Biokémia Intézet

Az opioid receptorok az idegsejtek membránján levő kulcsfontosságú fehérjék, melyeknek legalább 3 fő típusát (μ , δ , κ) lehet elkülöníteni. A növényi alkaloid morfín a μ -opioid receptorokhoz kötődik nagy affinitással. Egy amerikai kutatócsoport a közelmúltban felfedezte a morfín receptor agyban is előforduló endogén peptid ligandumait (Zadina et al. Nature (1997) 386: 499-502). Az endomorfín 1 (Tyr-Pro-Trp-Phe-NH₂) és az endomorfín 2 (NH₂-Tyr-Pro-Phe-Phe-CONH₂) igen potens analgetikus hatást mutatnak, nem rendelkeznek viszont a morfint jellemző kábító és ún. "reward" hatással, így szignifikáns klinikai potenciállal bírnak.

Az endomorfín-1 és endomorfín-2 konformációsán gátolt új szintetikus származékainak biológiai aktivitását tanulmányoztuk. A vizsgált származékok a 2-es helyzetben Pro helyett aliciklusos β -amino-karbonsavakat tartalmaznak, azok két királis centrumának megfelelően négy lehetséges konfigurációban, két cisz (*S,R* és *R,S*) és két transz (*S,S* és *R,R*) formában.

Radioligand kötési módszerrel patkány agyi membrán készítményekben receptorkötési vizsgálatokat végzünk annak megállapítására, hogyan változik az új származékok receptorhoz való kötési affinitása, receptor szelektivitása. Egyrészt a radioaktívan jelölt vegyületek kötődési paramétereit mértük kinetikai és telítési kísérletekben, másrészt jelöletlen anyagok, ligandok tulajdonságait vizsgáltuk kompetíciós kísérletekben, ebből következtetve a receptor, ill. altípus specifitásukra és kötési paramétereikre. A μ illetve δ receptorokhoz kötődést [³H]Ile^{5,6}-deltorfinnal illetve [³H]endomorfín-2-vel végzett leszorítási kísérletekkel határozzuk meg. A különböző analógok jelátviteli tulajdonságaira a GTP γ S kötési kísérletekből következtethetünk. Ez a módszer segít eldönteni a vizsgálandó anyag agonista vagy antagonistá jellegét azáltal, hogy megmérhetjük, vajon az adott ligand stimulálja-e a receptor-ligand kölcsönhatás indukálásán keresztül a [³⁵S]GTP γ S kötődést a G-fehérjéhez, ill. segít meghatározni az agonista hatékonyságát. Mindezen vizsgálatok után kiválasztottunk egy új analógot (cisz-ACHC-endomorfín-2), aminek radioaktívan jelölt, ill. nem jelölt formáját is vizsgáltuk, radioligand és receptorkötési mérésekkel karakterizáltuk.

Az alapvegyületek szerkezeti módosítása, ill. annak az új származékok receptorhoz való kötési affinitására, receptor altípus szelektivitására ill. a biológiai aktivitásra gyakorolt hatásának vizsgálata mind az alapkutatás, mind a gyógyszerkutatás számára fontos információkat szolgáltat.

**A kukoricafeldolgozás minőségellenőrzésében használható
gyors módszerek vizsgálata**

Gelencsér Tímea, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Salgó András** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék

Konzulensek: **Orbán Ferencné** minőségügyi vezető
Hungrana Kft.

Gergely Szilveszter tanszéki mérnök
BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék

A kukorica feldolgozás korszerű, enzimes technológiájának fejlesztése, a hulladékanyagok minimalizálásának igénye, a termelési biztonság növelése egyre újabb, lehetőség szerint gyors, ellenőrzési módszerek fejlesztését és gyakorlati bevezetését igényli. A gyorsvizsgálatok egyrészt kiválthatják a klasszikus ellenőrző módszerek egy részét, másrészt új analitikai igényeket elégíthetnek ki.

TDK dolgozatomban a Hungrana Kukoricafeldolgozó Kft. (Szabadegyháza) üzemi, technológiai feltételei között vizsgáltam a különféle gyors, ipari környezetbe illeszthető minőségellenőrzési módszerek alkalmazhatóságát.

A feldolgozóüzem igényeinek megfelelően elemeztem a nyersanyag minőség változásának hosszú távú trendjét, és kimutattam a termesztési körülmények okozta kedvezőtlen minőség változások valószínű okait.

NIR spektroszkópiai és klasszikus kémiai vizsgáló módszerek összehasonlításával statisztikailag elemeztem és módosítottam a száraz állapotú kukoricanyersanyag minősítésére szolgáló kalibrációs összefüggéseket, majd kalibrációt dolgoztam ki nedves kukorica nyersanyag minősítésére. A kidolgozott kalibrációk elemzése során igazoltam a referencia módszerek pontosságának, a kalibrációk használhatóságára gyakorolt hatását.

A kukoricanyersanyag mikrobiológiai fertőzöttségének gyors kimutatására az „elektronikus orr” mint vizsgáló eljárás alkalmazhatóságát vizsgáltam.

Immunkémiai módszer (ELISA) alkalmazásával (Veratox DON 5/5) kimutattam, hogy a feldolgozóüzem DON toxin fertőzöttsége elsősorban a melléktermékek tekintetében nem elhanyagolható. Szintén immunkémiai alapú tesztsík módszerrel (Agri-Screen cry Strp Test) igazoltam, hogy a feldolgozóüzem általam vizsgált kukoricái között (0,125 %-ot meghaladó szinten) nincs genetikailag módosított nyersanyag.

**Katabolit represszióra rezisztens celluláz enzim termelő
Trichoderma mutánsok előállítása és vizsgálata**

Megyeri László, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki kar

Témavezető: **Dr. Szakács György** tudományos főmunkatárs
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

TDK munkám során feladatom az volt, hogy katabolit represszióra rezisztens *Trichoderma* mutánsokat hozzak létre, melyek a jól ismert *T.reesei* Rut C30 törzsnél több celluláz enzimet termelnek gőzrobbantással előkezelt fenyőfa és fűzfa szénforráson. A munka első lépéseként mintegy 90 *Trichoderma* vad törzs celluláz enzim termelését vizsgáltam meg rázó lombikos tenyésztésben. A legmagasabb szűrőpapír lebontó aktivitást (FPA) egy brazil talajmintából izolált (TUB F-1505) törzs mutatta, ezért a mutációs kísérleteket ezzel a törzssel végeztem. A mutációt kémiai mutagén (N-metil-N'-nitro-N-nitrozóguanidin, NTG) és UV besugárzás használatával hajtottam végre az irodalomból adaptált, majd továbbfejlesztett módszer alkalmazásával. Több mint 14000 mutáns telepet hoztam létre és vizsgáltam meg Petri csészés agaros táptalajon kinövesztve, ezek közül 186 mutánssal végeztem rázatott lombikos fermentációt. Mintegy 50 mutáns került liofilezésre a tanszéken, ezek közül 32 mutáns enzimtermelése volt azonos, vagy magasabb a *T.reesei* Rut C30-nál.

A kísérletek lezárásaként a legjobb 6 mutánst Svédországban a Lundi egyetemen rázatott lombikos fermentációban és laboratóriumi fermentációs kísérletekben hasonlítottuk össze a *T.reesei* Rut C30-al, illetve a fermentációs felülúszókkal hidrolízis kísérleteket is végeztünk. Legjobb termelőnek a TUB F-1721, TUB F-1724 és a TUB F-1727 jelű törzs bizonyult, ezek ipari érdeklődésre is számot tarthatnak. A *T.reesei* Rut C30 rázatott lombikban és fermentorban – az irodalmi adatokkal összehangban - alig termelt β -glükózidáz enzimet (0.005-0.05 IU/ml), míg a mutánsok igen magas aktivitásokat mutattak (0.59-0.67 IU/ml). Továbbá, a mutánsok esetében gyorsabban beállt a maximális felső enzim szint, mint a Rut C30 esetében. A magas β -glükózidáz aktivitásnak köszönhetően a hidrolízis kísérletekben a mutánsok legalább 50%-al jobbnak bizonyultak, mint a *T.reesei* Rut C30. Az új mutánsok fermentálé felülúszóival végzett lignocellulóz hidrolízis kísérletekben nem volt szükség pótlólagos β -glükózidáz enzim adagolásra, míg a Rut C30 felülúszók vagy kereskedelmi celluláz enzim készítmény esetében igen. Ez perspektivikusan jelentős költség megtakarítást tesz lehetővé a bioalkohol előállításakor.

**Kemotaktikus peptidok és konjugátumaik szintézise és
vizsgálata**

Horváti Kata, okl. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Bősze Szilvia** tudományos főmunkatárs
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport
Dr. Hudecz Ferenc egyetemi tanár
ELTE Szerves Kémiai Tanszék
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

A kemotaxis az egy- és többsejtű szervezetek alapvető válaszreakciója, melynek fontos biológiai és klinikai jelentősége van. Kemotaktikus aktivitású molekulák előállításával lehetőségünk van olyan új típusú szintetikus ligandumok kifejlesztésére, melyek szerepet kaphatnak a terápiás alkalmazásban.

A Semmelweis Egyetem Genetikai, Sejt- és Immunbiológiai Intézete, az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoportja és az ELTE Szerves Kémiai Tanszéke között létrejött együttműködés keretében régóta folynak kutatások a kémiai jelátvitel evolúciójának megismerésére és oligopeptid szignálvegyületek tanulmányozására.

A fenti csoportok által végzett kutatások bizonyították, hogy a triptofil-szeril-X-triptofil-szerin (X=változó aminosav) pentapeptidet (citokinekben, citokinreceptorokban jelenlévő konzervatív szekvenciamotívum), vagy annak részletét tartalmazó szintetikus peptidok némelyike jelentős kemotaktikus aktivitással rendelkezik.

A terápiás alkalmazhatóság terén nagy elméleti és gyakorlati jelentősége van a kis méretű lineáris peptidok makromolekuláris hordozóhoz való konjugálásának.

Munkánk során olyan szintetikus peptidok és peptidkonjugátumok előállításával foglalkoztunk, melyek az előzetes kísérletek alapján jelentős kemotaktikus potenciállal rendelkeznek. A peptidkonjugátumok előállításához az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport által kifejlesztett szintetikus, elágazó láncú polipeptideket választottunk hordozónak (poli[Lys-(Ser_i-DL-Ala_m)] (SAK); poli[Lys-(Glu_i-DL-Ala_m)] (EAK)). Ezen hordozókról az előzetes kutatások megállapították, hogy önmagukban is rendelkeznek kemotaktikus aktivitással. A peptidkonjugátumok szintézisét tioéterkötés kialakításával végeztük, annak érdekében, hogy a kemotaktikus aktivitású peptid szerkezete ne változzon jelentős mértékben. Az előállított peptidkonjugátumok analízise során kapott adatok alapján megállapíthatjuk, hogy az elágazó láncú polipeptideknél az általunk használt konjugálási eljárás sikeresen alkalmazható.

Dehidroaskorbinsav és glükóz transzportja a növényi mitokondriumban

Mayer Miklós, IV. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Szarka András** egyetemi adjunktus
BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék
Dr. Bánhegyi Gábor egyetemi docens
SE-ÁOK Orvosi Vegytani Intézet

Az ember néhány más emlőssel egyetemben (pl.: tengeri malac, gyümölcssevő denevér) elveszítette az askorbinsav (C-vitamin) bioszintézisének képességét, ezért megszerzésére külsőleg, elsősorban növényi forrásokra szorulunk.

Az askorbinsav szintézis nemrégiben feltárt növényi útvonala jelentős különbséget mutat az állati szervezetben már régen ismert útvonalhoz képest. Növényekben a bioszintézis az utolsó lépésig a citoszólban folyik, azonban az utolsó lépést katalizáló enzim, az L-galaktono-1,4-lakton dehidrogenáz a mitokondrium belső membránjában található, szoros kapcsolatban a mitokondriális elektrontranszferláncsal.

Az enzim topológiája jelenleg is ismeretlen. Amennyiben aktív centruma a mitokondriális mátrix felé néz, egyrészt egy L-galaktono-1,4-lakton, másrészt egy askorbát transzporternek léteznie kell a mitokondrium belső membránjában, hiszen az enzim szubsztrátjának a mátrixba kell jutnia, termékének pedig ki kell onnan kerülnie. Specifikus askorbát transzporterre akkor is szükség van, ha az aktív centrum a két membrán közti tér felé néz, hiszen az askorbinsav jelenlétét több más sejtsejtszervecskével egyetemben a mitokondriumban is leírták.

Kísérleteink során BY2 dohány sejtekből izolált mitokondriumok esetében leírtuk a dehidroaskorbinsav és a glükóz mitokondriális felvételét. Radioaktívan jelölt ligandok rapid filtrációja során specifikus glükóz és dehidroaskorbát transzportot figyeltünk meg, amelyek hőmérséklet-, időfüggést és szubsztráttelítést mutattak. Ugyanakkor a redukált askorbinsav mitokondrium membránon keresztüli transzportját egész kis mértékűnek találtuk. Ez alapján valószínűsíthető, hogy a két membrán közötti térben szintetizálódó askorbinsav oxidált formájában képes a mitokondriális membrán átlépésére.

A transzportfolyamatok látszólag függetlenek a mitokondriális légzéstől. Az eredmények igazolják a növényi mitokondriális dehidroaskorbát és glükóz transzport meglétét, valamint valószínűsítik, hogy azonos, mindenesetre közeli rokonságban álló transzporterek (vagy transzportrendszerek) mediálják a két vegyület transzportját.

A dUTPáz enzim kölcsönható fehérjehálózatának vizsgálata *Drosophila melanogaster*ben

Pukáncsik Mária, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** tudományos tanácsadó
MTA SzBK Enzimológiai Intézet

Konzulens: **Dr. László Elemér** egyetemi tanár
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

A DNS-javításban és a programozott sejthalál útvonalak irányításában a fehérje kölcsönhatások alapvető szerepet játszanak. Ezen kölcsönhatások azonosítására különböző immunológiai módszereket alkalmaznak.

A dolgozat fő célkitűzése az volt, hogy gyors, hajlékony módszert dolgozzunk ki a dUTPáz enzim kölcsönható partnereinek kimutatására. Fontos, hogy a módszer alkalmas legyen a kölcsönható partnerek összetételében bekövetkező bármiféle olyan változás nyomon követésére, melyet a sejt különböző stressz válaszai, fejlődési állapotváltozásai, beteg illetve egészséges jellege okoz.

Egyetlen kísérletes technika valószínűleg nem lesz alkalmas a célkitűzés megvalósítására. A jelen dolgozatban ezért két lehetséges módszert igyekeztem kifejleszteni:

- az egyik módszer a Far Western blot, amely a sejtextrakt fehérjéinek denaturáló gélen történő szétválasztása után membránon detektálja a fehérjéket.
- a másik a ko-immunoprecipitálás módszere, mely során sejtextraktból csapadék formájában nyerjük ki a célfehérjét és kölcsönható partnereit, melyeket ezt követően SDS gélen elválasztva tömegspektrometriás módszerrel azonosítani lehet a *Drosophila* genomprojekt adatai segítségével.

A fentiekén túlmenően célul tűztük ki a dUTPáz enzim expresszió szintjének vizsgálatát S2 *Drosophila* sejtekben.

Quantitative evaluation of sorbitol near to other alcoholic sweeteners through QSAR and thermogravimetric studies

Nicoleta Birta, Vth year student of chemistry

WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Supervisor: **Dr. Nicolae Doca** professor
WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Due to a wide application of sorbitol and its derivatives, and their susceptibility to the action of different factors of subsequent degradation, like those thermal for example, was necessary remove these problems, which affect mainly the consumer.

The purpose of this study is to observe the behavior of sorbitol in order to establish a safe board, taking in consideration that in the baking process of different daily products, the temperature can reach almost 350°C.

Due to the six-hydroxyl groups the main thermal degradation process of sorbitol is the dehydration. The theoretical considerations and analysis by means of molecular mechanics allowed establishing a probable stable structure, which has a potential teratogenic activity [1].

The aim of QSAR studies made on some alcoholic sweeteners and most representative sugars were to investigate a correlation between the molecular properties and relative sweetness (E_R , %) of each compound [2].

After the plotting and the observation of a similar behavior between heat of formation and electrostatic potential, the last one was chosen to be relevant to describe the relative sweetness (E_R , %) and its perception by tongue receptors.

[1]. Gabriela, V., Nicoleta, B., Nicolae, D., *Ann. West Univ., Timisoara*, 12(3) 321-324 (2003)

[2]. Wali, A., Mushtaq, M., *J. Pakistan Med. Assoc.*, 52(9) (2002)

Use of porcine pancreas trypsin for testing at molecular level the toxicity of some ionic liquids

Cristina Stoian, Vth year student of chemistry

Irina Balcu, Vth year student of chemistry

WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Supervisor: **Dr. Ostafe Vasile** professor
WUT Biochemistry Department

The present paper tries to evaluate trypsin in order to introduce it into an ecotoxicological test battery, as an important member of a strategy implying multidimensional risk analysis. This enzyme is found in many organisms and it participate in major biochemical pathways. The enzyme from porcine pancreas is easy to extract and to analyze and has many known inhibitors, which can be used as model for testing the effects of new chemicals, like ionic liquids. Trypsin exhibits an optimum pH at 8.2–8.6 in Tris-HCl buffer with CaCl_2 (5 mM) and has a specific activity of 60-70 mM BAPA·min⁻¹·mL⁻¹. The apparent K_M for BAPA was $1.8 \cdot 10^{-9}$ M. The use of enzyme for testing the effect of chemicals was exemplified for ionic liquids with different cationic structures but identical anionic groups and the degree of enzyme inhibition was as follows: imidazolium < pyrrolidinium < pyrimidinium < phosphonium < quaternary ammonium. Regarding the anions' influence upon the degree of enzyme inhibition, the order was: Cl^- < BF_4^- < DCNA^- < OcSO_4^- < pTS^- < TFMS^- < HFSb^- < MOEGSO_4^- . The majority of the tested compounds shows poor enzyme inhibition at very high concentrations, following a non-competitive pattern.

The influence of ionic liquids and antifouling biocides on Glutathione S-transferase

Brăduț Jurconi, Vth year student of chemistry and biology

WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Supervisors: **Dr. Frauke Stock** research worker
University of Bremen
Dr. Doca Nicolae professor
WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Glutathion S-transferases (GST; EC 2.5.1.18) are mainly cytosolic enzymes that catalyze the conjugation of electrophile molecules with reduced glutathion [1]. GSTs play an important role in insecticide resistance and are involved in the metabolism of organophosphorous and organochlorine compounds. Other xenobiotics such as plant defence allelochemicals against phytophagous insects induce GST activity [2].

Ionic liquids are organic salts with melting points under 100 degrees, often even lower than room temperature. Recently they are employed more and more as substitute for the traditional organic solvents in chemical reactions. The most common ones are imidazolium and pyridinium derivatives, (but also phosphonium or tetralkylammonium compounds can be used for this purpose [3])

Fouling (the growth of shell, weed, and algae on immersed surfaces) is a natural phenomenon that occurs continuously and vigorously in the marine environment. On ocean-going vessels, fouling leads to a significant increase in fuel consumption, as well as loss of speed and maneuverability. [4] The most effective solutions to marine fouling to date are the TBT SPC coatings, which permit intervals of at least five years between dry-docking. Anti-fouling biocides are used to prevent the growth of aquatic organisms on boats and ships. In the past, organotin and copper were most commonly used as biocides. [5]

- [1] Boyland, E., Chasseaud, F., *Adv. Enzymol.*, 32, 173-176 (1969)
- [2] Yu, S.J., *Petic. Biochem. Physiol.*, 17, 59-63 (1982)
- [3] Wasserscheid, P., Keim, W., *Int. Ed.*, 39, 3772-3789, (2000)
- [4] Dupont, J., de Souza R.F., *Chem. Rev.*, 102, 3667-3692, (2002)
- [5] Welton, T., *Chem. Rev.*, 99, 2071-2083, (1999)

Rögzített Alcalase előállítás és jellemzése szol-gél kompozitokban

Dudás Zoltán, V. évf. vegyész hallgató

WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Témavezetők: **Dr. Preda Gabriella** egyetemi docens
WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography
Dr. Adrian Chiriac egyetemi tanár
WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography
Dr. Halász János egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Szilika üvegeket előállíthatunk szilikából és a szilícium szerves származékaiból, szobahőmérsékleten szol-gél technológia segítségével. A technika alapját a megfelelő alkoxidok kondenzációja és polimerizációja képezi [1]. Az utóbbi években nagy hangsúlyt kapott a biomolekulák csapódása szilika szerkezetekben szol-gél technológia segítségével. Az ezen a területen elért eredmények új lehetőségeket kínálnak az alap- és alkalmazott kutatásban az anyagismeret, a kémiai bioanalitika, a biokatalízis, a biotechnológia és a környezeti technológia területén [2, 3].

Ebben a dolgozatban bemutatjuk az Alcalase rögzítését szilika gélben, egy és kétlépéses szol-gél technológia felhasználásával, szilícium-dioxid forrásként tetraetoxiszilánt és alkiltri-etoxiszilánt használva.

A kapott biokatalizátort jellemeztük kémiai és biokémiai szempontból. A dolgozat célja egy olyan optimális összefüggés meghatározása, amely összefüggést teremt mátrix szerkezeti tulajdonságai és a rögzített enzim biokatalitikus tulajdonságai között. A kísérleti eredményeink azt mutatják, hogy a mikropórusos szol-gél anyagok természete miatt az enzim katalitikus aktivitását befolyásolják a diffúziós folyamatok és az enzim katalitikus centrumainak sztérikus blokkolása. Ugyanakkor a szol-gél technológia szintézis egyes körülményei is denaturáló hatásúak lehetnek az enzimre nézve.

Az egyik irány, amit követtünk e hátrányok kiküszöbölésére, az enzimet stabilizáló adalékanyagok (PEG, PVA, BSA és zselatin) használata és templátok (glükóz) alkalmazása, amelyek a mátrix szerkezetét módosítják. Biztató kísérleti eredményeink arra engednek következtetni, hogy a leírt eljárás egyszerű, gazdaságos és nem utolsó sorban működő módszert jelent nagyszámú enzim és más biomolekula (proteinek, színezékek, gyógyhatású anyagok) vagy akár egész sejtek rögzítésére.

- [1] Jitaniu, A., Britchi, A., Deleanu, C., Badescu, V., Zaharescu, M., *J. Non-Cryst. Solids*, (319), 263-279 (2003)
- [2] Wei, Y., Xu, J., Feng, Q., *M. Lin, Mater. Lett.*, (44), 6-11 (2000)
- [3] Soares, C.M.F., dos Santos, O.A., Olivo J.E., de Maraes, F.F., Zanin, G.M., *J. Molec. Catal. B. Enzym.*, (29), 69-79 (2004)

Genetikus algoritmus alkalmazása NMR spektrumok paramétereinek becslésére

Szalay Zsófia, III. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Rohonczy János egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

A szilárd NMR spektrumok alakjából következtethetünk a vizsgált anyag szerkezetével kapcsolatos spektroszkópiai paraméterekre. Ezek meghatározása bonyolultabb spektrumoknál csak sok paramétert alkalmazó kvantumkémiai modelleken alapuló spektrumszintézissel és görbeillesztéssel lehetséges. Az ilyen elven működő programok a sokdimenziós paramétertér valamely pontjából kiindulva, a térgradienst követve, iterálva keresik a görbeillesztési feladat megoldását. Sok lokális minimummal rendelkező paramétertérben a leggyakrabban használt gradiens-módszerek nem képesek megtalálni az abszolút szélsőértéket. Ilyen esetben többé-kevésbé heurisztikus módszereket használnak (pl. szimplex módszerek), de még ezek hatékonysága is erősen függ a kiindulási pontoktól. Ennél is robosztusabb a *genetikus algoritmus*, a darwini evolúció egyes elemeit alkalmazó keresés, melyet egyre több, nehezen megoldható problémában alkalmaznak sikeresen.

Egy ilyen algoritmuson alapuló programot írtam a Bruker Biospin GmbH „TopSpin” nevű programcsomagjának szilárd NMR spektrumokat szimuláló moduljába. A dolgozat bemutatja a szilárd NMR spektrumok alakját meghatározó paramétereket, a genetikus algoritmus általános jellemzőit, majd az ezek alapján írt program működését. Végül néhány jellemző példaszpektrum illesztésével demonstrálom a program hatékonyságát olyan esetekben, ahol más módszerek nem, vagy csak bizonytalanul találtak megoldást.

Háromtagú gyűrűs szililének stabilitása és stabilizálhatósága

Petrov Klára, III. évf. vegyész mérnök hallgató

BME Vegyész mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Veszprémi Tamás egyetemi tanár
BME Szervetlen Kémia Tanszék

Munkám során háromtagú gyűrűs szililének stabilitásának és stabilizálhatóságának kvantumkémiai vizsgálatával, ezáltal egy újfajta, stabilis molekula tervezésével foglalkoztam. Az elméleti számításokat a *Gaussian98* ill. az *AIM2000* programcsomag segítségével végeztem. A kvantumkémiai módszerek közül a sűrűségfüggő elméleten alapuló B3LYP módszert, a számítási szintek közül a cc-pVTZ (nagyobb rendszerek esetén 6-311++G**) bázist használtam.

Munkám során először a ciklotriszilanilidén molekula geometriájának és elektronszerkezetének a meghatározásával foglalkoztam. A gyűrűs, C_2 szimmetriával rendelkező alapmolekula mellett vizsgáltam a Si_3H_4 potenciálfelület globális minimumát képező érdekes, nyílt szerkezetű, C_s szimmetriájú izomert is.

A geometriai adatok, a Wiberg-indexek és a Mulliken-töltések vizsgálatával valamint a Bader-analízis és izodezmiikus reakciókból számolt stabilizációs energiák segítségével tanulmányoztam a szubsztitúció hatását a háromtagú gyűrű stabilitására. Az alapmolekula Si(IV) atomjainak N ill. S szubsztitúciójával nagy stabilizációs-növekedést értem el. Ezen szerkezetek stabilitása csak kevéssé marad el az ismert, stabilis, öttagú gyűrűs molekulákétól. A továbbiakban részletesen tanulmányoztam a két nitrogént tartalmazó gyűrű tulajdonságait. Az alapmolekula hidrogén atomjainak helyettesítése kevesebb sikert hozott.

Munkám során rábukkantam egy érdekes, nyíltláncú, sík-szerkezetű molekula-csoportra is. Ezeknek a molekuláknak saját potenciálfelületükön alacsonyabb az energiájuk, mint a gyűrűknek. Tanulmányozásuk szép eredményekkel kecsegtet.

A kutatás folytatásával szeretném a dolgozatban található vizsgálatok sorát pontosítani, valamint a talált érdekes szerkezetek körét bővíteni. Ezzel utat mutatva a preparatív kémia számára új vegyületek előállítására.

A hiper Hartree-Fock módszer

Tóth Gábor, V. évf. fizikus hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Surján Péter** egyetemi tanár
ELTE Elméleti Kémia Tanszék

A dolgozatban a Hartree-Fock (HF) módszert, mint kvantumkémiai közelítő eljárást próbáljuk általánosítani. Az eredeti HF módszer szemléletesen azt jelenti, hogy egy sok elektronból álló rendszerben az elektron-elektron párkölcsönhatás helyett egy elektron „csak” a többi átlagterét látja. A másodkvantált formalizmusban ez szemléletesen azt jelenti, hogy a kételektron operátorokból álló összeget részleges átlaggal közelítjük, egyelektron operátorok összegére vezetjük vissza. A kvantumkémiaiában a primér kölcsönhatások legfeljebb kétestest jellegűek. Különböző számolási módszerekből adódóan mégis előfordulhatnak olyan esetek, hogy a rendszer fizikai tulajdonságát leíró effektív Hamilton operátorban többelektron operátorok jelennek meg. Példa magasrangú operátorokra a kvantumkémiaiában: a *coupled cluster* módszer effektív Hamilton operátora, a Löwdin-féle spin-projcionált összetett Hamiltoni, vagy egyszerűen egy kételektron operátor négyzete, amely négyelektronos tagot is tartalmaz. Ezek egzakt kezelése roppant bonyolult feladat.

A fentiek miatt próbálkozunk egy olyan módszer kidolgozásával, amely az eredeti HF módszer technikáját alapul véve egy általános átlagolási eljárást ír le egy olyan jelölésrendszerbe ágyazva, amely egyértelműen jelzi az adott átlagolási lépést. Az eljárás során tetszőleges n -test kölcsönhatást n -k kölcsönhatássá átlagolunk vissza, amit az

$$(n) \rightarrow (n-k)$$

szimbólummal fejezünk ki. Ezt az átlagolást nevezzük hiper Hartree-Fock (HHF) módszernek. A dolgozatban a kvantumkémia gyakorlatából vett példákon keresztül mutatjuk be az átlagolás működését.

Izotopomerek figyelembevételének hatása termodinamikai állapotfüggvények számításánál

Izsák Róbert, IV. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Tasi Gyula** egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Ab initio kvantumkémiai számítások során az egyes molekulák számítását általában úgy végezzük, hogy az azokat felépítő atomokat az adott elem leggyakoribb izotópjával vesszük figyelembe. Mivel a legtöbb ilyen számítás a Born-Oppenheimer közelítésen alapszik, az összes, az izotópösszetételén kívül egyébként azonos molekulára (izotopomerre) azonos elektronenergiaérték adódik.

Az egyes termodinamikai függvények számításánál azonban már számít az, hogy milyen izotopomert vizsgálunk. A hatás jelentkezik egyrészt már a zérusponthi (rezgési) energia ($ZP(V)E$), másrészt a hőmérsékleti korrekciók megadásánál. Mindkét esetben számítanunk kell a tömegsúlyozott erőállandómátrixot, ennek sajátértékei adják a normálrezgések frekvenciáit, amelyek függenek az izotóptömegektől. Másrészt az egyes izotopomerek esetén más és más lesz a molekula szimmetriája, ami a hőmérsékleti korrekciók bizonyos tagjaiban okoz módosulást.

Hogy ez a hatás milyen mértékű, azt elsősorban egy állapotfüggvény, az entrópia vizsgálatán keresztül szeretnénk bemutatni, a többi függvényre inkább csak utalunk.

Az izotopomerek hatásának figyelembevételénél problémát okoz, hogy a számos lehetőség közül kiválasszuk a tényleg jelentőseket, másrészt a számítást végző programok a kiválasztott izotopomerek esetén ismételt elvégzik a nem kis gépidőt igénylő számításokat. Az általunk alkalmazott módszer lényege, hogy egy nem túl magas szintű módszer esetén (HF/6-31G*) egy adott molekulára a számított geometria és erőállandómátrix segítségével számítjuk az állapotfüggvényeket úgy, hogy a molekulából előállítjuk az izotopomereket, és azokat a nekik megfelelő gyakorisággal (amiket az izotópok elemgyakoriságából határozzunk meg) vesszük figyelembe a végeredmény megadásakor.

A vizsgálandó molekulák a metán, az etán, ezek összes klórszármazéka és a foszgén. Az etán esetén bizonyos klórszármazékoknál az egyes konformerekre külön elvégezzük a számítást, majd ezek súlyát a végeredményben Boltzmann-statisztikával állapítjuk meg.

A TDK dolgozat a fent ismertetett téma részletezését tartalmazza, a megfelelő elméleti háttér leírásával, a felhasznált programcsomagok, és a probléma kezelésére írt Fortran rutinok ismertetésével, valamint a kapott eredmények kiértékelésével együtt.

Képi megjelenítő egy oligoszacharid adatbankhoz

Máncsi Attila, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Lipták András** egyetemi tanár
DE Biokémiai Tanszék
MTA Szénhidrátkémiai Kutató Csoport

Az emberiség tudása egyre növekvő mértékben gyarapszik. Ezt a növekvő tudás- és adatmennyiséget már képtelenség a hagyományos módszerek segítségével átlátni, a hatékony munkához megfelelő számítógépes háttér alkalmazása elengedhetetlen. Ennek megfelelően léteznek átfogó szerves kémiai adatbázisok, valamint speciális területekre szakosodottak. A legtöbb ilyen adatbázis tartalmaz szerkezeti képleteket is, melyeket tömörített képi formában, vagy vektorgrafikusan tárol. Ez a szöveges információhoz képest az első esetben jóval több helyet igényel. Azonban mindkét esetben figyelmen kívül hagyunk egy nagyon fontos dolgot, mégpedig azt, hogy egy pontos tudományos név egyértelműen megad egy vegyületet. A megvalósításhoz azonban mindkét területen (kémia, programozás) elegendő jártassággal rendelkező emberek szükségesek, továbbá a nomenklatura leprogramozása rengeteg munkával jár, mivel a legtöbb jelölést egyenként kell lekezelni. Viszont „hagyományos eszközökkel” minden új vegyületet külön meg kell rajzolnunk, míg a nomenklatura alapján működő programunk az ismert elemekből szinte végtelen variációban képes képleteket rajzolni. Ezen tények fényében egy több mint 20.000 oligoszacharid szintézist tartalmazó szöveges adatbázis elfogadható mértékű képi konverziójára vállalkoztam.

Az elmúlt néhány évtizedben a szénhidrátkémia területén is rohamos fejlődés kezdődött. Ez köszönhető a biológiai folyamatok szabályozásában betöltött szerepük felismerésének. Bár az oligoszacharidok egy része enzimatis úton is előállítható, többségük jelenleg csak kémiai szintézisek révén nyerhető nagyobb mennyiségben. Ilyen szintézisek kivonatait tartalmazza az általam felhasznált adatbázis is.

Néhány, a program fejlesztése során felmerült probléma alapján szeretném bemutatni a program felépítését, működését és a szénhidrát nomenklatura programozói oldalról történő megközelítését.

Metilezett piridinszármazékok hidratációs szabadenergiájának számítása számítógépes szimulációs módszerekkel

Pártay Lívia, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Jedlovsky Pál** tudományos ösztöndíjas
ELTE Kolloidkémia és Kolloidtechnológiai Tanszék

Különböző metilezett és szimmetrikusan dimetilezett piridinszármazékoknak a piridinhez viszonyított relatív hidratációs szabadenergiáját számítottuk ki. A számításokat a szabadenergia perturbáció és a termodinamikus integrálás módszerével végeztük, kanonikus Monte Carlo szimulációval kapott konfigurációkon. A módszerek során a piridinmolekulát a kívánt metilezett származékká alakítottuk és ehhez mindkét módszer esetén többféle utat is választottunk, hogy a számításaink pontosságát megbecsüljük.

Az eredmények egyértelműen azt mutatták, hogy egy metilcsoport hozzáadása a gyűrűre csökkenti a hidratációs szabadenergiát és növeli a hidratációs belső energiát, de a metilcsoport helyzetének változtatása csak kis eltérést okoz a szabadenergia különbségben, számításunk pontossága pedig nem engedi, hogy erről is határozott következtetéseket vonjunk le. A Coulomb és a Lennard-Jones kölcsönhatások különböző befolyásoló hatásait is vizsgáltuk, s ennek eredményei azt mutatták, hogy a metilcsoportok számának változtatása metilenként körülbelül ugyanakkora értékkel változtatja a Lennard-Jones kölcsönhatás szabadenergia járulékát, míg a metilcsoportok helyzetének változtatása a Coulomb kölcsönhatás járulékát befolyásolja jelentősen.

A belső energia és az entrópiát tartalmazó tag összehasonlításakor megfigyelhetjük, hogy a kettő azonos nagyságrendű, de ellentétes előjelű, így ezek egymást majdnem kioltva adják a szabadenergia különbséget, mely így egy nagyságrenddel kisebb azoknál. A hőmérséklet ismeretében (300 K) az entrópia értékét is megbecsülhettük, s azt a következtetést vontuk le, hogy egy metilcsoport gyűrűre rakása körülbelül $30 \text{ J/K}\cdot\text{mol}^{-1}$ -al csökkenti az entrópiát.

Ionfolyadékok szerkezetváltozásainak vizsgálata

Lemli Beáta, III. évf. kémia-matematika szakos hallgató

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kunsági-Máté Sándor** egyetemi docens
PTE Általános és Fizikai Kémia Tanszék

Széleskörű alkalmazási lehetőségeiknek és kedvező környezeti tulajdonságaiknak köszönhetően az elmúlt néhány évben az ionfolyadékok a figyelem középpontjába kerültek. Ezek a 100 °C-on és annál alacsonyabb hőmérsékleten folyadék halmazállapotú, ionos összetételű anyagok legtöbbször egy szerves kationból és egy ahhoz csatlakozó szerves vagy szervetlen anionból állnak. Gyakorlati alkalmazhatóságukhoz a fizikai és kémiai tulajdonságaik részletes ismerete szükséges, melyek közül az egyik legfontosabb a sajátos szerkezetük.

Vizsgálataink során imidazolium alapú ionfolyadékok esetében a kation-anion pár szerkezetére, a lehetséges koordinációs módok felderítésére irányuló kvantumkémiai számításokat végeztünk. Számos, különböző aniont tartalmazó ionfolyadék esetében megállapítottuk, hogy a kation – anion pár több, eltérő energiájú stabil konformációt felvehet. Molekuladinamikai számításaink szerint [1] a $[C_{14}mim]^+[PF_6]^-$ ionfolyadék esetében az elemi cella méreteinek a kísérletek során tapasztalat szokatlan változása [2] az ionpár általunk talált két stabil konformációja között létrejövő átmenetnek tulajdonítható. E megállapításainkból kiindulva megvizsgáltuk a szilárd-szilárd fázisátmenetet követő szilárd-folyadék fázisátmenet tulajdonságait is. Ehhez a kation alkil-láncának hossza és ezen ionfolyadékok olvadáspontja között kísérletileg meghatározott [3,4] összefüggést használtuk fel. Megállapítottuk, hogy az olvadáspont különös függése az alkil-lánc hosszától molekuláris szintű dinamikai tulajdonságok következménye.

Reményeink szerint eredményeink hozzájárulhatnak új, környezetbarát ionfolyadékok tervezéséhez és célirányos szintéziséhez.

- [1] Kunsági-Máté, S., Lemli, B. Nagy, G., Kollár, L., *J. Phys. Chem. B.*, 108, 9246-9250 (2004)
- [2] DeRoche, J., Gordon, C.M., Imrie, C.T., Ingram, M.D., Kennedy, A.R., LoCelso, F., Triolo, A., *Chem. Mater.*, 15, 3089-3097 (2003)
- [3] Holbrey, J.D., Seddon, K.R., *J. Chem. Soc. Dalton Trans.*, 13, 2133-2140 (1999)
- [4] Gordon, C.M., Holbrey, J.D., Kennedy, A.R., Seddon, K.R., *J. Mater. Chem.*, 8, 2627-2633 (1998)

A diagonális Born-Oppenheimer korrekció korrelált hullámfüggvényekkel

Tajti Attila, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Szalay Péter** egyetemi tanár
ELTE Elméleti Kémia Tanszék

Az utóbbi időben az ab initio kvantumkémiai módszerek és a számítástechnika fejlődése kisebb rendszerek elektronszerkezetének számítását korábban soha nem látott pontossággal tették lehetővé. Ezekben az alkalmazásokban már azon közelítések hibáit sem hanyagolhatjuk el, melyeket más körülmények között rutinszerűen alkalmazunk molekuláris rendszerek tárgyalásakor. Ezek közé tartozik a magok és az elektronok mozgásának adiabatikus szétválasztását megvalósító Born-Oppenheimer közelítés is, melynek pontatlanságát az ún. diagonális Born-Oppenheimer korrekció (DBOC) számításával lehet (és szokás) figyelembe venni. Bár jelentősége bizonyított, a DBOC irodalma nem túl kiterjedt, a korrelációs módszerekkel történő számolása pedig különösen tanulmányozatlan terület. Dolgozatomban bemutatom, miként lehetséges a DBOC-t a leghatékonyabb ab initio eljárások közé tartozó Coupled-Cluster, valamint konfigurációs kölcsönhatás (CI) módszerekkel számítani. Az általunk elsőként levezetett formulák lehetővé teszik pontos poszt-Hartree-Fock értékek rutinszerű számolását az ún. analitikus deriváltak módszerével, megnyitva az utat a korrelációs effektus kiterjedt és szisztematikus tanulmányozása felé.

Szilaciklopropén származékok potenciálfelületeinek és izomerizációs reakcióinak vizsgálata

Olasz András, V. évf. vegyészmérnök hallgató

Pintér Balázs, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Veszprémi Tamás** egyetemi tanár
BME Szervetlen Kémia Tanszék

Legfőbb célunk a C_2YW_4 és a Si_2YW_4 ($Y=C, Si, Ge$; $W=H, F, Me, SiH_3$) összegképletű gyűrűs molekulák potenciál felületének feltárása. Az 1-diszilagermilén analógok a Si_2C gyűrű kivételével léteznek, a 2-diszilagermilén analógok közül minimumnak adódnak a C_2SiF_4 és a Si_2YW_4 ($Y=C, Si, Ge$; $W=H, F, Me, SiH_3$). A 2-diszilagermilén analógok energiáját alacsonyabbnak találtuk az 1-diszilagermilén analógokénál; kivételt képez a C_2SiF_4 molekula, mely egyetlen stabilis tagja a C_2Y az izomercsaládnak. A fluor szubsztituens mindkét szerkezetnél részlegesen kiegyenlíti a kötéshosszakot, növelve a gyűrű feltételezhető aromasságát. Ez összhangban van a fluornál tapasztalt kiugróan alacsony NICS(1) és NICS(2) értékekkel. Az aromasság bizonyítása további vizsgálatokat igényel. C_2 és C_{2v} szimmetriájú, hipovalens atomot tartalmazó gyűrű nyolc esetben globális minimum (C_2SiH_4 , C_2GeH_4 , $C_2Ge(SiH_3)_4$, $Si_3(SiH_3)_4$, Si_2GeH_4 , Si_2GeF_4 , Si_2GeMe_4 , $Si_2Ge(SiH_3)_4$). Ezeket az izomereket a fluorral ellentétben a szilil szubsztituens stabilizálja. A Si_2GeW_4 ($W=H, F, Me, SiH_3$) molekulák közül ez a legstabilabb izomer, ami megegyezik a germilénekkel megfigyelt jelentős stabilitással.

Eddig ismeretlen gyűrűs dibridge szerkezetet találtunk a Si_2XW_2 potenciálfelületen ($X=C, Si, Ge$; $W=H, F$). A szerkezet Bader analízise során nem találtunk kötést a két pillératom között, a kölcsönhatás a két hídatomon keresztül valósul meg. Az eddig feltárt kettőshíd szerkezetekben a Si_2GeH_4 kivételével kalitkakritikus pontot találtunk. A Si_2CH_4 , és a Si_3H_4 potenciálfelületen a kettőshíd szerkezet adódott globális minimumnak.

Jelentős eltérést találtunk a különböző gyűrűkön fellépő monobridge szerkezetek között. A Si_3H_4 és Si_2GeH_4 esetben a híd szerkezet minimum, C_3H_4 esetében pedig átmeneti állapot. A Si_2GeH_4 a hídatom részvételével négyes gyűrűt alkot, míg a Si_3H_4 nyitott szerkezetű.

Számításaink szerint az izomerizáció C_3H_4 esetében köztitermék nélkül, Si_3H_4 és Si_2GeH_4 esetében köztiterméken keresztül valósul meg. A jövőben metil és szilil csoportok átrendeződését is vizsgálni kívánjuk.

