

XXVIII.

Országos  
Tudományos  
Diákköri  
Konferencia



Kémiai és Vegyipari Szekció



JA7Epress



SZEGEDI  
EGYETEMI  
KIADÓ

Szeged, 2007. április 2–4.

# Analitikai kémia tagozat

1. A feladat megoldásához a következő adatokat használja:  $\log K_{sp}(\text{AgCl}) = 9,75$ ;  $\log K_{sp}(\text{Ag}_2\text{C}_2\text{O}_4) = 20,45$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaC}_2\text{O}_4) = 23,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaC}_2\text{O}_4) = 17,70$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrC}_2\text{O}_4) = 10,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbC}_2\text{O}_4) = 12,70$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgC}_2\text{O}_4) = 8,75$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnC}_2\text{O}_4) = 10,65$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiC}_2\text{O}_4) = 12,15$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnC}_2\text{O}_4) = 10,05$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaCO}_3) = 7,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaCO}_3) = 8,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrCO}_3) = 7,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbCO}_3) = 7,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgCO}_3) = 6,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnCO}_3) = 8,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiCO}_3) = 9,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnCO}_3) = 8,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaSO}_4) = 9,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbSO}_4) = 7,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgSO}_4) = 6,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiSO}_4) = 8,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaCrO}_4) = 9,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbCrO}_4) = 7,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgCrO}_4) = 6,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiCrO}_4) = 8,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaC}_2\text{O}_4) = 23,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaC}_2\text{O}_4) = 17,70$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrC}_2\text{O}_4) = 10,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbC}_2\text{O}_4) = 12,70$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgC}_2\text{O}_4) = 8,75$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnC}_2\text{O}_4) = 10,65$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiC}_2\text{O}_4) = 12,15$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnC}_2\text{O}_4) = 10,05$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaCO}_3) = 7,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaCO}_3) = 8,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrCO}_3) = 7,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbCO}_3) = 7,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgCO}_3) = 6,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnCO}_3) = 8,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiCO}_3) = 9,80$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnCO}_3) = 8,30$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaSO}_4) = 9,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbSO}_4) = 7,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgSO}_4) = 6,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiSO}_4) = 8,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnSO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{BaCrO}_4) = 9,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{CaCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{SrCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{PbCrO}_4) = 7,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{MgCrO}_4) = 6,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{MnCrO}_4) = 7,35$ ;  $\log K_{sp}(\text{NiCrO}_4) = 8,85$ ;  $\log K_{sp}(\text{ZnCrO}_4) = 7,35$ .

**Lab-on-a-chip technika alkalmazása a búzafajták automatikus azonosításában**

**Balázs Gábor**, V. évf. biomérnök  
BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Tömösközi Sándor** egyetemi docens  
BME Biokémiai és Élelmiszertechológiai Tanszék  
**Nádosi Márta** kutató mérnök  
BME Biokémiai és Élelmiszertechológiai Tanszék  
Konzulens: **Dr. Bezúr László** egyetemi docens  
BME Általános és Analitikai Kémiai Tanszék

A gabonatermeltetési rendszereknél, a kereskedelemben, és a nemesítés során szükség van a búzafajták gyors, és megbízható azonosítására. A jelenleg rendelkezésünkre álló eljárások időigénye nagy, rutinszerű végrehajtásuk gyakorlatot és elmélyült szakértelmet igényel. Ezzel szemben az iparban, a kereskedelemben, de még a vizsgálati laboratóriumokban is rövidebb vizsgálati idő, megbízható analitikai módszer és automatizált méréstechnika iránt van növekvő igény.

A hitelkártya nagyságú „analitikai laboratórium”, a laboratory on a chip (lab-on-a-chip, LOC) az elmúlt néhány év eredménye. A mikrochip elektroforézisen alapuló technológia olyan modern és automatizálható bioanalitikai módszerek alkalmazását teszi lehetővé, amivel gyorsan, kis mennyiségű mintából dolgozhatunk. A labchip az eddigieknél lényegesen hatékonyabb analitikai megoldást kínál a DNS-ek és RNS-ek vizsgálatához, a fehérjék méret szerinti elválasztásához, és az egyes alegységek azonosításához.

Munkám során alapvetően a módszer egyes lépéseinek validálását, valamint a fehérjék alegységösszetételét is befolyásoló, ezért a fajtaazonosítás szempontjából meghatározó jelentőségű környezeti tényezők hatását vizsgáltam. Tanulmányoztam a módszerhez szükséges mintaelőkészítési lépések megfelelőségét, a lehetséges hibák forrásait. Vizsgáltam a létrehozott magyar búzafajtákon alapuló adatbázis, és a hozzá kapcsolódó, a Tanszéken fejlesztett fajtaazonosítási szoftver alkalmazását.

Összegzésként megállapítható: a lab-on-a-chip technika alkalmas lehet fehérjealapú fajtaazonosítási rutinmódszer kialakítására. Az analitikai teljesítményjellemzők vizsgálata alapján a módszer ipari gyakorlatban történő alkalmazása nagy eséllyel vezethető be a közeljövőben. A gyakorlati alkalmazás mellett az eddig elért eredmények megalapozzák az eljárás kutatómunkában történő alkalmazását, pl. a környezeti hatások vagy a fehérjeösszetétel-funkcionalitás kapcsolat vizsgálata során.

**Halogéntartalmú oldószerekkel szennyezett talajvizek mikrobiológiai  
lebontásának követése kapilláris gázkromatográfiával**

**Benesóczki Dóra, V. évf. vegyész**  
ELTE Természettudományi Kar

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

A halogénezett szénhidrogének (pl. tetraklóretilén, triklóretilén) széleskörű ipari felhasználású anyagok, gyakori talaj és talajvízszennyezők. Nagyfokú toxicitásuk miatt fontos a szennyezett területek kármentesítése, azaz remediációja. Az ELTE Mikrobiológiai Tanszékkel való kooperáció keretében módszert dolgoztam ki halogénezett szénhidrogének mikroorganizmusokkal történő lebontásának analitikai követésére.

Az általam kifejlesztett mérési eljárás klórozott és a bioremediáció során keletkezett szénhidrogének (etilén, etán, metán) gázkromatográfiás meghatározására alkalmas. A módszer automatizált statikus gőztér analízist, szimultán lángionizációs és elektronbefogásos detektálást alkalmaz, talaj illetve talajvíz mátrixokra optimalt.

**Cr(VI) extrakciós elválasztása, dúsítása dimetil-indokarbocianin (DIC) segítségével és a króm tartalom meghatározása GFAAS módszerrel**

**Boruzs Klára**, V. évf. környezettudomány, vegyész szakirány  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Posta József** egyetemi tanár  
DE Szerzetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A munkám során klorid ionok jelenlétében a Cr(VI) ion asszociátum képződésének és elválasztásának körülményeit vizsgáltam szimmetrikus cianin színezékekkel (dimetilindokarbocianin – DIC). A munkám célja az volt, hogy az eredeti Cr(VI) komplexbe vitelére és elválasztására kidolgozott spektrofotometriás módszert grafitküvettás atomabszorpciós spektrometriára alkalmazzam.

Savas közegben és klorid ionok jelenlétében a dimetil-indokarbocianin (DIC) színezék komplexet képez a Cr(VI)-al. A komplex képződésének és elválasztásának körülményeit vizsgáltam. Extraháló szerként toluolt használtam. A munka során meghatároztam a Cr(VI) komplex szerves fázisba való toluolos extrakciójának optimális körülményeit (pH, klorid-koncentráció és a színezék koncentrációja). Megvizsgáltam a hőmérséklet hatását az elválasztásra, a kialakult komplex stabilitását, az esetleges dúsítási lehetőségeket és néhány idegen ion hatását az elválasztásra. A krómtartalmat Zeeman-háttérkorrekciós grafitküvettás atomabszorpciós spektrométerrel (GFAAS) határoztam meg.

**Az eljárás leírása**

Az extrakciót szobahőmérsékleten végeztem. A vizes fázis térfogata (kivéve az esetleges dúsítási lehetőségek vizsgálatánál) 5 mL volt. A kémcsövekbe a Cr(VI)-hoz adagoltam a reagensek (klorid ionok, kénsav, színezék) optimált koncentrációjának [ $c(\text{NaCl}) = 1,3\text{M}$ ;  $c(\text{H}_2\text{SO}_4) = 0,2\text{M}$ ;  $c(\text{DIC}) = 1,1 \cdot 10^{-4}\text{M}$ ] megfelelő térfogatokat, majd az oldatot nagy tisztaságú ioncserélt vízzel feltöltöttük 5 mL-re. Ezután az oldatot 1 perces extrakciónak vettem alá. Extrahálószerként toluolt használtam. A két fázis szétválása után meghatároztam a szerves fázis krómtartalmát GFAAS módszerrel.