A n-hexán, az 1-hexén és az 1-hexin ab initio konformációs analízise

Matisz Gergely, IV. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Tasi Gyula** egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A viszonylag egyszerű felépítésű n-alkán molekulák konformációs tulajdonságainak vizsgálata segítségével szolgálhat bonyolultabb molekulák tanulmányozásához. A n-alkán molekulákra vonatkozó szerkezeti információk többsége molekulamodellezésből származik, mivel nagyon kicsi dipólusmomentummal rendelkeznek, így mikrohullámú spektroszkópiai tanulmányozásuk nehéz. Az 1-alkének és 1-alkinek dipólusmomentuma lényegesen nagyobb a láncvégi $CH_2=CH-$ és $CH=C-$ csoport jelenléte miatt, így ezeknél a molekuláknál mikrohullámú spektroszkópiai vizsgálat is lehetséges, ezzel mód nyílik a molekulamodellezés segítségével nyert eredmények kísérleti adatokkal való összevetésére. Számos mostanában megjelent publikációban vizsgálták ezeket a molekulákat – a n-alkánokat [1], az 1-alkéneket [2] és az 1-alkineket [3] – ab initio konformációs analízist végezve kisebb szénatomszámú képviselőikre. A többszörös kötést tartalmazókra mikrohullámú spektroszkópiai vizsgálatokat is végeztek. A szerzők fontosnak tartják további, magasabb szintű számítások elvégzését a kísérleti eredmények jobb értelmezésére.

A TDK dolgozat témája a n-hexán, az 1-hexén és az 1-hexin ab initio konformációs analízise. A munka során Monte-Carlo módszerrel generálva a kiindulási geometriákat – erre a célra írt FORTRAN programmal – majd azokat RHF szinten 6-31G* bázis alkalmazásával optimalizálva történt az 1-hexén és 1-hexin konformerek meghatározása. A n-hexánra már rendelkezésre állt megbízható vizsgálat eredménye. Az 1-hexénnél az említett korábbi vizsgálatokhoz képest további, új konformerek adódtak. A dolgozatban tárgyalásra kerül az 1-hexén és 1-hexin konformerek számának értelmezése korábbi, n-alkánokra vonatkozó eredmények alapján.

Az egyes konformerekre G2 és G3 módszerekkel nagy pontosságú energiaszámítást végezve a konformerek relatív gyakoriságának meghatározása és termokémiai mennyiségek számítása is megtörtént. A számítások eredményei a rendelkezésre álló kísérleti adatokkal jó egyezést mutatnak.

[1] Tasi, G. et al., *J. Phys. Chem. A*, 102, 7698 (1998)[2] Fraser, G.T., R.D. Suenram, C.L. Lugez, *J. Phys. Chem. A*, 104, 1141 (2000)[3] Atticks, K., R.K. Bohn, H. Michels, *Int. J. Quantum Chem.*, 85, 514 (2001)

Az 1-2 hidrogén átmenetek mechanizmusának vizsgálata

Hollóczki Oldamur, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Nyulászi László** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szervetlen Kémia Tanszék

Munkám célja az 1-2 hidrogén átmenetek egy eddig kevésbé vizsgált, bimolekuláris mechanizmusának megismerése volt. E célból karbén izomerizációját vizsgáltam a náluk jóval stabilabb kettőskötésű izomerekké. A monomolekuláris izomerizáció aktiválási energiája a metil-, és szililkarbén kivételével magas, így – e két kivételtől eltekintve – szobahőmérsékleten nem játszódhatnak le. Ezzel szemben a bimolekuláris reakciók gátja igen alacsony, esetenként gát nélkül is lejátszódhatnak. Ennek oka, hogy az 1-2 hidrogén átadás bimolekuláris folyamata során hidrogénkötések stabilizáló hatására először egy komplex képződik. E komplexben a hidrogénhid-kötések kovalens CH kötéssé képesek alakulni, miközben az EH kötések hidrogénhidas kölcsönhatássá válnak. Mivel a két folyamat szinkronban megy végbe, a reakció gátja alacsony. Ezzel szemben a monomolekuláris reakcióban a kötésnek először el kell "szakadnia", s csak ezt követi az új kötés kialakulása. A metil-, és szililkarbén esetében a vándorló proton távolodásával keletkező HC-CH₂⁻, ill. HC-SiH₂⁻ anion stabilizálódik azzal, hogy az aminocsoporttal izoelektronos -CH₂⁻, ill. a foszfinocsoporttal izoelektronos -SiH₂⁻ csoport a karbén üres pályájával kölcsönhatásba kerül, arra elektronokat küld.

Az aktiválási entrópia szerepe a legtöbb általam vizsgált bimolekuláris 1-2 hidrogén átmenet esetében jelentősnek bizonyult, azonban az aktiválási szabadentalpiák még ennek figyelembevételével is igen kicsik.

A bimolekuláris mechanizmus feltételezésével több irodalmi reakció (klór-metilkarbén, és hidroximetilkarbén) esetén sikerült megmagyarázni a korábban feltételezett monomolekuláris mechanizmus anomáliáit. Ez alapján elképzelhető, hogy a bimolekuláris mechanizmus sok más esetben is lehetséges reakcióútnak bizonyul. Ennek az olyan vegyületek előállításánál van kiemelkedő jelentősége, amelyekből 1-2 hidrogén átmenettel egy stabilabb vegyület képződik. Amennyiben a kvantumkémiai számítások megmutatják, hogy ez az átalakulás bimolekuláris mechanizmus szerint játszódik le, a molekula sztérikus hatásokkal stabilizálható.

A munka folytatásaképpen tervezzük az 1-3 hidrogén átmenetek vizsgálatát is, s ezek összehasonlítását az 1-2 átmenetekkel. Egy másik fontos kutatási irány egyéb mobilis csoportok (pl. trimetilszilil) átmeneteinek vizsgálata.

Elektronvezető polimer előállítása szerves pufferoldatban

Csízi Júlia Ivett, okl. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Visy Csaba** tanszékvezető egyetemi tanár
SZTE Fizikai Kémia Tanszék

A szerves polimerek, hétköznapi nevükön műanyagok, korunk nélkülözhetetlen anyagai, melyek köztudottan jó szigetelő sajátsággal rendelkeznek. Az elektromosan vezető polimerek így olyan különleges tulajdonságú új anyagoknak tekinthetők, amelyek egyesítik magukban a fémek elektromos vezetési, a félvezetők optikai és a műanyagok kedvező mechanikai tulajdonságait, így ezen anyagokat szintetikus fémeknek is szokás nevezni.

Vezető polimerek előállítása történhet kémiai, illetve elektrokémiai úton. Mi célszerűen elektrokémiai polimerizációval állítottunk elő polimerfilmet, mely folyamat során köztitermékként nukleofil támadásra érzékeny gyökkation keletkezik. A pirrol és az anilin elektrokémiai polimerizációja a nagy nukleofilitású vizes oldatban is megvalósítható, ilyen körülmények között történő polimerizáció során azonban H⁺ keletkezik, amely a legfrissebb eredmények alapján mellékfolyamatként a pirrol láncpolimerizációját indítja el. A láncpolimerizáció a konjugációt csökkentő hatása folytán kedvezőtlen a filmkészítés szempontjából.

Célunk ezért az volt, hogy puffer hatású közegben végezzük a pirrol polimerizációját, mely egyúttal kedvező körülményeket teremt biológiaiilag aktív rendszereknek (például enzim) a polimerfilmbé való rögzítéséhez. A piperazin-1,4-bisz(2-etánszulfonsav), szokásosan rövidítve PIPES dinátrium sója gyakran alkalmazott biológiai puffer, ezért választásunk erre az anyagra esett. A megfelelő pH-jú oldat előállításához meghatároztuk a PIPES savas (diprotonált) formájának disszociációs állandóit, ugyanis ezzel kapcsolatban az irodalomban is hiányos információk álltak rendelkezésünkre. Ezek ismeretében a kétszeresen protonált PIPES és dinátrium PIPES megfelelő mennyiségeivel 6,8-as pH-jú pufferoldatot állítottunk elő, és ebben végeztük a polimerizációt.

Meghatároztuk az elektrokémiai polimerizáció optimális körülményeit. Az így készített film tulajdonságait összehasonlítottuk az eddigiekben egyik legkedvezőbb viselkedésű film, a polipirrol/dodecil-szulfát tulajdonságaival. A polimer vizsgálata során tanulmányoztuk redoxi aktivitását, töltéskapacitását, optikai viselkedését, és megállapítottuk a két réteg hasonlóan kedvező viselkedését.

Oktanól-víz megoszlási hányados becslése gázkromatográfiás adatokból

Kondor Anett, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Dallos András egyetemi docens

VE Fizikai Kémia Tanszék

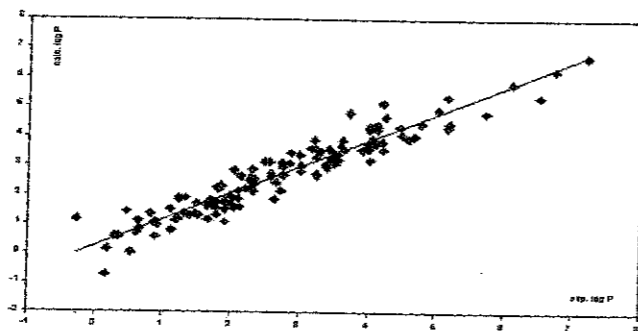
Kresz Richárd doktoráns

VE Fizikai Kémia Tanszék

Az oktanól-víz rendszerben mért megoszlási együttható ($\log P$) az oldott anyagnak az élő szervezetek szöveteiben, sejtjeibe történő bejutására és a szövetek közötti megoszlására ad tájékoztatást. Új molekulák tervezésénél, gyógyszerek és illatanyagok engedélyeztetésénél kulcsparaméter.

Gázkromatográfiás adatbázisra támaszkodva LSER (Linear Solvation Energy Relationship) típusú egyenletekkel korrelációt és becslést végeztem különböző szerves molekulák oktanól-víz megoszlási hányadosainak értékére. Gázkromatográfiával viszonylag gyorsan, nagy mennyiségű és nagy pontosságú információ gyűjthető az intermolekuláris kölcsönhatásokról. A becslésre használt egyenletek változói az oldott anyagok különböző állófázissal bevont kapilláris oszlopokon meghatározott Kováts-indexei voltak. Állófázisokként olyan elágazó szénláncú paraffint használtam, amely egy alkil csoportját különböző típusú intermolekuláris kölcsönhatásokat mérő funkcionális csoportokkal (-OH, -OMe, -CN, -SH, -CF₃) helyettesítették.

A korrelációs egyenletekkel becsült értékek jó egyezést mutatnak az irodalmi értékekkel.



A becsült és az irodalmi adatok összehasonlítása

Mikrorészecskék nedvesedésének vizsgálata filmmérleggel egy- és kétfolyadékos határretegben

Bordács Sándor, III. évf. mérnök-fizikus hallgató

BME Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi docens

BME Fizikai Kémia Tanszék

Konzulens: Agod Attila doktoráns

BME Fizikai Kémia Tanszék

Mikrorészecskék határretegbeli szerkezetképzése modellül szolgál nanostrukturált vékonyrétegek Langmuir-Blodgett technikával történő előállításához. A modellrendszer nagy előnye, hogy a részecskék nedvesedése, valamint a részecskefilm szerkezete optikai mikroszkóppal is megfigyelhető, utat nyitva a határretegbeli szerkezetképzési mechanizmusok feltárásához és az oldalnyomás (II)-terület (A) izotermák analízisének megalapozásához.

Munkám során kémiailag módosított felületű 75 μm átmérőjű üveggyöngyök nedvesedését, filmmérlegbeli viselkedését tanulmányoztam, a peremszög és a határfelületet alkotó fázisok anyagi minőségének függvényében. Vizsgálataim fókuszában a részecskefilm II-A izotermáiból nyerhető információk, valamint a lehetséges kollapszus mechanizmusok álltak.

Kísérleteimből kiderült, hogy a kollapszus mechanizmusát két tényező szabja meg: az adhéziós munka valamint a tiszta határreteg felületi feszültsége. A film kollapszusakor részecskék szorulnak ki a határretegből, ha az adhéziós munka kis értéke nagy felületi feszültséggel párosul. Egyéb esetekben gyűrődéses kollapszust várhatunk.

Azokban a rendszerekben, amelyekben kihullásos kollapszust figyeltem meg, egy korábbi elmélet alapján számított peremszögeket szignifikánsan nagyobbak találtam az általam közvetlenül mért értékeknél. Ez azt mutatta, hogy az összes részecske adhéziós munkájánál jóval nagyobb munkát kell befektetnünk a réteg szubfázisba kényszerítéséhez. Az eltéréseket a kiszorulási folyamat dinamikáját figyelembe véve értelmeztem, és számítottam a komprimálás hatásfokát is.

Végül rendszereztem a filmmérleges mérések során előforduló hibalehetőségeket, és a szisztematikus hibák kiküszöbölésére korrekciókat ajánlottam.

Szilárd elektródok felületi feszültségének vizsgálata bending beam módszerrel

Rokob Tibor András, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Láng Győző egyetemi docens
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Az elektrokémiában leggyakrabban alkalmazott elektródok (a "szilárd elektródok") esetében az elektronvezető fázis szilárd, az ionvezető fázis pedig folyékony. Az elektródfolyamatok ekkor egy szilárd-folyadék fázishatáron, vagy annak közelében mennek végbe.

Fázisok közötti határfelületek jellemzéséhez fontos adat a felületi feszültség és a felületi energia. "Szilárd elektródok" esetén ezen fogalmak pontos értelmezése, és mérésének kivitelezése számos kérdést vet föl.

E kérdések közül először néhány, a szilárd-folyadék határfelület elvi jellemzésével kapcsolatossal foglalkozom. Felhívom a figyelmet az irodalomban megtalálható egyes megállapítások pontatlanságára. Röviden ismertetek egy új szilárd-folyadék határfelületi termodinamikai modellt.

A bending beam módszerrel történő felületifeszültség-mérés elvének rövid ismertetése után e módszer alapegyenleteivel foglalkozom. A felületi feszültség-görbületi sugár viszonyára vonatkozóan bemutatok két, az irodalomban megtalálható összefüggést, majd elemzem, hogy ezek közül melyik nyugszik megbízható alapokon. A görbületi sugár változása és a visszavert fénypont elmozdulása között ismertetek egy olyan egyenletet, mely a fény sugar beesési szögét is tartalmazza paraméterként.

Ezek után röviden bemutatom az általunk épített bending beam mérőrendszert és a hozzá készített mérőszoftvert.

Végezetül ismertetem saját mérőrendszerünkön polimerfilm-elektrodokra mért eredményeimet, melyek alátámasztják a polimerfilmmel borított és a borítatlan elektródokon lejátszódó adszorpciós folyamatok között megfigyelt hasonlóságot.

Inverziós görbék meghatározása Monte Carlo szimulációkkal

Rutkai Gábor, IV. évf. vegyész informatikus hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Kristóf Tamás egyetemi docens
VE Fizikai Kémia Tanszék

A számítógépes modellezés fejlődésének köszönhetően napjainkban egyre nagyobb teret hódít a fizikai-kémiai folyamatok és jelenségek számítógépes szimulációja. Fluidumok termodinamikai tulajdonságainak meghatározásában ma már sokszor fontos szerepet játszik a számítógépes szimulációk használata is. Molekuláris szimulációkkal gyorsan és – megfelelő intermolekuláris kölcsönhatási modellek birtokában – kellő pontossággal leírhatjuk fluidumok viselkedését olyan állapotokban is, ahol a termodinamikai tulajdonságok nehezen vagy egyáltalán nem határozhatók meg kísérleti módszerek segítségével.

A Joule-Thomson-effektus inverziós görbéjére korábban relatíve kevés molekuláris szimulációs eredmény született. Többségében a Lennard-Jones-fluidumra határoztak meg inverziós pontokat Monte Carlo illetve molekuladinamikai szimulációs módszerek és emellett extrapolációs vagy interpolációs technikák alkalmazásával. Néhány munka foglalkozott továbbá ipari felhasználás szempontjából is jelentős fluidumok, mint pl. a szén-dioxid, vizsgálatával. Kén-hidrogén inverziós pontjainak meghatározására irányuló munka eddig még nem született.

Célunk az volt, hogy a viszonylag precíz állapotegyenlettel rendelkező Lennard-Jones-fluidum inverziós görbéjét minél pontosabban tudjuk meghatározni Monte Carlo szimulációkkal. Az NpH (izoentalpiás-izobár) sokaság az izoentalpiás Joule-Thomson-effektus jellemzőinek számítására alkalmasnak ígérkezett. Az új módszer használatával számításokat végeztünk kén-hidrogénre is, amely anyagra már kidolgoztak precíz intermolekuláris potenciálmodelleket. A ritkaságnak számító NpH -Monte Carlo számítások eredményeit összevetettük kísérleti állapotegyenletekből származó eredményekkel, valamint irodalmi adatokkal.

A bemutatott módszer hatékonynak bizonyult a tesztelés céljából választott Lennard-Jones-fluidumra és az ipari jelentőséggel bíró kén-hidrogénre egyaránt, és segítségével reális eredményeket kaptunk a kén-hidrogén inverziós pontjaira olyan szuperkritikus tartományokban is, ahol nem rendelkezünk mérési eredményekkel.

Kompozit poli(dimetil-sziloxán) elasztomerek duzzadási és duzzadáskinetikai vizsgálata

Hajsz Tibor, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Zrínyi Miklós** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Filipcsei Genovéva** egyetemi adjunktus
BME Fizikai Kémia Tanszék

Az utóbbi évtizedben az anyagtudomány, és a számítástechnika látványos fejlődésen ment keresztül, ezért kézenfekvőnek tűnik olyan anyagok előállítása, amelyek a számítógéptől kapott jeleket „megértik”, és ennek megfelelően változtatják tulajdonságaikat. Szabályozástechnikai szempontból legegyszerűbbnek kínálkozó lehetőség az elektromos-, vagy mágneses tér alkalmazása. Az intelligens anyagok megjelenése kínálta a lehetőséget e probléma megoldására.

Elasztomerek nagy rugalmasságot mutató anyagok, amelyek rugalmassága a polimermolekulák hajlékonyságától, térhálós polimereknél a térhálósítás mértékétől, valamint a töltőanyag mennyiségétől és minőségétől függ. A töltőanyagot tartalmazó műanyagokat polimer kompozitoknak nevezzük. Az anizotrop kompozit elasztomer olyan rugalmas anyag, amelynek mechanikai tulajdonságai iránytól függően mások. Jelentőségük abban áll, hogy a technikai eszközeink többségében a terhelés legtöbbször jól meghatározott erővonalak mentén hat. Ezen erővonalaknál jóval nagyobb szilárdságra van szükség, mint máshol.

A magnetoreológiai (MR) folyadékok megjelenése lehetővé tette mágneses térre érzékeny anizotrop kompozit elasztomerek előállítását. Külső mágneses tér ugyanis polarizálja a láncszerű aggregátumokban az egymást követő részecskéket. A polarizáció mértéke (és ezzel együtt e részecskék) mágneses kölcsönhatásának erőssége az alkalmazott tér erősségétől függ. A láncszerű aggregátumokban a polarizáció következtében fellépő kölcsönhatások jelentős erőt fejtenek ki. Mivel a mágneses polarizáció igen gyors folyamat, így lehetőség van arra, hogy MR folyadékok illetve az anizotrop elasztomerek mechanikai, mágneses, termikus, duzzadási és optikai tulajdonságait külső tér alkalmazásával pillanatszerűen megváltoztassuk.

Az anizotrop kompozit elasztomerek előállításának és fizikai kémiai tulajdonságainak tanulmányozásához elengedhetetlenül szükséges a töltőanyagot nem tartalmazó elasztomer tulajdonságainak megismerése valamint a mágneses térre érzékeny részecskéket tartalmazó elasztomerek esetében a töltőanyag duzzadásfokra gyakorolt hatásának tanulmányozása.

Geometriai inhomogenitás hatása a konvektív instabilitásra

Tot Szilvia, IV. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Tóth Ágota** egyetemi docens
SZTE Fizikai Kémiai Tanszék
Dr. Horváth Dezső egyetemi docens
SZTE Fizikai Kémiai Tanszék

A kémiai front egy autokatalitikus reakció tér- és időbeli terjedése. Ha a reaktánsoldat sűrűsége kisebb, mint a termékelegyé, akkor felülről lefelé haladó front esetén a hidrodinamikai erők hatására közegáramlás, azaz konvekció lép fel, mely a kezdeti síkfront stabilitásvesztését és egy cellás szerkezet létrejöttét eredményezi. Alulról indítva síkfrontot a kisebb sűrűségű oldat lesz a nagyobb sűrűségű oldat tetején, amely elrendezés hidrodinamikailag stabil és a síkfront megőrzi stabilitását. Korábban kimutattuk, hogy széles és vékony cellákban (Hele-Shaw cellákban) az oldat vastagsága nagy mértékben befolyásolja a kialakuló mintázatot. Célunk, hogy kvantitatívan jellemezzük a kialakuló szerkezetet olyan rendszerekben, ahol a cella vastagsága térben periodikusan változik. Az általunk tanulmányozott reakció a tetracionátion kloritonnal történő savkatalizált oxidációja, ahol a reakció során a sűrűség növekszik.

A kiindulási reaktánskeletet a kívánt geometriai inhomogenitást tartalmazó plexiből készült széles és vékony cellába töltöttük. A cellában elektrokémiai úton síkalakban indítottuk be a reakciófrontot, melyet számítógépes képfeldolgozó rendszer segítségével követtünk és rögzítettünk. A kísérletek során változtattuk a heterogenitás mértékét, a cellavastagságot, és a reaktánsok kiindulási koncentrációját. Adott időközönként (0,4s-1s) meghatároztuk a frontprofilokat, melyeket elemi komponenseire bontottunk Fourier-transzformációval. A Fourier-amplitúdók időbeli változásából mennyiségileg jellemeztük a mintázatok kezdeti kialakulását.

A homogén rendszerekhez képest a kémiai frontok kialakulásának sebességében nagymértékű gyorsulást tapasztaltunk. A mintázatképződést az inhomogenitás vezérli olyan esetekben, ahol az inhomogenitás hullámhossza a leggyorsabban kialakuló front hullámhosszával közelítőleg megegyezik. Amennyiben nagymértékben különböznek egymástól, akkor a kettő együttesen befolyásolja a cellás szerkezet kialakulását.

Aromás 'vendég' molekulák elektrofil karakterének szerepe 'host-guest' komplexek stabilitásában

Szabó Kornélia, III. évf. kémia-környezettan szakos hallgató

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr Kunsági-Máté Sándor** egyetemi docens
PTE Általános és Fizikai Kémia Tanszék

A kalixarének kehely alakú molekulák, melyek kationokkal és anionokkal, továbbá semleges molekulákkal egyaránt képesek kölcsönhatásba lépni. Sokoldalú komplexképzési hajlamuk széleskörű gyakorlati alkalmazásukat teszi lehetővé.

A korábbi vizsgálatok megállapították, hogy a kalixarén molekulák és az aromás vendégmolekulák π -elektron rendszere között létrejövő kölcsönhatás jelentősen függ a kalixarén befogadó molekula konformációjától [1], valamint az oldószer permittivitásától is [2]. Valószínűsíthető volt, hogy az aromás vendégmolekula elektronsűrűsége is jelentős hatást gyakorolhat a 'host-guest' komplex stabilitására. E tulajdonságot a környezeti kémiai szempontból is fontos fenolszármazékok (*p*-nitro-fenol, *p*-klór-fenol, fenol és *p*-metil-fenol), mint vendég-molekulák vizsgálható kalix[6]arén-hexaszulfonát gazda-molekulával létrejövő komplexképződésén, mint modellen tanulmányoztuk. A korábban már általunk is eredményesen alkalmazott [3,4] módszerek (Job-módszer és vant'Hoff elmélet) felhasználásával a komplexképződési reakció entalpia-, ill. entrópiaváltozását két független módszerrel mértük. A 'gazda-vendég' komplex stabilitását és ebből a kölcsönhatás termodinamikai paramétereit fluoreszcenciás módszerrel határoztuk meg, míg a komplexképződés entalpia-, ill. entrópiaváltozásának közvetlen mérését pásztázó kalorimetriás (DSC) módszerrel végeztünk. Méréseink szerint a komplexképződés során az entrópia csökken. Ezt a meglepő eredményt molekuláris szinten az oldószermolekulák sajátos újrendeződésével sikerült értelmeznünk.

Reményeink szerint eredményeink hozzájárulhatnak a kémiai érzékelők alapjául szolgáló szelektív 'gazda' molekulák célirányos tervezéséhez.

- [1] Kunsági-Máté, S., Nagy, G., Jurecka, P., Kollár, L., *Tetrahedron Lett.*, 58, 5119-5124 (2002)
- [2] Kunsági-Máté S., Bitter I., Grün A., Nagy G., Kollár L., *Anal. Chim. Act.*, 461, 273-279 (2002)
- [3] Kunsági-Máté S., Szabó K., Lemli B., Bitter I., Nagy G., Kollár L., *J. Phys. Chem. B*, 108, 15519-15522 (2004)
- [4] Kunsági-Máté S., Szabó K., Bitter I., Nagy G., Kollár L., *Tetrahedron Lett.*, 45, 1387-1390 (2004)

Fluorozott foszfor-ilidek dimerizációs reakcióinak kvantumkémiai vizsgálata

Benkő Zoltán, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Nyulászi László** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szervetlen Kémia Tanszék

Stabil foszfor-ilidek előállítására gyakran azért hiúsul meg, mert a keletkező vegyületek dimerizálnak. Már régebben megfigyelték, hogy a foszforon történő fluor-helyettesítés stabilizálja az ilid típusú vegyületeket. Vizsgálataim célja annak megállapítása volt, hogy ez a stabilizáció elég-e ahhoz, hogy a dimerek kialakulását meggátolja.

Az $F_3P=NH$ és $F_3P=CH_2$ molekulák és nitrogénnel illetve szénnel helyettesített származékainak dimerizációs reakcióit vizsgáltam kvantumkémiai módszerekkel. A számításokat B3LYP/3-21G(*), 6-311+G** illetve bizonyos esetekben aug-cc-pVTZ szinteken végeztem. Meghatároztam a $F_3P=NH$, $F_3P=N-CN$, $F_3P=N-COOH$, $F_3P=CH_2$, $F_3P=C(CN)_2$, $F_3P=C(COOH)_2$ vegyületek illetve dimerjeinek lehetséges szerkezeteit. A szerkezeti adatok, valamint a molekulapályák analízise alapján megállapítottam a PF_3 csoport σ^* pályáira történő visszadonálás hatását.

Az $F_3P=NH$ illetve $F_3P=CH_2$ dimerizációjának szabadentalpia-változása 298K hőmérsékleten minden vizsgált szinten negatív értéknek adódott, melyből megállapíthatjuk, hogy a két ilid ezen a hőmérsékleten termodinamikailag nem stabil. A reakció átmeneti állapotait is meghatároztam, és a reakció energiagátja a számítások szerint nem olyan nagy, hogy meggátolhatná a dimerizációt. Mivel a disszociációs folyamatok entrópia-változása pozitív érték, megbecsülhető az a hőmérséklet, amely felett a disszociációs folyamat a kedvezményezett. Számításaim alapján kb. 200-250°C fölött mindkét dimer disszociál, így az eddig még elő nem állított ilidek tulajdonságait a gyűrűs dimer pirolízisekor keletkező monomer vizsgálatával meg lehet határozni.

Vizsgálatokat végeztem olyan foszforon fluorozott ilidekkel is, melyek C illetve N atomjukon elektronszívó helyettesítőket tartalmaznak, s ismert hogy a foszfinná történő izomerizációs reakcióban stabilizálják az ilidet. A B3LYP/6-311+G** szinten számított adatok alapján sem a ciano-származék, sem a karbonsav-származék nem fog dimerizálni, így ezen ilidek előállítását a dimerizáció nem fogja megakadályozni. Ezáltal új, várhatóan stabil foszfor-ilidek előállítására nyílik lehetőség.

Aromaanyagok adszorpciós tulajdonságainak vizsgálata Inverz gázkromatográfiával

Józsa Emese, V. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Dallos András egyetemi docens
VE Fizikai Kémiai Tanszék

Információk százazreit jelentik az illat anyagok, amelyek szaglószerünk által jellemzést adnak környezetünkről. Az információ feldolgozásának módjait a szaglás mechanizmusát és az illatanyagok adszorpciós tulajdonságait világszerte kutatják, előbbiért Nobel-díjjal tüntették ki e téma kutatóit. A gyakorlati életben egyre fontosabbá vált az illatanyagok adszorpciós tulajdonságainak feltérképezése, hiszen gyakran valamilyen felülethez kötődve jutnak el hozzánk. Inverz gázkromatográfiás méréseink aromaanyagok adszorpciós tulajdonságainak vizsgálatára irányultak.

Munkánk során Chrompack 439 típusú gázkromatográfiás készülékkel, standard pamut-és szövetanyagokkal, mint állófázissal töltött oszloppal dolgoztunk. Az oszlopokon számos illatminta retenciós jellemzőit vizsgáltuk, He vivőgázt, 50°C és 150°C közötti hőmérséklettartományt alkalmazva. A kromatogramok alapján meghatároztuk a valódi retenciós időket, majd az ebből számolt fajlagos retenciós térfogatokat. Az injektált anyagmennyiség függvényében ábrázoltuk a fajlagos retenciós térfogatokat, és extrapolációval meghatároztuk az oldott anyagok végtelen kicsi koncentrációjára vonatkozó fajlagos retenciós térfogat értékeket (V_g^∞).

A V_g^∞ értékek alapján Henry állandót számoltunk és ennek logaritmusát ábrázolva a hőmérséklet függvényében kiszámítottuk az adszorpciós folyamat moláris entalpia-és entrópia változását. Az egyes anyagokra különböző hőmérsékleteken kiszámított értékekből -Henry állandó (He); parciális nyomás (pp); adszorbeált anyag mennyisége (n)-külön-külön többdimenziós izotermákat készítettünk.

Az így kapott izotermákra hőmérsékletfüggő paraméterekkel rendelkező, Langmuir- adszorpciós modell egyenletet illesztettünk. A számított és a mért adatok jó korrelációt mutatnak egymással.

Tanszékünkön végzett kísérletek eredményeinek gyakorlati alkalmazása az öblítő szerek, mosószerek tervezésekor kerül előtérbe.

Adataink segítségével megjósolható, hogy milyen mértékben, és mennyi ideig marad illatos egy ruhanemű, ha az adott illatanyagot alkalmazzák a textilöblítőben.

A szolvatáció/deszolvatáció vizsgálata poli(3-metil-tiofén) filmben elektrokémiai kvarckristály mikromérleg technikával

Janáky Csaba, III. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Visy Csaba tanszékvezető egyetemi tanár
SZTE Fizikai Kémia Tanszék

A vezető polimerek, például a polipirrol, politiofén és a polianilin igen közkedvelt anyagok egyedi redoxi, optikai és elektromos tulajdonságaik miatt.

Az elektrokémiai polimerizáció során a polimerek oxidált, vezető állapotban képződnek. Az elektroneutralitás elve miatt a láncok mentén kialakult pozitív töltéseket anionoknak kell kompenzálnia. A filmek redoxi átalakításai megváltoztatják a töltéshordozók számát, így azokat ionmozgásnak kell kísérenie. Jóllehet sok publikáció jelent meg ennek vizsgálatával kapcsolatban, nagyon kis részük foglalkozott az ionmozgáshoz kapcsolódó oldószermozgással. Ezért célul tűztük ki az oldószer szerepének vizsgálatát a poli-3-metil-tiofén film redoxi átalakításai során [1].

A poli(3-metil-tiofén) polimerizációját galvanosztatikusan végeztük, platina elektródon, 50 mC/cm² felületi töltésűrűséggel, (Bu)₄NPF₆ vezetőső jelenlétében először nitrobenzolban, majd acetonnitrilben. Az redoxi folyamatok és az azokat kísérő jelenségek vizsgálatához ciklikus voltammetriát, és elektrokémiai kvarckristály mikromérleg technikát (EQCM) használtunk. Az EQCM egy *in situ* módszer az elektród felületi tömegváltozásának mérésére mikro-, nanogramm tartományban, a számítások a Sauerbrey-egyenleten alapulnak [2].

A mérések során a ciklikus voltamogramokat 10, 25, 100 mV/s-os sebességgel vettük fel, a nitrobenzolban készült film esetén először nitrobenzolban, majd oldószercsere után acetonnitrilben. Az oldószercsere hatását az ellentétes sorrendben is vizsgáltuk. Mérési eredményeinkből elkészítettük a tömegváltozás-átáramlott töltés görbéket, melyek meredeksége megadja a mozgó részecskék virtuális moláris tömegét. Az oxidációs folyamatok során ez a NB esetén 103 g/mol, AC esetén 59,5 g/mol. Mivel M(PF₆⁻) = 145 g/mol, azaz "tömeghiány" van, és a nagy méretű (Bu)₄N⁺ hozzájárulása kizárható, így eredményeink igazolják, hogy oldószer kiáramlása kíséri az oxidációt.

Ez az tapasztalat megerősíti azt az elképzelést, hogy a kvázi-fémes állapot elérésében az oxidációt kísérő deszolvatáció kulcsszerepet játszik.

[1] Csaba Visy, Csaba Janáky, Emese Kriván, *Journal of Solid State Electrochemistry*, Springer-Verlag, New York, In press

[2] Sauerbrey, G., *Z. Für Phys.*, 155, 206 (1959)

Rézionok hatása a liposzómák szerkezetére

Varga Zoltán, IV. évf. mérnök-fizikus hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Bóta Attila** egyetemi docens
BME Fizikai Kémia Tanszék

Dolgozatomban a biológiai membránok egyik fő foszfolipid komponenséből, a dipalmitoil-foszfatidil-kolinból (DPPC) és vízből álló liposzómák rézionok (réz-acetát) jelenlétében bekövetkező szerkezetváltozásait tanulmányozom, a rendszer gél állapotában. Az elvégzett kis és nagyszögű röntgenszórásos vizsgálatok alapján a liposzómák jellegzetes héjszerkezetének valamint kettősréteg lipid alrácsának változása a rézionok kis koncentrációjában (a réz/lipid molaránnyal kifejezett 0.01 - 0.05 értéktartományban) bekövetkezik. A szerkezeti változás a periodikus rétegszerkezet szabályosságának csökkenésével és a lipidmolekulák laterális irányú elhelyezkedésének változásával jár. A rövid és hosszú távú periodicitás sérülése a rézionok inhomogén elhelyezkedésére vezethető vissza. Az anomális kisszögű röntgenszórásos vizsgálatok [1] egyértelműen megmutatták, hogy a rézionok a várakozással ellentétben a rétegszerkezet karakterisztikus ismétlődési távolságához (64 Å) képest lényegesen nagyobb méretű, átlagosan 280 Å sugarú gömbökkel jellemezhető tartományokban (doménekben) koncentrálnak és csak kisebb arányban helyezkednek el a periodikus vízhéjakban.

A DPPC-réz-acetát-víz rendszer mért szórás- és diffrakciós görbéit (illetve annak részleteit) modellszámítások alapján is előállítottam. A modellszámításokban az alaprendszer fő szerkezeti jellemzőit építettem be. A kisszögű szórás illetve diffrakciós görbék szimulációjánál felhasznált paraméterek hatásait tanulmányoztam és azokat egybevettem a mért szórás- és diffrakciós görbék változásaival. Megállapítottam, hogy a rézionok inhomogén elhelyezkedésének a szórás- és diffrakciós görbékre gyakorolt hatása az alaprendszer fluktuációjának figyelembevételével írható le. Modellszámítások alapján igazoltam, hogy a szeparált anomális kisszögű szórás- és diffrakciós görbék lokális csúcsa a rézionok periodikus elhelyezkedésének következménye és nem egyszerűen két kisszögű görbe különbsége. A lipidrétetre vonatkozó modellszámítások segítségével követtem a rézionok inhomogén eloszlásának a nagyszögű diffrakciós csúcs alakjára gyakorolt hatását, korrelációt állapítottam meg a laterális irányú domének mérete és a nagyszögű diffrakciós félértékességének kiszélesedése között.

[1] G. Goerigk, R. Schweins, K. Huber, M. Ballauff, *Europhys. Lett.*, 66, 331-337 (2004)

A liponsav antioxidáns hatását befolyásoló tényezők tanulmányozása

Csepei Lénárd István, IV. évf. vegyész hallgató

Muntean Norbert, V. évf. vegyész hallgató

BBTE Kémia és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Szabó Gabriella** egyetemi adjunktus
BBTE Kémiai Tanszék

A dolgozatunkba a liponsav [1] antioxidáns hatását befolyásoló tényezőket vizsgáltunk. Biológiai rendszerekben az egyik igen fontos antioxidáns a liponsav (2-ditiolán-3-pentánsav). Hatása többféle mechanizmus útján valósul meg: aktivált oxigént tartalmazó gyökök befogása, más antioxidánsok újraképzése, oxidatív stressz okozta molekula-meghibásodások helyreállítása, bizonyos fém-ionok komplexálása. Az átmenetifém-ionok módosítják a liponsav antioxidáns hatását, mivel komplexeket képeznek.

Az antioxidáns hatást a Briggs-Rauscher oszcilláló reakció révén mértük. Antioxidáns adagolásával az aktív BR elegyhez azt tapasztalták, hogy az oszcilláció azonnal leáll, majd bizonyos – inhibíciós időnek nevezett – idő elteltével visszatér. Az inhibíciós idő az antioxidáns koncentrációjával lineárisan változik, a koncentrációk egy viszonylag széles tartományában. Ez a tény lehetővé teszi egy, az inhibíciós idő mérésén alapuló, analitikai módszer kidolgozását az antioxidáns hatás meghatározására.

A liponsav okozta inhibíciós időre felvett kalibrációs görbéhez viszonyítottuk a fémionokat is tartalmazó oldat inhibíciós idejét. A liponsav relatív antioxidáns aktivitását vizsgálva megállapítottuk, hogy [4]:

liponsavhoz adagolva megváltozik az t_{inh}
a változás mértéke függ a fémionok koncentrációjától
különböző átmenetifém-ionok különböző mértékben csökkentik az t_{inh} .

[1] Fujieda, S., Ogata, H., *Talanta*, 1996 (1989).

[2] Cervellati, R., Crespi-Perellino, N., Furrow, S., Minghetti, A., *Helv. Chim. Acta*, 83, 3179 (2000)

[3] Cervellati, R., Honer, K., Furrow, S., Neddens, C., Costa, S., *Helv. Chim. Acta*, 84, 3533 (2001)

[4] Csepei, L., Muntean, N., Miklosi, L., Szabo, G., Bolla, Cs., *IX. Nemzetközi Vegyészkonferencia*, Kolozsvár, november 14-16, 123 (2003)

Diszpergens hatású módosított polimerviasz előállítás és vizsgálata

Angyal András, V. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Bartha László** tanszékvezető egyetemi docens
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

Diákköri munkám során olyan, elsősorban gumibitumen kompozíciókban alkalmazható diszpergens hatású adalékokat állítottam elő, olefinek maleinsav-anhidriddel történő kopolimerizációs reakcióival, melyek alapanyaga műanyag-hulladékok enyhe termikus krakkolása során keletkező polimerviaszok voltak. Az előállított adalékok diszpergáló hatékonyságát előzetes szelekció után gumibitumen rendszerekben vizsgáltam. Az adalékok szintetizálására különböző típusú polimerek (polietilén, polipropilén, polisztirol) degradációs maradékát használtam fel. Ezekből különböző olefinek kettős kötést is tartalmazó komonomerrel (sztirollal, n-decén) köztitermékeket készítettem. Az adalékokhoz a köztitermékek acilezésével jutottam. A köztitermékek és a szintetizált adalékok előzetes vizsgálata során meghatároztam azok savszámát, illetve felvettem a 400-4000 cm⁻¹ hullámszám tartományba eső infravörös spektrumát. Jelentős különbségek mutatkoztak a kialakult polimerek szerkezetében mind a köztitermékek, mind pedig a diszpergens adalékok esetében. A molekulaszervezet alapján választottam ki a legmegfelelőbb adalékokat a gumibitumen számára és ezekkel végeztem hatásvizsgálatokat. A hatásvizsgálatokat „A” típusú bitumen, „B” gumi, és egy kereskedelmi ülepedésgátló adalék felhasználásával végeztem. A kiválasztott adalékok egyik esetben sem rontották az ülepedési tulajdonságot, s hatékonyságuk nem volt rosszabb, mint a referenciaként alkalmazott kereskedelmi ülepedésgátló adalék. A polimer hulladékból keletkező paraffinviaszok adalék célú felhasználásának vizsgálatával csak kevesen foglalkoznak, de a bemutatott eredmények biztató alapjai lehetnek egy hulladékokon alapuló, jelentős értékű termékkel rendelkező termékeket előállító ún. „clean” technológia kidolgozásához.

Kulcsszavak: polimerviasz, degradáció, gumibitumen, diszpergens adalék

FCC-benzinek minőségjavításának vizsgálata

Juhász Krisztián, V. évf. vegyészmérnök hallgató

Marusa Andor, V. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Hancsók Jenő** egyetemi docens
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék
Magyar Szabolcs doktoráns
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

A gépjárművek korszerű katalizátorainak aktivitását és élettartamát jelentősen csökkentik a motorbenzinben lévő kénvegyületek, illetve azok égéstermékei, ezért a motorbenzinek kén tartalmára vonatkozó előírások jelentős mértékben szigorodnak a közeljövőben. Az Európai Unióban pl. 2005-től legfeljebb 50 ppm lehet a motorbenzinek kén tartalma, de regionálisan biztosítani kell a gyakorlatilag kénmentes (<10 ppm) motorbenzint is. Ezen kívül szigorítják az aromástartalomra vonatkozó előírást is, amely a jelenlegi 42 v/v% helyett 2005-től legfeljebb 35 v/v% lehet.

A keverőkomponensek közül az FCC-benzin képezi a motorbenzinek kb. 35-40%-át, és ebből származik a motorbenzinek kén tartalmának döntő része (>90%). Ezért az FCC-benzinek kénmentesítése kiemelkedő jelentőségű az új kénmentesítő előírások teljesítéséhez. A hagyományos CoMo/Al₂O₃ kénmentesítő katalizátorok nem alkalmazhatók gazdaságosan a viszonylag nagy (25-30%) olefintartalmú FCC-benzinek kénmentesítésére, mert az olefinek legnagyobb része a kénmentesítés körülményei között hidrogéneződik, és a benzin oktánszáma jelentősen csökken.

Az elmúlt 10-15 évben számos technológiát dolgoztak ki FCC-benzinek gazdaságos kénmentesítésére (kis oktánszámvesztés, kis H₂-fogyasztás). Ezen belül a katalitikus szelektív hidrogénező-kénmentesítő eljárások terjedtek el leginkább, melyek nem nemesfém-tartalmú és nem zeolithordozós katalizátorokkal üzemelnek. Ha az FCC-üzem alapanyagát a hidrogénező kénmentesítéssel vagy enyhe hidrokrakkolással csökkentik, akkor az FCC-benzin kén tartalma már viszonylag kicsi, 300 ppm-nél kisebb (ellenkező esetben 1000-2000 ppm). Ezért olyan katalizátorok (pl. nemesfém/zeolit) alkalmazása is előtérbe kerülhet, amelyek kén-tűrése korlátozott.

A Tudományos Diákköri munkánk célja egy Pt-Pd/zeolit katalizátor FCC-benzinek kénmentesítésére való alkalmazhatóságának vizsgálata volt. Ennek keretében tanulmányoztuk a katalizátor kénmentesítő aktivitását egy teljes forráspont-tartományú FCC-benzinnel, valamint az ebből nyert nehéz frakcióval. Célunk volt továbbá a műveleti paramétereknek (elsősorban hőmérséklet, folyadékterhelés) a cseppfolyós termékek hozamára és minőségére gyakorolt hatásának tanulmányozása.

Folyamatos heteroazeotrop extraktív desztilláció vizsgálata

Papp Katalin, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Lelkes Zoltán** egyetemi docens
BME Vegyipari Műveletek Tanszék
Dr. Rév Endre egyetemi docens
BME Vegyipari Műveletek Tanszék

A desztilláció még ma is az egyik legelterjedtebb ipari elválasztási művelet, annak ellenére, hogy nagy az energiaigénye. Nem-ideális elegyek elválasztása hagyományos desztillációval nem megoldható. E problémák megoldására is fejlesztették ki a különleges desztillációs eljárásokat. A két legismertebb különleges desztillációs eljárás az extraktív és a heteroazeotrop desztilláció. Az extraktív és a heteroazeotrop desztilláció mellett, hogy alkalmasak azeotropok elválasztására, energia fogyasztás szempontjából is előnyösek. Mind a folyamatos extraktív, mind a folyamatos heteroazeotrop desztilláció részletesen kutatott és ismert művelet. Habár a két művelet hibrid megvalósítása a folyamatos heteroazeotrop extraktív desztilláció további előnyökkel járhat, részletes vizsgálata mindeddig nem történt meg. TDK dolgozatom célja, hogy a folyamatos heteroazeotrop extraktív desztilláció megvalósíthatósági vizsgálatát kidolgozzam és a művelet korlátait meghatározzam. A megvalósíthatósági vizsgálatot az acetónitril-víz minimális azeotrop butil-acetáttal történő elválasztásán mutatom be. A művelet legfontosabb korlátai adott tányérszám mellett egy adott oldószer/betáplálási arány esetében a minimális, a maximális reflux; míg adott refluxarány mellett a minimális és maximális oldószer/betáplálási arány. A vizsgálatok alapján a folyamatos heteroazeotrop extraktív desztilláció megvalósítható és hatékony művelet.

Gumiőrlemények hatása a gumi-bitumen kompozíciók tulajdonságaira

Fazekas Bence, okl. környezetmérnök

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Bíró Szabolcs** tanszéki mérnök
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

Tudományos diákköri munkám során a gumi-újrahasznosítási módszerek egy csoportjával, a gumiőrleménnyel történő bitumen-módosítással foglalkoztam. A gumi-bitumen kompozíciókat egy 1300 cm³ térfogatú reaktorban állítottam elő, különböző kereskedelmi forgalomban is kapható bitumenek és gumiőrlemények felhasználásával. A vizsgálati mintákat egy kémiai degradálást és mechano-kémiai diszpergálást egyaránt alkalmazó technológiával állítottam elő, melynek hatására a gumibitumenek tárolási stabilitása megfelelt a polimerrel modifikált bitumenek műszaki előírásainak.

Kísérleti munkám során vizsgáltam a különböző helyről származó, különböző összetételű és szemcseméret-eloszlású gumiőrlemények hatását a kompozitok tulajdonságaira.

Vizsgáltam a gumiőrlemény előállítási módjának hatásait, hiszen a különböző őrlési technológiák határozzák meg a gumiőrlemény felületi jellemzőit ezzel nagymértékben befolyásolva a bitumen-gumi nedvesítési folyamatokat. Meghatároztam, hogy mely alkalmazott gumiőrlemény felhasználása adhat a gyakorlat számára kedvező eredményeket.

Polimerekkel módosított bitumenek előállítása és vizsgálata

Héri Attila, V. évf. környezetmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Bartha László** tanszékvezető egyetemi docens
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

Az elmúlt évtizedek egyre szigorodó előírásainak hatására olyan bitumen-polimer kompozitok előállítása lett a cél, amelyek tulajdonságai jobban megfelelnek a szigorodó minőségi követelményeknek és felhasználási tulajdonságaik kedvezőbbek, mint az eddig alkalmazott bitumeneké. Kutatások és fejlesztések eredményei alapján ma már ismert, hogy a gumiabroncsból származó hulladékgumi gumiőrleménnyé alakítva, megfelelő előkezelés után másodnyersanyagként bitumenekbe vagy útépitési aszfaltokba keverhető, és különböző eljárásokat is kifejlesztettek ezen kompozitok előállítására. A polimerekkel módosított bitumenek napjainkban is alkalmazott előállítási technológiái közül két klasszikus eljárást (nedves eljárás és elasztomerrel történő bitumen-módosítás), illetve annak végtermékeit (gumibitumen (GB) és SBS-sel módosított bitumen (PmB-A)) hasonlítottam össze egy általunk kifejlesztett úgynevezett módosított nedves eljárással és ennek végtermékével, a kémiaiilag stabilizált gumibitumenekkel (KSGB).

Kísérleteim során használt gumiabroncsból származó gumiőrleményeket, valamint kereskedelmi forgalomban is kapható bitumeneket használtam fel a gumibitumen kompozitok előállításához. Az előállításokat egy 1300 cm³ hasznos térfogatú reaktorban végeztem. Minden előállított mintánál meghatároztam a rugalmas, hideg, stabilitási és folyási tulajdonságokat, majd ezeket összevetettem egymással.

Megállapítottam, hogy a módosított nedves eljárással előállított KSGB kompozitok egyes tulajdonságai jelentősen eltérnek a hagyományos- vagy éppen a szintetikus gumikkal módosított bitumenekétől. Gyakorlati szempontokat is tekintve pedig akár vetélytársai lehetnek a napjainkban alkalmazott csúcsmínőségű, tiszta polimerekkel módosított bitumeneknek is.

Királis alkoholok reszolválása szuperkritikus extrakcióval

Molnár Péter, okl. vegyész mérnök

BME Vegyész mérnöki kar

Témavezetők: **Dr. Simándi Béla** egyetemi docens
BME Vegyipari Műveletek Tanszék
Dr. Fogassy Elemér egyetemi tanár
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék
Dr. Székely Edit egyetemi adjunktus
BME Vegyipari Műveletek Tanszék

A királis vegyületek enantiomerjeinek hatása egymástól jelentősen eltérhet. Elválasztásuk egyik módja a diasztereomer képzésen alapuló reszolválás. A diasztereomerek, ill. a diasztereomer és az enantiomer keverék elválasztása (pl.: kristályosítás) és az enantiomer diasztereomerból való felszabadítása során gyakran alkalmaznak egészségre káros szerves oldószereket. Ezek helyettesíthetők szuperkritikus állapotú szén-dioxidos extrakció (SFE) alkalmazásával.

Munkám során rácém *transz*-2-halogén-ciklohexán-1-olok, valamint a 2-izopropil-5-metilciklohexán-1-ol (mentol) reszolválásával foglalkoztam. Molekulakomplexképző reszolváló ágensként (2*R*,3*R*)-(-)-*O*,*O'*-dibenzoil-borkősav monohidrátot alkalmaztam. A *transz*-2-halogén-ciklohexán-1-olok homológ sorának reszolválásakor a mintákat kezdetben metanolban készítettem elő és az SFE után a diasztereomert szerves oldószeres extrakcióval bontottam meg. Azt tapasztaltam, hogy az elérhető enantiomer tisztaság (ee) és az optimális reszolváló ágens/alkohol molarány (mr) a halogénatom méretével növekszik (extraktum ee_{Cl}=72,2%; ee_{Br}=89,3%; ee_I>99%; mr_{Cl}=0,55; mr_{Br}=0,63; mr_I=0,67). 2² típusú kísérlettervben vizsgáltam az extrakciós paraméterek hatását. A hőmérséklet hatása nem, a nyomás hatása csak a jódciklohexanol esetében jelentős. *Transz*-2-klór-ciklohexán-1-ol modell vegyület alkalmazásával sikerült továbbfejleszteni a reszolválási eljárást olvadékból történő mintaelőkészítés és frakcionált extrakció alkalmazásával. Az optimális mr érték a korábbi eljárással megegyezik, de a nyomás mellett a hőmérséklet hatása is szignifikáns. A legjobb elválasztást 100 bar-on és 33°C-on értem el. A mentol reszolválását az új módszerrel oldottam meg, amely eredményesen reszolválható szuperkritikus CO₂-dal, de a reszolválás optimalizálása további kísérleteket igényel.

Háromszegmenses szimulált mozgóréteges preparatív folyadék kromatográfiás művelet (SMB) vizsgálata

Turza Pál Gergely, V. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Szánya Tibor** egyetemi docens

VE Vegyipari Műveleti Tanszék

Nagy Melinda doktoráns

VE Vegyipari Műveleti Tanszék

A preparatív kromatográfiás műveletek legkorszerűbb csoportját a szimulált mozgóréteges műveleti megoldások alkotják és egyre szélesebb körben alkalmazzák elsősorban nehezen izolálható és/vagy nagytisztaságú termékek előállítására a gyógyszeriparban, a finomkémiai és biotechnológiai szeparációs feladatok megoldására. Ezekben a készülékekben a folyadékfázis mozgása mellett a szilárd fázis szimulált mozgását is megvalósítják. Ezáltal az úgynevezett batch technológiákat folyamatossá tehetjük és ezáltal nemcsak a termelést tehetjük gazdaságosabbá, hanem közel azonos mértékben kötődő komponensek is nagy tisztasággal elválaszthatók.

A TDK munkám során a Veszprémi Egyetem Vegyipari Műveleti Tanszékén folyó szimulált mozgóréteges folyadék kromatográfiás (Simulated Moving Bed, SMB) vizsgálatokba kapcsolódtam be. Az SMB művelet paramétereinek összetettsége miatt először számítógépes szimulációkat futtattam, a szétválasztási paraméterek hatásának megállapítására, majd a kapott szimulációs eredmények közül kísérletekkel ellenőriztem a számítógépes szimuláció pontosságát. A vizsgálatokat AB szteroid elegy YMC S50 tölteten, aceton-diklórmetán eluenssel történő szétválasztását vizsgáltam.

A dolgozatom elméleti részében összefoglalom a kromatográfiás eljárások elméleti alapjait, a nagyhatékonyságú preparatív folyadékkromatográfiás műveletek elméletét, az SMB művelet alapjait, és a modellezés matematikai alapjait.

A gyakorlati részben a meglévő kísérleti eredmények felhasználásával számítógépes szimulációkat végeztem. Először szimulációkat futtattam az acetondiklórmetán eluens összetétel és betáplálási térfogatáram változtatásával. Bemutatom a szimulációs programot, a szimulációval kapott adatok kiértékelését. A szimulációk közül kiválasztva a legjobbakat, méréseket végeztünk a szimulációk kísérleti ellenőrzésére. A kísérleti részben a térfogatáramok változtatásának hatását vizsgáltam a termék fajlagosokra. A kapott mérési eredményeket összehasonlítom a szimulációs eredményekkel, és egy mérés értékelését részletesen bemutatom.

Gumibitumenek tulajdonságainak függése az előállítási körülményektől

Bús Nikolett Katalin, IV. évf. környezetmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Bartha László** tanszékvezető egyetemi docens

VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

A Veszprémi Egyetem Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszékén folyó gumibitumen kutatások keretén belül a különböző körülmények között előállított kompozitok tanulmányozásával foglalkoztam. A vizsgált gumibitumeneket egy 1300 cm³ hasznos térfogatú szakaszos reaktorban állították elő két technológiai lépésben. Az előállítás két részfolyamata a kémiai degradálás, majd az ezt követő mechanikai nyírás volt. Vizsgálataim során azt tanulmányoztam, milyen összefüggés van az egyes technológiai lépések időtartama és a keletkezett gumibitumenek tulajdonságai között. Vizsgáltam a minták lágyuláspontját, penetrációját, rugalmas tulajdonságait, tárolási stabilitását illetve viszkozitásukat, és ezek időbeli változását. Vizsgálataimat szabványban előírt módszerek alapján végeztem.

Az egyes részfolyamatok időtartamát növelve a mért lágyuláspontok kis mértékben csökkentek, a penetrációk nem mutattak jelentős változást. Mind a termikus degradálás, mind pedig a mechanikai nyírás időtartamának növelése a minták homogenitását javította, és ezzel egyidejűleg kis mértékben nőtt a kompozitok nyújthatóságai is. A dinamikai viszkozítások időbeli változása a végtermék nagyon fontos tulajdonsága, ezekből az értékekből az előállítás során, illetve a tárolás során lezajlott folyamatokra következtethetünk. Megállapítottam, hogy mindkét részfolyamatnak volt egy optimális időtartama, aminél hosszabb illetve rövidebb ideig tartó kezelés kedvezőtlen tulajdonságokat eredményezett. Emellett a tárolási stabilitás mért értékei is azt mutatták, hogy a vizsgált kompozitok e tekintetben is érzékenyek az előállítási időtartam hosszára.

A nyersanyag tulajdonságok és a műveleti paraméterek hatása az extrudátumok minőségére

Mikola Erika, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Merész Péter** egyetemi adjunktus
BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék

Az élelmiszer tudományi kutatások keretében nagy figyelmet fordítanak az élelmiszeripari feldolgozások során bekövetkező változások nyomon követésére, vizsgálatára, hogy a kapott eredmények ismeretében a feldolgozási technológiákat jellemezhessek, az esetleges kedvezőtlen jelenségeket kiszűrhessek. A végső cél olyan élelmiszer előállítási eljárások kialakítása, mely ízletes, nagy tápértékű, antinutritív anyagoktól mentes, kedvező megjelenésű élelmiszer gyártását teszi lehetővé. Kísérletem célja az volt, hogy az extrudálási technológiát abból a szempontból jellemezsem, hogy az extrudálás alatt a hőterhelés (hőmérséklet és a tartózkodási idő) mértéke hogyan befolyásolja amaránt-kukorica keverék egyes jellemző tulajdonságait. Kiválasztva egy viszonylag magas szemcseméretű frakciót (>600 µm), szándékom volt összehasonlítani, hogy milyen eltérések tapasztalhatók egy alacsonyabb szemcseméretű frakcióval kapott azonos kísérleti beállítások eredményeihez képest.

Vizsgálataim során 5 különböző hőmérsékleten, három különböző tartózkodási idő mellett, három különböző amaránt tartalmú kukoricakeverékekkel végzett teljes faktoriális kísérletben vizsgáltam az extrudálás mértékét, a termék egyensúlyi nedvesség tartalmát, a techno-funkcionális tulajdonságai közül a vízkötő és víztartó képességét. Az ismertetett kísérleti terv szerint elvégzett vizsgálatok eredményeként az extrudátumok nedvesség tartalmára, expanziós arányára, expanziós térfogatára, vízkötő és víztartó képességére kaptam az értékelésbe vont eredményeket.

Az eredményeket vizsgálatonként a faktorok szerinti elrendezésben táblázatba foglaltam, ahol az átlagértékekkel és a szórással jellemeztem őket. ANOVA feldolgozást végeztem, 95%-os szignifikancia szinten fogadva el a kísérletek eredményeit, ill. a faktorok hatását. Ábrákon szemléltettem az egyes faktorok hatását, szövegben ismertetve a szignifikancia meglétét, vagy hiányát, az ábrákon a minták varianciáját a 95%-os konfidencia intervallum jelölésével mutattam be. Az értékelés során vizsgáltam az egyes faktorok kölcsönhatását páronként, ennek szemléltetésére kétdimenziós ábrán mutattam be a becsült hatásokat jellemző felületeket.

Kén- és benzoltartalmú *n*-hexán frakciók izomerizálásának vizsgálata

Keresztury László, okl. vegyészmérnök

Nguyen Kha Viet Son, okl. vegyészmérnök

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Hancsók Jenő** egyetemi docens
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

A környezetbarát és nagy energiatartalmú motorbenzinek kéntartalmát (kezdetben 0,1 %, majd 1993-tól 500, 2000-től 150, majd 2005-től 50, majd 2009-től várhatóan 10 ppm), benzoltartalmát (korábban 5 V/V%, majd 2000-től 1,0 V/V%) és összes aromástartalmát (jelenleg 42 V/V%, majd 2005-től 35 V/V%) jelentős mértékben csökkentették. Ezért a kén- és benzolmentes, kis aromástartalmú vagy aromásmentes keverőkomponensek iránt nagyon megnőtt az érdeklődés.

A környezetbarát és nagy energiatartalmú motorbenzinek legfontosabb keverőkomponensei közé tartoznak a C₅-C₇ izomerátumok, mert kis kéntartalmuk mellett gyakorlatilag aromás- és olefinmentesek, nagy az oktánszámuk, kicsi a szenzibilitásuk (kísérleti- és motoroktánszám különbsége), valamint könnyen és tisztán égő vegyületeket tartalmaznak. Ezért a mennyiségük és minőségük iránti igény állandóan fokozódik.

Az izomerátumokat *n*-paraffinokban dús frakciók katalitikus vázizomerizációjával állítják elő. A növekvő mennyiségi igények miatt, és a benzinreformálás alapanyagának benzol-prekursorokat tartalmazó könnyű részének rendelkezésre állása miatt előtérbe került az olyan alapanyagok izomerizálása is, amelyek benzol is tartalmaznak. Az ilyen alapanyagok átalakítására – különösen hogyha azok kéntartalmúak is – többlépcsős eljárást javasolnak, külön-külön kénmentesítést, benzoltelítést és izomerizálást.

A kísérleti munkánk legfőbb célkitűzése olyan katalizátorok és technológiai paraméterkombinációk kiválasztása volt, amelyeken, illetőleg amelyek mellett kén- és benzoltartalmú *n*-hexán frakciót használva a kénmentesítés, a benzoltelítés és a vázizomerizáció egy lépésben lejárásodik.

A kísérleti eredményekből megállapítottuk, hogy sikerült olyan katalizátort kiválasztani, amely alkalmas kén- és benzoltartalmú *n*-hexán frakciók szimultán módon történő vázizomerizálására, kénmentesítésére és benzoltelítésre. A nyert termékek kiváló motorbenzin-keverőkomponensek.

Gumi-bitumen kompozíciók hideg-tulajdonságainak vizsgálata

Buda Botond, okl. környezetmérnök

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Bíró Szabolcs** tanszéki mérnök
VE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

Magyarországon gyártott bitumenekből és különböző szemcseméret eloszlású gumiőrlemények felhasználásával készült gumi-bitumen kompozíciók hidegoldali tulajdonságait tanulmányoztam. A minták mindegyike ún. utóhígításos eljárással készült, ezzel ugyanis javítani tudtuk az előállított minták stabilitását. Vizsgáltam, hogy az előállítás paramétereinek, valamint az alapanyagok minőségi-mennyiségi összetételének változtatásával a végtermékek hidegoldali viselkedése miként változik. Vizsgálataimhoz a nagy számú előállított mintából olyanokat választottam, melyek lehetővé tették az egyes paramétereknek az általam vizsgált tulajdonságokra gyakorolt hatásának tanulmányozását. A hidegtulajdonságoknak megfelelően tanulmányoztam a Fraass töréspontot, valamint 7°C-on a duktilitást és a rugalmas visszaalakulást. Következtetéseimet a Magyarországon érvényben lévő, módosított útépitési bitumenek műszaki utógáz előírásainak, valamint a gumibitumenekre vonatkozó ASTM D 6114 szabványnak megfelelően vontam le. A minták Fraass töréspontja és rugalmas visszaalakulása a legszigorúbb hazai követelményeknek is megfelelt. Ez bizonyosan a gumit felépítő polimerekből kialakult rugalmas térhálónak köszönhető, melynek szerkezetébe a bitumen diszpergálódik, s így egy polimer-bitumen diszperz rendszer alakul ki. Az általam vizsgált időintervallumban a mechanikai nyírás eltérő ideje a hidegtulajdonságokra nem volt hatással. A kiindulási bitumenarány nem, a végső bitumenarány nagymértékben befolyásolta a hidegtulajdonságokat, hasonlóképpen, mint a visszahígításnál használt bitumen minősége. Az alkalmazott kétfajta bitumen megfelelő arányának megválasztásával tág intervallumban (10 - 69 cm között) lehetett változtatni a végtermékek 7°C-on mért duktilitását. Megállapítottam, hogy az SBS modifikálószer kiváltható hasonlóan jó, vagy jobb hidegtulajdonságokat biztosító adalékokkal. Az eddig használt gumiőrlemények közül a G1 gumiőrleménnyel készített minták adtak előnyös hidegtulajdonságokat. Megállapítottam, hogy a viszkoelasztikus tulajdonsággal rendelkező gumibitumenek kiemelkedően jó hidegtulajdonságokkal rendelkeznek, mely előnyt jelenthet a jövőben az útépités terén. Hagyományos modifikálószerrel mellőzésével sikerült olyan gumiőrleménnyel módosított gumi-bitumen kompozíciókat előállítani, melyek megfelelnek a hazai utógáz előírásoknak.

Pervaporáción alapuló hibrid elválasztási eljárások vizsgálata és összehasonlítása

Valentinyi Edit, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Mizsey Péter** egyetemi tanár
BME Vegyipari Műveletek Tanszék
Koczka Katalin tudományos segédmunkatárs
BME Vegyipari Műveletek Tanszék

Dolgozatomban pervaporáción alapuló hibrid elválasztási eljárásokat vizsgáltam és hasonlítottam össze az etanol-víz elegy elválasztásának példáján.

Munkám során a következő eseteket vizsgáltam:

1. Pervaporáció után a permeátumot desztilláljuk, és az etanoltartalmú fejterméket visszavezetjük a pervaporáció betáplálásához (PV + D). A retentát a kívánt koncentrációjú etanol.

2. Desztillációval töményítjük a kiindulási elegyet közel azeotróp összetételű, és utána pervaporációval érjük el a kívánt tisztaságot (D + PV).

3. Desztillációval töményítjük a kiindulási elegyet közel az azeotróp összetételű, pervaporációval tovább töményítve túljutunk az azeotróp ponton, majd újabb desztillációval fenéktermékként kapjuk a kívánt tisztaságú etanolt (D + PV + D).

Céлом annak a hibrid elválasztási struktúrának a megállapítása volt, amely gazdaságossági mutatója alapján a legkedvezőbb, vagyis az éves összköltsége minimális. Az egyes elválasztási alternatívákat a ChemCAD programmal modelleztem.

Kapott eredményeimből megállapítható, hogy az a hibrid eljárás a leg gazdaságosabb, amikor először alkalmaztuk a desztillációt, és sorosan kapcsolt membránsorra vezettük a kolonna fejtermékét. Párhuzamos esetben is sikerült elérni ugyanazzal az összfelülettel a megkívánt elválasztást, azonban itt a kisebb membránmodulok miatt a membrán beruházási költsége jóval több, és az összköltség legnagyobb részét mind a négy esetben ez teszi ki. Továbbá az is látható, hogy ilyen betáplálási összetételnél nem érdemes az elegyet rögtön a membránsorra vezetni, ugyanis az azeotróp pontot desztilláció segítségével hatékonyabban meg lehet közelíteni.

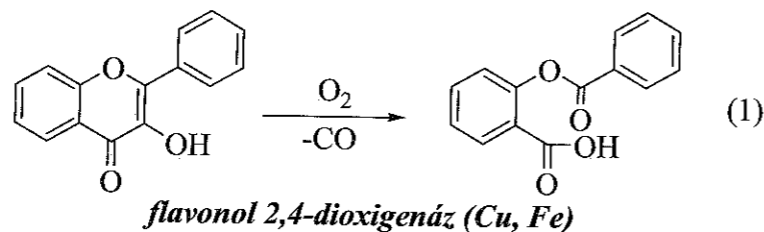
Flavonol 2,4-dioxigenáz néhány réztartalmú szerkezeti és funkcionális modelljének vizsgálata

Góger Szabina, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kaizer József** tudományos főmunkatárs
MTA-VE Petrolkémiai Kutatócsoport
Dr. Speier Gábor egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

A növényvilágban előforduló flavonolok oxidatív gyűrűbontási reakcióját az aktív helyen rezet [1], vagy vasat [2] tartalmazó flavonol 2,4-dioxigenáz enzimek katalizálják (1).



Az *Aspergillus japonicus*-ből elkülönített enzim röntgenszerkezete alapján az aktív helyen található réz(II)-ion koordinációs övezete kétféle lehet: az egyik esetben három hisztidines nitrogén, míg a másikban a három hisztidines nitrogén mellett még egy glutaminsavból származó oxigén alkotja. Az enzimatis reakció során szubsztrátum- és termék-enzim komplexek keletkeznek, melyeknek szerkezeti modellezésére $[Cu^{II}(L)(fla)]ClO_4$ és $[Cu^{II}(L)(O-bs)]ClO_4$ (L: bpbna: bisz(2-piridilmetil)-benzil-amin, 6Me₂bpbna: bisz(6-metil-2-piridilmetil)-benzil-amin, bpga: bisz(2-piridilmetil)-glioxilsav, flaH: flavonol és O-bsH: O-benzoil-szalicilsav) összetételű komplexeket állítottunk elő. Szerkezetüket spektroszkópiai (UV-Vis, IR) és röntgendiffrakciós módszerekkel jellemeztük. Funkcionális modellként a flavonolátó-komplexek dioxigénnel való reakcióját vizsgáltuk, és tanulmányoztuk a reakciók során képződő termék-komplexek katalitikus aktivitását flaH oxigénezési reakciójában.

- [1] Fusetti, H., Schroter, K.H., Steiner, R.A., van Noort, P.I., Pijning, T., Rozeboom, H.J., Kalk, K.H., Egmond, M.R., Dijkstra, B.W., *Structure*, 10, 259-268 (2002)
[2] Barney, B.M., Schaab, M.R., LoBrutto, R., Francisco, W.A., *Protein Expression and Purification*, 35, 131-141 (2004)

Vízoldható, anionos porfirin higannyal alkotott SAT komplexeinek egyensúlyi, fotofizikai és fotokémiai vizsgálata

Valicsek Zsolt, okl. vegyész

VE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Horváth Ottó** tanszékvezető egyetemi tanár
VE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A biokémia egyik legjelentősebb vegyületcsaládját képező porfirinek komplexei közül megkülönböztetett figyelmet szentelnek az úgynevezett „sitting-atop” szerkezettel rendelkezőknek, melyek kialakulásáért – elsősorban – a fémion mérete a felelős. Ezekben a központi atom nem képes a ligandum magjába koplánárisan beilleszkedni, hanem kissé afölött kötődik meg, miközben nyeregfelületté torzítja azt. Ez a szimmetria jelentős csökkenését és az egyik átlómenti pirrol-nitrogén-pár átellenes oldalról történő támadhatóságának növekedését eredményezi. A sajátos koordináció következtében hatékonyabbá válik a fotoindukált, ligandumról fémionra történő elektronátmenet, ami megalapozza katalizátorként való használhatóságukat a fényenergia tárolására megfelelő vegyületek képzésének körfolyamataiban.

Az eddigi eredményeink igazolják a SAT vegyületek fotokémiai aktivitásának nagyságrendekben mérhető növekményét a szabad liganduméhoz viszonyítva, valamint a tapasztalataink alapján egyszerű spektrofotometriai eljárást javasolhatunk annak a kérdésnek a megválaszolására, hogy egy, a kritikus érték (80 pm) körüli rádiusszal rendelkező fémion normál vagy SAT komplexet képez-e.

A higanyak mindkétféle töltésű ionja bis-porfirin-származékot is képzett, melyekhez hasonlóknak sem tanulmányozták még a fotokémiai viselkedését sem. A két különböző töltésű fémion egy ligandummal alkotott vegyületének tulajdonságai eléggé hasonlítanak egymáshoz, sőt több eddig vizsgált monoporfirinéhez is, így a SAT komplexeken belül is további szerkezetfüggő csoportokat feltételezhetünk. Ezenfelül a dihgany(I)dikation két ligandummal alkotott komplexének és a higany(II)ion 2:2-esének sajátosságai között is fellelhetünk egyezéseket: egyik fénykibocsátása sem mérhető, illetve mindegyik fotoredoxi aktivitása kisebb a monoporfirinénél. A Hg²⁺-ionok esetében még a Hg₃P₂ képlettel azonosítható komplex is előállt, ami amúgy a SAT metalloporfirinek tárgykörében a legvizsgáltabbak közé tartozott, csak összetételét illetően viták merültek fel a 2:2-es ismeretének hiányában. Ez a forma sem fluoreszkál, de fotokémiai viselkedése rendkívülinek mondható a többi eredmény tükrében.

Néhány indolszármazék vas(III)-mal alkotott vegyületének vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával

Kovács Krisztina, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Vértés Attila egyetemi tanár
ELTE Magkémiai Tanszék

A Fe(III) indol-3-ecetsavval (IAA) alkotott vegyületét A. A. Kamnev és munkatársai vizsgálták [1]. Az említett indolszármazék az auxinok családjába tartozó növényi hormon, melyet a rhizoszférában élő baktériumok egy része is képes előállítani és a növényi szervezet számára elérhetővé tenni. A Fe(III)-IAA kölcsönhatás jelentős lehet a talajbeli Fe(III) mobilizálásában, illetve fontos szerepet játszik az IAA enzimatis lebonthatásában.

Munkámban a Fe³⁺ és az indol-3-karbonsav (ICA), indol-3-propionsav (IPA), indol-3-butánsav (IBA), triptofán (TRP) között lejátszódó reakciókat vizsgáltam. A Mössbauer-spektrumok felvételéhez az oldatokat cseppfolyós nitrogén segítségével gyorsfagyasztottam (kvencseltem). Ez a folyamat, egyben, a szobahőmérsékleten folyó reakciókat is befagyasztotta. Az említett vegyületek az IAA-val analóg szerkezetű, szintén auxinaktivitást mutató anyagok.

Az oldatminták elkészítésénél az [1] cikkben szereplő körülményeket vettem alapul. A vizes oldatok spektrumaiból megállapítható, hogy a komplexek valószínűleg dimerek és/vagy oligomerek formájában vannak jelen a rendszerben. Emellett az ICA, IPA, IBA esetén a kiinduláskor kizárólag Fe(III)-at tartalmazó elegyekben az összekeverést követően jelentős mennyiségű Fe(II) figyelhető meg; TRP az adott körülmények között nem volt redukáló hatású. Vizsgáltam a reakció esetleges fotokémiai aktivitását is. A szilárd komplexek összetételére elemvizelési eredmények és Mössbauer-mérések alapján többféle javaslatot tettem.

A fenti eredményektől azt várjuk, hogy hozzájárulnak a redukciós reakció mechanizmusának – és egyben az enzimatis auxinlebonthatás lépéseinek – jobb megismeréséhez.

[1] Kamnev, A.A., Shchelovkov, A.G., Perfiliev, Yu.D., Tarantilis, P.A., Polissiou, M.G., *Journal of Molecular Structure*, 563-564, 565-572 (2001)

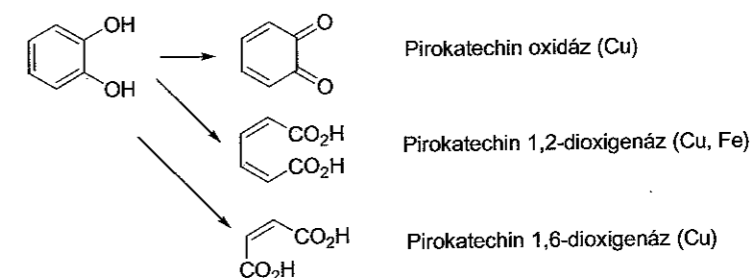
Réz-pirokatechinát komplexek előállítása és dioxigénnel való reakcióinak vizsgálata

Zsigmond Zoltán, V. évf. vegyész hallgató

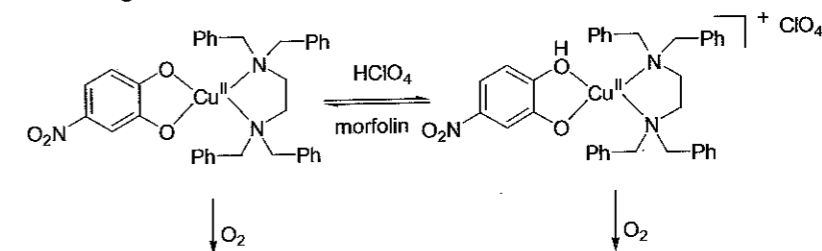
VE Mérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Kaizer József tudományos főmunkatárs
MTA-VE Petrolkémiai Kutatócsoport
Dr. Speier Gábor egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

A pirokatechinek oxidatív lebontását oxigenáz és oxidáz enzimek végzik, melyek aktív centrumában főként réz és vas fordul elő. Az említett folyamatok a mechanizmustól függően eltérő termékeket eredményeznek:



A reakciók lehetséges mechanizmusának tisztázása, valamint annak eldöntése végett, hogy mi az a faktor, ami meghatározza a szubsztrátum oxidációjának módját, egyszerű ligandumok felhasználásával pirokatechinátó-réz-komplexek előállítását és oxigénnel történő reakcióinak vizsgálatát tűztük ki célul.



Ligandumként előállítottuk és karakterizáltuk a tetra-benzil-etilén-diamint (tben), majd pirokatechinátó réz(II) komplexeit ([Cu^{II}(tben)(NO₂Cat)], [Cu^{II}(tben)(NO₂CatH)]ClO₄, NO₂CatH₂: 4-nitro-pirokatechin) képeztük. Ezek után vizsgáltuk az említett komplexek reakcióit dioxigénnel és javaslatot tettünk mechanizmusukra.

Több amin-, illetve amidcsoportot tartalmazó ligandumok átmenetifém komplexei

Fónagy Barbara, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Várnagy Katalin** egyetemi docens
DE Természettudományi Kar

Aminosavamidok (pamd, ppmd, epmd) és két-, illetve négy amincsoportokat tartalmazó származékok (pam, ppm) komplexképzését vizsgáltuk Cu(II)-, Ni(II)- és Zn(II)-ionokkal oldategyensúlyi és fotometriás vizsgáló módszerekkel. Azt is tanulmányoztuk, hogy az amidnitrogén deprotonálódása végbemegy-e a savamid-fémion rendszerekben.

Az aminszármazékok (pam= 2-pirrolidinil-metánamin) vizsgálatai azt mutatták, hogy a pam ligandum komplexképződési folyamatai és a meghatározott stabilitási állandók jó egyezésben vannak más diaminok (etilén-diamin) megfelelő állandóival. A Zn(II)-komplexeknél a pH emelésével végbemegy a koordinálódott vízmolekulák deprotonálódása. A ppm (N,N'-(bis[2(S)-2-pirrolidinil-metil])-propán-1,3-diamin) ligandum esetén a négy nitrogén egyidejű koordinálódására van lehetőség.

Az amidszármazékok (pamd=2-pirrolidinil-metánamid, ppmd= N,N'-(bis[2(S)-2-pirrolidinil-metil])-propán-1,3-diamid, epmd= N,N'-(bis[2(S)-2-pirrolidinil-metil])-etán-1,2-diamid) vizsgálatai során kiderült, hogy mindhárom rendszerben megtörténik az amidnitrogén deprotonálódása a pH emelésével. A Cu(II)-pamd rendszer esetén két elvált lépésben történik meg a deprotonálódás, ezt spektrofotometriai mérésekkel is igazoltuk. A Ni(II)-pamd rendszerben a deprotonálódással geometriaváltás is bekövetkezik, az oktaédes geometria síknégyszetesre vált, ez spektrofotometrián szintén jól követhető. A kétszeresen deprotonálódott komplexben a koordináció négy nitrogénes: 2x(NH₂,N-). A Cu(II)-, Ni(II)- és Zn(II)-epmd és ppmd rendszerekben is végbemegy az amidnitrogén deprotonálódása, három csatolt kelátgyűrű kialakulása jellemző ezekre a rendszerekre. A négy nitrogénes koordinációjú komplexek kialakulása itt is megjelenik, és a ligandumok szerkezete jobban stabilizálja a komplexet, mint a pamd esetében.

Az amin- és amidszármazékok vizsgálatából az derült ki, hogy a 4 N-es koordinációjú ligandumok igen stabilis komplexeket képeznek, még erősen lúgos tartományban is.

Királis foszfonit ligandumok előállítása és alkalmazása enantioszelektív homogénkatalitikus hidrogénezésben

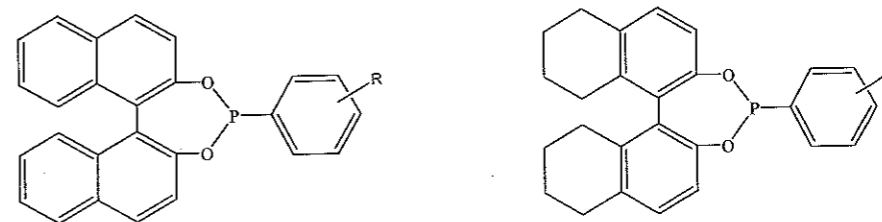
Varga Tamás, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Gulyás Henrik** tudományos segédmunkatárs
VE Szerves Kémia Tanszék
Dr. Bakos József egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

Homogén katalízisről akkor beszélünk, ha a katalizátor és a reagensek azonos fázisban vannak. Előnyei a heterogén katalízissel szemben, hogy enyhébb körülmények között rendszerint nagyobb aktivitást és szelektivitást biztosít. További fontos jellemzője, hogy a katalizátor-komplex szerkezetének változtatásával a katalitikus sajátságok finoman „hangolhatók”.

Háromértékű foszforvegyületek ródiumpkomplexei számos telítetlen szubsztátum hidrogénezését katalizálják. Királis ligandumok alkalmazásával prokirális szubsztátumok enantioszelektív hidrogénezése is megvalósítható.



H₀- illetve H₈-binaftol alapú foszfonitek

Munkánk során H₀- valamint H₈-binaftol alapú monofoszfoniteket állítottunk elő. Igazoltuk, hogy a ligandumok elektronikus sajátságai jelentősen befolyásolhatók az arilgyűrű szerkezetének változtatásával. Vizsgáltuk a ligandumok ródiumpkomplexeinek katalitikus sajátságait itakonsav-dimetil-észter és (Z)- α -acetamido-fahéjsav-metil-észter aszimmetrikus hidrogénezése során. Itakonsav-dimetil-észter hidrogénezésekor a legnagyobb enantioszelektivitást (87 % és 86 %) a H₀- és a H₈-[2,4-(CH₃O)₂C₆H₃] alkalmazásával érték el. (Az előállított ligandumok jelölése a binaftilegység és az arilgyűrű szerkezetének megadásával történik, pl. H₈-[3,5-(CH₃)₂C₆H₃]: oktahidrobinaftol, 3,5-dimetilfenil, vö. ábra.) (Z)- α -acetamido-fahéjsav-metil-észter hidrogénezésekor a legnagyobb optikai hozamot (87 %) a H₀-[2,4-(CH₃O)₂C₆H₃] ligandum ródiumpkomplexével kaptuk.

Bíborsav-foszfátáz enzim aktív centrumának modellezése

Jenei Zsuzsanna, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Gyurcsik Béla** egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Körtvélyesi Tamás egyetemi docens
SZTE Fizikai Kémia Tanszék
Dr. Hans Erik Mølager Christensen egyetemi docens
DTU Kémia Tanszék

Mesterséges foszfoészteráz enzimek tervezése során célunk, hogy minél jobban megközelítsük a természetben előforduló enzimek szerkezetét, működési mechanizmusát. A legnagyobb hatékonysággal működő természetes foszfoészteráz enzimek aktív centrumaiban két, esetleg három fémion található, melyek együttműködése eredményezi a hatékony hidrolízist. A bíborsav-foszfátázok specifikusan a foszfátészter kötések hidrolitikus hasításáért felelősek. Általános jellemzőjük, hogy aktív centrumuk két fémiont (Fe(III)-M(II), ahol M(II)=Fe(II), Zn(II), Mn(II)) tartalmaz.

Munkánk során a bíborsav-foszfátázok aktív centrumát „lemásolva” olyan modellpeptideket terveztünk, melyek fémkomplexei várhatóan képesek foszfátészter kötések hasítására. Ezen modellpeptidek megfelelő aminosavsorrendjének kialakítása és fémion-kötő tulajdonságainak modellezése molekuladinamikai módszerekkel történt. Emellett, az enzim aktív központjának két fémet (Fe³⁺, Zn²⁺ vagy Fe³⁺, Fe²⁺) tartalmazó környezetét és a ligandum bekötődésének jellegét is tanulmányoztuk.

A tervezett molekulák közül egy 24 aminosavból álló polipeptidet (L7) a glutation S-transzferáz (GST) „gén fúziós rendszer” segítségével előállítottuk, majd tisztítottuk. Ezen lépések optimalizálására eljárásokat dolgoztunk ki. A fúziós protein szerkezetének meghatározásához kristályosítási kísérleteket is végeztünk.

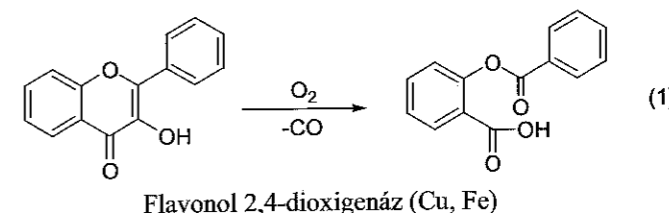
Flavonol 2,4-dioxigenáz néhány vastartalmú szerkezeti és működési modelljének vizsgálata

Baráth Gábor, IV. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kaizer József** tudományos főmunkatárs
MTA-VE Petrolkémiai Kutatócsoport
Dr. Speier Gábor egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

A növényvilágban előforduló flavonolok oxidatív gyűrűbontási reakciójaért a flavonol 2,4-dioxigenáz felelős (1).



Ezen enzimeknek ezidáig két válfaja ismeretes, az egyik aktív centrumában rezet [1], míg a másik vasat [2] tartalmazó metalloenzim. A *Bacillus subtilis*-ből elkülönített protein esetében azt találták, hogy katalizálja a flavonol oxigénezési reakcióját, tehát flavonol 2,4-dioxigenáz aktivitással bír. Az enzim vizsgálata során megállapították, hogy az aktív centrumban a vas vas(II) és vas(III) formában is megtalálható, továbbá hogy a vas körül három hisztidines nitrogén és egy glutaminsavból származó oxigén található. A vas aktív formájának eldöntése céljából előállítottunk három vas(III)- és kettő vas(II)kompleket, melyek szerkezetét spektroszkópai módszerekkel (IR, UV-VIS...) és röntgendiffrakcióval állapítottuk meg. Ezek után vizsgáltuk az előállított komplexek dioxigénnel való reakcióját, továbbá az enzimmolekulához hasonló rendszerek kidolgozása céljából az említett komplexek mellett, három, négy és ötfogú ligandumok felhasználásával is tanulmányoztuk a flavonollal izoelektronos 2-fenil-3-hidroxi-4(1H)-oxokinolin oxigénezési reakcióját.

- [1] Fusetti, H., Schroter, K.H., Steiner, R.A., van Noort, P.I., Pijning, T., Rozeboom, H.J., Kalk, K.H., Egmond, M.R., Dijkstra, B.W., *Structure*, 10, 259-268 (2002)
[2] Barney, B.M., Schaab, M.R., LoBrutto, R., Francisco, W.A., *Protein Express. Purif.*, 35, 131-141 (2004)

Kalkokarbonil ligandumok vizsgálata ciklopentadienil-mangán-karbonil modellvegyületeken

Pongor Csaba István, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Sztáray Bálint** egyetemi adjunktus
ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

Dolgozatomban a $\text{CpMn}(\text{CO})_3$, $\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CS}$ és $\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CSe}$ vegyületeket vizsgáltam ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiával (UPS). Felvettük az alapvegyület ($\text{CpMn}(\text{CO})_3$) és a tiokarbonil komplex ($\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CS}$) az irodalomban eddig még nem közölt HeII spektrumát, valamint a $\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CSe}$ eddig ismeretlen HeI és HeII spektrumát is.

A spektrumok asszignálását a HeII spektrumokból levonható újabb kísérleti adatokra, és kvantumkémiai számításokra alapoztuk. Ennek során $\text{CpMn}(\text{CO})_3$ esetében az irodalmival azonos eredményre jutottunk, a $\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CS}$ spektrumának azonban új értelmezését adtuk.

Az így nyert eredményekből megállapíthatjuk, hogy a kalkokarbonil ligandumok π -akceptor szempontból a CO-ot jól helyettesítik, a szubsztitúció hatására a $\text{Mn}(d)\text{-CX}(\pi^*)$ pályák nem destabilizálódnak és nem is stabilizálódnak. Bebizonyosodott, hogy a karbonil ligandummal szemben a tiokarbonil és szelenokarbonil π -donor ligandumnak mondható. Míg a CO HOMO alatti π pályája a komplexben is a ligandumon lokalizálva található, addig a CS és CSe π pályájának átfedése a központi fématom pályáival nem hanyagolható el. A CO, CS, CSe sorban a σ -donor jelleg erősödik mivel szubsztitúció hatására a $\text{Mn}(d)\text{-CX}(\sigma^*)$ pályák destabilizálódnak.