**Eredmények**

A módszert sikeresen alkalmaztam a króm(VI) GFAAS-sal való meghatározására. A munka során felvett kalibrációs görbe ( $y = 0,005x$ ) a Lambert-Beer törvényt követően 0-10 ppb Cr(VI) tartományban lineáris. A kialakult komplex stabilitási vizsgálata alapján 2 órán keresztül nem változott az abszorbancia. A reakció szobahőmérsékleten volt optimális. A hűtés nem volt hatással a reakcióra, míg a hőmérséklet növelése (50 °C-ig) a komplex bomlásához vezetett.



**Többszörös lézerimpulzusokkal kivitelezett lézerrel indukált plazma spektroszkópia (LIPS) jellemzése és alkalmazása**

**Cseh Gábor**, III. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Galbács Gábor** egyetemi docens  
SZTE Szerzetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A LIPS a lézer fényforrással kivitelezett atomspektroszkópiai módszerek közé tartozik, amely működési elve a következő. Egy kellően nagy energiájú, impulzus üzemű lézer fényét a mintatárgy felületén egy kis pontra fókuszáljuk, ahol a minta anyaga elpárolog, atomizálódik illetve ionizálódik - rövid élettartamú mikroplazma jön létre. Analitikai célra ebben a mikroplazmában gerjesztődő mintaalkotók által kibocsátott emissziós spektrum használható. A LIPS technika nagy előnye, hogy nincs szükség mintaelőkészítésre, így szilárd, gáz és folyadék-halmazállapotú minták egyaránt mérhetők. Az elemzés a mintafelület néhány száz  $\mu\text{m}$  átmérőjű kis részletén történik, ami felületi elem-eloszlás vizsgálatot is lehetővé tesz. Ismételt mérésekkel rétegvastagság-mérés is lehetséges. A módszer mikrodestruktív, mindössze ng nagyságrendű mintamennyiséget igényel. A mérések akár nagy távolságból, vagy terepen is elvégezhetőek. A LIPS valódi multielemes módszer, amelynek kimutatási határai 1-10  $\mu\text{g/g}$  nagyságrendűek.

A LIPS technika teljesítménye elvben fokozható, ha kettő vagy több lézerimpulzussal kivitelezük a mérést oly módon, hogy a követő lézerimpulzusok és a mikroplazma között kölcsönhatás alakulhat ki. Ilyenkor ugyanis a követő lézerimpulzusok energiája tisztán a mikroplazma komponenseinek gerjesztésére fordítható. Munkám során ennek az elvnek a gyakorlatban való kipróbálását végeztem el egy mikroszkóp köré épített, hordozható, többszörös lézerimpulzusokkal dolgozó, a Tanszéken kifejlesztett LIPS mérőműszer felhasználásával.

Különböző szilárd minták (elsősorban ötvözetek és műanyagok) alkalmazásával igazoltam, hogy a több impulzusos LIPS technika jelentősen érzékenyebb és precízebb mérések kivitelezését teszi lehetővé. Kísérleteim során a LIPS kvalitatív és kvantitatív alkalmazására is sor került. Nehézfémek jelenlétét és koncentrációját vizsgáltam különböző műanyag, szintetikus kötőanyag és ötvözetminták esetében. Az alkalmazott kísérleti berendezés olcsó és kisebb méretű, mint más alternatív berendezések, amely széles körű ipari alkalmazási lehetőségeket jósol.

**Vízből extrahálható ásványolaj-eredetű szénhidrogének meghatározása  
membrán segített oldószeres extrakcióval**

**Csemyák Izabella, V. évf. vegyész**  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Kende Anikó** PhD hallgató  
ELTE, EKOL laborvezető

A leggyakrabban előforduló környezetszennyező anyagok közé tartoznak az ásványolaj-eredetű szénhidrogének, melyek analitikai mérése a jelenleg használatban levő szabvány szerint folyadék-folyadék extrakción alapul. Ez a minta-előkészítési eljárás időigényes és nagymennyiségű oldószer szükséges hozzá.

Munkám során egy új, alternatív módszert dolgoztam ki vizek  $C_9$ - $C_{24}$  szénatomszám tartományba eső alifás szénhidrogén-tartalmának gázkromatográfiás meghatározására membrán segített oldószeres extrakcióval (Membrane Assisted Solvent Extraction, MASE). Vizsgáltam az új technika oldószerfüggését, meghatároztam az optimális oldószertérfogatot, extrakciós időt és módot, valamint elvégeztem a módszer kalibrálását és értékelését. Az új módszer előnye az egyéb minta-előkészítési eljárásokhoz képest, hogy oldószer- és munkaidőigénye csekély, így az eljárás egyszerre környezetbarát és költségkímélő.

A minta-előkészítési módszer mellett optimalám a nagytérfogatú injektáláshoz (Programmable Temperature Vaporiser, PTV) szükséges paramétereket, a kimutató határt jelentősen csökkentettem. Továbbá a membrán segített oldószeres extrakciót teljesen automatizáltam, ezáltal párhuzamosan több minta készíthető elő. Így lerövidült az analízis idő és a relatív standard deviációk is csökkentek.

**Speciációs analitikai mérőrendszerek kidolgozása plazma emissziós  
atomspektroszkópiai detektálással**

**Horváth Márk**, V. évf. környezetmérnök  
SzIE Mezőgazdaság- és Környezettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Heltai György** tanszékvezető egyetemi tanár  
SZIE Kémia és Biokémia Tanszék

A speciációs analitikai módszerek általában kromatográfias elválasztási eljárások és elem-specifikus detektálási módszerek összekapcsolását igénylik. A MIP-AES a gázkromatográfiában jól bevált elem-specifikus detektor. Folyadék-kromatográfias detektorként való alkalmazásáról azonban alig találunk adatokat, az oldatporlasztásos mintabevitel kis hatásfoka és technikai nehézségei miatt.

A nagynyomású hidraulikus porlasztó, és az általunk kifejlesztett radiatív fűtésű deszolvatáló rendszer segítségével vizes oldatok jó hatásfokkal betáplálhatók MIP sugárforrásba. A kifejlesztett rendszer HPLC elválasztásokkal való összekapcsolásának lehetőségeit Cr(III)/Cr(VI) speciációs analízise során vizsgáltuk, amelyben a Cr(III)/Cr(VI) ionpár-képzéses HPLC elválasztást alkalmaztunk. Ennek során részletesen összehasonlítottuk a kromatográfias jelképződést befolyásoló alábbi hatásokat MIP-AES és ICP-AES detektálás esetén:

- A mintabemérő hurok térfogatának nagysága (20  $\mu\text{l}$ , 100  $\mu\text{l}$ , 455  $\mu\text{l}$ ).
- A  $\text{Cr}^{3+}$  és a  $\text{CrO}_4^{2-}$  ionforma hatása a plazmára vizes közegben és víz-metanol elegyekben.
- A szerves ionpár-képző reagens (TBA-Ac) hatása a plazmára vizes közegben.
- A TBA-kromát ionpár-komplex visszanyerése az oszlopról.
- Könnyen ionizálható elemek (K, Na, Ca) hatása a két ionforma emissziójára.

További kísérletekben a HPLC rendszerből származó nagy eluensáram ( $\approx 1 \text{ ml min}^{-1}$ ) jobb illesztésének lehetőségeit a radiatív fűtésű deszolvatáló termospray típusú átalakításával tanulmányoztuk.

Mіндеzen hatásokat figyelembe véve megállapítottuk, hogy a HPLC-NHP-MIP-AES rendszerrel species szelektív kalibráció esetén 2-3 nagyságrendű dinamikus tartományban a Cr(III)/Cr(VI) speciációs analízis elvégezhető, a kimutatási határok a nanogram tartományba esnek.