A spektrumok asszignációhoz a fotoelektron-spektroszkópiában bevált Koopmans-elv mellett a DFT módszerek által szolgáltatott Kohn-Sham pályae energiákat is felhasználtuk. Ennek elméleti háttérét csak néhány éve dolgozták ki, és alkalmazására a fémorganikus kémiában nem sok példa akad.

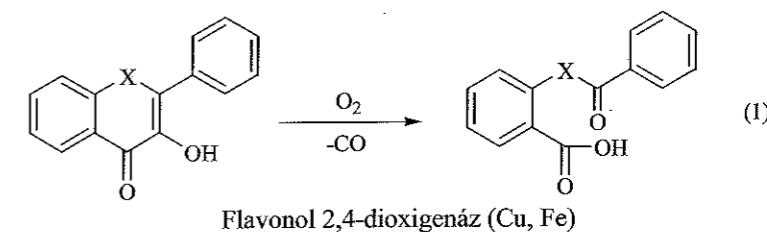
2-Fenil-3-hidroxi-4(1H)-oxokinolin rézkomplexeinek előállítása és oxigénezési reakcióinak vizsgálata

Csay Tamás, V. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kaizer József** tudományos főmunkatárs
MTA-VE Petrolkémiai Kutatócsoport
Dr. Speier Gábor egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

A 2-fenil-3-hidroxi-4(1H)-oxokinolin (X: NH) izoelektronos a 3-hidroxi-flavonnal (X: O), melynek lebontásáért a flavonol 2,4-dioxigenáz felelős [1]. Ezen enzimeknek ezidáig két válfaja ismeretes, az egyik aktív centrumában rezet [1], míg a másik vasat [2] tartalmazó metalloenzim. Ettől eltérően a 3-hidroxi-4-oxokinolin dioxigenáz aktív centrumában sem fémet, sem egyéb kofaktort nem tartalmaz.



A flavonol 2,4-dioxigenáz enzim szubsztrátum specifikusságának vizsgálata céljából 2-fenil-3-hidroxi-4(1H)-oxokinolinátó-réz(I)- és réz(II)-komplexeiket ($[\text{Cu}^{\text{I}}(\text{PPH}_3)_2(\text{PhQuinH})]$, $[\text{Cu}^{\text{II}}(\text{PhQuinH})_2]$ és $[\text{Cu}^{\text{II}}(\text{bnbpa})(\text{PhQuinH})]\text{ClO}_4$, PhQuinH: 2-fenil-3-hidroxi-4(1H)-oxokinolin, bnbpa: bisz(pikolil)-benzil-amin), mint szerkezeti modelleket állítottunk elő, majd diffrakciós és spektroszkópiai módszerekkel meghatároztuk szerkezetüket. Vizsgáltuk továbbá az előállított komplexek oxigénezési reakcióit, meghatároztuk a termékkomplexek szerkezetét és teszteltük katalitikus aktivitásukat a 2-fenil-3-hidroxi-4-oxokinolin oxigénezési reakciójában.

- [1] Fusett, H., Schroter, K.H., Steiner, R.A., van Noort, P.I., Pijning, T., Rozeboom, H.J., Kalk, K.H., Egmond, M.R., Dijkstra, B.W., *Structure*, 10, 259-268 (2002)
[2] Barney, B.M., Schaab, M.R., LoBrutto, R., Francisco, W.A., *Protein Expression and Purification*, 35, 131-141 (2004)

Réz(II) halogenidek reakciója 3,5-dimetilpirazol-1-metanollal és a keletkezett komplexek jellemzése

Magyari József, II. évf. vegyész hallgató

ÚE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Mészáros Szécsényi Katalin** egyetemi tanár

ÚE Kémiai Intézet

Dr. Leovac Vukadin egyetemi tanár

ÚE Kémiai Intézet

A pirazolszármazékok jó komplexképzők, amit elsősorban a piridin jellegű nitrogén jelenléte biztosít. Amennyiben a pirazolgyűrű szubsztituensei donoratomot tartalmaznak, ezek szintén részt vehetnek a központi atom koordinációjában. A pirazolszármazékok fémkomplexeinek széleskörű gyakorlati alkalmazása miatt a komplexképződési reakciókat befolyásoló kísérleti körülmények ismerete mind elméleti, mind gyakorlati szempontból jelentős. A reakciót befolyásoló tényezők ismerete lehetőséget nyújt adott tulajdonsággal rendelkező vegyületek előállítására. Laboratóriumunkban évek óta vizsgáljuk a kísérleti feltételeket, elsősorban a fémionhoz tartozó anion valamint a pirazolgyűrű szubsztituenseinek hatását a komplexképződési reakciókra.

Jelen dolgozatunkban a 3,5-dimetilpirazol-1-metanol és a réz(II)-klorid valamint réz(II)-bromid között lejátszódó reakcióban keletkező termékek szerkezetét és termikus tulajdonságait vizsgáljuk, összehasonlítva ezeket hasonló pirazol-származékok szerkezetével és termikus tulajdonságaival.

A réz(II) klorid és a 3,5-dimetilpirazol-1-metanol etanos oldatában lejátszódó komplexképződési reakció során az N-1 pirrol-nitrogénatomhoz kapcsolódó szubsztituens lehasad, és a reakció terméke 3,5-dimetilpirazol komplex. Mivel a halogenidionok híd-funkciót is betölthetnek, jelenlétükben gyakran polinukleáris komplex képződik. A réz(II)-klorid reakciója során a ligandummal két féle, zöld és narancs színű termék keletkezik. A zöld színű kristály összetételét a $[\text{CuCl}_2(3,5\text{-DMP})_2]_2$ képlettel írhatjuk le, ahol a 3,5-DMP 3,5-dimetilpirazolt jelöl, míg a narancs színű termék binukleáris (3,5-dimetilpirazol)-komplex, amelynek összetétele a $[\text{CuCl}_2(3,5\text{-DMP})]_2$ képlettel jellemezhető. A komplexben a kloridionok hídként kötik össze a két központi rézatomot.

A reakció lefolyása réz(II)-bromid esetében lényegesen eltér a réz(II)-kloridnál tapasztalttól. Ezen esetben nem következik be a ligandum bomlása, ami az anionok jelentős hatására utal a komplexképződési reakciókban. A réz(II)-bromid reakciójával binukleáris 3,5-dimetilpirazol-1-metanol, (3,5-DMP-MeOH), komplex képződik, amelynek összetételét a $[\text{CuBr}_2(3,5\text{-DMP-MeOH})_2]$ képlet mutatja.

**Környezeti kémia és környezettechnológia
tagozat**

Klórtartalmú benzolszármazékok oxidatív és redukív ártalmatlanítása vas alapú katalizátorokon

Mohl Melinda, IV. évf. környezettudomány szakos hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Halász János** egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A klórtartalmú aromás vegyületeket kedvező fizikai és kémiai tulajdonságaik, valamint rendkívüli stabilitásuk miatt nagy mennyiségben gyártották, és még gyártják napjainkban. Ezek a komponensek azonban jelentős környezeti terhelést jelentenek, nagyfokú stabilitásuk révén felhalmozódnak a táplálékláncban, és kifejtik toxikus hatásaikat. Mivel helyettesítésükre még nem találtak megfelelő vegyületeket, illetve az eddig gyártott anyaggal is kezdeni kell valamit, égetően szükséges ártalmatlanításuk mielőbbi megoldása.

Az élőlényekre kifejtett toxikus hatásaik révén a biológiai lebontás nem valósítható meg. A kémiai megoldások közül a *termikus oxidáció* csak 1200 °C felett alkalmazható, ami jelentős mértékben megdrágítja a technológiát. Környezetbarát megoldást jelenthet azonban a *katalitikus oxidáció*, vagy a *katalitikus hidrodehalogénezés*.

A munkánk során különböző szerkezetű (hidrotalcit, ZSM5, MCM41, SiO₂ vagy Al₂O₃ hordozóra vitt, bauxit vagy vörösiszap hőkezelésével nyert) Fe-tartalmú katalizátorok jelenlétében, hidrogénatmoszférában vizsgáltuk a modellvegyületként alkalmazott mono- (CB) és a TCDD (dioxin) perkurzoraként tekinthető 1,2-diklórbenzol (DCB) átalakulását, folyamatos állóágyas reaktorban, 200-400 °C hőmérséklettartományban. A CB és DCB oxidációját az említett katalizátorokon és rendszerben oxidatív előkezelést követően 10%-os levegőfelesleg alkalmazása mellett is tanulmányoztuk.

A kiindulási anyagok és a termékek analízisét gázkromatográfiás úton végeztük, míg a katalizátorok kristályszerkezetének jellemzést röntgendiffraktometriás módszerrel, hőstabilitásukat termikus módon határoztuk meg.

A hidrodehalogénezés során a kiváló kezdeti aktivitással bíró drága szintetikus anyagok mellett a vörösiszap eredetű katalizátor bizonyult aktívnek, jelentősen nagyobb élettartammal, így alkalmazása hatékony környezetkímélő eljárás alapját jelenti. A CB és DCB oxidációja során a viszont hidrotalcit eredetű katalizátorok rendelkeznek nagy aktivitással és élettartammal, már viszonylag alacsony hőmérsékleten is, ami szintén alapja lehet ezen vegyületek környezetbarát ártalmatlanításának.

A szerin fotodegradációja gerjesztett TiO₂ felületén

Baja Bernadett, IV. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Horváth Attila** egyetemi tanár
VE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék
Szabóné dr. Bárdos Erzsébet egyetemi adjunktus
- VE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A titán-dioxid a fizikai és kémiai tulajdonságainak köszönhetően a heterogén fotooxidációs eljárásoknál a leggyakrabban használt katalizátorok közé tartozik. A módszer lényege, hogy katalitikus vagy fotokémiai reakciókkal a vízben jelenlevő oldott komponensek oxidatív úton eltávolíthatóak. Az utóbbi években egyre nagyobb figyelmet fordítanak a biológiailag aktív molekulák fotokémiai vizsgálatára. Az orvostudományban elterjedtek a különféle sugárkezelési módszerek, ezért fontos tudni, hogy a szervezetünket felépítő anyagok (a fehérjéket felépítő aminosavak) hogyan viselkednek a különböző hullámhosszúságú fény hatására.

Kutatómunkám során a szerkezetileg hasonló három aminosav (alanin, szerin, fenilalanin) heterokatalitikus fotooxidációját vizsgálom. Céлом, annak meghatározása, hogy a funkciós csoportok hogyan befolyásolják a szerves vegyületek fotobomlását.

A fotoreakciót egy speciálisan kialakított, 3 dm³ hasznos térfogatú, belső cirkulációs, ipari folyamatok modellezésére is alkalmas fotokémiai reaktorban végeztem (betáplált levegő sebessége: 40 dm³/h, TiO₂ mennyisége: 1 g/dm³). A gerjesztés 40 W teljesítményű Tungstram fénycsővel történt, melynek kisugárzási színekepe 350 nm-nél mutat maximumot. Az aminosav koncentrációját fluoreszcenciás módszerrel határoztam meg.

TDK munkámban a szerin fotooxidációját tanulmányoztam Degussa P25 TiO₂ katalizátoron. Megállapítottam, hogy a vegyület fotobomlását a félvezető katalizátor jelenléte nagymértékben megnövelte.

A reakcióelegy pH-ja jelentősen befolyásolja a fotooxidáció sebességét. A szerin fotokatalitikus bomlása 6-9-es pH tartományban kedvezményezett. Az aminosav eloszlásgörbéjét figyelembe véve megállapítottam, hogy az ikerionos forma a fotoaktív részecske.

Izopropil-alkohol hidroxilgyök-befogó és benzokinon szuperoxid-gyökönion befogó alkalmazásával kimutattam, hogy a szerin fotooxidációjában a hidroxilgyök és szuperoxid-gyökönion fontos szerepet játszik.

Tanulmányoztam a szerves vegyület fotolízisét fémmel módosított TiO₂ katalizátor felületén.

Várhatóan környezetbarát komplexképző ligandum
oldategyensúlyi vizsgálata

Horváth László, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Labádi Imre** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Szilágyi István doktoráns
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A hagyományos komplexkémiail kutatások egyik legfőbb törekvése új ligandumok, illetve ligandumcsaládok kifejlesztése, keresése. Ezen kutatások mögött általában valamilyen analitikai probléma megoldására való törekvés, vagy valamilyen ipari alkalmazás áll. Ma már számos ipari folyamatban alkalmazásra kerülnek az úgynevezett nagyhatékonyságú komplexképzők. Ezek közé tartoznak a poliaminopolikarbonsavak, melyek legismertebb és széles körben felhasznált képviselője az EDTA. Azonban vizsgálatok kimutatták, hogy az EDTA nagy mennyiségben terheli környezetünket, mivel biológiai lebomlása lassú folyamat [1]. Ezért fontos cél, olyan komplexképző kifejlesztése, mely megfelelően környezetbarát, ugyanakkor nagy stabilitással vagy szelektivitással rendelkezik. Ennek jegyében került sor a dimetiléntriámin-tetraecetsav (DMTTA) kifejlesztésére, amely az EDTA-hoz hasonló szerkezetű vegyület.

Munkánk során a DMTTA oldategyensúlyi tulajdonságait tanulmányoztuk, vizsgálati módszerként a pH-metriai titrálást alkalmaztuk. Méréseink során meghatároztuk a DMTTA protonálódási állandóit, illetve vizsgáltuk a réz(II) ionnal képzett komplexeinek összetételét, és számoltuk azok stabilitási állandóit. A protonálódási állandók értékeit a Superquad, míg a stabilitási állandókat a Psequad számítógépes programok segítségével határoztuk meg.

Összességként elmondhatjuk, hogy az általunk mért DMTTA protonálódási állandók jó egyezést mutatnak az EDTA megfelelő pK értékeivel. A réz(II)-DMTTA rendszer egyensúly vizsgálata során megállapítottuk a keletkező komplexek összetételét, illetve stabilitási állandóik számértékét. Meghatároztuk a képződő részecskék eloszlását a pH függvényében, valamint javaslatot tettünk a képződő komplexek lehetséges szerkezetére.

[1] Henneken, L., Nörtemann, B., *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, 73, 144-152 (1998)

Peszticidek fotodegradációs mechanizmusának elemzése és
lehetséges biológiai hatásának modellezése

Virág Diána, IV. évf. biológia-környezetvédelem szakos hallgató

EKF Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kiss Attila** tanszékvezető főiskolai docens
EKF Biokémia és Molekuláris Biológia Tanszék
Dr. Naár Zoltán főiskolai tanár
EKF Növénytan Tanszék

Az általánosan alkalmazott peszticidek **fotokémiai bomlási folyamatairól, a bomlástermékek szerkezetéről, és azok biológiai hatásáról** jelenleg igen kevés információ áll rendelkezésre, így kutatásaink fő célkitűzése a mindennapi gyakorlatban is széles körben felhasznált 4 különböző típusú növényvédőszer fotolitikus bomlási mechanizmusának megismerése, a köztitermékek azonosítása és toxicitásának vizsgálata.

A vizsgálataink során speciális UV- fényforrást, **UV- spektrofotometriát** és GC méréseket, valamint **GC/MS** technikát alkalmaztunk

A **karbendazim** fotodegradációja során hamar keletkezik metilvesztésen keresztül **2-benzimidazol-karbaminsav**, majd a C-N kötés szakadása következik be.

Az **acetoklór** bomlása esetében két degradációs alternatíva jelent meg: etilcsoport, illetve klór-szubsztituens leszakadásával indulhat a folyamat, majd az acetyl-csoport lehasítása, N-demetileződés és etilvesztés következik be.

A **simazin** bomlása UV fotonok hatására **két párhuzamos reakcióúton** mehet végbe: **klór-csoport leszakadásával** vagy N-demetileződéssel, amit klórvesztés, illetve lépcsőzetes etilvesztés követ.

A **klórpirifosz** fotobomlása egy klór-csoport leszakadásával vagy egy etil csoport leszakadásával iniciálódhat. További fotoimpulzusok hatására újabb klór-szubsztituensek és etil-csoportok lehasadása ment végbe.

Az igen eltérő szerkezetű anyagok esetében nagy mértékű eltérés mutatkozik a fotodegradáció kinetikai lefolyásában, így az egyes molekulák egyedi **szerkezeti sajátosságainak nagy szerep jut a fotolitikus stabilitás biztosításában.**

Mikrobiológiai vizsgálataink során az alapvegyületek, és a bomlástermékek biológiai hatását vizsgáltuk 3 gyakori talajmikroorganizmussal, melyek jelentős érzékenységet mutattak. Megállapítható, hogy a peszticid-bomlástermékek jelentősen **módosítják a talaj mikrobiota összetételét.**

**„Purge and trap” minta-előkészítési módszerek
összehasonlítása aromás szennyezők meghatározására talajból**

Angyal Vilmos, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Torkos Kornél** egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék
Rikker Tamás gázkromatográfia részlegvezető
Dr. E. Wessling Kémiai Laboratórium Kft.

A környezetbe kerülő kőolajipari termékek szennyezhetik a talajt, a felszíni és felszín alatti vizeket, valamint a levegőt. Mivel számos erősen toxikus komponens tartalmaznak, melyek veszélyeztethetik az emberi egészséget és az ökológiai rendszereket, ezért a környezeti elemek szennyezésének felmérése napjainkban kulcsfontosságú. Talajból illékony aromás szénhidrogének meghatározására „purge and trap” eljárást ajánlanak, mely hazánkban is egyre szélesebb körben terjed.

Az OI Eclipse 4660 típusú „purge and trap” (P&T) készülék magyarországi forgalmazójának megbízásából a műszer alkalmasságának feltérképezése, valamint talajok oldószeres minta-előkészítésének optimalása volt célunk. A kidolgozott oldószeres eljárás összehasonlításra került a másik elterjedt talaj előkészítési technikával, a szuszpenziós módszerrel. Noha a két talaj minta-előkészítési alkalmazhatósága a tudományos közvéleményt megosztja, az irodalomban érdemi összehasonlítást nem találtam.

A szuszpenziós minta-előkészítés során a bemért talajmintához szervesanyag-mentes vizet és mágneses keverőbabát adunk. Talajszuszpendáló feltétellel ellátott „Purge and trap” készülékbe helyezük az edényt, majd a mérőrendszer folyamatos kevertetéssel szuszpenziót képez, miközben nagytisztaságú gázt buborékoltat át rajta, majd ezt követi a gázkromatográfias tömegspektrometriás (GC-MSD) analízis. A minta-előkészítés kimutatási határa 5 µg/kg (5 ppb).

Az oldószeres minta-előkészítés során az ismert tömegű talajhoz metanolt adagolunk, majd ultrahangos fürdőben extraháljuk. Ezután az extraktum letisztult részéből mintát veszünk, és azt szervesanyag-mentes vízzel buborékmentesen feltöltjük. Ez a vízzel hígított extraktum kerül elemzésre a kapcsolt „purge and trap”-gázkromatográf(GC)-tömegszelektív detektor(MSD) rendszerrel. Ez a technika speciális feltételt nem igényel. A minta-előkészítés kimutatási határát az irodalomban szereplő 200 µg / kg (200 ppb)-hoz képest az optimalásnak köszönhetően 5 µg / kg-ra, az egészségügyi határérték tizedére vittem le.

**Klórtartalmú C₂-szénhidrogének lebontása peroxon eljárással:
Ti- és Fe-tartalmú mezopórusos katalizátorok hatása**

Csató Anita, IV. évf. környezettudomány szakos hallgató

Horváth Katalin, V. évf. környezettudomány szakos hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Halász János** egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A C₂-szénhidrogének átmeneti termékként (diklór-etán) és oldószerként (triklór-etilén, perklor-etilén, tetraklór-etán) széles körben használatosak de képződhetnek a klórozással történő fertőtlenítési folyamatok melléktermékeiként is. Egészségkárosítóak, így a levegőbe vagy a vizekbe kerülve (X-VOC szennyezés) jelentős környezetkárosítást okoznak, ezért kivonásuk, ártalmatlanításuk a modern környezetvédelem egyik fontos feladata.

Teljes lebontásuk környezeti hőmérsékleten csak nagyhatékonyságú oxidációs módszerekkel lehetséges, ezek egyike a peroxon eljárás, ami ózon és H₂O₂ együttes alkalmazását jelenti. A peroxon eljárás hatékonysága katalizátorok jelenlétében növelhető, ezért vizsgáltuk az átmenetifémeket (Fe, Ti) tartalmazó mezopórusos (MCM-41, SBA-15, hidrotalcit, hőkezelt vörösiszap) anyagok hatását X-VOC tartalmú levegő (oxigén) vizes közegű oxidációjában.

A katalizátormintákat az irodalomban leírt módszerek szerint szintetizáltuk, röntgendiffrakciós, adszorpciós, infravörös-spektroszkópiai és termikus analitikai módszerekkel határoztuk meg jellemző fizikai-kémiai tulajdonságaikat.

A háromfázisú reakciórendszer követésére alkalmas kísérleti berendezés paramétereinek meghatározása során több elrendezést is teszteltünk, a leghatékonyabbnak a buborékreaktoros megoldás bizonyult. A kilépő gáz analízisét gázkromatográfias úton végeztük, az ózontartalom meghatározására UV-spektrofotometriát, míg a H₂O₂ mérésére jodometriás módszert alkalmaztunk.

Az oxigénnel lejátszódó modellreakcióban a már képződő ózon és a hidrogénperoxid együttes jelenlétekor (peroxon eljárás) 90% fölötti konverzió érhető el, a katalizátorok jelenléte ezt mérhető módon már nem befolyásolta.

A valós körülményeket modellező, levegővel végzett vizsgálatainkban a katalizátorok jelenléte mindegyik modellvegyületnél az eredeti 15-20%-os konverzió jelentős növekedését eredményezte. A Ti-tartalmú minták nagyobb aktivitást mutattak, a legnagyobb konverziót Ti-SBA15 jelenlétében értük el. A drága szintetikus katalizátorok mellett azonban hatásosan alkalmazható a hőkezelt vörösiszap is.

Keményítő bázisú anionos flokkulálószer fejlesztése

Meiczinger Mónika, okl. vegyészmérnök

VE Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Marton Gyula** egyetemi tanár
VE Vegyipari Műveleti Tanszék
Dr. Dencs Béláné egyetemi adjunktus
VE Vegyipari Műveleti Tanszék

Az iparban és a szennyvíztisztításban alapvető művelet a szűrés és üleptetés. A folyamat elősegítése érdekében flokkuláló- és koagulálószeret adagolnak a kezelendő elegyhez. Az eljárás során keletkező iszap mindig is gondot okozott az üzemeknek, hiszen szigorú környezetvédelmi előírásoknak megfelelően kell elhelyezni, esetleg megsemmisíteni a keletkezett iszapot. Nem mindegy, hogy a környezetet terhelő, szintetikus polielektrolitokkal vagy környezetbarát, ún. „zöld” flokkulálószerrel oldják meg ezt a problémát.

A Veszprémi Egyetem Vegyipari Műveleti Tanszékén kifejlesztettek az ivóvíztisztításban alkalmazható, a keményítő módosításával létrejövő flokkulálószeret. A keményítőlánc monómerjein található hidroxil csoportok egy részét ionos funkciók csoportokkal helyettesítve polielektrolitok állíthatók elő.

A keményítő módosítása a reagensek összekeveréséből és hőkezeléséből – reagáltatásából áll. Ennek során foszfátcsoportok épülnek be a keményítő szerkezetébe. Sajnos a hőkezelés a keményítő degradációjával jár, viszont a megfelelő reakciósebesség eléréséhez szükséges. A reakciónak úgy kell lejátsszódnia, hogy lehetőség szerint ne roncsolódjon a keményítő polimer szerkezete, és minél ionosabb vegyületet kapjunk. Feladatom az volt, hogy megtaláljam a lejátsszó reakció optimális körülményeit.

A kísérletek során változtattam a reakcióközeg pH-ját, a bevitt foszfátsó mennyiségét, a hőkezelés idejét és hőmérsékletét. A származékot oldatba vittem, vizsgáltam a keményítőszármazék üleptőképességét, töltéssűrűségét, valamint molekulaméretét. Az üleptőképességet egy tanszéki, saját fejlesztésű teszttel, a töltéssűrűséget kolloid-titrálással határoztam meg. A molekulatömeg eloszlást méretkizárásos folyadékkromatográfiával és többszögű lézer fényeszközös detektálással határoztuk meg. A kísérletsorozat végén alkalmam nyílt gyógyszeripari szennyvízen kipróbálni az előállított flokkulálószer közül a legjobb tulajdonságokkal rendelkezőket. A már ipari körülmények között alkalmazott flokkulálószerhez képest sikerült jobb tulajdonságokkal rendelkező terméket előállítani a reakciókörülmények megfelelő változtatásával.

Csapadékokban található szervesetlen szennyezők meghatározása

Szirmai Georgina, IV. évf. anyagmérnök hallgató

ME Műszaki Anyagtudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Emmer János** egyetemi docens
ME Kémiai Tanszék
Dr. Raisz Iván egyetemi docens
ME Kémiai Tanszék

Munkánk célja a csapadékokban található szervesetlen szennyezők meghatározása, környezetre való hatásuknak megismerése.

A nyári időszakban több alkalommal vettem eső mintát Bükkszentkereszten és környékén, valamint sikerült szert tennem egy meglehetősen ritka meteorológiai jelenségből származó csapadékra jég formájában, Miskolc belvárosában. A mintavételezés kézi mintavevővel történt különböző helyeken: szabad téren, fák alatt, ereszcsonnából.

Célunk a mintákban található főbb ionok meghatározása (Cl^- , NO_3^- , NO_2^- , SO_4^{2-} , Na^+ , Mg^{2+} , és Ca^{2+}) HPLC analízissel és titrálásos módszerrel, valamint a pH és vezetőképesség mérése, hogy képet kapjunk a minták pontos összetételéről.

Megállapítottuk a különböző mintákban levő szennyezőanyagok mennyisége közötti eltéréseket. Az időjárás szabta korlátok miatt a mintavételek között, hol kevesebb, hol több idő telt el. Bizonyítást nyert, hogy az egyes mintákban található szervesetlen ionok koncentrációja hosszabb esőzésmentes időszak után nagyobb értéket mutat, mint a csapadékos időszakban.

Titanát nanocsövek szintézise és jellemzése

Horváth Endre, V. évf. környezettudomány szakos hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kiricsi Imre** tanszékvezető egyetemi tanár
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
Dr. Kónya Zoltán egyetemi adjunktus
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
Hodos Mária doktoráns
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A szervesetlen nanocsövek a nanostruktúrák jeles képviselői, melyek érdekes tulajdonságokat és számos felhasználási lehetőséget rejtenek. Titanát nanocsöveket szintetizáltunk hidrotermális eljárással. A szintézis paramétereinek változtatásával a nanocsövek képződési mechanizmusát, valamint az optimális képződési körülményeket szeretnénk volna meghatározni. Eredményeink alapján kijelenthetjük, hogy az optimális szintéziskörülmények a következők: 2 g titán-dioxidhoz 140 ml 10 M NaOH-t mértünk, majd három napig 130 °C-on szárító szekrényben kezeltük. Energiafelhasználás csökkentés céljából elméletileg már egy napos szintézis is elegendő, mert fajlagos felületben nincs eltérés, csupán a jellemző pórusméret csökken néhány Å-mel három nap után. A szintézis hőmérséklet változtatása során azt tapasztaltuk, hogy 90 °C-on részlegesen alakulnak ki a nanocsövek, és 110 °C már elegendő a kialakulásukhoz. 150 °C és 170 °C alkalmazásakor szintén nanocsövek keletkeztek. Ebben a szintézis sorozatban a 150 °C-os minta produkálta a legnagyobb fajlagos felületet. A szintézist döntően a NaOH koncentráció határozza meg. A kiindulási titán-dioxid teljes átalakulásához szükséges legalább a 10 M NaOH koncentráció, kevésbé koncentrált oldat hatására ugyanis át nem alakult szemcsék, lapok, részlegesen felcsavarodott csövek maradnak a mintában. Töményebb, 15 M NaOH alkalmazásakor szintén fel nem csavarodott csövek jelentek meg a mintában. A jelenségnek két oka lehet. Az egyik, hogy a 15 M NaOH gátolja a teljes feltekeredést. A másik, hogy a csövek kialakulnak ugyan, de a folyamat során a 15 M NaOH hatására részlegesen kicsavarodnak. Az optimális szintéziskörülmények között előállított titanát nanocsöveket átmeneti fémekkel és szulfidjaikkal módosítottuk, s így különleges szerkezetű, spektrálisan érzékenyített, nagy fajlagos felületű, elméleti síkon hatékony fotokatalizátort állítottunk elő.

Alumínium oxidon kialakított reflexiós szenzor ammónia gázra

Markovics Ákos, III. évf. kémia tanár szakos hallgató

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kovács Barna** egyetemi docens
PTE Általános és Fizikai Kémiai Tanszék

Az optikai szenzorok olyan eszközök, amelyek optikai tulajdonságai egy kiválasztott vegyület vagy ion jelenléte esetén megváltoznak. A szenzor kialakításától függően a mért optikai paraméter lehet többek között fényelnyelés, reflexió, fluoreszcencia, törésmutató. Optikai érzékelőket különféle ionok kimutatása mellett gyakran alkalmaznak gázok, így az ammónia gáz koncentrációjának meghatározására is.

Az ammónia mérése környezetvédelmi szempontból is fontos feladat. Számos olyan enzimreakció is ismert, amelynek végterméke ammónia, így egy optikai ammóniaérzékelő bioszenzorokban is alkalmazható.

Az optikai szenzorokban a jelváltozás egy megfelelően kialakított néhány mikron vastagságú polimer filmben következik be. A polimerek alkalmazásának számos előnyös tulajdonságai mellett korlátai is vannak: a lágyított polimer rétegek öregedése, zsugorodása miatt tulajdonságai jelentősen változnak. Így a szenzor érzékenysége, válaszideje és kalibrációs paraméterei is megváltoznak. Ezért mechanikailag és kémiaiilag stabilabb közeget kerestünk optikai ammónia kifejlesztéséhez.

Vizsgálatunk során elektrokémiai úton eloxált alumínium felületet alakítottunk ki. Az eljárás során porózus oxidfilm keletkezik, mely alkalmas az ammónia gáz detektálására szolgáló indikátor adszorpcióval történő rögzítésére. A festés után a pórusok elzárására különböző apoláros anyagokat alkalmaztunk.

Méréseink során meghatároztuk a szenzor készítésének optimális paramétereit, az anódos oxidálás, az immobilizálás ideális körülményeit. Ezt követően kalibrációs görbéket vettünk fel, megmértük a maximális jelváltozásokat, és a válaszidőket különböző módon készített érzékelők esetében. Beszámolunk a kimutatási határral, a reprodukálhatósággal, és a szenzorok élettartamával kapcsolatos eredményeinkről is.

Az új típusú érzékelő előnye, hogy az alumínium jól reflektál, így az érzékelő jele megfelelő fényforrás (lézer) alkalmazása esetén több km-es távolságból is olvashatóvá válhat.

Szuperoxid-gyökanion képződésének vizsgálata gerjesztett TiO₂ félvezető felületén

Mézes József, III. évf. levelező kémia tanár szakos hallgató

VE Tanárképző Kar

Témavezető: Szabóné dr. Bárdos Erzsébet egyetemi adjunktus
VE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A napjainkban fokozódó ipari termelés nem kívánatos mellékhatásaként keletkező, a természetben nehezen vagy egyáltalán nem lebomló vízszennyezők mineralizációjára a nagyhatékonyságú oxidációs eljárásokat alkalmazzák. Ezek közé tartozik a heterogén fotokatalízis, melynek lényege a vízben jelenlevő oldott komponensek oxidatív úton történő eltávolítása. A fotokémiai tisztítási módszerek egyre nagyobb mértékben nyernek alkalmazást, hiszen a szennyezések számos esetben a természetben is fotokémiai reakcióban bomlanak le. A félvezető tulajdonságú TiO₂-ot széles körben alkalmazzák fotokatalizátorként. A TiO₂ tartalmú fotokatalitikus rendszerekben lényeges folyamat a gerjesztés hatására keletkező elektronok és lyukak reakciója a félvezető felületén adszorbeált oxigén és vízmolekulákkal. A termékek: a szuperoxid-gyökanion és a hidroxilgyök nagy hatékonyságú oxidálószer, melyek elindíthatják a szerves szubsztrátum fotooxidációját. A luminolt régóta használják kemilumineszcenciás indikátorként. A redox folyamatban a luminol a szuperoxid-gyökanionnal reagálva inaktív terméké alakul, mely fényt sugároz. Munkám során a luminol alkalmazásával vizsgáltam a szuperoxid-gyökanion képződésének körülményeit a fotokatalitikus rendszerben.

A fotoreakciót egy speciálisan kialakított, 3 dm³ hasznos térfogatú, belső cirkulációs, ipari folyamatok modellezésére is alkalmas fotokémiai reaktorban végeztem, (betáplált levegő sebessége: 40 dm³/h, TiO₂ mennyisége: 1 g/dm³). A gerjesztés egy 40 W teljesítményű Tungstram fénycsővel történt, melynek kisugárzási színe 350 nm-nél mutat maximumot.

Megállapítottam, hogy TiO₂ tartalmú lúgos luminol oldat megvilágításakor 481 nm-en emittáló stabil részecske keletkezik. Munkám során részletesen vizsgáltam a luminol fotolízisét különböző pH-jú reakcióelegyekben katalizátor jelenlétében és anélkül. Gyökbefogók alkalmazásával bizonyítottam, hogy a 481 nm-en emittáló részecske a luminol egyszeresen deprotonált formája, a szuperoxid-gyökanion és a hidroxilgyök reakciójában képződik. Tanulmányoztam a szuperoxid-gyökanion képződésének sebességét különböző TiO₂-okon és azok ezüsttel módosított változatain.

Klórtartalmú C₂-szerves vegyületek hidrodehalogénezése Fe-ZSM-5 katalizátorokon

Karácsony Csilla, okl. kémia tanár

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Halász János egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A kétszénatomos, klórtartalmú szerves vegyületeket kedvező tulajdonságaik miatt az iparban jelentős mennyiségben gyártják és széles körben használatosak. Kémiailag ellenállóak, nagyfokú stabilitás jellemzi őket, azonban éppen e tulajdonságukból kifolyólag jelentős környezetszennyező ágensek. Munkám során a katalitikus hidrodehalogénezést vizsgáltam, mely egy potenciális átalakítási lehetőség értékes, hasznosítható termékekké.

A katalitikus hidrodehalogénezési folyamatokban a klórtartalmú szénvegyület közepes hőmérsékleten (250-400 °C-on) hidrogén vagy hidrogénező ágens jelenlétében hidrogén-kloriddá, szénhidrogénné, illetve az iparban hasznosítható klórtartalmú vegyületekké bontható le. Modellvegyületként a kétszénatomos triklóretént (TCE) és az 1,1,2-triklóretánt (TRI) használtuk. A katalizátorok Na-ZSM-5 alapzeolitből kiindulva szilárdfázisú ioncserével, speciális folyadékfázisú ioncserével, illetve izomorf szubsztitúcióval előállított Fe-ZSM-5 voltak. A katalizátorok jellemzésére a fémiontartalom és a BET-felület meghatározása mellett termikus analízist használtunk, a szerkezet stabilitását pedig (reakció előtt és után) röntgendiffrakciós mérésekkel követtük. A reakciókat áramlós rendszerben játszottuk le, a kiindulási anyagok és a termékek elemzése gázkromatográfiás analízissel történt.

A mérési eredmények alapján megállapítottuk, hogy az adott katalizátorokon hasonló feltételek mellett a TRI lényegesen nagyobb mértékben alakult át, mint a telítetlen TCE, ami véleményünk szerint az olefinmolekula erős adszorpciójának tulajdonítható, ami az aktív centrumokon játszódik le, és így ezek blokkolását eredményezi.

A gyengébben adszorbeálódó TRI átalakulása során csak részleges deklórozás játszódik le, többféle termék képződik, azaz a szelektivitás kicsi. A legkedvezőbb eredményeket a szilárdfázisú ioncserével előállított Fe-ZSM-5 esetében kapjuk 350-400 °C hőmérsékleten, azaz ezek a reakciókörülmények javasolhatóak a gyakorlati alkalmazáshoz, természetesen további vizsgálatok után.

Tiametoxám és imidakloprid derivatív spektrofotometriás meghatározása

Papp Zsigmond, III. évf. vegyész hallgató

ÚE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Gaál Ferenc** egyetemi tanár
ÚE Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

A tiametoxám és az imidakloprid a neonikotinoidok családjába tartozó, viszonylag új rovarirtószer. A rovarok idegműködését zavarják oly módon, hogy a posztzinaptikus membránon az acetilkolin által indukált jeleket blokkolják. Hatásuk szelektív, a melegvérű élőlényekre kevésbé toxikusak. Számos előnyös tulajdonságuk miatt fokozatosan átveszik a piretroid-, organofoszfor- és karbamátalapú rovarölőszerek helyét.

Szerkezeti hasonlóságuk miatt, meghatározásukra leggyakrabban folyadék- és gázkromatográfia használatos, de alkalmaznak immunokémiai módszereket is. A derivatív spektrofotometriás módszerek a nagyműszeres módszerekhez (HPLC-MS, GC-MS) képest viszonylag olcsó, egyszerű és gyors mérési lehetőséget biztosítanak számos olyan minta esetén, amelyeknél a spektrumok átfedése áll fenn.

E munka célja az imidakloprid és a tiametoxám egymás melletti kimutatása és meghatározása e viszonylag egyszerű méréstechnikával modell rendszerekben.

Az UV-spektrumok jellemzőinek feltérképezését követően meghatároztuk a mérésekhez megfelelő pH-értéket. Kivizsgáltuk az első és a magasabb rendű derivált spektrumok alkalmazhatóságát és a zajkiszűrés céljából végrehajtott egyszerű mozgóátlagos simítás hatását a spektrumokra. A módszer munkahullámhosszaként imidakloprid meghatározásakor 227 nm-t, tiametoxám esetén pedig 270 nm-t alkalmaztunk. Az így optimalizált módszerrel a kimutatási határ mindkét anyag esetében 0,3 ppm, a meghatározási határ pedig 1,0 ppm. Vizsgálataink szerint a módszer lineáris tartománya 1,0-15,0 ppm-ig terjed. A relatív standard deviáció értéke nem haladja meg az 1,5 %-ot. A kidolgozott módszer érzékeny, szelektív és precíz, ezért alkalmazható a két vegyület egyszerűbb rendszerekben történő, egymás melletti meghatározására.

Makromolekuláris és kolloidkémia tagozat

Térhálós polimerek és polimer nanokompozitok szintézise és orvosbiológiai alkalmazásuk

Ménesi Judit Bernadett, okl. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Dékány Imre** tanszékvezető egyetemi tanár

SZTE Kolloidkémiai Tanszék

Dr. Szekeres Márta egyetemi adjunktus

SZTE Kolloidkémiai tanszék

A térhálós polimerek biológiai rendszerekben számos funkciót látnak el: reakcióterek szeparálása, szelektív átjárhatóság biztosítása az aktív és passzív transzportfolyamatokban, valamint funkcionális molekulák immobilizálási terének biztosítása. A funkció betöltésének szempontjából a legfontosabb paraméterek közé tartozik a térhálóság foka, a blok-kopolimerek összetétele, valamint a töltőanyag kompatibilitás.

Munkám során kétféle felhasználási célból állítottam elő térhálós polimereket: bioszenzor szerkezetek fedésére UV-fényre polimerizálódó polimereket és mesterséges bőrpótló implantátum valamint szabályozott hatóanyag leadás céljára alkalmas termoszenzitív polimereket. Az enzim tartalmú bioszenzor szerkezeteknél fontos, hogy a fedőréteg polimerizációja szobahőmérsékleten menjen végbe, ezért alkalmaztam az UV-polimerizációs eljárást. A hidroxietil-metakrilát (HEMA) monomer és tetra(etilén-glikol)diakrilát (TEGDA) térhálósító komponensekből álló prekursor oldat összetételének változtatása mellett jodometriás módszerrel vizsgáltam a termék polimerizációs fokát. Voltametriás görbék felvételével vizsgáltam a polimer térháló diffúziógátló hatását. Termoszenzitív térhálós kopolimer géleket szintetizáltam N-izopropilakrilamid (NIPAAm) és akrilamid (AAm) monomerek és N,N'-metilénbiszakrilamid (BisAAm) térhálósító felhasználásával. A NIPAAm:AAm molarány változtatásával sikerült hőre duzzadó és zsugorodó géleket szintetizálni, amelyek működési hőmérséklete a biológiai szempontból kívánatos tartományban, 25 és 40 °C között van. A gélek szilárdságának növelése érdekében hidrophil és hidrophóbizált felületű agyagásvány részecskéket is beépítettem a szerkezetbe. Az így elkészített nanokompozitok és az alapgélek duzzadásképpességét és a duzzadás kinetikáját tömegmérésekkel vizsgáltam. A kopolimer monomer-összetételének hatását a duzzadásképpesre a gélek reológiai viselkedésén keresztül jellemeztem. Az oszcillációs reológiai vizsgálatokból meghatároztam a gélek rugalmassági, tárolási és komplex moduluszait, amelyek korrelációban voltak a duzzadásképpeséggel.

Micellák szerkezetének vizsgálata fordított Monte Carlo módszerrel

Madarász Ádám, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Tóth Gergely** egyetemi adjunktus

ELTE Elméleti Kémiai Tanszék

Munkám témája Reverse Monte Carlo (RMC) számítógépes modellezési eljárás alkalmazása, továbbfejlesztése egy kisszögű neutrondiffrakciós mérés kiértékelésére. Az eredeti (RMC) algoritmust 1988-ban dolgozta ki Robert McGreevy és László Pusztai. A módszer ma már széles körben használatos, főleg diffrakciós adatoknak a direkt Fourier-transzformációt kikerülő kiértékelésére, a kísérleti adatokkal konzisztens háromdimenziós szerkezeti modellek készítésére. Az RMC technika segítségével sikeresen modellezték már atomokból (ionokból) és/vagy kisebb molekulákból álló rendszerek szerkezetét. Témavezetőm vizsgálta az RMC-módszer kolloidokra való alkalmazhatóságát, köztük egy nemionos felületaktív anyag, a BRIJ-35 ($C_{12}H_{25}(OCH_2CH_2)_{23}OH$) vizes oldatára. A képződő micellákat az angol irodalomban hairy spheres-nek, azaz szőrös gömböknek hívják. Belső szerkezetüket már többen tanulmányozták, viszont az általunk kifejlesztett módszerrel sikerült az eddigiéknél részletesebb képet nyernünk a micellák közti szerkezetéről. A kapott párkorrelációs függvények alapján egy micella első koordinációs szférájában átlagosan kb. egy másik micella található.

Módszerünkben új, hogy nemcsak a részecskék koordinátáit változtatjuk véletlenszerűen, hanem a rendszer olyan globális tulajdonságait, mint például az aggregációs szám átlaga, szórása. Az eredeti RMC-módszert kombinálva egy direkt minimalizációs eljárással sikerült kiszűrni bizonyos kísérleti mérésekből származó bizonytalanságokat (sűrűség meghatározása, szórási intenzitás normalizálása). Az általunk javasolt egyszerű modellel számítástechnikailag kivitelezhetővé vált néhány száz micellából álló szimulációk futtatása, ami atomi szinten a részecskék nagy száma (millió nagyságrend) miatt egyelőre nem lehetséges.

A technika alkalmazható más, bonyolult szerkezetű kolloid részecskék interpartikuláris szerkezetének vizsgálatára.

Hidrofil nanorészecskék

Veres Adrienn Judit, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Borbély János tanszékvezető egyetemi docens
DE Kolloid- és Környezatkémiai tanszék

Napjainkban igen intenzív munka folyik olyan nanorészecskék előállítására, melyek vízdoldhatók és biokompatibilis sajátsággal rendelkeznek.

A kolloid mérettartományba eső kopolimerek előállítását emulziós polimerizációval végeztük úgy, hogy azok vízdoldhatók legyenek, megfelelő mérettel, összetétellel, porozitással és funkcionalitással rendelkezzenek.

A tulajdonságokat (részecskeméret, porozitás, összetétel) a kopolimerizáció körülményei (monomerek anyagi minősége, aránya, koncentrációja, hőmérséklet, iniciátor mennyisége) jelentős mértékben befolyásolták.

Egy- és kétfunkciós hidrofil vinilmonomerekkel homogén oldatban végezve a polimerizációt – ahogy az várható – széles méreteloszlású kopolimer keletkezik, és már egy kevés divinil monomer hatására is a polimerizációs láncreakció annyira felgyorsul, hogy a rendszer nagyon hamar begélesedik. A gélesedés megakadályozható úgy, hogy a (kevés) toluolban feloldott monomereket nátrium-lauril-szulfát vizes oldatában emulgeáljuk.

A keresztkötéseket biztosító 2 kettős kötést tartalmazó monomerek vízben csak kismértékben oldódnak, ami nagymértékben korlátozza az alkalmazható monomerek koncentráció viszonyát. Inverz emulzióban viszont a folytonos fázisban való jó oldhatósága miatt nem állítható elő a kívánt monomerarányú kopolimer (gélesedés). Ugyanakkor az alkalmazott monomerek kettős kötésük révén jól oldódnak toluolban, így az előállított kopolimerek összetétele széles tartományban változtatható.

A polimerizációt az SDS molekulákkal körülvett micellákban indítottuk el a vízdoldható $K_2S_2O_8$ iniciátor hatására, $60\text{ }^\circ\text{C}$ -ra való melegítéssel.

Vizsgálati módszerek

Tisztítás után az előállított kopolimereket $^1\text{H-NMR}$ és IR spektroszkópiával, gélpermeációs kromatográfiával, dinamikus fényszórás fotometriával, transzmissziós elektronmikroszkópiával vizsgáltuk

A technika alkalmazhatóságát több monomerpárra is ki kívánjuk terjeszteni.

Talajok szerkezetképzése és reológiai jellemzése

Kovács Krisztina Éva, V. évf. környezettudomány szakos hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Tombácz Etelka egyetemi docens
SZTE Kolloidkémiai Tanszék

A talaj, mint feltételesen megújuló természeti erőforrás védelme és javítása állandó és aktív tevékenységet igényel. Magyarország területének 8%-án találunk futóhomokot és gyengén humuszos homoktalajt. Ezekben az ún. szerkezet-nélküli talajokban a szélsőséges szemcseösszetétel, valamint a talajszerkezet-képző és -stabilizáló anyagok, a szerves és szervesetlen kolloidok hiánya miatt nem alakulnak ki mikro- és makroaggregátum szerkezeti elemek.

A reológia azokkal a törvényszerűségekkel foglalkozik, amelyek az anyagok külső deformáló erőhatásokkal szemben tanúsított viselkedését írják le. Talajmintából készített szuszpenzió reális plasztikus testként viselkedik nyíróerő hatására. A növekvő, majd csökkenő sebességgradiensek irányába felvett folyásgörbék jellemezhetők azzal a kritikus nyírófeszítéssel, az extrapolációval meghatározott Bingham-féle folyáshatárral, amely felett az adhéziós erővel összetartott részecsketerháló széttörik, valamint a fel- és leszálló ág közötti hiszterézis-hurok területével, amely a hosszabb-rövidebb idő alatt kialakuló, külső deformációkra érzékeny tixotrop részecsketerhálók jellemzője.

Dolgozatomban egy homoktalaj javítási kísérletből származó mintákat értékeltem, amelynek célja annak meghatározása volt, hogy homoktalaj szerkezetképzését hogyan befolyásolja az agyagásvány, illetve agyagásvány és szerves trágya keverék (ld. később: komposzt) hozzáadás. Egyértelműen kiderült, hogy önmagában egyik sem elegendő organo-minerális komplex képződéséhez. Mindez a homokszemcsék, a bentonit és a szerves anyag felületi töltéseivel magyarázható.

A szervesetlen és szerves kolloidok összekapcsolódása Ca^{2+} -hidakon keresztül történik, ezért következő lépésként a talajjavítási gyakorlatban már régóta alkalmazott meszesítéshez hasonlóan Ca^{2+} -ot adtam a talajmintákhoz. A különböző mennyiségben bentonitot, illetve komposztot tartalmazó mintákhoz különböző koncentrációjú Ca -só oldatokat adtam. Így meghatározható az a legkisebb, optimális Ca^{2+} mennyiség, amely agyagásvány, illetve komposzt jelenlétében kedvező hatással van a homoktalaj szerkezetképzésére.

Gabonafehérjék vizsgálata felületaktivitás mérésel

Hill Katalin, V. évf. biológia-kémia tanár szakos hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kiss Éva egyetemi docens

ELTE Kolloidkémiai és Kolloidtechnológiai Tanszék

Az allergiás betegségek gyakori előfordulása miatt az utóbbi években az érdeklődés előterébe került az allergén anyagok különböző szempontú vizsgálata. Ismeretes, hogy gabonafélék is tartalmaznak allergiás reakciót kiváltó anyagokat, melyek között fehérjetermészetűek is vannak. Az élelmiszer eredetű allergén fehérjék szerkezete, aktivitása és az allergiás tünetekhez vezető biokémiai folyamat mechanizmusa arra utal, hogy a fehérjemolekula felületi tulajdonságai szerepet játszhatnak az allergén jelleg érvényesülésében. Munkánk során ennek felderítésére kezdtünk vizsgálatokat. Bánkúti búza só- és vízdoldható fehérjét, albuminokat és globulinokat tartalmazó kivonatának (A+G), és vízdoldható frakció izoelektromos fókuszálással elválasztott 20 alfrakciójának felületaktivitását felületi feszültség és dilatációs reológiai viselkedés mérésével vizsgáltuk. Mindkét méréstípust víz/levegő, illetve a víz/olaj határfelület modelljeként szolgáló víz/dodekán rendszerben végrehajtottuk. Összehasonlításként minden mérést ovalbumin (OVA) és marha szérum albumin (BSA) azonos koncentrációjú oldataival is elvégeztünk, amely rendszerek megfelelő adatait referenciaként használtuk az eredmények értelmezéséhez.

A 20 alfrakció között szignifikáns eltérést tapasztaltunk. A referenciafehérjékkel összehasonlítva a víz/levegő határfelület esetén valamennyi búzakivonat felületaktívabbnak bizonyult mind a BSA-nál, mind az OVA-nál. Víz/dodekán határfelületen ugyanezt tapasztaltuk, azzal a kivétellel, hogy itt néhány minta a BSA-nál kisebb felületaktivitású volt. A reológiai viselkedés azt mutatta, hogy a búzakivonatok a referenciafehérjéktől lényegesen eltérnek, kis dilatációs modulusszal jellemezhetők, ami flexibilis és/vagy kis relatív molekulatömegű fehérjék jelenlétére utal.

A búzafehérje kivonatokkal végzett vizsgálatok során bemutattuk, hogy a felületaktivitási és határfelületi reológiai mérésekkel milyen információk nyerhetők az adszorbeálódó fehérjék természetéről, ami a felületaktivitás és az allergén jelleg között nagy valószínűséggel fennálló kapcsolat kutatásához felhasználható lesz.

A munka a Központi Élelmiszer-tudományi Kutatóintézetrel együttműködésben készült.

Termoplasztikus keményítő és nanokompozitjainak előállítás, szerkezetük és tulajdonságaik vizsgálata

Bagdi Kristóf, V. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: Dr. Pukánszky Béla tanszékvezető egyetemi tanár

BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

Konzulens: Müller Péter tanszéki mérnök

BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

Napjaink egyik jelentős problémája a műanyag hulladékok növekvő mennyisége, melynek oka a csomagolóanyagok nagy fajlagos térfogata, illetve lassú lebomlásuk. A probléma egyik lehetséges megoldása biológiailag lebomló műanyagok alkalmazása, melyek alapanyagaként elsősorban a természetes polimerek – például a keményítő és a cellulóz – jöhetnek számításba, mivel ezek amellet, hogy teljesen lebomlanak, még megújuló, olcsó, nagy mennyiségben hozzáférhető nyersanyagforrások is. Műanyagipari elterjedésüket azonban rossz feldolgozhatóságuk korlátozza. A keményítő elméleti olvadási hőmérséklete ($T_f = 257\text{ °C}$) a bomlási hőmérséklet ($T_b = 230\text{--}250\text{ °C}$) felett van, de megfelelő lágyítószerrel termoplasztikussá tehető.

Kutatásaink során sikerült kedvező mechanikai tulajdonságokkal rendelkező, különböző mértékben lágyított keményítőt készítenünk, két keverési eljárással is. Belső keverőben 30 és 60 % (m/m) glicerintartalom között állítottunk elő mintákat, majd vizsgáltuk ezek szerkezetét, és mechanikai tulajdonságait. Kísérleteinkhez szárított keményítőt, illetve lágyítóként szárított glicerint használtunk, mert a víz jelenléte tovább nehezíti a feldolgozást. A kapott termék mechanikai jellemzői jók, azonban a keményítő erősen hidrofil jellegének és az ebből fakadó jelentős vízfelvételének köszönhetően a tárolás során romlottak. Ezen különböző társított rendszerek, keverékek és kompozitok, előállításával próbálunk javítani, amitől a mechanikai tulajdonságok javulását is várjuk. Elsőként termoplasztikus keményítő alapú nanokompozitot állítottunk elő különböző módon felületkezelt montmorillonitok felhasználásával, majd a mintákon szerkezet- és tulajdonság-vizsgálatokat végeztünk.

Megoldásra vár a TPS (termoplastic starch) feldolgozhatóságának javítása, illetve a fröccsöntött termékek jelentős mértékű zsugorodásának csökkentése. További terveink között szerepel a TPS mátrixú, szálerősítésű rendszerek kifejlesztése, amitől a mechanikai tulajdonságok javulása mellett a termékek zsugorodásának csökkenését is várjuk.

Frontális polimerizációval előállított kompozitok kémiai felületmódosítása

Szikra Dezső, IV. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Nagy István egyetemi docens
DE Fizikai Kémiai Tanszék

Tudományos diákköri munkám során akrilamid – trietilén-glikol-dimetakrilát alapú, kémiai módszerekkel történő felületmódosításra alkalmas kompozitokat állítottam elő frontális polimerizációval. A készített kompozitok felületükön karboxil-, illetve hidroxil csoportokat tartalmaznak, melyekhez különböző anyagokat kapcsoltam kovalens kötéssel, a kötődés tényét IR spektroszkópiával, ATR módszer felhasználásával igazoltam.

Az akrilsavat tartalmazó kopolimereket tionil-kloriddal kezelve a felületen lévő karboxil-csoportokat savkloriddá alakítottam, melyhez etilén-diamint kapcsoltam. Az amin kötődését a spektrumban megjelenő amid sávok igazolják. Az alkoholokkal (allil-, és polivinil-alkohollal) adalékolt kompozitokat savkloridokkal acilezve a karbonil sávok intenzitásának jelentős növekedését tapasztaltam, amely új észterkötések kialakulására utal a felületen. ϵ ,N-karbobenzoxi- α ,N-karboxi-L-lizin anhidrid benzolos oldatával kezelve az alkohol tartalmú kompozitok felületén poli- ϵ ,N-karbobenzoxi-L-lizin bevonatot alakítottam ki, mely valószínűleg kovalensen kötődik a felülethez.

25 w% grafit adalékolásával az elektromos áramot vezető kompozitokat állítottam elő, melyek alkalmasak szerves elektroszintézisben való felhasználásra. A vezető kompozitokat felületmódosítás után katódként alkalmaztam acetofenon NH_4Cl -ot tartalmazó, víz – DMF elegyben történő elektroredukciója során. A poli- ϵ ,N-karbobenzoxi-L-lizin bevonatú elektród esetén a termékelegyben a 2,3-difenilbután-2,3-diol/1-feniletanol arány jelentős mértékben megnövekedett a többi elektród felhasználásával kapott termékelegyénél mérhető képest. A tapasztalt kemoselektivitás a poli-amonosav bevonat és az elektroredukció intermedierjeinek kölcsönhatásával magyarázható.

ZnO nanorészecskék optikai tulajdonságai rétegszilikátokkal stabilizált diszperziókban és ultravékony filmekben

Szendrei Krisztina, IV. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Dékány Imre tanszékvezető egyetemi tanár
SZTE Kolloidkémiai Tanszék

Munkám során cink-oxid/hidroxid kolloid részecskék szintézisét hajtottam végre 5-10 nm mérettartományban, dimetil-szulfoxid közegű rétegszilikát szuszpenziókban. Kiindulási anyagként cink-ciklohexán-butirátot, míg diszperzióközegként dimetil-szulfoxidot alkalmaztam, amelyek jó stabilizátorai a képződő ZnO nanorészecskéknek, ezért nem szükséges külön stabilizálószer alkalmazása. A különböző koncentrációjú (1 illetve 5 mM) szoloknak egy órás hőkezelés után, valamint 2 nap után is felvettem az abszorpciós és emissziós spektrumát, amelyekről leolvasható, hogy az intenzitás az 5 mM-os koncentráció esetében a nagyobb, amely az idő elteltével fokozatosan csökken. A spektrumokon egyértelműen látszik a ZnO nanorészecskék elnyelésének helye ($\lambda=360$ nm).

A kísérleteket úgy terveztem, hogy a már előzetesen előállított nanorészecskéket heterokoagulációs eljárással hoztam kölcsönhatásba a rétegszilikát szuszpenzióval.

Az abszorpciós és emissziós mérésekből megállapítottam, hogy a fluoreszcencia-intenzitás maximumok függenek a szuszpenzió és az agyagásvány koncentrációjától, valamint a stabilizálási időtől. A nagyobb ZnO koncentráció növelte az emissziós intenzitást, ezzel szemben a rétegszilikátok relatív mennyiségének növelése az emisszió kioltását okozza.

Az ultravékony filmek készítésénél a ZnO nanorészecskéket cink-acetátból preparáltam vizes közegben, Xe-lámpával történő besugárzással. Ezt követően ZnO/hektorit önszerveződő nanorétegeket készítettem üveglemez felületén, immerziós módszerrel. Vizsgáltam a bemelegítési idő, a koncentráció, és a rétegszám hatását az optikai tulajdonságokra. Meghatároztam ezen filmek transzmittancia spektrumait, amelyeken megfigyelhetők a rétegszámtól függő tiltott sáv energia-eltolódások. A 400°C-on kalcinált filmek spektrumán az eltolódások élesebben jelennek meg, mivel a kalcinálás során már tiszta ZnO keletkezett.

A nanofilmek a látható fényben a megfigyelési szög függvényében különböző interferencia-színeket mutatnak (sárga, zöld, vörös, kék, lila). Ellipszometriás mérések segítségével jó közelítéssel meghatároztuk a rétegvastagságokat: a ZnO rétegek kb. 50, míg a hektorit rétegek kb. 3 nm vastagságúak. Az előállított és rendezett szerkezetű filmek optikai szűrőként és fotokatalizátorként is felhasználhatók.

Amfifil polimer kotérhálók duzzadási viselkedése sóoldatokban

Kali Gergely Áron, okl. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Iván Béla** egyetemi magántanár
ELTE Kémiai Technológiai és Környezetkémiai Tanszék

Az amfifil kotérhálók olyan új térhálós polimerek, amelyek hidrofób és hidrofil polimer láncok kovalens összekapcsolódásával jönnek létre. Igen különleges tulajdonságuk, hogy mind poláros, mind apoláros anyagokkal képesek kölcsönhatásba lépni, továbbá mindegyik típusú oldószerekben képesek duzzadni. Munkám során áttekintést készítettem az amfifil kotérhálókról, és ebben mind a biokompatibilitásukat, mind a tulajdonságaikat részletesen tárgyaltam. Ebből megállapítható, hogy ezek a kotérhálók nagyon különleges, sokrétűen használható anyagok. Összegzést készítettem az irodalomban eddig közölt, sóoldatokban vizsgált hidrogéleken tapasztalt változásokról, mind egy-, két- és három-értékű fémsók esetén.

A kísérleti részben részletesen leírtam az általam előállított amfifil kotérháló, a polimetakrilsav-*l*-poliizobutilén (PMAA-*l*-PIB; *l* = linked) előállításának menetét, az iniciátor szintézisétől a térhálósítás lépéséig. A térhálóból egy sorozatot készítettem különböző poliizobutilén tartalommal. Ezen kotérháló sorozatot, illetve komponenseit, többféle analitikai módszerrel vizsgáltam (¹H-NMR, GPC, elemanalízis), ezeknek a méréseknek az eredményeit kiértékeltem, valamint értelmeztem.

A kotérhálók előállítása után, az ezekből nyert gélek viselkedését vizsgáltam változó koncentrációjú CaCl₂ só oldatában, és a kapott eredményeket összehasonlítottam az irodalomban közölt adatokkal. Meglepő módon azt az új eredményt kaptam, hogy az irodalmi eredmények alapján várt, az eddig közölt, homopolimer hidrogélekre vonatkozó adatoktól eltérően az amfifil kotérhálók esetén nem tapasztalható hirtelen gélkollapszus 1 mM-os CaCl₂ koncentrációnál, hanem a térfogatváltozás folytonos marad. A hidrofób polimer szegmensek jelenléte tehát megakadályozza a hirtelen kontrakció bekövetkeztét. Ezek a PMAA-*l*-PIB amfifil kotérhálókkal kapott új eredmények az amfifil kotérhálóknak a hagyományos hidrogélekétől eltérő alkalmazásának az alapját képezhetik.

Fluorimetriás módszer alkalmazása a reaktív oxigén specieszek képződésének kimutatására és gyökfogók tesztelésére

Nagy Szilvia, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Tombác Etelka** egyetemi tanár
SZTE Kolloidkémiai Tanszék

Napjaink kimerítő életritmus, a dohányzás, az alkohol, egyes élelmiszer adalékok, ill. gyógyszerek, az UV-A és UV-B sugárzás előidézi szervezetünkben és bőrünkben a reaktív oxigén gyökök vagy az irodalomban elterjedt kifejezéssel specieszek (ROS) képződését. Növekvő ROS koncentrációval fokozódik a károsító hatás, így lényeges mennyiségük csökkentése gyökfogók, antioxidánsok bevitelével. Munkám célja ROS képződés kimutatása és gyökfogók tesztelése volt fluorimetriás módszerrel.

A diklorodihydrofluorescein-diacetát (DCFH-DA) vegyületet használtam ROS kimutatására. A DCFH-DA molekula hidrolízis terméke, a diklorodihydrofluorescein (DCFH) könnyen oxidálódik, az oxidált forma diklorofluorescein (DCF) erősen fluoreszkáló vegyület. A reaktív oxigén gyökök képződését UV besugárzással idéztem elő. A híg DCFH oldatokban a növekvő időtartamú UV megvilágítás hatására nőtt a fluoreszkáló DCF mennyisége. Ezt használtam fel a ROS képződés fluorimetriás követésre. Antioxidánsok jelenlétében ugyanannyi oxidáns sokkal kevesebb DCFH tesztmolekulát képes oxidálni, mivel részben, vagy teljes mértékben az antioxidáns molekulákkal reagál el, így a fluoreszcencia intenzitás az antioxidánst nem tartalmazó mintához képest csökken. A C-vitamin, galluszsav és zöldtea kivonat antioxidáns hatását vizsgáltam. Az antioxidánsokat növekvő koncentrációban alkalmaztam az állandó koncentrációjú DCFH mellett. A DCFH és az antioxidánst is tartalmazó oldatsorozatokot párhuzamosan kezeltem UV fényel meghatározott ideig. Az UV besugárzás után felvettem az oldatok gerjesztési és emissziós spektrumait. A relatív fluoreszcencia intenzitás értékeket összehasonlítva következtettem a gyökfogók hatékonyságára. Vizsgálataim szerint a galluszsav hatása nagyon hasonló a C-vitaminéhoz, a zöldtea kivonat viszont erőteljesebb gyökfogónak bizonyult, mint a C-vitamin.

Mivel a ROS jelenléte a szervezetben káros folyamatokat idéz elő és felemészti a szervezetben jelen lévő antioxidánsokat fontos, hogy ismerjük jelenlétüket, és megfelelő étrenddel biztosítsuk (pl. rendszeres zöldtea fogyasztással) a hatékony gyökfogók bevitelét.

Reaktív nanorészecskék

Szalóki Melinda, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Borbély János** tanszékvezető egyetemi docens
DE Kolloid- és Környeztkémiai Tanszék

A nanotechnológia dinamikusan fejlődő tudományterület. Az irodalomban mégsem található egységes definíció a nanorészecskék megfogalmazására. Egyesek az 1-100 nm-es, míg mások az 1-500 nm-es tartományt tekintik a nanorészecskék mérettartományának. A tudomány figyelme egyre inkább a mérettartományok alsó része felé irányul. A nanorészecskék számos területen, többek között a gyógyszerkutatásban és a lakk- és festékiparban nyernek fontos alkalmazást. Az autópárhán már olyan felület bevonási technológiát használnak, ahol két különböző mechanikai tulajdonságú kopolimer ötvözésével jó vegyszer-, kopás- és karcállóságú bevonat készíthető [1]. Ezen bevonatok fontos környezetvédelmi előnye, hogy illékony szerves toxikus oldószert nem tartalmaznak, amit az irodalom Volatile Organic Compounds azaz VOC-nek nevez. A reaktív nanorészecskék, mint multivinil vegyületek használatosak fogászati tömő- illetve ragasztóanyagként [2, 3]. Kísérleteinkben olyan reaktív nanorészecskéket sikerült előállítani, melyek reaktív csoportjai reagálatlan vinilcsoportok. További monomerekkel reagáltatva lehetőség nyílik mag-héj nanostrukturák [4] előállítására. Amennyiben intramolekuláris reakcióban reagálnak el a vinilcsoportok, úgy térhálós rendszerek nyerhetők.

Tri- és monofunkciós (trimetilolpropán-trimetakrilát és sztírol) komonomerek emulziós polimerizációjával reaktív nanorészecskéket állítottunk elő. A reaktív csoportok arányát és a polimerek szerkezetét H-NMR spektroszkópiával [1], a részecskék méretét és méreteloszlását fényszórás fotometriával, transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkóppal analizáltuk. A vizsgálatok azt mutatták, hogy a részecske méret a trifunkciós monomer mólarányától függ. A térhálósító monomer mennyiségének növekedésével a részecskeméret csökken, mivel a reaktív csoportok intramolekuláris reakcióban elreagálnak és térhálós rendszer alakul ki. A polimerek terminiciálással térhálósíthatóak. Termoreaktivitásukat differenciális pásztázó kaloriméterrel (DSC) vizsgáltuk.

- [1] Stoye, D., Freitag, W., *Paints, Coatings and Solvents*, E. Urbano, Section 3.2, Wiley-VCH, Weinheim, 105 (1998)
[2] Latiff, A.H., Sabine, H.D., Rafael, L.B., *Dental materials*, 20, 513-521 (2004)
[3] Lai, J.H., Johnson, A.E., Douglas, R.B., *Dental materials*, 20, 570-578 (2004)
[4] Szalóki, M., Bukovinszki, K., Hegedűs, Cs., Borbély, J., *Műanyag és Gumi*, 8, 250-254 (2003)

Pókselyem modellpeptidek: az [(AG)₄EG]₁₆ térszerkezet vizsgálata

Palló Anna, IV. évf. vegyész hallgató

Pohl Gábor, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Perczel András** egyetemi tanár
ELTE Szerves Kémia Tanszék

Tekintve, hogy a [(AG)_xEG]_y összetételű peptidek vizsgálata nem minden esetben végezhető el kielégítően a klasszikus szerkezetkutató módszerekkel, a kísérleti eredmények alátámasztása, valamint a kísérleti és elméleti eredmények összevetése céljából elvégeztük az [(AG)₄EG]₁₆ modellpeptid részeinek kvantumkémiai szerkezetanalízisét. Elsődleges célunk a korábban feltételezett ismétlődő szekvenciájú polipeptidek összes lehetséges kanyar konformációinak feltérképezése, valamint a polipeptid különböző szerkezetei közötti stabilitásbeli különbségek felvázolása volt. Külön számításokat végeztünk a peptid különböző másodlagos szerkezetű részeire, majd összefűztük a β-redőzött rétegeket az α- és β-kanyarokkal, így megkaptuk az [(AG)₄EG]₁₆ polipeptid különböző szerkezeteinek potenciális energiáját. Az eddigi eredmények szerint az Ala-Gly-Glu-Gly-Ala-Gly szekvenciájú, II. típusú β-kanyar a legvalószínűbb szerkezet, ami jól egyezik a korábbi feltevésekkel.

Glükóz-oxidáz enzim adszorpciós immobilizálása alumino-szilikát részecskék felületén, glükóz szenzor építés céljára

Hajdú Angéla, IV. évf. klinikai kémikus hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Szekeres Márta egyetemi adjunktus
SZTE Kolloidkémiai Tanszék

A Kolloidkémiai Tanszéken vércukor analízis céljára glükóz szenzort építettünk, amelynek szerkezete szilárd részecske-szuszpenzióban diszpergált kötőanyag, térhálósító polimer, glükóz-oxidáz enzim (GOD) és ferrocén-monokarbonsav (FMC) mediátor volt, pH=7,07 foszfát puffer jelenlétében. Az ilyen összetételű tömény szuszpenziókat vékony rétegben vittük fel aranyréteggel bevont mikroszenzor alaplapra, amelyen a glüklóoldatok rácseppentésekor keletkezett áramot mértük amperometriás módszerrel. A szenzor összetételéhez négy különböző szilárd hordozót és több polimer adalékanyagot teszteltünk. A glükózkoncentráció kalibrálására alkalmas szenzorokat alumino-szilikát hordozó használatával volt lehetséges építeni.

Tudományos Diákköri dolgozatomban kísérleti úton információkat gyűjtöttem arra vonatkozóan, hogy a szenzor komponensei milyen kölcsönhatásba lépnek a szenzorréteg szilárd mátrixát alkotó alumino-szilikát részecskékkel. A vizsgálatokat az adalékanyagok hatására bekövetkező elektrokinetikai potenciálváltozások mérésével végeztem. Az alumino-szilikát részecskék vizes szuszpenzióiban mértem az elektrokinetikai potenciált dinamikus fényszórásmérő berendezés mikroelektroforézis cellájában, az ionerősség (a KCl háttéreltrolit koncentráció 0,005, 0,05 és 0,2 volt) és a pH (pH= 4-9 tartományban) függvényében. Meghatároztam az elektrokinetikai potenciál változását a GOD koncentráció fokozatos növelésével. Ezzel a módszerrel lépésenként kezdtem el felépíteni a szenzor összetett rendszerét a komponensekből. A méréseket elvégeztem pH=7 foszfát puffer jelenlétében is.

Vizsgálataim eredményeként megállapítottam, hogy az alumino-szilikát részecskék permanens, pH-tól független negatív töltést hordoznak, így a pH=9 és pH=7 közegben negatív töltésű (*Asparagillus Niger* eredetű) GOD nem kötődik elektrosztatikai erőkkel az adszorbenshez. Immobilizációja feltehetően a részecske térhálóban való csapdázás útján volt lehetséges. A pH=4 közegben, ahol a GOD töltése pozitív, csökkentette legjobban a GOD jelenléte az alumino-szilikát elektrokinetikai potenciálját, ez alátámasztotta az elektrosztatikai vonzáson alapuló adszorpciós mechanizmust.

Reakciókinetika és katalízis tagozat

Klórtartalmú etán- és etilénszármazékok lebontása katalitikus hidrodeklórozással

Kollár Márton, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Halász János egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A kétszénatomos klórozott szénhidrogéneket az iparban széles körben alkalmazzák kedvező fizikai, kémiai tulajdonságaik miatt; jó zsírolószerek, vegytisztításra, extrahálószerként, hígítóként használják a festék- és lakkiparban. Illékonyaságukból adódóan üvegházhatású gázokként károsítják az ózonpajzsot és az élő szervezetekben felhalmozódva toxikus, karcinogén hatást fejthetnek ki. Ártalmatlanításuk a modern környezetvédelem egyik legfontosabb feladata. Átalakításukra olyan módszereket kell keresnünk, melyek minimális energiabefektetést, egyszerű reakciókörülményeket, olcsón előállítható katalizátorokat igényelnek.

Dolgozatomban ezen utóbbi módszer lehetőségeit mutatom be. A katalitikus hidrodehalogénezési folyamatokban a klórtartalmú szénvegyület közepes hőmérsékleten (250-400 °C-on) hidrogén vagy hidrogénező ágens jelenlétében hidrogén-kloriddá, telített vagy telítetlen szénhidrogénné, illetve az iparban hasznosítható kevesebb klórt tartalmazó vegyületekké bontható le. Célunk minél hatékonyabb, szelektíven működő, hosszú élettartamú, gazdaságos katalizátort találni.

Modellvegyületeként a két szénatomot tartalmazó klórozott szénhidrogéneket, az 1,2-diklóretánt (DCE), az 1,1,2,-triklóretánt (TrCE), az 1,1,2,2,-tetraklóretánt (TCE), a triklóretilént (TrCE=) és a perklóretilént (PCE) használtunk. A reakciókat Fe-, Ni- vagy Co-tartalmú egyféműs, illetve kétféműs, SiO₂ hordozóra vitt katalizátorok jelenlétében, áramlásos rendszerben tanulmányoztuk, GC analízis felhasználásával

Mérési eredmények alapján megállapítottuk, hogy az átalakulás mértékét és szelektivitását nemcsak a reakciókörülmények (katalizátor, hőmérséklet, reaktánsarány), hanem az alaplomolekula telített vagy telítetlen volta is meghatározza, ugyanis adott katalizátorokon hasonló feltételek mellett a telített komponensek lényegesen nagyobb mértékben alakulnak át, mint a megfelelő telítetlen származékok. Számításaink szerint ez az olefinmolekula erős adszorpciójából következik, ami az aktív fémcentrumokon játszódik le, és így ezek blokkolását eredményezi.

Kobalt- és nikkeltartalmú szilikagél hordozós katalizátorok jelenlétében nagymértékű, szelektív lebontást sikerült elérnünk, az optimális reakcióparaméterek meghatározására irányuló kísérleteink folyamatban vannak.

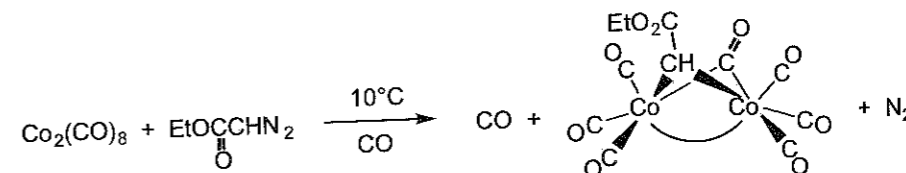
Oktakarbonil-dikobalt és etil-diazoacetát reakciójának vizsgálata

Fördös Eszter, IV. évf. vegyész hallgató

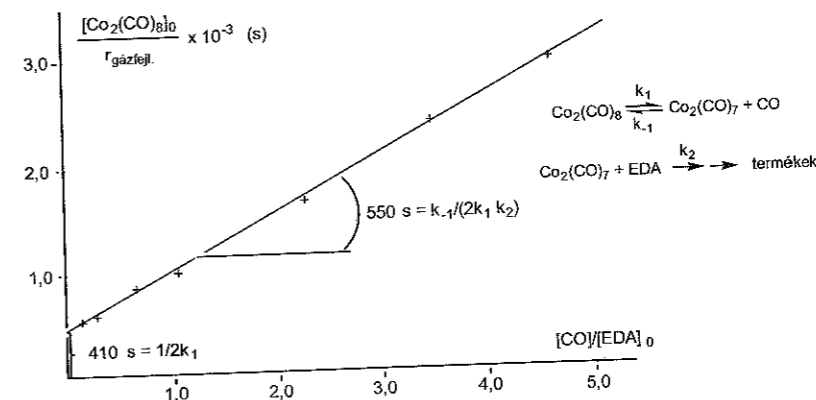
VE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Ungváry Ferenc egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

Az irodalomból ismert, hogy oktakarbonil-dikobalt és etil-diazoacetát (EDA) reakciójában szén-monoxid atmoszférában gázfejlődés kíséretében egy híd-helyzetű etoxi-karbonil-karbén ligandumot tartalmazó új dikobalt karbonil komplex képződik [1].



Dolgozatomban e reakció mechanizmusának tisztázását tűztem ki célul reakció kinetikai vizsgálatok segítségével. A mérési pontok egy Co₂(CO)₇ intermedierért versengő visszaalakulási (k₋₁) és termékképzési (k₂) reakciót feltételezve egy egyeneshez vezetnek, ahol a tengelymetszetből az intermedierhez vezető reakció sebességi állandója (k₁) a meredekségből pedig k₁ kiszűrésével a versengő reakciók sebességi állandóinak hányadosa (k₋₁/k₂) számítható.



A valószínűsített mechanizmus figyelembevételével sikerült a komplex kitermelését javítani.

[1] Tuba, R., Ungváry, F., *J. Mol. Catal. A: Chemical*, 203, 59-67 (2003)

GaAs félvezető kristály többlet arzén tartalmát meghatározó felületi reakciók vizsgálata

Végh Eszter Mária, I. évf. általános orvostan hallgató

KDOSZ

Témavezető: Dr Kunsági-Máté Sándor egyetemi docens
PTE Általános és Fizikai Kémia Tanszék

A napjainkban létfontosságú szerepet betöltő félvezető anyagok közül a gallium-arzenid (GaAs) az egyik legismertebb. Annak ellenére, hogy a GaAs-ból nehezebb és drágább mikrocsipeket gyártani, mint szilíciumból, a GaAs alapú félvezetők alkalmazása a magas működési hőmérsékleten is alacsony zajszintnek köszönhetően különösen optoelektronikai eszközökben széleskörűvé vált. A sztöchiometrikus GaAs félvezető réteget általában 600°C körüli hőmérsékleten növesztik. Ezen anyag elektromos paraméterei a növesztési hőmérsékletnek 200°C – 400°C közötti intervallumba csökkentésével (Low-Temperature grown, LT-GaAs) majd az ezt követő hőkezeléssel tovább szabályozhatóak. Az LT-GaAs réteg érdekes elektromos és optikai tulajdonságait a kristályrácsban többletként jelenlevő As atomok (As_{ex}) okozzák. Az arzéntöbblet kialakulásáért felelős elemi felületi reakciók ezideig nem pontosan ismertek. Az LT-GaAs rétegek As_{ex} tartalma a növesztési hőmérséklettel inverz összefüggést mutat [1,2]. A növesztési hőmérséklet 200 °C-ra csökkenésével - a rétegek arzéntöbblete 1,5%-ig emelkedik. Így az LT-GaAs rétegek As_{ex} koncentrációja sokkal magasabb, mint az egyensúlyi fázisdiagramok alapján várható érték (ez legfeljebb 0,1%), következésképpen ezt nem lehet egyszerű termodinamikai sajátságként tárgyalni [3]. A növekedési hőmérséklet és az As_{ex} tartalom között megfigyelt inverz összefüggés azt mutatja, hogy kell lennie egy olyan atomi szintű folyamatnak, ami a hőmérséklet emelkedésével csökkenti az As_{ex} képződésének valószínűségét. Egy ilyen folyamatban az As atomok először bejutnak a kristályba, majd egy részük eltávozik onnan. Természetesen magasabb hőmérsékleten több az eltávozó As atom, így a kristály As többlete magasabb hőmérsékleten kisebb lesz. Mindez a GaAs kristály és a benne lévő As atomokra nézve egy, a hőmérséklet és a mikrokozmoszt által szabályozott disszociációs reakcióhoz hasonlítható. Korábbi tapasztalataink felhasználásával [4,5] jelen munkánk során felépítettünk és kvantumkémiai módszerekkel megvizsgáltunk egy lehetséges modellt az arzéntöbbletet kialakító felületi reakciók leírására.

[1] Suda, A., Otsuka, N., *Surf. Sci.*, 458, 162 (2000)

[2] Kunsági-Máté, S., Marek, T., Schür, C., Strunk, H.P., *Surf. Sci.*, 515, 219-225 (2002)

[3] Kunsági-Máté, S., Schür, C., Marek, T., Strunk, H.P., *Phys. Rev. B*, 69, 193301-4 (2004)

[4] Kunsági-Máté, S., Végh, E., Nagy, G., Kollár, L. *J. Phys. Chem. A*, 106, 6319-6324 (2002)

[5] Kunsági-Máté, S., Végh, E., Nagy, G., Kollár, L. *Chem. Phys. Lett.*, 388, 84-88 (2004)

Alakszelektív reakciók funkcionizált MCM-41 katalizátorokkal

Nagy Mariann, V. évf. kémia-angol szakos hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: Rác Bulcsú tudományos segédmunkatárs
SZTE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Molnár Árpád egyetemi tanár
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A szilárd katalizátorok sok, a homogén fázisú analógokkal szembeni előnyös tulajdonsága (környezetvédelmi szempontok, könnyű kezelhetőség, újrafelhasználás és gazdaságossági tényezők) indokolja az ezekkel kapcsolatos kutatások kiterjedt voltát. Ehhez a témakörhöz kapcsolódva tanulmányoztuk felületmódosítással készült, szulfonsavas MCM-41 katalizátorok alakszelektív reakcióiban történő alkalmazási lehetőségeit.

Három különböző pórusméretű katalizátort készítettünk [1], ahol az alapváz előállítás után utólagos módosítással (grafting technika) a felületen propil-tiol-csoportokat alakítottunk ki. Ezt követő oxidációval hoztuk létre a felületi szulfonsav-funkciókat. A nyert katalizátorokat röntgendiffrakcióval, N_2 adszorpcióval, Raman- és DRIFT-spektroszkópiával, transzmissziós elektronmikroszkópiával és sav-bázis titrálással jellemeztük. Megállapítottuk, hogy az MCM-41 hexagonális szerkezete a funkcionizálás eredményeként lényegesen nem változott, ugyanakkor a pórusméret csökkenése következett be.

A katalizátorok aktivitását Friedel-Crafts-alkilezéssel, az alakszelektív tulajdonságokat 1,2-diolok átrendeződésével (2,3-butándiol, pinacol), a *transz*-sztilbén-oxid gyűrűnyitási reakciójában, valamint aromás aldehidek gyűrűs acetálképződésével vizsgáltuk. Általánosságban elmondhatjuk, hogy a katalizátorok kielégítő aktivitást és szelektivitást mutattak, és szignifikáns eltérések mutatkoztak a különböző pórusméretű katalizátorok esetén attól függően, hogy az átmeneti termékek milyen térigénnyel rendelkeznek. További fontos, értékes információkat nyertünk a termékeloszlások változásából is.

[1] Choi, J.S., Kim, D.J., Chang, S.H., Ahn, W.S., *Appl. Catal., A*, 254, 225 (2003).

[2] Hall, S.R., Fowler, C.E., Lebeau, B., Mann, S., *Chem. Commun.*, 201 (1999).

Malonsav–Ce(IV) rendszer tömegspektrometriás kinetikai vizsgálata

Stéger Ádám, IV. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Dózsa László** egyetemi docens
DE Fizikai Kémia Tanszék
Dr. Gáspár Vilmos tudományos tanácsadó
DE Fizikai Kémia Tanszék

A Ce⁴⁺–malonsav reakció a nem lineáris kinetikájú rendszerek körébe tartozó B–Z reakciócsalád egyik részfolyamata. Célul tűztük ki, hogy a folyamat során keletkező és reagáló gázok mennyiségének vizsgálatával elemezzük a reakció kinetikáját.

A reakciók lejátszódását egy Pfeiffer kvadrupól tömegspektrométerrel membrán betáplálásos technikával, a Ce⁴⁺ fogyását spektrofotometriásan Hitachi U-2000-es spektrofotométerrel követtük.

A tömegspektrometriás vizsgálatok során a CO₂ és az O₂ koncentrációjának változását figyeltük. A CO₂ oldott mennyisége, eleinte gyorsan, majd lassúbb ütemben nő egy telítési értékig. Az oxigén először hirtelen fogy, majd hosszabb ideig nem változik a reakció harmadik szakaszában nő majd telítésbe hajlik. A széndioxid jele már nem változik, mikor az O₂ mennyisége el kezd emelkedni.

Megvizsgáltuk a reakció viselkedését oxigénmentes és oxigénnel dúsított oldatokban is. Oxigén hiányos közegben az O₂ jel gyakorlatilag a háttérnek megfelelő marad, viszont CO₂ fejlődés tapasztalható annak megfelelően, hogy a Ce⁴⁺ közvetlenül oxidálja a malonsavat. Azt tapasztaltuk, hogy növelve a kezdeti O₂ mennyiséget nő a fejlődő CO₂ aránya is.

Megvizsgáltuk a reaktáns koncentrációk változásának hatását a gázfejlődési (elnyelődési) görbékre.

A spektrofotometriás mérések szerint a Ce⁴⁺ a reakció során monoton csökken, tehát nincs olyan részlepcs, amelyben az Ce³⁺-ból visszaalakulna.

A kísérleti tapasztalataink a korábbi eredményekkel kvalitatíven összhangban vannak [1]. A kvantitatív értékeléshez az eddigi vizsgálatokból, és az irodalomban összegyűjt ismeretanyagok alapján modellszámítások készülnek.

[1] Hegedüs, L., Försterling, H.D., Wittmann, M., Noszticzius, Z., *J. Phys. Chem. A*, 104, 9914-9920 (2000)

1-Hexén homogénkatalitikus hidroformilezése diffúziókontrollált tartományban

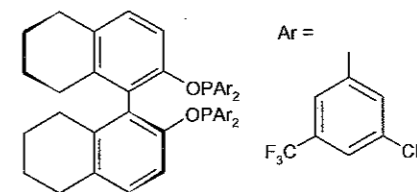
Balogh Szabolcs, V. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Bakos József** egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék
Madarász József doktoráns
VE Szerves Kémia Tanszék

A lineáris és elágazó láncú aldehidek termelésére a terminális olefinek hidroformilezési reakciója az ipar által legelterjedtebben alkalmazott homogénkatalitikus eljárás. Olcsó és gazdaságos eljárás kidolgozása a lineáris aldehidek előállítására nagy jelentőségű, ugyanis ezek felhasználásával évente több millió tonna fontos zsíralkoholt, zsírsavat illetve felületaktív anyagot nyernek.

A hidroformilezési reakciót megelőzi a szintézisgáz komponensek gáz/folyadék határfelületen történő átlépése. Ha a kémiai reakció sebessége meghaladja a komponensátadás és az oldatbeli diffúzió sebességét, akkor az oldatban a szintézisgázra kiéhezett állapot jön létre. A kimagasló aktivitású katalizátorrendszereknél a kémiai reakció diffúziókontrollálttá válik. A homogénkatalitikus hidrogénezés néhány esetére azt tapasztalták, hogy a komponensátadási tényező megváltoztatásával - azonos kísérleti körülmények mellett - jelentősen változik a katalizátorrendszer szelektivitása is [1].



Terminális olefin, 1-hexén hidroformilezését vizsgáltam. A diffúzió regio szelektivitásra gyakorolt hatásának feltérképezésére Rh(acac)(CO)₂ és (S)-2,2'-bisz[[di(3,5-bisz(trifluorometil)fenil)-foszfinil]oxi]-5,5',6,6',7,7',8,8'-oktahidro-1,1'-binaftil felhasználásával *in situ* előállított katalizátorrendszert alkalmaztam.

[1] Yongkui, S., Landau, R. N., Wang, J., LeBlond, C., Blackmond, D. G., *J. Am. Chem. Soc.*, 118, 1348 (1996).

Immobilizált réz-aminosav komplexek előállítása és vizsgálata

Korbély Barbara, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Hernádi Klára** egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
Dr. Labádi Imre egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A közelmúltban sok kutatócsoport tűzte ki célul olyan enzimutánzó komplexek előállítását, amelyek valamilyen módon egy szilárd hordozó felületén rögzítve vannak. Szerencsés esetben az immobilizált komplexek megtartják a szabad komplex előnyös tulajdonságait, s mindemellett további előnyökkel is rendelkeznek; a reakcióközgeből könnyen eltávolíthatók, majd újrahasznosíthatók; az immobilizálás hatására nőhet a katalizátor stabilitása és élettartama, valamint szélesebb hőmérséklettartományban és változatos körülmények között lesz használható. Az AKKT előzetes kutatásai során különféle aminosav-tartalmú komplexek megkötésére alkalmazott szilárd hordozók: különböző zeolitok, rétegszilikátok, illetve szilikagél voltak.

Jelen munkánk során polisztirol gyantán kötött komplexeket próbáltunk lépésenként felépíteni, melyek működésükben a szuperoxid-dizmutáz enzimhez (SOD) hasonlóak. Feltételezésünk szerint a flexibilis gyanta olyan környezetet biztosíthat a komplexeknek, amelyek igen hasonló lehet az enzimbeli környezethez.

Kísérleteinkben divinil-benzollal térhálósított klórozott polisztirol gyanta hordozóval és metilészter- (OMe) vagy tercbutiloxi-karbonil- (BOC) védőcsoporttal ellátott aminosavakkal dolgoztunk; a szintézisek során vizes és szerves (izopropanol illetve toluol) közegben is megpróbáltunk Cu^{2+} központú aktív komplexeket előállítani. A szintéziseket az ún. „ship in a bottle”-technikával végeztük, mely során az első lépésben az aminosavat szabad funkciós csoportján keresztül a gyantához kovalensen kötöttük, majd ezután fokozatosan építettük fel a komplexet.

Az előállított mintákat vizsgáltuk termogravimetriás mérésel, SOD-tesztreakcióval és kataláz-aktivitás mérésel, valamint infravörös spektroszkópiával. Meghatároztuk a Cu^{2+} - és N-tartalmat, ESR vizsgálattal pedig a komplex szerkezetéről kaptunk információkat.

Az eredmények alapján megállapítottuk, hogy (i) szerves közegben kialakul az általunk várt komplex, és annak szerkezete nagymértékben hasonlít a modellezni kívánt SOD enzim prosztetikus csoportjához, (ii) az aminosavakon védőcsoporttal ellátott komplexek SOD-aktivitást mutattak, a kataláz-aktivitási tesztreakcióban azonban nem hatékonyak.

Az oxálsavas BZ oszcillátor reakcióinak vizsgálata és modellezése

Lovrics Klára, IV. évf. biomérnök hallgató

BME Vegyész-mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Noszticzius Zoltán** egyetemi tanár
BME Kémiai Fizika Tanszék
Dr. Wittmann Mária egyetemi docens
BME Kémiai Fizika Tanszék

A nemlineáris dinamikai jelenségek egyik igen fontos példája a Belouszov-Zsobotyinszkij reakció, amelyet ezért intenzíven tanulmányoznak. Nemrég kiderült, hogy a klasszikus malonsavas BZ rendszer egyik köztiterméke az oxálsav. Céloom az oxálsav szerepének felderítése, és ezt tisztán oxálsav szubsztrátumú BZ rendszer tanulmányozásával kezdtük. Bár a rendszert többen vizsgálták, mégis realiztikus modellezésre eddig nem volt lehetőség a részreakciók hiányos ismerete miatt.

Célkitűzésem a hiányzó reakciók felderítése, és a kapott eredmények felhasználása a számítógépes modellezésben. A mostani mérésorozattal magát az oxálsavas BZ oszcillátort és annak négy részfolyamatát vizsgáltam azzal a szándékkal, hogy ezek sebességi állandóit meghatározzam.

Első lépésként megismételtem az oxálsavas oszcillációt 1M H_2SO_4 -ban és 20°C-on. Erre azért volt szükség, mivel a modellünkben felhasználni kívánt irodalmi adatok ezekre a körülményekre vonatkoznak.

A mi oxálsavas rendszerünkben a brómkihajtás nitrogénárammal történik, ez a fizikai folyamat pedig egy elsőrendű bomlásként fogható fel. Ennek a sebességi állandója volt az első fontos dinamikai paraméter, amit megmértem.

Ezután az oxálsavas oszcillátor részreakcióit kezdtük el tanulmányozni: három oxibrom részecskének (savas bromát, brómosav és hipobrómosav) az oxálsavval való reakciójának sebességi állandóit mértük, illetve modelleztük. A kapott eredményeket a korábbi irodalmi adatokkal együtt beillesztettük a modellünkbe, és számítógépes szimulációkat végeztünk.

A szimulációkat és a kísérleteket egybevetve megállapítható, hogy a modell sok szempontból jól közelíti a valóságot, ugyanakkor vannak jelentős eltérések is. Ez annak tulajdonítható, hogy számos további részreakció (pl. a karboxil gyök vagy a bróm atom reakciói) még nem kellően ismert, ezeket további kutatásokkal kívánjuk felderíteni.

Jód-ferrocén homogénkatalitikus karbonilezése aminosav-észterek jelenlétében

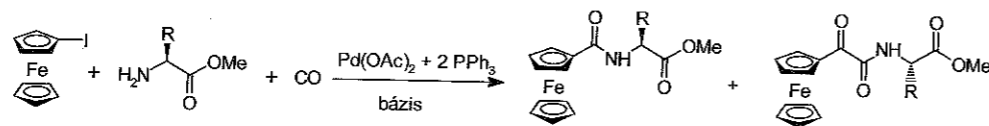
Balogh János, V. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: Skodáné dr. Földes Rita egyetemi docens
VE Szerves Kémia Tanszék

A ferrocénvázhoz kapcsolt aminosavak előállítása biokémiai szempontból is jelentős tématerület, hiszen a peptidlánc továbbépítésével gyakorlati szempontból fontos molekulákhoz juthatunk. Ferrocént tartalmazó nagyméretű proteinek redox közvetítőként működnek biológiai rendszerekben. A ferrocén és az aminosav közötti kapcsolat kiépítésére két homogénkatalitikus módszert alkalmaztak eddig [1,2], ezek között azonban nem találunk példát ferrocenoil-aminosavak palládium katalizált szintézisére.

Diákköri munkám során különböző ferrocénvázas aminosav-észtereket állítottam elő jód-ferrocénből kiindulva. A kapott vegyületeket tiszta állapotban kinyertem, szerkezetüket különböző spektroszkópai módszerekkel igazoltam. Módszert dolgoztam ki a továbbépítésre alkalmas, szabad karbonsav-származék előállítására.



A reakciókörülmények változtatásával sikerült teljesen új vegyületeket, a megfelelő ketoamidokat is előállítanom. Ez utóbbi reakciók esetében két új melléktermék keletkezését tapasztaltam, melyek szerkezetét izolálás után különböző spektroszkópai módszerekkel igazoltam és javaslatot tettem képződésük mechanizmusára.

[1] Eckert, H.; Siedel, C. *Angew. Chem., Int. Ed. Eng.*, 25, 159-160 (1986)

[2] Jackson, R.F.W.; Turner, D.; Block, M.H., *Synlett*, 862-864 (1996)

Naftalin szelektív alkilezése 3-pentanollal, elméleti számítások és kísérletek H-Y(FAU) zeolitkatalizátor alkalmazásával

Vass Laura, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: Dr. Halász János egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
Dr. Tasi Gyula egyetemi docens
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A 2,6-dialkil-naftalinok szelektív szintézise évtizedek óta kiemelt kutatási terület, napjainkig folynak a gazdaságos megoldásra irányuló fejlesztési munkák. Ezek a komponensek ugyanis az előnyös tulajdonságokkal rendelkező poli-(etilén-terenaftenát) típusú műanyagok kiindulási anyagaként, illetve folyadékkristály tulajdonságaikból eredően keresett termékek. Előzetes elméleti megfontolásaink alapján abból indultunk ki, hogy a jelenleg használt, diizopropil-, ill. ditercbutil-naftalint előállító katalitikus eljárásokhoz képest nagyobb szelektivitás érhető el az alkilező ágens alkalmas megválasztásával. Alkilező ágensnek kiindulásként a szimmetrikus 3-pentanolt választottuk, természetesen számolva az átmeneti termékek izomerizációjával.

A várható termékekre, az 1- és 2-(1-etilpropil)- ill. az 1- és 2-(1-metilbutil)-naftalinra, továbbá a 2,6- és 2,7-di-(1-etilpropil)- ill. 2,6- és 2,7-di-(1-metilbutil)-naftalinra, konformációs analízist végeztünk ab initio (HF, MP2) módszerekkel. A molekulaalak meghatározása után a jellemző méreteket paraméterbecsléssel számítottuk, ezek bizonyították, hogy a 2,6- és a 2,7-dialkil-naftalin izomerek mérete és alakja között jelentős különbségek vannak, melyek az alkilcsoport méretével nőnek. A 2,6-DEPN kinetikus átmérője leginkább az Y(FAU) zeolit pórusméreteivel korrelál (a 2,7-DEPN izomer viszont nem fér el a csatornában), így a savas centrumokkal rendelkező H-Y(FAU) katalizátoron az alakszelektivitás jelentős növekedése várható.

A kísérleteket autoklávban 150 °C-on, illetve állóágyas reaktorban 150-200 °C-on végeztük különböző oldószerekben és naftalin/3-pentanol reaktánsarányoknál. Az analízis, mely önmagában is komoly probléma a témával foglalkozók körében, GC-FID-del történt; a termékek azonosításához irodalmi adatokra, GC-MS vizsgálatokra és saját megfontolásainkra támaszkodtunk.

Eddigi eredményeink szerint a 2,6-DEPN szelektív képződése az adott katalizátoron a reaktánsaránytól, a reakcióidőtől és a hőmérséklettől függ. Elméleti és gyakorlati probléma, hogy – már ezen a viszonylag alacsony hőmérsékleten is – felületi krakk-reakciók eredményeként kokszképződéssel kell számolnunk, ami egyrészt a termékek mennyiségét csökkenti, másrészt az aktív centrumok blokkolásához vezet.

Jód-alkén szerkezeti részletet tartalmazó szubsztrátumok
homogénkatalitikus karbonilezési reakciói

Horváth László, III. évf. kémia-környezettan tanár szakos hallgató

PTE Természettudományi Kar

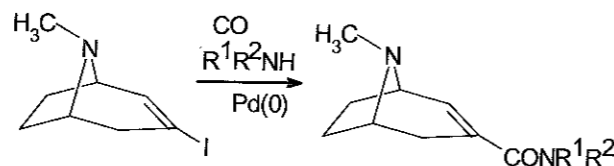
Témavezető: Dr. Kollár László egyetemi tanár
PTE Szervetlen Kémia Tanszék

A homogénkatalitikus reakciók szintetikus alkalmazása egyre szélesebb körű [1]. Ezen belül a palládium-katalizált karbonilezési reakciók számos gyakorlati jelentőségű termék szintézisének alapjául szolgálnak [2].

Tudományos diákköri munkám során palládium komplexek által katalizált aminos- és alkoxikarbonilezési reakciókkal foglalkoztam. Szubsztrátumként biológiai fontosságú keton alapvegyületekből kialakított jód-alkén származékokat használtam.

Könnyen elérhető kiindulási anyagokból, tropinonból és kámforból – hidrazon-származékukon keresztül – előállítottam a 3-jód-2-tropént és a 1-jód-kámfént. A keton–hidrazon–jód-alkén reakcióút lépéseit optimalizáltam, és gyakorlati szempontból is érdekes hozamokkal izoláltam a termékeket.

Palládium-foszfin *in situ* katalizátorok jelenlétében vizsgáltam 3-jód-2-tropén alkoxikarbonilezési és aminokarbonilezési reakcióit. Az *O*- és *N*-nukleofileket tág határok között változtattam: különböző rendű alifás alkoholok és aminok mellett fenol, ill. anilin-származékokat is alkalmaztam. Aminokarbonilezési reakcióban α -aminosav-metilészterek mint aminok felhasználásával megvalósítottam több tropán- és kámfor-vázás karbonsavamid kitűnő hozamú palládium-katalizált szintézisét, azaz a tropán (kámfor) alapváz és az aminosav szerkezeti egység összekapcsolását.



3-Jód-2-tropén alkoxikarbonilezése *in situ* kialakított Pd(0) katalizátorok jelenlétében

A fenti módszer lényege abban áll, hogy az ismert alapvázak adott pozíciójában nagy kemoselektivitással új szén-szén kötések alakíthatók ki. Az így nyert vegyületek további aktív származékok intermedierjei.

[1] Cornils, B., Herrmann, W.A. (Eds.), *Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds*, Wiley-VCH, Weinheim, (1996)

[2] Skoda-Földes, R., Kollár, L., *Curr. Org. Chem.*, 6, 1097 (2002)

Sarjadzó élesztő sejtciklusa enzimkinetikai modelljének
vizsgálata

Lovrics Anna, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Turányi Tamás egyetemi docens
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Megvizsgáltuk a Novák Béla, John J. Tyson és munkatársai által kifejlesztett enzimkinetikai modellt a sarjadzó élesztő sejtosztódási ciklusának leírására [1]. A modell 13 enzim koncentrációváltozását írja le a sejtciklus során, és 73 reakciósebességi együtthatót és egyéb paramétert tartalmaz. A modell jellemzője, hogy míg a szerkezetét, a modell alapjául szolgáló csatolt algebrai- és közönséges differenciálegyenlet-rendszert számos kísérleti bizonyíték támasztja alá, addig a paraméterek értékére közvetlen kísérleti adat nincsen.

A paraméterek értékének egyenkénti változtatásával megállapítottuk, hogy azok mely értékhatárok között fogadhatók el, ha a többi paramétert a modell szerzői által javasolt "eredeti" értéken rögzítettük. Vizsgáltuk a paraméterek értékének együttes változtatásának hatását és megállapítottuk, hogy együttes változtatás esetén az egyenkénti változtatáshoz képest jelentősen eltérő paraméterkészletek is elfogadhatók. Megadtunk egy redukált modellt, amely az eredeti 14 változó helyett csak 10 változóval és az eredeti 73 paraméter helyett csak 52 paraméterrel írja le az élesztő sejtciklusát.

Megállapítottuk, hogy a vizsgált enzimkinetikai modell legtöbb paramétere öt paramétercsoportba sorolható és ezen csoportok paramétereikhez tartozó érzékenységi függvények egymáshoz globálisan hasonlóak. Ennek az a következménye, hogy bár egyes reakciókinetikai paraméterek megváltozhatnak genetikai mutáció miatt, és ezzel megváltozhat kulcsfontosságú enzimek koncentrációprofilja, de a molekuláris szabályozórendszer alapvető szerkezete miatt ezt a hatást egy másik fontos kinetikai paraméter újabb mutáció okozta megfelelő megváltozása teljes mértékben helyreállíthatja. A javított szabályozórendszer örökölhető és ezért tartósan fennmaradhat. Első ízben mutattuk ki egy biokémiai szabályozórendszernek a reakcióérzékenységek hasonlóságában megmutatkozó molekuláris hibajavító képességét.

[1] K. Chen és munkatársai, *Molecular Biology of the Cell*, 11, 369-391 (2000)

Heterogén palládium-katalizátorok előállítása és sajátságainak vizsgálata különböző szerves kémiai átalakulásokban

Tóth Diána, okl. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: Papp Attila doktoráns
SZTE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Molnár Árpád egyetemi tanár
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékén kiterjedten foglalkoznak új típusú heterogén jellegű katalizátorok előállításával, fizikai és kémiai sajátságainak tanulmányozásával. E témakörhöz kapcsolódóan különböző hordozóra rögzített palládium-katalizátorok vizsgálatát terveztük.

A Pd-ot, valamint egyes esetekben a palládiumot bórral kombinálva eltérő módon különféle hordozóra vittük. E célra SiO₂-ot, annak felületre kötött fenilcsoporttal módosított származékát, valamint rendezett térszerkezetű, mezopórusos MCM-41 és SBA-15 típusú szilárd hordozókat használtunk. Az általunk elkészített katalizátorok aktivitását a kereskedelmi forgalomban lévő, a korábbiakban már bizonyítottan eredményesen működő katalizátorok (Pd/C, Pd-ENCAT) aktivitásával hasonlítottuk össze. A katalizátorok fizikai sajátságait BET, XRD és TEM felületvizsgáló módszerekkel tanulmányoztuk.

Egyes palládium-katalizátorokkal korábban a Heck-féle C–C kapcsolási reakcióban nyert kedvező tapasztalatok alapján [1,2] egy, a Heck-reakcióhoz jellegében közel álló fontos szerves kémiai átalakulás, a Suzuki–Miyaura-kapcsolás [3] kutatására helyeztük a hangsúlyt. Vizsgálataink során nemcsak a katalizátorok aktivitásának megismerése volt a kizárólagos cél, hanem a legideálisabb reakciókörülmény megteremtése is, beleértve az oldószerek hatását, valamint vizsgáltuk a reagensekhez kapcsolódó eltérő tulajdonságú funkciócsoportok befolyását is az átalakulásra.

A Suzuki–Miyaura-reakciót, amely viszonylag egyszerűen végrehajtható C–C kötés kialakítására szolgáló átalakulás, kiválóan elősegítik az általunk használt Pd-katalizátorok. A legmagasabb (90 % fölötti) konverziókat jód- és brómszármazékok fenilbórsavval és 4-acetilfenilbórsavval történő reakciójában sikerült elérnünk, Pd-B/MCM41 és Pd/SiO₂ katalizátorokkal, DMF és H₂O 4:1 arányú elegyében (100 °C, 4 h).

- [1] Molnár, Á., Papp, A., Miklós, K., Forgo, P., *Chem. Commun.*, 2626 (2003)
[2] Papp, A., Miklós, K., Forgo, P., Molnár, Á., *J. Mol. Catal. A: Chem.*, nyomdában
[3] Suzuki, A., *J. Organomet. Chem.*, 576, 147 (1999)

Oktakarbonil-dikobalt által katalizált trimetilszilil-diazometán karbonilezésének vizsgálata

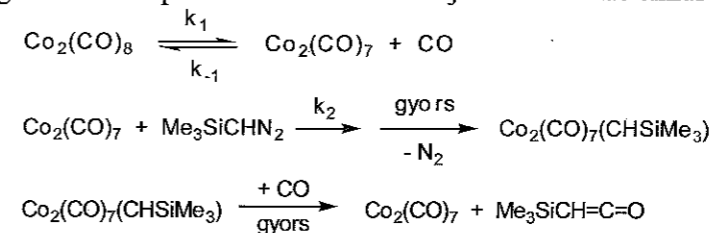
Ungvári Neszta, V. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Ungváry Ferenc egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

Korábbi vizsgálataimmal megállapítottam, hogy trimetilszilil-diazometánból (Me₃SiCHN₂) oktakarbonil-dikobalt jelenlétében légköri nyomású szén-monoxid vagy argon atmoszférában egyaránt trimetilszilil-ketén (Me₃SiCH=C=O) képződik, amely az alkalmazott kísérleti körülmények között nem alakul tovább és izolálható [1]. Vizsgálataim folytatásaként reakciókinetikai méréseket végeztem a trimetilszilil-ketén képződés mechanizmusának megállapítása céljából [2].

A kezdősebességek módszerét alkalmazva mennyiségi infravörös spektroszkópiával megállapítottam, hogy a trimetilszilil-ketén képződés sebessége egyenesen arányos a trimetilszilil-diazometán és az oktakarbonil-dikobalt koncentrációjával és fordítva arányos a szén-monoxid koncentrációjával, amely összhangba hozható egy heptakarbonil-dikobalthez vezető előegyensúly és egy azt követő sebesség meghatározó lépés elképzeléssel. A messzemenően a baloldalon lévő előegyensúly a sebesség meghatározó lépéshez képest valószínűleg gyorsan beáll. Erre az esetre fennáll az, hogy: k₁ >> k₁' > k₂. A sebesség meghatározó lépés valószínűleg a heptakarbonil-dikobalt és a trimetilszilil-diazometán viszonylag lassú reakciója, amelyet gyors N₂-vesztés és trimetilszilil-ketén-képződés követ. Az ennek során regenerálódó heptakarbonil-dikobalttal újabb katalitikus ciklus indulhat.



A fenti elemi lépésekre levezethető kinetikai egyenlet:

$$r_{\text{Me}_3\text{SiCH=C=O}} = \frac{k_1 k_2}{k_{-1}} [\text{Co}_2(\text{CO})_8][\text{Me}_3\text{SiCHN}_2][\text{CO}]^{-1}$$

formailag megegyezik a tapasztalati kinetikai egyenlettel.

- [1] Ungvári N., ITDK Dolgozat, Veszprém, Összefoglalások, 128. (2003)
[2] Ungvári, N., Kégl, T., Ungváry, F., *J. Mol. Catal. A: Chemical*, 219, 7-11 (2004)

Különféle komplexekben hasznosítható P-ligandumok szintézise

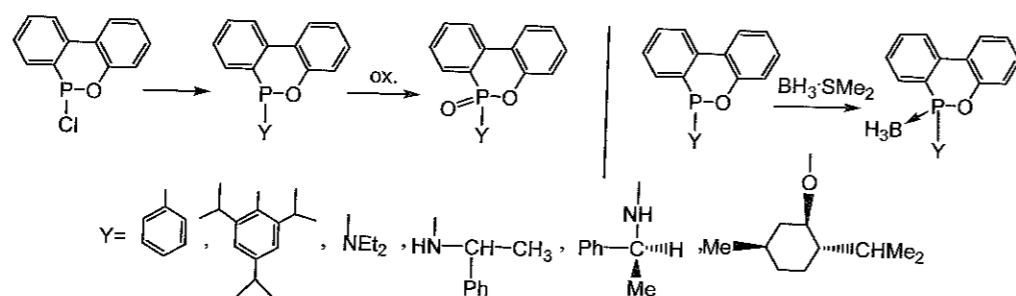
Kerényi Andrea, V. évf. vegyészmérnök hallgató
BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék
Dr. Szelke Helga tudományos segédmunkatárs
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

TDK tevékenységem során feladatomban új P-ligandumok és különféle komplexek szintézise képezte.

Elsőként 5- és 6-tagú P-heterociklusok illetve azok borán-komplexeinek előállíthatóságát vizsgáltam. Részletesebben a 2-metil-1-fenil-2,5-dihidro-1*H*-foszfol-1-oxid gyűrűbővítését tanulmányoztam.

Munkám második részében, a NIKE 2000 által rendelkezésre bocsátott P-klór-dibenzooxafoszfórinnál Grignard-reagenssel és különféle nukleofilekkel (aminokkal, enantiomertiszta (S)-(-)- α -feniletill-amminnal és (-)-mentollal) megvalósított reakcióban új akirális és királis P-ligandumokat állítottam elő. Az előállított foszfinokat oxidként és borán-komplekként stabilizáltam.



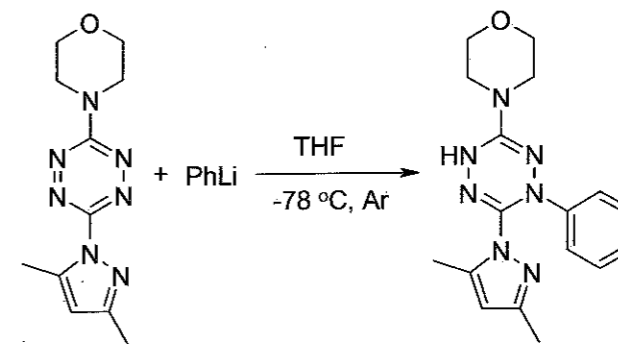
Átmenetifém katalizátorok ligandumaiként régóta alkalmaznak foszfinokat, újabban egyre több foszfinit és foszfonit egységet tartalmazó P-ligandumot. Ezért a munkám során előállított dibenzooxafoszfórinnal származékokból (foszfinitekből) diklór-dibenzonitril-platinával platina(II)-komplexeiket képeztem, melyeket a jövőben katalitikus hidroformilezési reakciókban kívánunk tesztelni.

Tetrazinszármazékok reakciója fémorganikus reagensekkel

Lőrincz Krisztián, IV. évf. vegyész hallgató
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kotschy András** egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

Annak ellenére, hogy a tetrazinszármazékokat a kémia számos területén (növényvédelem, foyadék-kristályok, robbanóanyagok, szintetikus intermedierek) alkalmazzák, elterjedésüknek gátat szab a különböző „szénalapú” helyettesítőket hordozó nem szimmetrikus tetrazinok előállítására alkalmas általános érvényű eljárás hiánya. A tetrazinok fokozott nukleofil szubsztitúciós készségét kihasználva elvben lehetőség nyílna e probléma megoldására, de fémorganikus reagensek hatására a tetrazinszármazékokon egy egyedi, úgynevezett azofil addíciós reakció játszódik le (1d. ábra).



Kutatásaim során célul tűztem ki az azofil addíció lejátszódását kiváltó tényezők feltérképezését és ezen ismeretek birtokában olyan reagensek és kísérleti körülmények kiválasztását, amelyek a tetrazinszármazékok és fémorganikus reagensek közötti átalakulást a nukleofil szubsztitúció irányába tolják el.

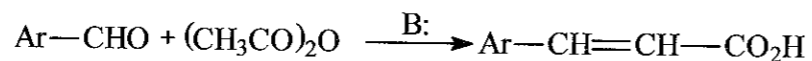
2,2,2-Trifluoracetofenon Perkin-reakciója

Cserényi Szabolcs, okl. vegyész

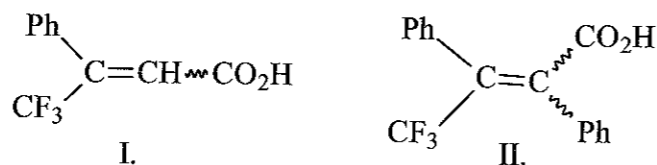
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Felföldi Károly** egyetemi docens
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A fluortartalmú vegyületek, köztük a trifluorometil-csoportot tartalmazók is, fontosak a gyógyszer- és agrokémiai iparban, mert számos különleges biológiai hatást mutatnak. A trifluorometilcsoporttal ellátott α,β -telítetlen karbonsav-észterek fontos intermedierek biológiailag aktív vegyületek szintézisében. Az α,β -telítetlen karbonsavak egyik előállítási lehetősége a Perkin-kondenzáció, amelynek hátránya, hogy csak aromás aldehidekkel megy [1] kielégítő eredménnyel:



A trifluoracetofenon az úgynevezett aktivált ketonok körébe tartozik. Számos olyan reakciója van, ami a trifluorometil-csoport aktiváló hatása miatt megy végbe. Ez miatt gondoltuk azt, hogy alkalmas szubsztrát lehet a Perkin-kondenzációban (ami ketonokkal nem megy), és a reakció eredményeként az **I**, az Ogliario módosításban a **II** vegyületnek kell képződnie:



Az **I**. vegyület mindkét izomerje ismert, a trifluoracetofenonból más típusú reakciókkal (Wittig-, Horner-Wadsworth-Emmons-, Heck-, Reformatszkij-reakció+elimináció) előállíthatók, a **II**. vegyület nem ismert.

Felvetésünk helyesnek bizonyult. A trifluoracetofenon Perkin-kondenzációja az **I**. vegyületet eredményezi, a reakció sztereoselektív, az *E:Z* izomer arány $\approx 98:2$. A kapott vegyületek fizikai adatai, spektroszkópiai jellemzői az irodalmi adatokkal megegyeznek. A Perkin-Ogliario módosítás ugyancsak pozitív eredménnyel zárult. A reakció eredményeként, bár még a pontos szerkezetmeghatározás hátra van, a **II**. vegyület *E*-izomerjét sikerült előállítani, a reakció sztereoselektív. Az új vegyület fizikai adatokkal, spektroszkópiai módszerekkel jellemeztük. Az irodalmi előzmények alapján úgy gondoljuk, hogy első ízben sikerült ketonnal Perkin-kondenzációt megvalósítani.

[1] Rosen, T., The Perkin reaction, in *Comprehensive organic synthesis* (ed. B.M. Trost), Vol.2., Pergamon Press, Oxford, 395-408 (1991)

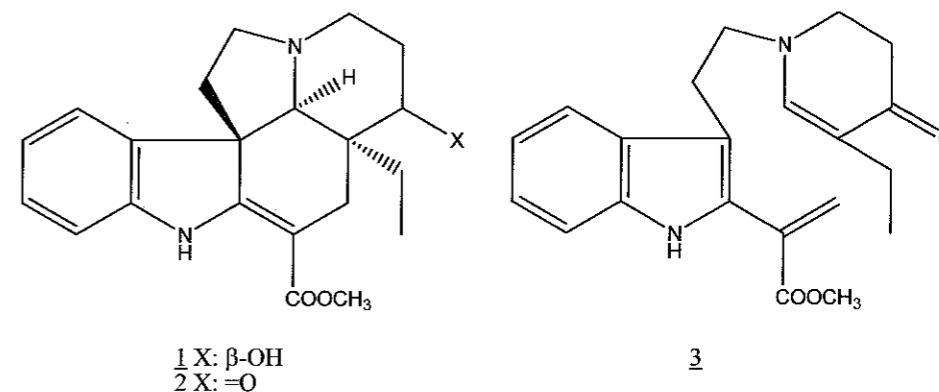
Új szintézisstratégia alkalmazása a 15- β -hidroxivinkadiformin előállítására

Tóth Flórián, okl. vegyész-mérnök

BME Vegyész-mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Kalaus György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia Tanszék

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia Tanszékén működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban új, konvergens szintézisstratégiát dolgoztak ki az aszpidospermanváz felépítésére. Eljárásukban egy alkalmasan kiépített triptamin-származékot, mint közös kiindulási anyagot reagáltattak megfelelően kiválasztott aldehidekkel, vagy aldehid ekvivalensekkel, melynek eredményeként olyan tetraciklusos észterekhez jutottak el, melyekből néhány lépésben kialakítható a célvegyület. Erre a stratégiára építve célul tűztük ki a 15- β -hidroxivinkadiformin (**1**) előállításának a megvalósítását.



A konvergens szintézis kulcsmolekulájaként választott indol-származékot egy alkalmasan kiépített aldehid ekvivalenssel reagáltattuk, de a reakcióban nem a várt termék keletkezett, hanem egy aktivált, terminális kettős kötést tartalmazó enamín. Az eredmény ismeretében kézenfekvőnek látszott az, hogy az aldehid ekvivalenst primer amino-csoportot tartalmazó triptamin-származékkal vigyük reakcióba.

Elképzelésünket siker koronázta, munkánk során eljutottunk a 15-oxovinkadiformin (**2**) és a 15-oxo- $\Delta^{20(21)}$ -szekodin (**3**) keverékéhez. A dihidro-oxoszekodin (**3**) xilolban p-toluolszulfonsav monohidrát jelenlétében végzett reakciója a 15-oxovinkadiformint (**2**) eredményezte. A karbonil-csoport regioszelektív redukciójával a 15- β -hidroxivinkadiforminhoz (**1**) jutottunk el.

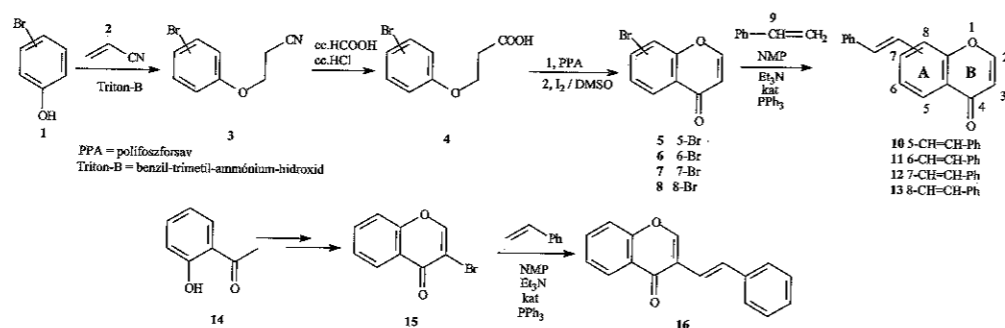
Kromonok Heck-reakciója

Vasas Attila, V. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Patonay Tamás** egyetemi tanár
DE Szerves Kémiai Tanszék

Célunk a Heck-reakció kiterjesztése volt A- és B-gyűrűben bróm szubsztituált-kromonokra, mivel ezen reakciót eddig kevésbé alkalmazták az oxigéntartalmú heterociklusok körében [1]. Az A-gyűrűben szubsztituált kromonokat négylépéses reakcióban állítottuk elő.



A 3-(3-bróm-fenoxi)-propionsav gyűrűzárása 5- és 7-bróm-kromanon keverékét adta, melyet szétválasztása eredménytelen volt. Az ennek oxidációjában képződő 5- (5) és 7-bróm-kromon (7) keverékét frakcionált kristályosítással és oszlopkromatográfiásan választottam szét. A B-gyűrűben szubsztituált 3-bróm-kromon (15) előállítása irodalmi eljárás alapján volt megvalósítható [1]. A reakciót a 3-bróm-kromon (15) és a sztírol (9) esetére optimalizáltuk. Az optimális körülményeket (N-metil-pirrolidon, trietil-amin, 2 mól% Pd(PPh₃)₄ katalizátor, 10 mól% trifenil-foszfín, 100 °C, 20 óra) a 6-bróm-kromonra (6) alkalmazva igen jó (80%) hozammal sikerült előállítanom a 6-sztíril-kromont (11). A 7- és 8-bróm-kromonnál (7,8) katalizátorcserét, hőmérséklet és a sztírol mennyiség növelését követően sikerült a 7- és 8-sztíril-kromont (12,13) előállítanom jó (97%) és közepes (41%) hozammal.

[1] Davies, S.G., Mobbs, B.E., *J. Chem. Soc. Perkin Trans. I*, 2597-2604 (1987)

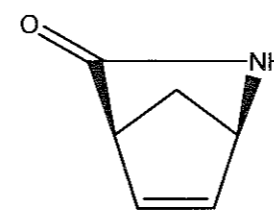
Kísérletek új homokirális karbociklusos szintonok előállítására

Mizda Roland, V. évf. vegyész hallgató

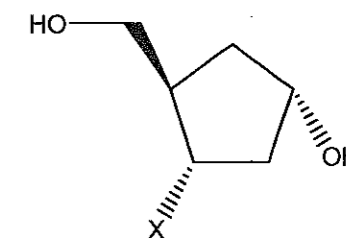
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Sági Gyula** tudományos csoportvezető
MTA BKI Nukleotidkémiai Csoport

Az utóbbi 10 évben a biokémiai kutatások előterébe kerültek az ún. karbociklusos nukleozidok, amelyekben a természetes nukleozidokra jellemző cukorgyűrűt egy 3-6 tagú szénhidrogénciklus helyettesíti. Kísérleteink fő célja új karbociklusos szintonok előállítása volt, melyhez alapanyagul az (1R, 4S)-2-azabicyclo[2.2.1]hept-5-én-3-on, egy telítetlen biciklusos laktám szolgált (1). A célvegyületek a 2 és a 3 molekulák voltak (1. ábra). A munka során kiderült, hogy a közvetlen klórbevitel nem lehetséges, így hidroxivegyület intermedieren át végeztük a szintézist. Ennek során új módszert alakítottunk ki arabino- és xilo-konformációjú (2- vagy 3-hidroxi-4-hidroxi-metil) ciklopentánok előállítására, amelyek értékes intermedierek lehetnek nukleofil szubsztitúciós reakcióval kialakítható karbociklusos szintonok előállításához.



1



2 X = OH
3 X = Cl

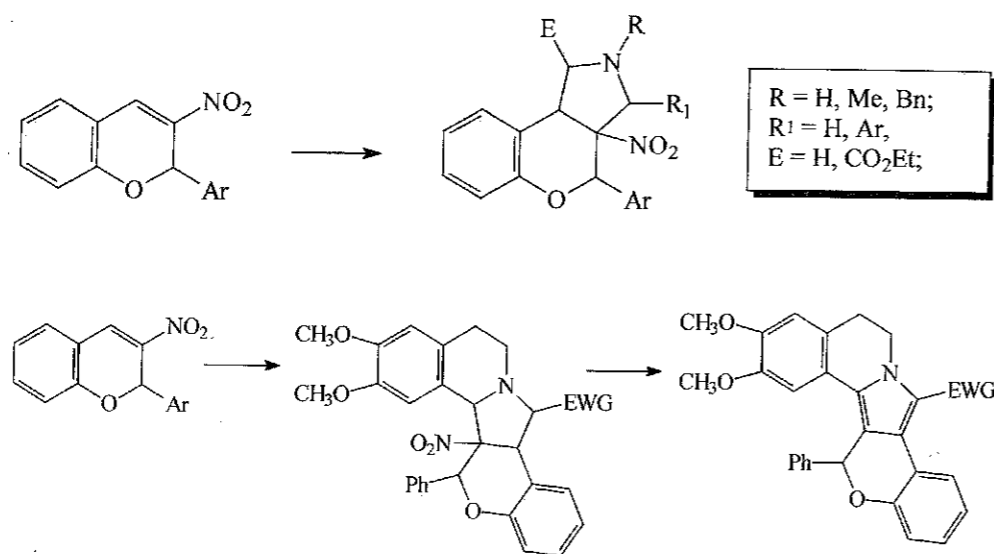
2-Aril-3-nitrokromének, mint dipolarofilek azometin-ilidek 1,3-dipoláris cikloaddíciójában

Marth Gabriella, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Nyerges Miklós** tudományos főmunkatárs
MTA BME SZKT Tanszéki Kutatócsoport
Virányi Andrea doktoráns
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Az azometin-ilidek 1,3-dipoláris cikloaddíciója megfelelő olefinekre az egyik legrövidebb és legkényelmesebb út pirrolidin-származékok gyors felépítésére. Kutatásaink során könnyen hozzáférhető kromén-származékokból kiindulva, különböző azometin-ilidek 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakcióit felhasználva új benzopirano[3,4-c]-pirrolidin származékokat állítottunk elő. A reakciók szinte kivétel nélkül jó termeléssel, sztereoselektív módon játszódnak le. A reakciók sebességét döntően befolyásolja a kromén dipolarofilhez kapcsolódó helyettesítők minősége.



Királis szelektorként alkalmazható kólsavszármazékok szintézise

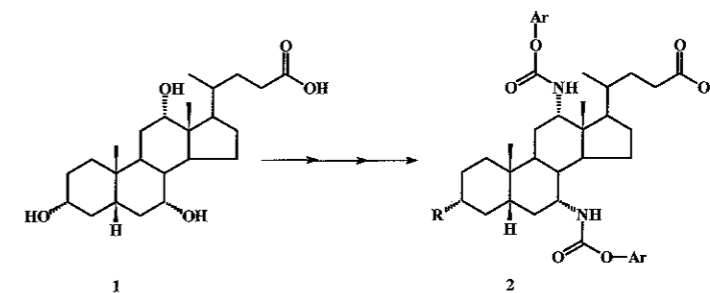
Schuster Ildikó, okl. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Wölfling János** egyetemi docens
SZTE Szerves Kémia Tanszék

Munkánk során királis szelektorként alkalmazható kólsavszármazékok előállítását tűztük ki célul. Kiindulási vegyületünk, a kólsav (**1**) 11 kiralitáscentrumot tartalmaz, olcsó, nagy mennyiségben rendelkezésre áll, mindhárom hidroxilcsoportja α -térállású, ami kedvező hatással lehet a szelekcióra, hiszen a molekula egyik felén ezáltal egy "hidrofil" kosár jön létre. Azt terveztük, hogy a molekula hidroxil-csoportjait részben, vagy teljesen amino-csoportokra cseréljük ki. A di-, ill. triamin erős asszociátumok képzésére alkalmas, továbbá lehetőséget kínál aromás uretánok előállítására, amelyek π - π kölcsönhatások révén létesíthetnek kapcsolatot a szétválasztandó enantiomerpár tagjaival.

A hidroxil-csoportokat oxidáltuk, majd a keletkező ketonokat oximmá alakítottuk. Az oxim redukciójával aminokat kaptunk, amelyeket a szénsavszármazékokkal reagáltatva megkaptuk a királis szelektorként alkalmazható vegyületeket (**2**). Kísérleteink egy részében mindhárom hidroxil-csoportot átalakítottuk ezen reakciósor szerint, ugyanakkor a 7-es és a 12-es helyzetű hidroxil-csoportok szelektív módosítása lehetővé tette egy eltérő szubsztituensnek a 3-as pozícióba történő beépítését. Irodalmi tapasztalatok alapján az aromás uretánok előnyösen befolyásolják a királis szelekciót. Azt tervezzük, hogy a későbbiekben az általunk előállított vegyületeket megfelelő szilikagél hordozóhoz kötve királis HPLC-kolonna töltetet készítünk.



Ar: 4-nitrofenil-, 3,5-dinitrofenil-, 3,5-dimetilfenil-csoport

R: -OH, -NH₂, ariloxi-karbonilamino-, arilaminokarboniloxi-csoport

Trimetilszilil-ketén és trimetilszilil-diazometán reakciójának vizsgálata

Seres Boglárka, IV. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kégl Tamás** tudományos munkatárs
VE Szerves Kémia Tanszék
Dr. Ungváry Ferenc egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

Trimetilszilil-diazometán katalitikus karbonilezésének vizsgálata során Ungváry Ferenc és munkatársai a reakció körülményeitől függő mennyiségben 2,3-bisz(trimetilszilil)-ciklopropanon és 2,3,4-trisz(trimetilszilil)-ciklobutanon izomer elegyek képződését észlelték [1,2], amely izomerek összetétele eltért az irodalomban [3,4] leírtaktól. Az eltérés okának kísérleti tisztázását és az izomerek képződésének elméleti kémiai vizsgálatát tűztem ki munkám céljaként.

Gázkromatográfiás elemzés alapján megállapítottam, hogy a trimetilszilil-diazometán és trimetilszilil-ketén reakciójának kinetikailag kontrollált terméke a *Z*-2,3-bisz(trimetilszilil)-ciklopropanon, amely termodinamikai kontroll esetén racém *E*-2,3-bisz(trimetilszilil)-ciklopropanonná izomerizálódik.

A 2,3-bisz(trimetilszilil)-ciklopropanon izomerelegy és trimetilszilil-diazometán reakciójában keletkező mindhárom lehetséges 2,3,4-trisz(trimetilszilil)-ciklobutanon izomer képződését kimutattam. Ezek közül a racém *Z,E*-2,3,4-trisz(trimetilszilil)-ciklobutanont és az előzőekben bemutatott racém *E*-2,3-bisz(trimetilszilil)-ciklopropanont királis nedvesítésű kolonnán gázkromatográfiás úton azonosítottam.

- [1] Ungvári, N., ITDK Dolgozat, Veszprém, Összefoglalások, 128 (2003)
[2] Ungvári, N., Kégl, T., Ungváry, F., *J. Mol. Catal. A: Chemical*, 219, 7-11 (2004)
[3] Zaitseva, G.S., Kisin, A.V., Novikova, O.P., Livantsova, L.I., Baukov, Y.I., *Zhur. Obshch. Khim.*, 58, 1677-1679 (1988); *J. Gen. Chem. USSR (Engl. Transl.)* 58, 1497-1498 (1988)
[4] Zaitseva, G.S., Lutsenko, I.F., Kisin, A.V., Baukov, Y.I., Lorberth, J., *J. Organomet. Chem.*, 345, 253-262 (1988)

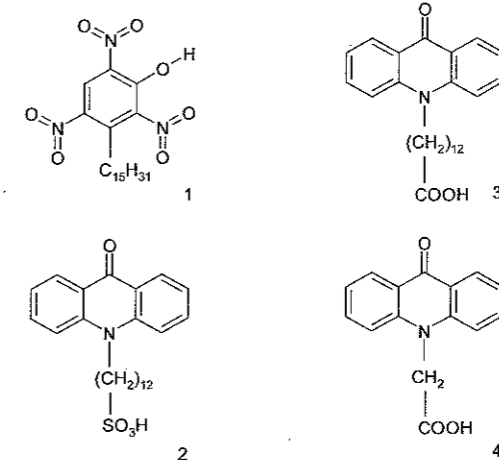
Új kromofór és fluorofór lipofil anionok szintézise, jellemzése és jelzőmolekulaként való alkalmazása

Naszályi Livia, okl. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Huszthy Péter** tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia Tanszék
Konzulens: **Dr. Gyurcsányi E. Róbert** egyetemi docens
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék

Az analitikai kémia területén az utóbbi években igen elterjedté vált a különböző jelzőmolekulák (markerek) használata. A markerek olyan vegyületek, amelyek segítségével egy adott analitikai módszerrel közvetlenül nem detektálható vegyületeket mutathatunk ki azáltal, hogy egyértelmű összefüggésbe hozzuk jelenlétüket, vagy koncentrációjukat egy jelzőmolekulával. Huszthy és munkatársai régóta foglalkoznak fluoreszcens és kromofór akridon egységet tartalmazó vegyületek szintézisével, mivel azok igen előnyös tulajdonságokkal rendelkeznek.



TDK munkám során az ábrán látható 2,4,6-trinitro-3-pentadecilfenolt (1), 12-(9-oxoakridin-10(9H)-il)dodekanszulfonsavat (2), 12-(9-oxoakridin-10(9H)-il)tridekansavat (3) és (9-oxoakridin-10(9H)-il)ecetsavat (4) állítottam elő konkrét analitikai céllal. Ezek közül 1 és 2 kromofór lipofil anionok ionszelektív folyadékmembrán elektródok aktív anyagaként kerültek felhasználásra az elektródok membránjában lejátszódó transzportfolyamatok vizsgálatában, míg 3 és 4 akridon egységet tartalmazó karbonsavak peptidkémiai jelzőmolekula szerepét töltik majd be.

Kinoidális tetrazinok reaktivitásának vizsgálata

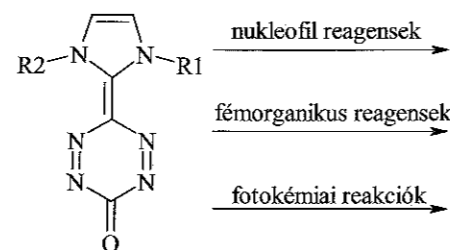
Dénes Júlia, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Bostai Beatrix** doktoráns
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék
Dr. Kotschy András egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

A tetrazinszármazékokat több mint száz éve ismeri az emberiség. Alkalmazzuk őket növényvédőszerekben, fotóipari adalékanyagokban, robbanószerekben és folyadékkristályokban is [1]. Reakcióik közül a (4+1) és (4+2) típusú cikloaddíciós reakciókat kíséri a legnagyobb figyelem, de addíciós és szubsztitúciós reakcióik is ismertek. Sokféle módszert dolgoztak ki előállításukra, de a nem szimmetrikusan szubsztituált 1,2,4,5-tetrazinoknak az előállítása csak csekély kitermeléssel jellemezhető [2].

Munkám során előállítottam jó kitermeléssel egy különleges szerkezetű, kinoidális tetrazint [3], melynek különböző reakcióit vizsgáltam heteroatomos nukleofilekkel és fémorganikus reagensekkel. Tanulmányoztam a fotokémiai bomlás mechanizmusát is, különböző oldószerekben.



R1 = R2 = 2,4,6-trimetilfenil
R1 = metil, R2 = butil

A dolgozat és az azt kísérő előadás kísérleteim eredményeit mutatja be.

- [1] Sauer, J., *Comprehensive Heterocyclic Chemistry II*. (Szerkesztette A.J. Boulton) Vol.6. Pergamon, 913, (1996)
[2] Gildewell, C.; Lightfoot, P., Royles, B.J. L; Smith, D.M., *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2.*, 1167, (1997)
[3] Bostai, B., *Nukleofil szubsztitúciós reakciók tetrazinszármazékokon*, szakdolgozat, ELTE (2003)

N-Glikánok glikozil-azidjainak szintézise

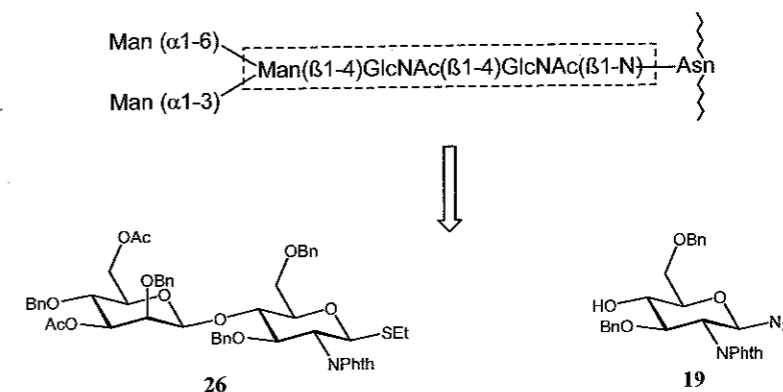
Kalmár László, V. évf. biológus, II. évf. vegyész hallgató

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kerékgyártó János** tudományos főmunkatárs
DE Biokémiai Tanszék

Az *N*-glikoproteinek szerteágazó és alapvető szerepet játszanak a biológiai folyamatokban. Ezen glikokonjugátumokban a fehérje adott aszparaginjaihoz a Man- α -(1 \rightarrow 6)-[Man- α -(1 \rightarrow 3)]-Man- β -(1 \rightarrow 4)-GlcNAc- β -(1 \rightarrow 4)-GlcNAc (I) törzs pentaszacharidon keresztül β -*N*-glikozidos kötéssel szénhidrátláncok kapcsolódnak.

Kutatócsoportunk célul tűzte ki szelektíven védett oligopeptidek és *O*-benzilezett oligoglikozil-aminok közötti kapcsolási reakciók tanulmányozását, mind a peptid, mind a szénhidrát méretének függvényében. Én feladatul kaptam a teljesen *O*-benzilezett *core*-pentaszacharid glikozil-azidjának előállítását.



Stratégiánk alapját a 3' és 6' helyzetben *O*-acetyl időleges védőcsoportot hordozó **26** diszacharid-tioglikozid szintézise képezte. A β -mannozidos kötést, a Biokémiai Tanszéken tovább fejlesztett módszerrel a megfelelő β -*D*-glükó-származék oxidációt követő redukcióval történő C-2 epimerizációjával alakítottuk ki. A rendelkezésünkre álló **19** szelektíven védett glikozil-azid és a **26** tioglikozid kondenzációja eredményezte a megfelelő a 3'' és 6'' helyzetben *O*-acetyl időleges védőcsoportokat hordozó triszacharidot. Az acetyl csoportok eltávolításával nyert triszacharid glikozil akceptor és az etil-2,3,4,6-tetra-*O*-benzil-1-tio- α -*D*-mannopiranozid kondenzációjával nyert pentaszacharid származék ftálimido csoportjainak acetamidora cserélése vezetett célvegyületünkhöz.

Aril-helyettesítőt tartalmazó 1,2,3,4,5,6-hexahidrofoszfinin-oxidok szintézise

Lengyel Dóra, V. évf. vegyészmérnök hallgató

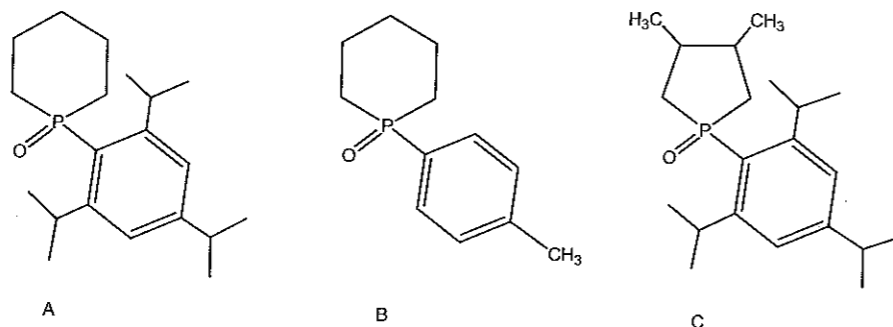
BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Konzulens: Sipos Melinda doktoráns
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

A Szerves Kémiai Technológia Tanszék foszfor-heterociklusos kutatócsoportjában az elmúlt több mint másfél évtizedben jónéhány 5-, 6-és 7-tagú foszfor-heterociklusos vegyületsalád szintézisét kidolgozták. Az eddigi munkának egyrészt szintetikus jelentősége van, másrészt várhatóan biológiai aktivitással rendelkező vegyületeket tett hozzáférhetővé.

TDK munkám során feladatomban az volt, hogy különféle 1,2,3,4,5,6-hexahidrofoszfinin-oxidokat (például **A** és **B**) készítsék többféle módszerrel, így az 1,2-dihidrofoszfinin-oxidok redukciójával, illetve a foszforfunkció megváltoztatásával és az új P-heterociklusok konformációját tanulmányozzam. Vizsgálni kívántam továbbá a hidrogénezés során fellépő váratlan gyűrűszűkülési reakciókat (lásd: **C** termék) is. Az új vegyületeket egy érdekes és új reakcióban kiindulási anyagként kívántuk alkalmazni.



1,3-Dipólusok képzése és azok cikloaddíciós reakciói a 13 α -ösztron sorban

Benedek Gabriella, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

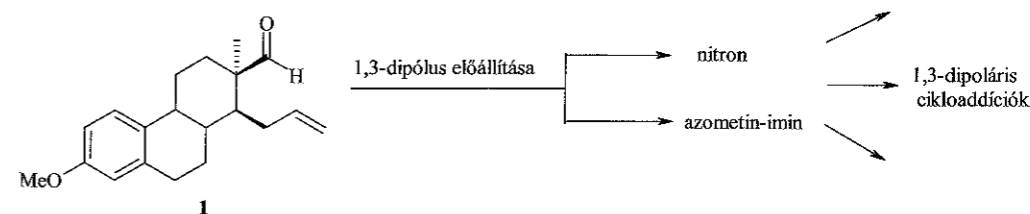
Témavezető: Dr. Mernyák Erzsébet tudományos munkatárs
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A szteránváz vegyületek a természetes szénvegyületek fontos csoportját alkotják. Növényi, állati és emberi szervezetben egyaránt előfordulnak. Sokrétű biológiai funkciót látnak el.

Az eddigi szteroidkémiai kutatások elsősorban a szteránváz szubsztituálására irányultak. Az utóbbi időben előtérbe került a szteroidok vázmódosítása is, hiszen a gyűrűrendszer anellációs szénatomjának konfiguráció-változása a konformációt is meghatározza. A konformáció változása befolyásolja a receptorkötődést, végső soron a molekula biológiai hatását.

A 13 α -ösztron D-gyűrűjének szubsztituálásával irányítható a gyűrűrendszer konformációja, ezzel befolyásolható a szteroid molekula receptorkötődése. Ennek farmakológiai jelentősége abban rejlik, hogy ily módon irányított szubsztitúcióval olyan módosított szteroidok állíthatók elő, amelyek pl. antiösztrogénként viselkedve kiszorítják a hormont a receptor aktív centrumából, és így terápiásan alkalmazhatók.

Munkánk során olyan szteroid-1,3-dipólusokat (nitron és azometin-imin) sikerült előállítanunk, amelyek 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakciók hasznos kiindulási anyagának bizonyultak. Ezen intermedierek képzését az *epi*-ösztron sorba tartozó D-szekoaldehidből kiindulva (**1**), Lewis-sav katalízissal, illetve az alkenil-oldallánra történő intramolekuláris elektrofil addícióval is sikerült megvalósítani. A cikloaddíciók eredményeként számos új nitrogén-, illetve oxigéntartalmú szteroid-heterociklust állítottunk elő.



Perfluor-tercier-butoxi csoporttal szubsztituált aminok szintézise

Mohl János, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Szabó Dénes egyetemi docens
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Az ELTE Szerves Kémiai Tanszékén az elmúlt tíz évben számos új típusú fluororganikus vegyület szintézisét és jellemzését valósították meg. Legtöbb esetben ezek szerkezetére az jellemző, hogy a fluorofiliasért egy nem elágazó perfluoralkil lánc $[\text{CF}_3(\text{CF}_2)_n]$, $n = 3, 5, 7, 9$ a felelős [1,2]. Ehhez a témakörhöz kapcsolódva diákköri munkám során olyan reagensek szintézisét tűztük ki célul, amelyek fluorofiliasát a perfluor-tercier-butyl csoport $[(\text{CF}_3)_3\text{C}-]$ határozza meg. Ez a fluoros csoport szerkezetében lényegesen eltér az előbb említettektől. Kompaktabb és elágazó. További fontos sajátossága, hogy merev és gömbszerű. Ezen tényeket alapul véve olyan különböző rendűségű aminok szintézisének kidolgozása volt a feladatom, amelyekben legalább egy perfluor-tercier-butoxi csoport $[(\text{CF}_3)_3\text{C}-\text{O}-]$ található. Az általam előállított vegyületek lehetőséget adnak az eddig ismert fluorofilias-adatbázis további bővítésére. Ennek segítségével információt nyerhetünk a fázispreferencia és a molekulaszervezet közötti összefüggés kapcsolatára, amely segítheti újabb szerkezetű fluorofil katalizátorok, ligandumok és reagensek hatékony tervezését és szintézisét.

- [1] Abulikemu, A., Halász, G., Csámpai, A., Gömory, Á., Rábai, J., *J. of Fluorine Chem.*, 125, 1143-1146 (2004)
[2] Szlávik, Z., Tárkányi, G., Gömory, Á., Tarczay, Gy., Rábai, J., *J. of Fluorine Chem.*, 108, 7-14 (2001)

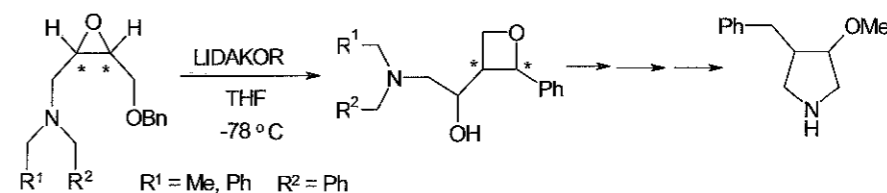
Optikailag aktív oxirán-, oxetán- és pirrolidin-származékok előállításának vizsgálata

Farkas Ferenc, V. évf. vegyészmérnök hallgató

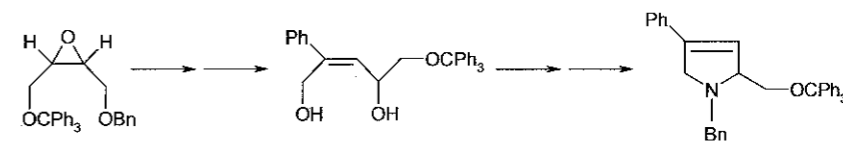
BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Thurner Angelika tudományos munkatárs
MTA Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport
Dr. Faigl Ferenc egyetemi tanár
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Az utóbbi időben a gyógyszeripar számára egyre fontosabb az optikailag aktív gyógyszermolekulák enantioszelektív szintézise. Céлом volt enantiomer tiszta oxirán-származékok előállítása és ezekből diszubsztituált-pirrolidin-, és dihidropirrol-származékok szintézise. Ezért kinetikusan rezolváltam a racém (*Z*)-2-benziloximetil-3-hidroxiometil-oxiránt, majd ebből aminosoxiránt állítottam elő, melyet LIDAKOR-ral sztereoselektív módon királis aminosoxetán-származékká rendeztem át. Ezzel párhuzamosan a racém aminosoxetánból előállítottam egy új vegyületet a 3-metoxi-4-benzilpirrolidint.



Ezt követően racém (*Z*)-2-tritiloximetil-3-hidroxiometil-oxiránt állítottam elő és ismételten enzimet alkalmazva rezolváltam. A kinyert optikailag aktív anyagból benziloximetil-4-tritiloximetil-oxiránt képeztem és ebből butillitiummal optikailag aktív oxetánt, valamint (*Z*)-but-2-én-1,4-diol-származékot állítottam elő és ezt új, 2,4-es helyzetben diszubsztituált dihidropirrol-származékká alakítottam.



A különféle utakon előállított új pirrolidin-, és dihidropirrol-származékok optikailag aktív formái értékes intermedierek lehetnek a gyógyszeripar számára.

Új ferrocéntartalmú arilglikozidok és heterociklusok szintézise

Pásztor Judit, IV. évf. vegyész hallgató

Ozohanics Olivér, IV. évf. vegyész hallgató

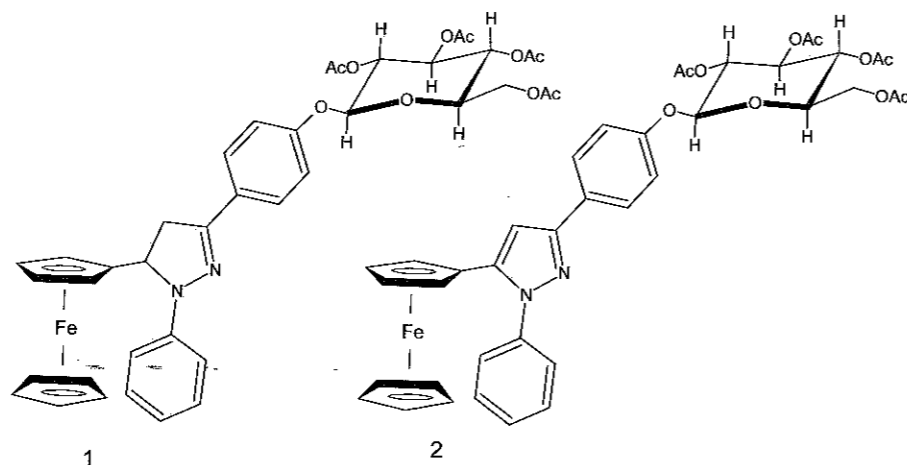
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Zsoldosné dr. Mády Virág tudományos főmunkatárs
MTA-ELTE Spektroszkópai Szerkezetkutató Csoport

Az elmúlt években, felismerve a ferrocén különböző vegyületeinek biológiai aktivitását, jelentősen megnőtt az érdeklődés ezen anyagok iránt az orvostudomány és biológia területén. Számos ferrocénszármazéknál rákellenes hatást mutattak ki, néhány szénhidrát-tartalmú vegyületnél maláriaellenes hatásról számoltak be.

A kutatócsoportban, melynek munkájába bekapcsolódtunk, korábban számos ferrocén szubsztituált heterociklust és ferrocenil-aril-kalkonglikozidot állítottak elő, és komplex szerkezetvizsgáló módszerekkel vizsgálták ezek szerkezetét és molekuladinamikai sajátosságait.

Kutatásaink célja olyan új ferrocénszármazékok előállítása volt, melyek egyidejűleg tartalmaznak heterociklust és szénhidrát-molekularészt.



Megfelelően szubsztituált ferrocenil-aril-kalkonokat aril-hidrazin-származékokkal reagáltatva új glikozilezett pirazolin- és pirazol-származékokat (pl. **1** és **2**) állítottunk elő. A pirazolin \rightarrow pirazol átalakítást egyszerűbb ferrocenil-pirazolin származékokon szisztematikusan vizsgáltuk.

Ösztránvázas szteroid-alkoholok és -aminok előállítása és heterogén $\text{Ru}(\text{OH})_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ -katalizátorral történő epimerizációja

Hermán Beáta, V. évf. vegyész hallgató

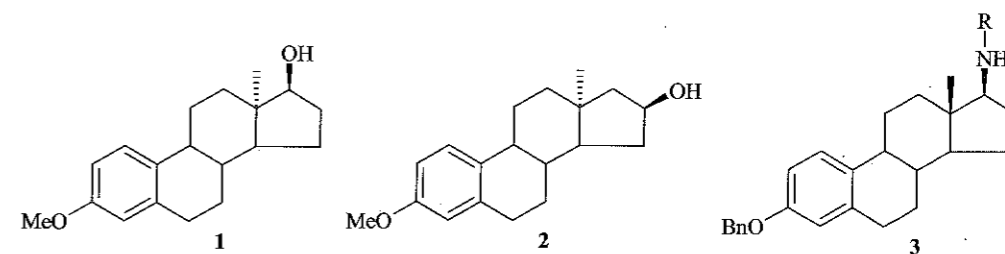
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Mernyák Erzsébet tudományos munkatárs
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A szteroidkémiaiban nagy kihívást jelent a sztérikusan gátolt alkohol-, illetve amino-származékok szintézise. Ismeretes, hogy az ösztron 17-es keto-csoportjának redukciója — kevés kivételtől eltekintve — általában 17β -olt eredményez. A 17α -vegyület csupán elhanyagolható mennyiségben képződik. A 13-*epi*-ösztron 3-metiléterének redukciója viszont keverékhez vezet, ahol a képződő szteroid alkoholok aránya az alkalmazott redukálószerrel függ. A mi célunk az volt, hogy egy olcsó katalizátor felhasználásával, heterogén katalitikus körülmények között állítsunk elő sztérikusan gátolt ösztránvázas alkoholokat. Az *epi*-ösztron-3-metiléter káliumbórhidrides redukciójával nyertük a 17β -hidroxivegyületet (**1**), amelynek epimerizációs reakciója a $\text{Ru}(\text{OH})_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ katalizátorral sikeresnek bizonyult.

Munkánk következő részében sztereo- és regioselektív reakcióban, 9-borabiciklononán reagens alkalmazásával, jó termeléssel sikerült a 16β -hidroxiszármazékot (**2**) előállítanunk, amelynek epimerizációs reakciója nem szolgáltatja a 16α -alkoholt.

A szteroid-alkoholok szintézise után a 13 β -ösztron sorba tartozó 17-keto-vegyületből kiindulva, kondenzációs, majd azt követő redukciós reakcióval 17β -amino-származékot (**3**) nyertünk. Az aminok segítségével arra a kérdésre kerestük a választ, hogy az általunk előállított $\text{Ru}(\text{OH})_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ katalizátor oxigénmentes körülmények között alkalmas-e aminok epimerizációjára is.



Fluorofil terminális olefinek szintézise és ideális elkülönítése

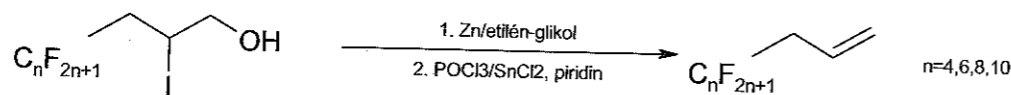
Takács Ferenc Tamás, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Rábai József egyetemi docens
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Fluorofil terminális olefinek perfluoralkil-jódhidrinekből kiinduló szintézisére két analóg eljárást tanulmányoztam, a reakció paramétereit és a termék elkülönítés körülményeit optimalizáltam. Ezekben az eljárásokban a fluoros vegyületek illékonyágát és szerves oldószerekkel szemben tapasztalható korlátozott elegyedését használtuk elkülönítésükre. Ez a feldolgozási eljárás számos előnnyel jár a „hagyományos” fluoros extrakcióval szemben, pl. nincsen szükség viszonylag drága perfluoralkán típusú oldószerek használatára.

A reakciótermékek elkülönítése leginkább a vízgőz-desztilláció módszeréhez hasonlítható, ahol a víz helyett a fluorofil vegyületekkel magasabb hőmérsékleten sem elegyedő etilén-glikol szerepel.



Feladatomban volt olyan perfluoralkil-propén szintézis kidolgozása, amely kevésbé mérgező reagenseket használ fel, mint a szakirodalomban közölt eljárások, ugyanakkor eléri, vagy meghaladja azok hatékonyságát. Az általam vizsgált két eljárás (ld. ábra) során a reakciókat is és a feldolgozást is optimalizáltam. A cinkporral végzett dehalohidroxilezésnél jelentős mennyiségű melléktermék keletkezik, így a piridines eljárás (2) konverzió szempontjából hatékonyabb. Az általam elvégzett szintéziseknél az elválasztás nehéz vagy lehetetlen ($n=4$) hagyományos technikával, mely jelentősen lecsökkenti a termelést, így új technikát kellett kidolgoznom a termékek elkülönítésére. Ez az új technika az „inverz glikol-gőz-desztilláció” és a perfluoralkil-propén – piridin azeotróp desztilláció, amivel a termelés ~40%-ról ~80%-ig növelhető. A olefin – piridin azeotróp desztilláció hatékonyságát bizonyítja, hogy az elegyből kidesztillált kétfázisú kondenzátum alsó rétege, azaz a fluoros fázis ~99% terminális olefint tartalmaz (GC).

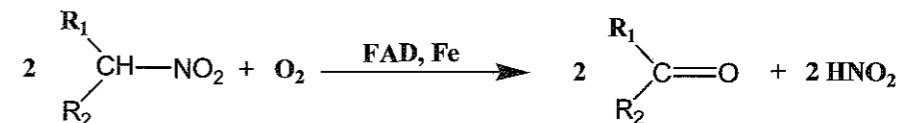
Alifás nitrovegyületek autooxidációjának vizsgálata

Durkó Norbert, V. évf. vegyész hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Speier Gábor egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék
Dr. Kaizer József tudományos főmunkatárs
MTA-VE Petrolkémiai Kutatócsoport

A növényvilágban előforduló alifás nitrovegyületek oxidatív lebontásáért a 2-nitropropán dioxigenáz a felelős, amely az intracelluláris enzimek csoportjába tartozik [1]. Az enzimológiai vizsgálatok azt mutatták, hogy a fenti enzim vasat és FAD koenzimet tartalmaz.



Bár az irodalomban több fém [2,3], illetve FAD [4] tartalmú modell is ismeretes, az enzimreakció mechanizmusa még mindig nem tisztázott. A folyamat megértéséhez nagymértékben hozzájárulhat az autooxidáció, mint alapreakció tanulmányozása.

Modellvegyületként előállítottuk a 2-nitro-propán és a fenil-nitro-metán káliumsóját, majd vizsgáltuk dioxigénnel való reakcióit. Spektroszkópiái (pl. MS, UV-VIS) és analitikai módszerekkel (GC, nitrit-, és nitrát-ion meghatározás) azonosítottuk a vizsgált reakciók termékeit, majd gázvolumetrikus és gázkromatográfiás módszerekkel meghatároztuk sztöchiometriájukat. A reakcióban kimutatott intermedierek azonosítása alapján (ESR, UV-VIS, MS) javaslatot tettünk az oxigénezési reakciók mechanizmusára.

- [1] Kido, T., Soda, K., Suzuki, T., Asada, K., *J. Biol. Chem.*, 251, 6994 (1976)
[2] Balogh-Hergovich, É., Speier, G., Huttner, G., Zsolnai, L., *Inorg. Chem.*, 37, 6535 (1998)
[3] Balogh-Hergovich, É., Grécsi, Z., Kaizer, J., Speier, G., Reigler, M., Giorgi, M., Párkányi, L., *Inorg. Chem.*, 1687 (2002)
[4] Gadda, G., Edmondson, R.D., Russel, D.H., Fitzpatrick P.H., *J. Biol. Chem.*, 272, 5563 (1997)

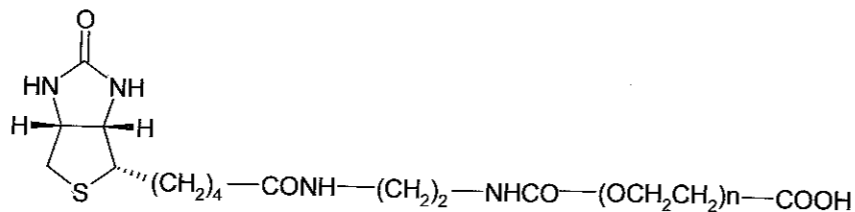
Biotinil – oligoetilénglikol építőelemek előállítása peptidek jelzésére és vízoldhatóbbá tételére

Bartos Ádám, okl. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Uray Katalin** tudományos főmunkatárs
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport
Dr. Hudecz Ferenc egyetemi tanár
ELTE Szerves Kémiai Tanszék,
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Mind *in vitro*, mind *in vivo* vizsgálatok során – főként az aggregálódásra nagymértékben hajlamos β -redőzött réteg szerkezetű peptidek esetében – gátat jelent e vegyületek alacsony vízoldhatósága. E peptidek oldhatóbbá tételének egyik lehetősége oligoetilénglikol (OEG) konjugátumainak előállítása. Számos kötődési vizsgálathoz (pl. Biacore) a peptidet/fehérjét biotinnal kell jelölni. Ezt figyelembe véve célunk egy olyan vegyületsorozat előállítása volt, melyek egyidejűleg tartalmaznak biotint, és egy etiléndiamin „spacer”-en keresztül különböző számú etilénglikol alegységből felépülő OEG-karbonsavat. E származékot azután egy lépésben lehet peptidekhez/fehérjékhez kapcsolni.



Célunk elérésére különböző hosszúságú ($n=2-4$) oligoetilénglikolt dikarbonsavvá oxidáltunk, észterkötésen keresztül klórmethyl-csoportokkal funkcionizált polisztirol hordozóhoz (Merrifield-gyanta) kötöttünk, majd az ily módon egyik karboxilcsoportján védett OEG másik karboxilcsoportjához amidkötéssel etiléndiamint kapcsolunk. Ennek szabad aminocsoportjához a peptidkémiai szokásos eljárással, BOP/DIEA segítségével kapcsolható biotin. A hordozóról a terméket HF-dal hasítottuk.

A képződő biotin-származék (1) karboxilcsoportján keresztül egy lépésben kapcsolható peptidekhez, mind szilárd fázison, mind oldatban. E peptidek vízoldékonysága várhatóan nagyobb, és a biotin jelenléte alkalmassá teszi a biotin – avidin kölcsönhatáson alapuló kötődési kísérletekre.

Kutatásainkat az OTKA (T037749) támogatta.

Fenilalanin-ammónia-liáz enzim mechnizmusvizsgálata N-metilezett-fenilalaninokkal

Tomin Anna, V. évf. vegyészmérnök hallgató

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Poppe László** tudományos tanácsadó
BME Szerves Kémia Tanszék, MTA Alkaloidkémiai

Az l-fenilalanin növényvilágban és gombákban lejátszódó metabolizmusának kezdeti lépésében a fenilalanin ammónia-liáz (EC 4.3.1.5; PAL) enzim katalizálja az ammonia nem oxidatív eliminációját. Mivel a fenilalanin ammónia-liáz fontos szerepet játszik a növények metabolizmusában, érthető, hogy a PAL enzim a herbicidek egyik gyakori célpontja.

Kutatásaink célja annak a megállapítása volt, hogy a *Petroselinum crispum*-ból kivont fenilalanin-ammónia-liáz enzim által katalizált reakciókban az N-metil-l-fenilalanin, N-metil-4-nitro-l-fenilalanin és az N,N-dimetil-4-nitro-l-fenilalanin szubsztrátként vagy inhibitorként viselkednek-e, és ezzel további kísérleti adalékokat szolgáltatunk ezen enzim működésének molekuláris szintű megismeréséhez. Eredményeink szerint az N-metil-l-fenilalanin gyenge szubsztrátnak bizonyult ($K_m=6.6$ mM, $k_{cat}=0.22$ s⁻¹). Ennek megfelelően metilamminnal és (E)-fahéjsavval PAL jelenlétében az eliminációval ellenkező irányú reakció termékét nem tudtuk kimutatni. Az (E)-fahéjsav és ammónia reagáltatásakor az ammóniára kapott K_m értékek – pH8,8 ill. pH10 esetén 4,4 ill. 2,6 M – alapján megállapítható volt, hogy a vissza-reakcióban az ammónia, és nem az ammóniumion koncentrációja a meghatározó. Az N-metil- és N,N-dimetil-l-fenilalaninok erős kompetitív inhibitorok mutatkoztak ($K_i=130$ nM and 8 nM). Ezen inhibíciós viselkedés értelmezéséhez a PAL modell aktív helyén belül végzett molekulamechanikai számításokat is felhasználtunk.

A dolgozatban leírtak egy a *Helvetica Chimica Acta* folyóirat által elfogadott közlemény alapját képezik [1]. A dolgozatban leírt vegyületeket a PAL szubsztrát kötőmódjának tisztázása céljából elküldjük Dr. Calabrese (DuPont, USA) részére, aki nemrégiben közölte a PAL kristályszerkezetét [2].

[1] Viergutz, S., Poppe, L., Tomin, A., Rétey, J., *Helv. Chim. Acta*, 86, 3601-3612. (2003)

[2] Calabrese, J.C., Jordan, D.B., Boodhoo, A., Sariaslani, S., Vannelli, T., *Biochemistry*, 43 (36), 11403-11416. (2004)

Tumorellenes szerek célbajuttatása biokonjugátumok segítségével

Bai Katalin Boglárka, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Mező Gábor** tudományos tanácsadó
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék

Napjainkban a sebészeti beavatkozások és sugárterápia mellett egyre nagyobb szerepet játszik a kemoterápia a rosszindulatú daganatok kezelésében. Kemoterápiás szerek a citosztatikumok, melyek a tumoros sejtek szaporodását gátolják. Munkám során egy, a folsavantagonisták közé tartozó citosztatikumot, a methotrexatot konjugáltam az általam előállított oligopeptidekhez.

A citosztatikum receptoron keresztüli sejtbe juttatásához szükség van egy hordozó molekulára, mely olyan kemotaktikus peptidet tartalmaz, amelyek receptora megtalálható pl.: monocitákon. Így a kemotaxis jelenségét kihasználva a citosztatikum receptormediált célbajuttatása válik lehetővé.

Munkám során az immunfolyamatokat serkentő tetrapeptid (tuftsin) analógiára készült oligomert alkalmaztam hordozóként, melyhez négy különböző célbajuttató szekvenciát kapcsoltam, majd ezekhez a kemotaktikus peptidekhez konjugáltam a citosztatikumot egy enzimlabilis spacer szekvencia (GFLGC) alkalmazásával. Az így előállt konjugátumok: **MTX-GFLGC{CH₂CO-K(MTX-GFLGC{CH₂CO}-NH₂)-[TKPK(For-MLF)G]₄-NH₂}-NH₂**, **MTX-GFLGC{CH₂CO-K(MTX-GFLGC{CH₂CO}-NH₂)-[TKPK(For-NleLF)G]₄-NH₂}-NH₂**, **MTX-GFLGC{CH₂CO-K(MTX-GFLGC{CH₂CO}-NH₂)-[TKPK(For-TKPR)G]₄-NH₂}-NH₂**, **MTX-GFLGC{CH₂CO-K(MTX-GFLGC{CH₂CO}-NH₂)-[TKPK(Ac-TKPKG)G]₄-NH₂}-NH₂**. Az alábbi molekulákat referenciaként alkalmaztam: **Ac-(TKPK(For-TKPR)G)₄-NH₂**, **Ac-(TKPK(Ac-TKPKG)G)₄-NH₂**. Feladatomban volt továbbá az előállított molekulák kemoattraktív tulajdonságának és tumorellenes hatásának vizsgálata sejtenyészeten.

Az oldalláncokban kemotaktikus peptidet tartalmazó hordozót szilárdfázisú peptidszintézissel építettem föl, Boc/Bzl illetve Fmoc/Bu technikákat egyaránt alkalmazva. Az előállított oligopeptideket, gyantáról való lehasítást követően konjugáltam a citosztatikumhoz egy pentapeptid (GFLGC) spacer szekvencián keresztül, tioéter kötés kialakításával. A konjugátumokat nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával tisztítottam, minőségüket tömegspektrometriával azonosítottam.

Szteránvázis epoxidok gyűrűnyitása ionfolyadékban

Horváth Anita, V. évf. vegyész hallgató

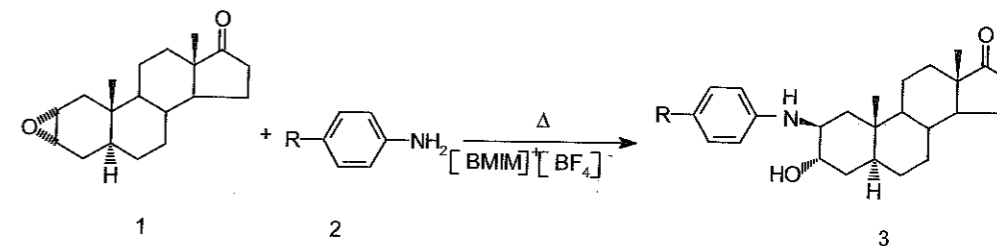
VE Mernői Kar

Témavezető: **Skodáné dr. Földes Rita** egyetemi docens
VE Szerves Kémia Tanszék

A 2β-amino-3α-hidroxi-5α-androsztánok, továbbá sóik és észterek számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek, felhasználhatók az érzéstelenítésben, alacsony vérnyomás kezelésére, ezenkívül hipnotikus és görcsoldó hatásúak. A mozgató végkészüléket bénító, membránstabilizáló izomrelaxánsok között is sok szteránvázis, 2-amino-3-hidroxi-származékra visszavezethető vegyületet találunk.

Az alifás származékok előállítása az irodalom szerint a megfelelő epoxidok és aminok reakciójával történik, magas hőmérsékleten, hosszú reakcióidő (72-80 h) és nagy aminfelesleg alkalmazásával. Szteránvázis epoxidok aromás aminok jelenlétében lejátszódó gyűrűfelynyitásával azonban még nem foglalkoztak.

TDK munkám során a 2α,3α-epoxi-5α-androsztán-17-on (1) gyűrűnyitási reakcióját vizsgáltam különböző aromás aminok (2) jelenlétében. Mivel az irodalom szerint az epoxidok aromás aminokkal való reakcióját hatékonyan segítik elő az ionfolyadékok, kipróbáltam a különféle [BMIM]-sók, mint oldószerek alkalmazhatóságát a szteránvázis vegyületek esetében.



Megállapítottam, hogy a szteránvázis epoxid reakciója esetében legalkalmasabb oldószer a [BMIM]⁺[BF₄]⁻ ionfolyadék. A reakciók az aromás amintól függően közepes vagy jó hozammal, nagy regioszelektivitással játszódtak le. Az alkalmazott ionfolyadék újra felhasználható volt, ennek során a kiindulási vegyület átalakulása csak kis mértékben csökkent. A *p*-nitro-anilin esetében a reakció sikertelen volt, az ionfolyadékban oldott lítium-triflát katalizátor jelenlétében azonban jó átalakulást sikerült elérnem.

Két fluorofór egységet tartalmazó molekuláris szenzorok fejlesztése

Nagy Krisztina, IV. évf. vegyész hallgató.

ELTE Természettudományi Kar

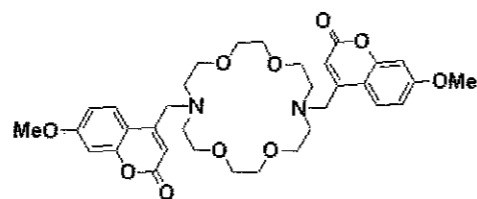
Témavezető: Dr. Kele Péter posztdoktori ösztöndíjas
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

Napjaink egyik növekvő jelentőségű kutatási területe fluoreszcens szenzorok molekuláris felismerésben történő alkalmazása. Az előnyök közé tartozik a jól megalapozott tudományos háttér, amely a szerkezetbeli tulajdonságok fluoreszcencia-intenzitásra gyakorolt hatását írja le [1].

Munkánk során annak lehetőségét vizsgáltuk, hogy több fluorofór egység PET szenzorokba történő beépítése növeli-e a szenzor által kibocsátott jel erősségét. Kísérleteink során olyan szenzormolekulát állítottunk elő, amelynek receptor részletét egy 1,10-diaza-18-korona-6-éter csoport adja. A szenzor felépítése, annak *fotoindukált elektrontranszfer* (PET) szenzorként való felhasználását teszi lehetővé. A vegyület felépítéséből adódóan várható volt, hogy a két fluorofór egység intramolekuláris excimert képez, ami a szenzor további előnyös felhasználását teszi lehetővé.

Kísérleteink során megállapítottuk, hogy az általunk vizsgált két fluorofórt tartalmazó szenzor nem képez intramolekuláris excimert, így kizárólag, mint PET szenzor alkalmazható. Ammóniumsókkal komplexálódási kísérleteket végeztünk annak eldöntésére, hogy az egy fluorofórt tartalmazó szenzorhoz képest a második fluorofór csoport jelenléte növeli-e a szenzor érzékenységét. Megállapítottuk, hogy a vizsgált három ammóniumsó esetében a két fluorofórt tartalmazó szenzor minden esetben hatékonyabb. A kísérletek arra is rámutattak, hogy a komplexálódás során lejátszódó konformációs változások ugyancsak szerepet játszanak a fluoreszcencia serkentésében.

A dolgozat és az azt kísérő előadás kísérleteim, méréseim eredményeit mutatja be.



[1] de Silva, A. P.; Gunaratne, H. Q. N.; Gunlaugsson, T.; Huxley, A. J. M.; McCoy, C. P.; Rademacher, J. T.; Rice, T. E. *Chem. Rev.* (1997), 97, 1515-1566.

Várhatóan fungicid hatású amino-szilán vegyületek szintézise és vizsgálata

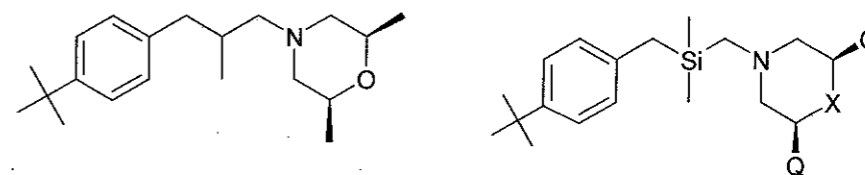
Vigóczki Edina, V. éves vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Hegyes Péter tudományos főmunkatárs
SZTE Szerves Kémia Tanszék

Munkánk célja olyan biológiai aktív vegyületek előállítása volt, amely szilícium atomot is tartalmaz, és szerkezetében hasonlítanak a már bizonyított aktivitással rendelkező fenpropimorf (2,6-dimetil-morfolin származék) szerkezetéhez. Esetünkben a biológiai hatás viszonylag egyszerű módszerekkel mérhető mikrobiológiai, egészen pontosan a gombaölő fungicid hatást jelenti. Gombaölőszereknek (fungicideknek) nevezzük azokat a szervetlen és szerves vegyületeket, valamint antibiotikumokat, amelyek a gombák fejlődését akadályozzák, vagy teljesen elpusztítják azokat. Ezek a gombaölőszerek, amelyek szerkezetüket tekintve aminoszármazékok (allilaminok, azolok, morfolinok), a gombák növekedésében létfontosságú szerepet betöltő ergoszterin bioszintézisét gátolják.

A szén-szilícium közeli rokonsága miatt célul tűztük ki, hogy egy szén szilícium cserével, fungicid hatással bíró vegyületeket állítsunk elő. Az általunk szintetizált vegyületek a molekula benzil részéhez kapcsolódó csoportokban (o,m,p-F, p-tBu, p-ciklohexil, -Cl, -Et) és a hozzákapcsolt aminokban (morfolin, 2,6-dimetil-morfolin, piperidin) különböznek. Esetünkben X: O, CH₂; Q: H, CH₃.



fenpropimorf

A fenpropimorf szerkezetéből kiindulva szén szilícium cserével új vegyületeket állítottunk elő, továbbá összehasonlítás céljából előállítottuk a köztitermek bezilhalogenidek, aminokkal kapcsolt megfelelőit is.

A fenpropimorffal mutatott szerkezeti analógia miatt úgy véljük, hogy a *para*-trebutil-amino-szilán vegyület rendelkezik a legnagyobb biológiai aktivitással, amit még bizonyítani nem tudunk, mivel a biológiai vizsgálatok folyamatban vannak.

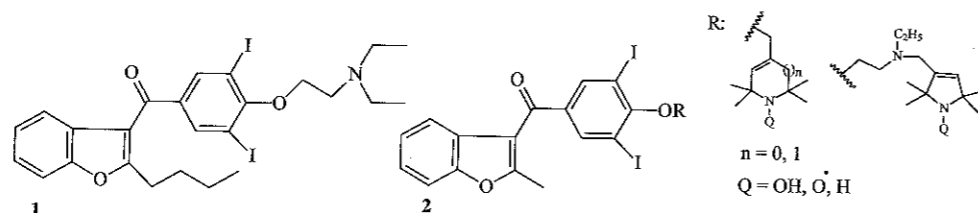
Új, paramágneses és diamágneses amidaron származékok szintézise és vizsgálata

Bognár Balázs, IV. évf. biológia-kémia szakos hallgató

PTE Természettudományi Kar

Témavezetők: Dr. Hideg Kálmán egyetemi tanár
PTE Szerves és Gyógyszerkémiai Intézet
Dr. Kálai Tamás egyetemi docens
PTE Szerves és Gyógyszerkémiai Intézet

Az amidaron (1) széles körben használt u. n. III. osztályú keringésre ható szer [1]. Alkalmazása során számos mellékhatás lép fel, pl.: tüdőfibrózis, májelégtelenség, fényérzékenység, jódanyagcsere zavarok. Néhány éve sikerült azonosítani az *N*-dezetileződött, káros metabolitját [2], és több kutatócsoport olyan új amidaronszármazékokat szintetizált, amelyek az eredeti antiaritmiás hatást megtartva kisebb mellékhatással bírnak [3]. A paramágneses pirrolin nitroxid szabad gyökről ill. amin prekursoraikról kiderült, hogy a mexiletin I. osztályú antiaritmiás szerhez kapcsolva annak hatásspektrumát bővítik, szabad gyök elimináló hatását javítják [4]. Diákköri dolgozatomban nitroxidokat, ill. ezek amin és hidroxilamin prekursorait tartalmazó új amidaron származékok (2) szintézisét és biológiai vizsgálatát írtam le.



- [1] Mátyus, P., Rablóczy, G., *Gyógyszerkémia 1-2.* (Töke, L.; Szeghy, L. szerk.) Tankönyvkiadó, Budapest, 372-435 (1992)
[2] Wilson, B.D., Lippmann, M. L., *Am. Rev. Respir. Dis.*, 141, 1553-1558 (1990)
[3] Carlsson, B., Singh, B.N., Temciuc, M., Nilsson, S., Li, Y-L., Mellin, C., Malm, J., *J. Med. Chem.*, 45, 623-630 (2002)
[4] Li, H., Xu, K. Y., Zhou, L., Kálai, T., Zweier, J.L., Hideg, K., Kuppusamy, P., *J. Pharm. Exp. Ther.*, 295, 563-571 (2000)

TPPP/p25: egy új agyspecifikus fehérje szerkezet és kölcsönhatás vizsgálata

Zotter Ágnes, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Ovádi Judit tudományos tanácsadó
MTA SzBK Enzimológiai Intézet

Ovádi Judit laboratóriumában szarvasmarha agyból izoláltak és azonosítottak egy új agyspecifikus fehérjét (Tubulin Polymerization Promoting Protein, TPPP/p25), melynek elsődleges célpontja a mikrotubuláris hálózat. A fehérje patológiás humán agyszövetben a Parkinson-kórra jellemző zárványokban lokalizálódik. Az *in vitro* szerkezeti és kölcsönhatási vizsgálatokat nagymértékben korlátozta a rendelkezésre állt izolált fehérje rendkívül kis mennyisége. Feladatomban volt, hogy az izolálási eljárást módosítva, nagyobb kitermelést érjek el, valamint klónozással humán rekombináns fehérje előállítását és a fehérje izolálási folyamatát dolgozzam ki. Továbbá összehasonlító vizsgálatokat végeztem a marhaagyból izolált (foszforilált) és a rekombináns humán (nem foszforilált) TPPP/p25 másodlagos szerkezetét és tubulinnal való kölcsönhatását illetően. A marhaagyból történő izolálás módosítása, a TPPP/p25 előállítása mellett, egy 20 kDa molekulatömegű fehérje izolálásához vezetett, amely, mint azt a tömegspektroszkópiás analízis igazolta, az axonok körüli myelin fehérje. CD-spektroszkópiás és turbidimetriás vizsgálataim szerint a myelin α -hélix tartalma igen alacsony. Kötődik a tubulinhoz, ami tubulinpolimerizációt indukál, a TPPP/p25-höz hasonlóan. Kiderült, hogy a myelin természetes szubsztátja lehet az agyspecifikus tripszin IV enzimnek, melynek célfehérjéje nem volt ismert. Beállítottam a humán rekombináns TPPP/p25 *E. coli* baktériumban való termeltetését, és a fehérje affinitáskromatográfiás izolálását. A UV-CD-spektrumok alapján a rekombináns humán fehérje, hasonlóan a marhaagyból izolálthoz néhány százalék α -hélix tartalommal bír. Vibrációs CD-spektroszkópiás mérések az UV-CD mérésekhez hasonlóan azt mutatták, hogy a TPPP/p25 szerkezet nélküli fehérje. A rekombináns TPPP/p25 is kölcsönhat a tubulinnal, azonban a kölcsönhatás gyengébb a marha agyból izolált TPPP/p25-tubulin kölcsönhatáshoz viszonyítva. A két fehérje szekvenciája nagyobb mint 90%-os homológiát mutat, így az eltérés oka valószínűleg abban keresendő, hogy a rekombináns fehérje nincs foszforilálva. A rekombináns fehérje is képes indukálni aberráns tubulin asszociátumot, de ehhez magasabb tubulin és/vagy TPPP-p25 koncentráció szükséges. A TPPP/p25 foszforilációja fontos regulációs tényező lehet a mikrotubuláris hálózatra kifejtett hatását illetően, amely szerepet játszhat a Parkinson-kór patomechanizmusában.

Elektronikusan és sztérikusan kontrollált homogénkatalitikus hidrogénezés

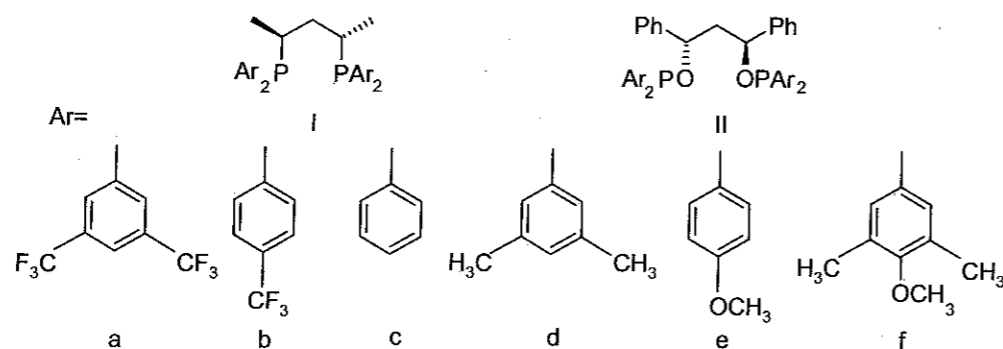
Herseczki Zsanett, IV. évf. vegyészmérnök hallgató

VE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Hegedüs Csaba** tudományos segédmunkatárs
VE Szerves Kémia Tanszék
Dr. Bakos József egyetemi tanár
VE Szerves Kémia Tanszék

A természetben előforduló szerves vegyületek egy részét optikailag aktív vegyületek alkotják. A biológiailag aktív vegyületek (gyógyszerek, növényvédő szerek) jelentős része optikailag is aktív. Az enantiomerek eltérő biológiai hatást mutathatnak, a kívánt biológiai aktivitás gyakran csak az egyik enantiomerhez kötődik. Az optikailag tiszta enantiomerek előállításának leghatékonyabb módszere az aszimmetrikus homogén katalízis.

A kiváló hidrogénező aktivitású 2,4-bisz(difenilfoszfino)pentán (BDPP) és az 1,3-bisz(difenilfoszfinoxi)-1,3-difenil-propán (BDPODP) alapvázát megtartva módosítottuk a ligandum sztérikus és elektronikus tulajdonságait. Előállítottunk elektronküldő (Id, Ie, If, IId, IIIf) és elektronszívó (IIa, IIb) csoportokat tartalmazó ligandumokat.



A ligandumok sztérikus és elektronikus tulajdonságait itakonsav-dimetil-észter, (*Z*)- α -acetamido-fahéjsav-metil-észter és (*Z*)- α -acetamido-fahéjsav hidrogénezése során vizsgáltuk. A legjobb eredményeket a bázikusabb ligandumokkal értük el (*Z*)- α -acetamido-fahéjsav-metil-észter (IIIf, ee: 87,6% (*R*)) és (*Z*)- α -acetamido-fahéjsav (Id, ee: 97,2% (*R*)) hidrogénezésekor, míg itakonsav-dimetil-észter hidrogénezésekor a legkevésbé bázikus (*S,S*)-BDPP származék adta a legnagyobb katalitikus aktivitást és enantioszelektivitást (ee: 63,1% (*R*)).

Antitumor hatású molekulákat tartalmazó GnRH-III konjugátumok szintézise

Szabó Ildikó, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Mező Gábor** tudományos tanácsadó
MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék

A statisztikai adatok alapján a daganatos megbetegedések a második helyen állnak a halálozási listán. Éppen ezért az elmúlt századtól kezdve nagyszabású kutatások folytak a daganatos megbetegedések kialakulási okának, mechanizmusának és mindezen keresztül hatékony gyógyításának felderítésére.

A szövetspecifikus sejtműködés szabályozásának egyik mechanizmusa a hormonok sejtspecifikus receptoraihoz való kötődése révén érvényesül. Ez a tény adja hormonok, illetve származékaik fontos szerepét a daganatok kezelésében. Különös jelentőséggel bírnak azon daganattípusokban, melyek hormonfüggő növekedést mutatnak.

A GnRH hormon egy decapeptid, melynek izolálását és szerkezet-felderítését Schally végezte [1], amiért Nobel-díjat kapott. Azóta számos analógját állították elő, és sikeresen alkalmazták hormon-függő daganatok kezelésére.

A GnRH hatását speciális, hormonreceptorokon keresztül fejti ki, tehát a célsejtekre közvetlen hatást fejt ki.

Munkám során, célkitűzésemnek megfelelően olyan kétkomponensű GnRH-III analógokat készítettem, amelyekben a nyolcadik pozícióban található lizin ϵ -aminocsoportjához tumorellenes hatású molekulák (methotrexat, ferrocén) kapcsolódnak egy enzimlabilis spacer molekulán (GFLG) keresztül, ezáltal kívántam fokozni biológiai aktivitását daganatos sejteken. A konjugátumok előállítása három részből tevődött össze.

1. A lizin oldalláncon funkcionált GnRH-III (pGlu-His-Trp-Ser-His-Asp-Trp-Lys(CiAc)-Pro-Gly-NH₂) molekula szintézise;
2. A tumorellenes szert tartalmazó, konjugálásra alkalmas spacer (X-GFLGC-NH₂, ahol X = methotrexat (Mtx) vagy ferrocén (Fc)) szintézise;
3. A két molekula összekapcsolása tioéter kötés kialakítására alkalmas kémiai ligációs módszerrel.

További feladatomban a konjugátumok (HPLC-vel tisztított) biológiai aktivitásának emlő és vastagbél daganatos sejtvonalakon történő vizsgálata.

[1] Schalley, A.V., *Am. J. Obstet Gynecol.*, 125, 1142-1147 (1976)

SAC-13 nanokompozit szilárd-sav-katalizátor alkalmazása szerves szintézisekben

Darányi Mária, III. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Ledneczki István** doktoráns
SZTE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Molnár Árpád egyetemi tanár
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A szerves szintézisben és az ipari folyamatokban egyre növekvő fontossággal bírnak a szilárd katalizátorok, mivel környezetvédelmi szempontokból, kezelhetőség, újrafelhasználás és gazdaságossági tényezők miatt ezek kedvezőbbek a homogén fázisú analógoknál. Különösen igaz ez erős szerves savak esetén (HF, kénsav, salétromsav), hiszen heterogén szilárd katalizátorok felhasználása biztonságosabb is.

A Nafion gyanta (perfluorozott szulfonsavas ioncserélő polimer) sok tulajdonsága (a 100 %-os kénsavval összemérhető savasság, termikus stabilitás, kémiai inertesség, regenerálhatóság) miatt értékes, szerves szintézisekben széles körben alkalmazott savas katalizátor [1]. A nagyon kis (0.02 m²/g) felület miatti alacsony fajlagos aktivitást SiO₂ mátrixban történő immobilizálással megoldották (Nafion-H/SiO₂ nanokompozit, kereskedelmi neve SAC-13) [2,3].

A Nafion-H SAC-13 katalizátort védőcsoportok kialakításában használtuk: alkoholok tetrahidropirán-éter készítése, diacetátok előállítása aldehidekből, gyűrűs acetátok képzése karbonilvegyületekből. A reakciók könnyen, nagyon rövid reakcióidő (5 min–2 h) alatt magas hozammal (általában 80–100 %) adják a megfelelő védett származékokat (Táblázat). Hasonlóan enyhe körülmények között végrehajtható a védőcsoportok eltávolítása is. Külön kiemelendő, hogy a katalizátor – az aktivitás kismértékű (5–10%) csökkenése mellett – többször újrafelhasználható.

Alkohol	Hozam (%)	Aldehid	Hozam (%)
Oktán-1-ol	94	Pentanal	100
Benzil-alkohol	74	Oktanal	100
Ciklohexanol	96	Ciklohexánkarbaldehid	100
Allil-alkohol	99	Benzaldehid	65

Védőcsoportok kialakítása alkoholok és aldehidek esetén.

[1] Olah, G.A., Prakash, G.K.S., Sommer, J., *Superacids*, Wiley, New York, (1985)

[2] Harmer, M.A., Farneth, W.E., Sun, Q., *J. Am. Chem. Soc.*, 118, 7708 (1996)

[3] Török, B., Kiricsi, I., Molnár, Á., Olah, G.A., *J. Catal.*, 193, 132 (2000)

Seabuckthorn oils from berries, pulp and pomace

Alexandra Gruia, IVth year student of chemistry and biology

Natalia Alexa, Vth year student of chemistry

WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Supervisors: **Dr. Mariana Albulescu** lecturer
WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography
Dr. Adrian Chiriac professor
WUT Faculty of Chemistry, Biology and Geography

Seabuckthorn (*Hippophae rhamnoides*) is a plant known for more than two thousand years in Asia. It's also widely spread about Europe, especially along the seacoasts and on surface mining residual areas [1]. The growth of seabuckthorn is sporadic in Romania and recently controlled cultivars were initiated.

Seabuckthorn is the record-holder among medicinal plants in high content of vitamins, polyphenols, carotenoids and other biologically active compounds. Biologically active principals interact with each other to exhibit synergistic effects [2]. They normalize lipids level, protein and carbohydrate metabolism. Hippophae oil is used in medicine, in therapy of malignant tumors, in treatment of skin disorders, gynecological and gastric diseases, in normalizing the body immunity and also exhibits high anti-microbial activity [3]. Seabuckthorn is known as an unique source of high valued oils (seed, pulp, whole berry oil), but their chemical properties are not fully known. The fatty acid profile, chemical values and the contents of trace constituents strongly depend on the vegetal raw material and the isolation method.

This work shows our preliminary experiments on extraction and analysis of seabuckthorn oil from different vegetal materials (whole berry, pulp, peels and seeds). Some parameters were varied to optimize the extraction: the solvent (hexane, ethylic ether and chloroform), the extraction technique (ambient extraction, reflux extraction). Good results were obtained using hexane as extraction solvent and extraction weight ratio of 1:5 raw material / solvent; maceration at normal temperature is better than the reflux one. The whole berry is richer in oil than pomace. Physical and chemical analysis (refraction index, saponification value, acidity value, esterification value) were made for the seabuckthorn oils obtained and differences between samples were observed. The fatty acids profile was determined by HPLC analysis of esterified oils and the results were compared with literature data.

[1] Ruan, C., Qin, P., Zheng, J., He, Z., *Scientia Horticulturae*, 101 (4), 417-426 (2004)

[2] Qi, Y., Zhou, B., Li, J., Bao, Y., Xue, Y., *HIPPOPHAE*, 9 (1), 32-36 (1999)

[3] Negi, P.S., Chauhan, A.S., Sadia, G.A., Rohinishree Y.S., Ramteke, R.S., *Food Chemistry*, In Press, accepted 16 July (2004)

Imidazol átmeneti fémkomplexeinek előállítása és vizsgálata

Czibulya Zsuzsanna, okl. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Labádi Imre** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az élő szervezetekben a fémionok részvételével végbemenő folyamatokban résztvevő molekulák (biomolekulák) rendszerint több koordinatív kötés kialakítására képes donor atommal ill. csoporttal rendelkeznek. A fémionok és e molekulák között kialakuló komplex vegyületek ill. az ún. aktív centrumok (pl. az enzimekben) szerkezete gyakran igen különböző, attól függően, hogy a donor csoportok milyen atomokat tartalmaznak, ill. hogy azok egymáshoz képest milyen térbeli elrendezésben helyezkednek el. Ezen fémkomplexek ill. aktív centrumok tulajdonságainak megismerése igen fontos a biológiai folyamatok megértése szempontjából, s e vizsgálatokat különböző módszerekkel szokás elvégezni. A klasszikus vizsgálati módszerek általában nem biztosítják azokat a körülményeket, amelyek az élő szervezetekben léteznek, ezért szükség van olyan vizsgálati módszerekre, amelyek során a legmesszemenőbben igyekszünk utánozni a természetet. Ennek egy lehetséges módja az, amikor az enzim aktív centrumát utánzó fémkomplexet immobilizáljuk valamely szilárd anyagon, vagy anyagban, majd a nem immobilizált és az immobilizált komplexek tulajdonságait összehasonlítjuk.

A fentiekben leírt kutatások kezdődtek az elmúlt évek során a Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék és az Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék együttműködésében. A munka keretében elsőként a szuperoxid-dizmutáz enzim (SOD) tevékenységét utánzó fémkomplexek előállításával, azoknak a zeolitokba ill. rétegszilikátokba való bevitelével és biológiai aktivitásuk vizsgálatával foglalkoztak. Mivel az imidazol ill. a hisztidin imidazol a SOD aktív centrumának alkotórésze, első lépésként az imidazol tartalmú fémkomplexek előállítását, immobilizálását ill. az immobilizált és a nem immobilizált komplexek vizsgálatát ill. tulajdonságainak összehasonlítását tűztük ki célul. Ehhez a termikus analízis (derivatográfia) és az IR spektroszkópia módszereket alkalmaztuk. Az dolgozatban a vas, mangán, réz, cink, kobalt, nikkal imidazzal alkotott komplexeinek előállításával és azok termikus és infravörös vizsgálatával foglalkozunk, mivel, bár az irodalomból bőséges ismeretek szerezhetőek mind a hat fémről, és komplexeikkel is régóta foglalkoznak a kémikusok, azonban az előbb említett módszerekkel még nem írták le őket.

A trimetilszilil-cianid izomerizációjának vizsgálata

Pohl Gábor, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Csonka István** egyetemi tanársegéd
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék
Dr. Tarczay György egyetemi adjunktus
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

A trimetilszilil-izocianid izomer léte és részaránya egy mind a mai napig tartó tudományos vita tárgya. A cianid-izocianid izomerizációt sok vegyület esetén tanulmányozták már, de míg alkil-cianidok esetében kimerítő vizsgálatokat végeztek a kétféle izomer stabilitásától az izomerizáció mechanizmusáig bezárólag, meglepően kevés információt találhatunk a megfelelő szilil-cianidokról. A trialkilszilil-cianidokat elterjedten használják szilil- illetve cianidcsoport bevitelére, valamint átmenetifémkomplexek ligandumaként. Sok szintézist alapoznak a trimetilszilil-cianid és -izocianid között fennálló egyensúlyra, ám ennek hátterével meglepően kevés cikk foglalkozik. Az alkilszilil-származékok közül legtöbbit a trimetilszilil-cianidot tanulmányozták. Bár már több mint fél évszázada ismerik e vegyületet, az izomerizáció mechanizmusa, és a feltételezett egyensúly jellemzői mindmáig nincsenek megnyugtatóan tisztázva.

Kísérleteim során felvettem a trimetilszilil-cianid hagyományos- és mátrixizolációs IR, Raman, ¹H-NMR, ¹³C-NMR és UV fotoelektron spektrumát. Tudomásom szerint UPS illetve mátrix-izolációs spektrumra eddig nincs példa az irodalomban. E módszerek segítségével kimutattam az egyensúly oldószertől és hőmérséklettől való függését, és magyarázatot kaptam némely cikk ellentmondásaira. A mátrixizolációs IR spektroszkópia és elméleti kémiai számítások felhasználásával vizsgáltam az izomerizációs egyensúlyt. A kísérleti adatokat felhasználva kiszámoltam az izomerizáció entalpiáját, melyet összevettem a kvantumkémiai számítások által kapott értékekkel. Elméleti számítások segítségével az átmeneti állapot szerkezetét, valamint az aktiválási energiákat is meghatároztam.

Fe(III) szénhidrátkomplexek szerkezetének tanulmányozása Röntgensugár alkalmazásával (EXAFS, oldatröntgen)

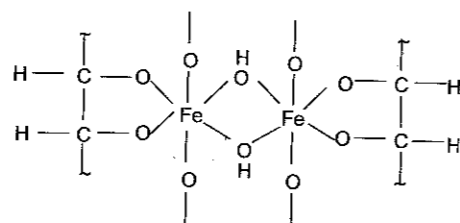
Bálint Szabolcs, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Nagy László** egyetemi tanár
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Dr. Sipos Pál egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Dr. Radnai Tamás tudományos tanácsadó
MTA KKKI, Röntgendiffrakciós Osztály
Dr. Megyes Tünde tudományos főmunkatárs
MTA KKKI, Röntgendiffrakciós Osztály

A Fe(III)-szénhidrátkomplexek azért érdekesek, mert az élő szervezetek vas utánpótlását biztosíthatják, gyógyszer formájában.

Munkám célja az volt, hogy megtanuljam az EXAFS spektrumok kiértékelésére szolgáló PC-n futó programcsomag használatát, valamint megismerjem, hogy milyen információkat nyerhetünk a mérésekből. Az EXAFS mérések alapján a Fe(III)-D-fruktóz komplexre az ábrán látható szerkezetet ajánlották. Az első koordinációs szférában a Fe-O távolság 195, a nemkötő Fe...C 275, a Fe...Fe 310 pm. Az előbbi az ötagú kelát, az utóbbi pedig a dihidroxohidas dimer komplexekre jellemző. További feladatomból volt, hogy a Fe-D-fruktóz (2 különböző pH-jú, 8,0 és 11,0) és a -D-glükonsav (pH = 11,0) komplexek oldatainak röntgendiffrakciós vizsgálatában részt vegyek. Az utóbbi technika egyik előnye az EXAFS módszerrel szemben, hogy sokkal olcsóbb, itthon is hozzáférhető. Hátránya, hogy a mintákban a fémionkoncentrációnak két nagyságrenddel nagyobbak kell lennie.



A dolgozatban összehasonlítottuk a két módszerből nyert szerkezeti paramétereket. Az EXAFS mérési technika alkalmas a kiszemelt ion közvetlen környezetének tanulmányozására, míg a röntgendiffrakciós módszerrel nem csak a kiszemelt ion koordinációs szférája, hanem az oldat szerkezete is vizsgálható. A röntgendiffrakciós mérésekből a vas(III)ion koordinációs szférájára kapott szerkezeti paraméterek: Fe-O távolság 190, Fe...C = 277 pm, jó egyezést mutatnak az EXAFS mérések eredményeivel.

Foszfán-szubsztitúció hatása a Co(CO)₃NO elektronszerkezetére

Gengeliczki Zsolt, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Sztáray Bálint** egyetemi adjunktus
ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

Dolgozatomban a trikarbonil-nitrozil-kobaltot (Co(CO)₃NO) valamint foszfán-, illetve foszfítszarmazékait (Co(CO)₂NOPR₃; R = Me, Et, Pr, Bu, OMe, Ph, Cy), mint modellvegyületeket vizsgáltam ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiával (UPS). Az alapvegyület és szarmazékainak HeI és HeII spektrumából a foszfánligandumok elektrondonor illetve -akceptor szerepéről nyertem információt.

Az asszignációt a kísérleti eredményekből levonható következtetésekre, és kvantumkémiai számításokra alapoztam.

A 7–10 eV között jelentkező sávok relatív intenzitása a fotonenergiával növekszik, ami alapján az erősen d-karakterű Co-d-COπ* viszontkoordinációs pályákhoz rendelhetők. A foszfán-, illetve foszfítligandumot tartalmazó komplexek spektrumában 10 és 13 eV között megjelenő csúcsok relatív intenzitásának csökkenése a HeII spektrumokban pedig azt a feltételezést erősíti, hogy ezek a sávok elsősorban a Co-d-Plp, illetve a ligandumon lokalizált P-C kötésként leírható pályákhoz tartoznak.

A spektrumokból kitűnik, hogy foszfán-szubsztitúció hatására a Co-d-COπ* viszontkoordinációs pályák több mint 1–1,5 eV-tal destabilizálódnak. Ez a foszfánligandumok jó elektrondonor tulajdonságával magyarázható. A destabilizáció mértéke az alkilánc méretével, és így térigényével együtt növekszik. Az oxigénatomot tartalmazó P(OMe)₃ komplexének első ionizációs energiája csak mintegy 0,6 eV-tal kisebb az alapvegyület ionizációs energiájánál, azaz nagy elektronegativitású atommal a foszfánligandum elektrondonor képessége csökkenthető, miközben térigénye közel változatlan.

A Koopmans-elv mellett a Kohn-Sham pályae energiákat is felhasználtam a spektrumok asszignációjában. Ennek elméleti háttérét csak nemrég írták le az irodalomban, és átmenetifém-komplexekre még nem alkalmazták. A közönséges kvantumkémiai programcsomagokban is megtalálható funkciókat (B3LYP, B3P86, BLYP) és bázisokat (LanL2DZ, 6-311G**, 6-31++G**) alkalmaztam. Az alapvegyület esetében az igen drága EOMIP-CCSD módszer pvdz, pvtz és 6-311G** bázissal nyert eredményeit is felhasználtam.

Szilikagélen rögzített réz(II) komplexek vizsgálata

Balogh Zoltán, IV. évf. vegyész hallgató

Dávid Tamás, IV. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Labádi Imre** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Szilágyi István doktoráns
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A hordozóra rögzített fémkomplexek felhasználása heterogén katalizátorként igen elterjedt az utóbbi időben. Alkalmazásuk széles körben elterjedt: szerves kémiai (oxidáció, redukció, polimerizáció stb.) reakciók, enzimrendszerek modellezése, vegyipari alkalmazások. Ezekben az anyagokban szilárd hordozóként leggyakrabban fém-oxidokat, zeolitot, szilikagélt, agyagásványokat vagy polimereket alkalmaznak. A szervetlen hordozók több előnyös tulajdonsággal rendelkeznek más anyagokkal szemben: kémiailag inertek, jó mechanikai és termikus stabilitással rendelkeznek, előállításukra és szerkezeti jellemzésükre már kidolgozott módszerek állnak rendelkezésre. A fent említett előnyök mellett a szilikagél rendelkezik még megfelelő morfológiai tulajdonságokkal, nagy fajlagos felülettel és lehetőség van funkcionális csoportok kovalens rögzítésére is a mátrix felületéhez. Az immobilizálás megtörténhet hidrogén-híd kötések segítségével vagy kovalens kötések keresztül is [1].

Munkánk során előállítottunk két ligandum (dietyléntriámin, trisz(aminoetil)amin) réz(II) komplexét, majd rögzítettük őket szilikagélhez kétféle módszerrel: hidrogén-hidak segítségével és kovalens kötések keresztül. Az immobilizált komplexek kialakulását FT-IR spektroszkópia módszerével ellenőriztük, illetve meghatároztuk fémion tartalmukat atomabszorpciós spektroszkópia módszerével. Ezt követően vizsgáltuk az előállított katalizátorok termikus viselkedését TG/DTG és DTA módszerekkel, majd mértük szuperoxid gyök, illetve hidrogén peroxid lebontó képességüket (*szuperoxid dizmutáz*, illetve *kataláz* aktivitás). Összegzésként azt mondhatjuk, hogy a komplexek immobilizálása minden esetben sikeres volt. A tesztreakciók eredményei alapján pedig megállapíthatjuk, hogy a katalizátorok jó szuperoxid gyök dizmutáló és hidrogén peroxid lebontó képességgel bírnak, tehát megfelelően modellezik a fent említett enzimeket.

[1] De Vos, D.E., Dams, M., Sels, B.F., Jacobs, P.A., *Chemical Reviews*, 102, 3615-3640 (2002)

Sóolvadékok oldáshőjének kalorimetriás vizsgálata

Demeter Zsolt, V. évf. anyagmérnök hallgató

ME Műszaki Anyagtudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kaptay György** egyetemi tanár
ME Kémiai Tanszék
Maziar Sahba Yaghmaee egyetemi tanársegéd
ME Kémiai Tanszék

A dolgozat a Miskolci Egyetem Műszaki Anyagtudományi Karának Kémiai Tanszékén készült, az itt található Multi HTC Drop Calorimeter segítségével folyt a munka. Legjobb tudomásom szerint a berendezés Magyarországon egyedülálló.

A műszert a francia SETARAM cég készítette kalorimetriás mérésekre. A műszer egyik fő felhasználási területe az úgynevezett ejtéses módszer. Azaz egy tégelybe mintadarabokat ejtünk (a tégelyben egy másik anyag van olvadék állapotban) és a keletkező hőeffektust mérjük. Ez lenne az oldáshő mérése. Viszont ki kell emelni, hogy ilyenkor az ejtésnél mért entalpiaváltozás nem maga az oldáshő, hanem egy olyan hőmennyiség, ami több más tagot is tartalmaz. De ezeket ismerve lehetséges az oldáshő számítása.

Méréseink során a KCl-K₂TiF₆ rendszer volt a célpont. Azon okból választottuk ezt a rendszert, mert sok helyen alkalmazzák (kompozitgyártásban szemcsefinomításra, elektrokémiai kísérleteknél), ugyanakkor nem rendelkezünk igazán részletes, pontos adatokkal róla. Ezért döntöttünk ezen vizsgálatok mellett, így nemcsak ebben a rendszerben juthatunk új információkhoz, hanem magának az oldáshő vizsgálatának módszerei is kidolgozásra kerülnek.

Ezeknek a méréseknek a bemutatása a dolgozat fő célja, egyelőre csak demonstrációs céllal.

Fe(III)-ionok viselkedése tömény lúgoldatokban

Zeller Dalma, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Sipos Pál** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Tanszék

Munkánk során a Fe(III)-mal forrón túltelített, tömény lúgoldatokból kiváló higroszkópos csapadékok jellemzését és a Fe(III)-ionok körül oldatfázisban és szilárd állapotban kialakuló koordinációs szféra szerkezetének összehasonlítását tűztük ki célul.

A csapadékok előállítását különböző körülmények között megvizsgáltuk (lúgkoncentráció, ellenion minősége) és megállapítottuk, hogy az kizárólag $c \geq 18,5$ mol/dm⁻³ koncentrációjú NaOH oldatban képződnek. A szilárd minták vas tartalmát permanganometriásan, nátrium tartalmát lángfotometriásan, víztartalmát TG, karbonáttartalmát pH-metriás módszerrel határoztuk meg. Ezek alapján mintáink a preparálási körülményektől függően ~ 10 tömeg% vasat, ~ 30 tömeg% nátriumot, ~ 30 tömeg% vizet tartalmaznak, karbonát tartalmuk, pedig elhanyagolható. Az eddig meglévő analitikai adatok alapján megállapítottuk, hogy a minták színe az anyalúgból visszamaradt NaOH tartalommal hozható összefüggésbe.

A minták szerkezetének tanulmányozására porröntgen diffrakciót (XRD), Mössbauer-, XPS, infravörös-, és Raman-spektroszkópiát használtunk. A röntgendiffraktogramok, alapján bizonyítottuk, hogy a kivált csapadék egy új, önálló fázis és nem az anyalúg alkotóelemeinek fizikai keveréke. Mössbauer-spektroszkópiai mérések segítségével megállapítottuk, hogy egy szimmetrikus környezetben lévő, kizárólag Fe(III)-t tartalmazó anyaggal állunk szemben. Az ismeretlen anyag Raman spektruma jól definiált, távoli IR spektruma viszont információszegény. Így a vibrációs spektrumok alapján a Fe(III) körüli koordinációs geometriát (tetraédes vagy oktaédes) nem tudtuk megállapítani. A kérdés eldöntésére EXAFS mérések vannak folyamatban.

A pillanatnyilag rendelkezésre álló adatok alapján feltételezhető, hogy a minta összetétele, vagy Na[Fe(OH)₄]_xNaOH_yH₂O, vagy Na₃[Fe(OH)₆]_x'NaOH_y'H₂O.

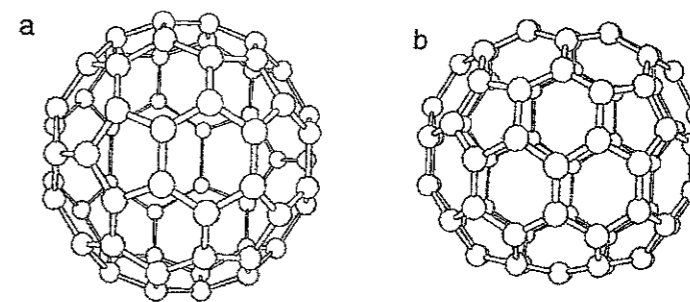
Fullerének és származékaik NMR spektroszkópiás vizsgálata

Király Péter, V. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Rohonczy János** egyetemi docens
ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A dolgozat irodalmi áttekintést nyújt a fullerének szerkezetéről, alapvető származékaikról. Ezen témához kapcsolódóan végeztük kísérleti munkánkat. Fullerénkeverékeket ¹³C-NMR módszerrel vizsgáltunk oldat és szilárd fázisban. Megmértük a C₆₀ spin-rács relaxációs idejét széndiszulfid és deuterokloroform oldószerkegyében. Szintetikus munkánk során a fulleréneket vízoldható fullerolokká alakítottuk, majd szililezéssel származékoltuk. Az előállított fullerolokat és az irodalomban eddig még nem ismert szililszármazékaikat ¹H-NMR és ¹³C-NMR módszerrel vizsgáltuk, jellemeztük. Az előállított fullerolokban a ¹³C-NMR spektrum alapján több különböző kémiai környezetben találtunk hidroxil-csoportokat. A fullerolok sikeres szililezését ¹H/¹³C kétdimenziós HSQC NMR spektrummal igazoltuk.



(a) A Buckminsterfullerene C₆₀ és (b) a rögbilabda alakú C₇₀ molekulák szerkezete.

Az L-hisztidin néhány átmeneti fémionnal alkotott komplexének előállítás, termikus és IR spektroszkópiai vizsgálata

Pál Edit, V. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Labádi Imre** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Szilágyi István doktoráns
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az enzimek speciális tulajdonságú fehérjék, amelyek a biológiai rendszerekben lejátszódó kémiai reakciókat katalizálják igen nagy hatékonysággal, s rendszerint fémionokat is tartalmaznak. A metalloenzimekben a fémionok az enzim molekula szerves részei, és az ún. aktív centrumban helyezkednek el. Itt a leggyakrabban a fehérjét alkotó aminosavak oldalláncaiban található donorcsoportokhoz kapcsolódnak, amely által a fémionok körül egy koordinációs szféra – kvázi – fémion alakul ki. Ismerve e természetes katalizátorok nagy hatékonyságát, szelektivitását, érthető az a megnövekedett érdeklődés az enzimutánzó fémkomplexek keresése és vizsgálata iránt, amelyet tapasztalhattunk az elmúlt évtizedekben.

Az enzimutánzó fémkomplexek vizsgálatok a klasszikus kísérleti módszerek nem biztosítják ugyanazokat a körülményeket, mint amelyek az élő szervezetekben léteznek, ezért van szükség olyan vizsgálatokra, melyek során megpróbáljuk a legmesszemenőbben utánozni a természetet. Ennek egy lehetséges módja, ha egy enzim aktív centrumát utánzó fémkomplexet immobilizálunk szilárd anyagon vagy anyagban. Ezzel próbáljuk utánozni a donor atomoknak, illetve csoportoknak az enzimekben kialakuló meghatározott elrendeződését.

Az immobilizálás sikerének és hatásának megállapításához azonban szükség van a nem immobilizált és az immobilizált komplexek tulajdonságainak összehasonlítására is. Mivel számos enzim aktív centrumában – aktív fémkomplexében – fontos szerepet játszik a hisztidin, ezért a hisztidin tartalmú enzimutánzó fémkomplexek immobilizálására irányuló vizsgálatokat a hisztidin egyszerű fémkomplexeinek előállításával és tanulmányozásával kezdtük el. Vizsgálati módszerként az IR spektroszkópia és a derivatográfia módszereket választottuk.

Alkil-nitritek fotolízise argon mátrixban

Mátyus Edit, IV. évf. vegyész hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Magyarfai Gábor** egyetemi adjunktus
ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék
Dr. Tarczay György egyetemi adjunktus
ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

Munkánk során különböző nitritek (*n*-propil-, *i*-propil-, ciklohexil-, *t*-butil-) konformációs viszonyait és fotokémiai reakcióit vizsgáltuk IR spektroszkópiával argon mátrixban. Mátrixizolációs körülmények között korábban még nem vizsgálták sem az *n*-propil-, *i*-propil-, *t*-butil-nitrit konformációs viszonyait, sem ezen nitritek fotolízisét.

Vizsgálatainkhoz azért választottuk a mátrixizolációs technikát, mert ez lehetővé teszi izolált, szinte kölcsönhatásmentes környezetben levő specieszek tanulmányozását. Az alacsony hőmérsékletnek valamint az izolációnak (azaz a kölcsönhatásmentes környezetnek) köszönhetően reaktív specieszek is előállíthatók akár a mátrix leválasztása közben, akár a már izolált részecskékből fotolízissel. Az alkil-nitritek fotolízise során ilyen reaktív termék lehet például a megfelelő alkoxi gyök is.

A 2004 tavaszán összeállított mátrixizolációs berendezéssel az itt bemutatott eredmények voltak az első mérések, és a mátrixban leválasztott részecskék fotolízisére irányuló első kísérleteket is ezen vegyületcsaládon belül végeztük el.

A konformációs viszonyok tanulmányozására és a spektrumok asszignációjához elméleti kémiai számításokat végeztünk valamennyi nitrit stabil konformereire vonatkozóan B3LYP / 6-31++G** szinten. Azonosítottuk a szobahőmérsékletű gázkeverékből leválasztott mátrixban számottevő mennyiségben jelen levő konformereket, és megfigyeltük a konformerarány változását a fotolízis során.

A fotolízis termékei között valamennyi esetben megjelenik a megfelelő aldehid ill. keton, valamint az instabil nitroxil. Ezen anyagoknak megfelelő spektrumvonalak mellett még egyéb sávokat is megfigyeltünk, melyek hozzárendelését még nem sikerült egyértelműen megadnunk. A lehetséges termékek között szerepel az alkoxi gyök is. E tekintetben még további vizsgálatokat tervezünk, hogy igazolhassuk a gyök nagyobb mennyiségű megjelenését a mátrixban.

Négy karboxi-metil-cellulóz $\text{Me}_2\text{Sn(IV)}$ komplexeinek FT-IR és Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálata

Berenji Péter, IV. évf. vegyész hallgató

SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Nagy László** egyetemi tanár
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Sipos Pál egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Szorcsik Attila tudományos segédmunkatárs
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az ónorganikus komplexek jelentős biológiai aktivitással rendelkeznek [1]. A CMC szilárd állapotban előállított ónorganikus komplexeiben a ligandumok donorcsoportjai koordinációs módjának a meghatározására FT-IR spektroszkópiai vizsgálatokat végeztünk. Az eredmények azt mutatták, hogy a 2-3 pH tartományban leválasztott komplexekben a monodentát módon koordinálódó karboxilátcsoportok mellett a protonált karboxilátcsoportra jellemző sáv is jelen van jelentős intenzitással, tehát nem minden karboxilátcsoport koordinálódik az ónhoz. A széles OH vegyértékrezgési sáv a ligandum protonált hidroxicsoportjaitól, másrészt az ón(IV)organikus kation vegyes akvakomplexének jelenlétével magyarázható. Ennek a sávnak pH 7 felett jelentősen lecsökkent a szélessége, ami az alkoholos OH csoport(ok) fémion indukált deprotonálódásával és koordinációjával magyarázható. Ugyanakkor a karboxilátcsoportok is részt vesznek a koordinációban és így intra- és intermolekuláris hidak révén bonyolult, térhálós szerkezetű komplexek kialakulására következtettünk.

A központi fémion környezete szimmetriájának meghatározásához Mössbauer-spektroszkópiai méréseket végeztünk. A színeképek mindegyike az ón(IV)organikus komplexekre jellemző kvadrupólus-felhasadás (Δ) értékeket mutat, ami ugyancsak jól definiált komplexek képződésére utal. A kísérleti Δ értékeket összehasonlítottuk a parciális kvadrupólus felhasadás elmélet alapján a koordinációs szféra különböző elrendeződéseire számított elméleti $|\Delta|$ értékekkel és így kiválasztottuk a komplex legvalószínűbb sztereokémiáját. A számított $|\Delta|$ értékek a C–Sn–C kötésszög módosításával megfelelően közelíthetők a mért értékekhez. A központi ónatom körül kialakult geometria trigonális bipiramisos és oktaéderes.

Ezt a munkát az Országos Kutatási Alap (OTKA, T 043551 és a T 049415) támogatta, amelyért a szerzők köszönetet mondanak.

[1] Pellerito, L., Nagy, L., *Coord. Chem. Rev.*, 224, 111-150 (2002)

A konferencián részt vevő hallgatók névsora

Név	Int. kódja	Tagozat	Összef.
Alexa Natalia	WUT	szerves kémia II.	213. o.
Alexandra Gruia	WUT	szerves kémia II.	213. o.
Angyal András	VE MK	kémiai technológia	110. o.
Angyal Vilmos	ELTE TTK	környezeti kémia és környezettechnológia	140. o.
Bagdi Kristóf	BME VEK	makromolekuláris és kolloidkémia	155. o.
Bai Katalin, Boglárka	ELTE TTK	szerves kémia II.	204. o.
Baja Bernadett	VE MK	környezeti kémia és környezettechnológia	137. o.
Bálint Szabolcs	SZTE TTK	szervetlen kémia	218. o.
Balogh János	VE MK	reakciókinetika és katalízis	172. o.
Balogh Szabolcs	VE MK	reakciókinetika és katalízis	169. o.
Balogh Zoltán	SZTE TTK	szervetlen kémia	220. o.
Baráth Gábor	VE MK	koordinációs kémia	131. o.
Bartos Ádám	ELTE TTK	szerves kémia II.	202. o.
Bátai Réka	PTE ÁOK	analitikai kémia	49. o.
Benedek Gabriella	SZTE TTK	szerves kémia I.	193. o.
Benkő Zoltán	BME VEK	fizikai kémia	103. o.
Bereczki Katalin	DE TTK	analitikai kémia	45. o.
Bereczki Laura	BME VEK	analitikai kémia	50. o.
Berenji Péter	SZTE TTK	szervetlen kémia	226. o.
Birta Nicoleta	WUT	biokémia és biotechnológia	76. o.
Bognár Balázs	PTE TTK	szerves kémia II.	208. o.
Bónis Anna Zsófia	ELTE TTK	analitikai kémia	48. o.
Bordács Sándor	BME TTK	fizikai kémia	97. o.
Brăduț Jurconi	WUT	biokémia és biotechnológia	78. o.
Buda Botond	VE MK	kémiai technológia	120. o.
Bús Nikolett Katalin	VE MK	kémiai technológia	117. o.
Csató Anita	SZTE TTK	környezeti kémia és környezettechnológia	141. o.
Csaj Tamás	VE MK	koordinációs kémia	133. o.
Csepei Lénárd István	BBTE	fizikai kémia	107. o.
Cserényi Szabolcs	SZTE TTK	szerves kémia I.	182. o.
Csizi Júlia Ivett	SZTE TTK	fizikai kémia	95. o.
Czibulya Zsuzsanna	SZTE TTK	szervetlen kémia	216. o.
Darányi Mária	SZTE TTK	szerves kémia II.	212. o.
Dávid Tamás	SZTE TTK	szervetlen kémia	220. o.
Demeter Zsolt	ME MAK	szervetlen kémia	221. o.