**Műanyagminták elemanalitikai célú vizsgálata spektroszkópiai módszerekkel**

**Jedlinszki Nikoletta**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Galbács Gábor** egyetemi docens  
SZTE Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az adalékanyagok és az előállítás során alkalmazott fémtartalmú katalizátorok miatt a műanyagok is tartalmazhatnak különböző veszélyes elemeket (pl.: Pb, Cd, Cr, Hg, Br). Ezen elemeket tartalmazó vegyületek a műanyagok használata vagy megsemmisítése, újrafeldolgozása során veszélyt jelentenek - esetenként rákkeltők - ezért az Európai Unió különböző szabályokat vezetett be ellenőrzésükre. Ezek egyike az RoHS (Restriction of Hazardous Substances Directive), amely 2006. július 1-jén lépett érvénybe és az elektromos és elektronikai ipar termékeinek összetevőire (így műanyagokra is) vonatkozik. Ez a direktíva négy elemre és két vegyületcsoportra vonatkozóan tartalmaz megkötéseket: ezek rendre az ólom, higany, kadmium, króm(VI), valamint a PBB (polibrómozott-bifenilek) és a PBDE (polibrómozott-difenil-éterek), mely utóbbiak égéscsökkentő vegyületek.

Munkám közvetlen célja műanyag minták nehézfém tartalmának vizsgálata volt RoHS megfelelés szempontjából induktív csatolású plazma atomemissziós spektrometriával és röntgen fluoreszcencia spektroszkópiával. A minták kiegészítő jellemzésére a fotoakusztikus infravörös spektroszkópia módszerét alkalmaztam.

A vizsgált műanyag minták között különböző használati tárgyakból (játékokból, fröszközőkből, laboratóriumi eszközökből, stb.), valamint a TVK-ból (Tiszai Vegyi Kombinát) kapott alapanyagból származnak, továbbá felhasználtam az Európai Mérésügyi Hivatal (IRMM) által kibocsátott polietilén referencia mintákat is. Mivel a feldolgozott műanyagok kémiai ellenállóképessége igen különböző, így szükséges volt a feltárás előtt oldási próbákat is elvégezni. A mintákat az analízis előtt oldószerrel és ultrahanggal segített tisztításnak vettem alá, majd kiszáritottam őket. A mintákat zárt rendszerben, nagy tisztaságú fluoropolimer edényzet és HNO<sub>3</sub>, HCl, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> és HF tartalmú reagensanyag segítségével roncsoltam el egy AntonPaar Multiwave 3000 típusú mikrohullámú mintaelőkészítő berendezésben. Az oldatok nehézfém tartalmát egy Jobin-Yvon 24 típusú szekvens induktív csatolású plazma atomemissziós spektrométerrel határoztam meg. Az analízis minőségellenőrzését a bizonylatolt referencia minta segítségével végeztem el. A műanyag minták elemösszetételének gyors, áttekinthető jellegű vizsgálatára egy Philips MiniPAL típusú asztali röntgen fluoreszcencia spektrométert használtam.

**Biochipek fejlesztése aptamer - ligandum kölcsönhatások képalkotó plazmon rezonanciás vizsgálatához**

**Lautner Gergely**, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

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

A specifikus biomolekuláris kölcsönhatások rendkívüli szelektivitása lehetőséget nyújt egyrésztől összetett minták egyes komponenseinek mintaelőkészítés- és elválasztás nélküli meghatározására (bioszenzorok), másrészt alapot szolgálnak a biochip technológia és a nagy áteresztő képességű bioanalizátorok kifejlesztéséhez.

Munkám során a képalkotó felületi plazmon rezonancia alkalmazási lehetőségeit vizsgáltam DNS aptamer - ligandum kölcsönhatások detektálására. Az aptamerek kombinatorikus kémián alapuló in-vitro szelekciója és további célzott kémiai és biokémiai módosítása rendkívül jó kilátást biztosít új, hatékonyabb terápiás és antivirális gyógyszerek, molekuláris felismerést biztosító komponensek előállítására. Elsődleges feladatomban az aptamer-ligandum kölcsönhatások vizsgálatához szükséges biochipek tervezése, előállítása és alkalmazása volt. A képalkotó felületi plazmonrezonancia (iSPR) multiplex detektálási lehetőségének kihasználásához mikrokontakt nyomtatást és mikrofluidikai rendszeren alapuló felületmódosítási eljárásokat fejlesztettünk és alkalmaztunk. A mikrokontakt nyomtatásnál, valamint a mikrofluidika előállításához alkalmazott poli-dimetil-sziloxán (PDMS) mikromintázására fotolitográfiás, illetve egy újszerű lézeres ablációs módszert dolgoztunk ki.

A szenzorchip mikromintázási lehetőségeinek alkalmazásával megkíséreltük felmérni az aptamer alapú iSPR bioszenzorok előállításának lehetőségeit mind nagyméretű (Trombin véralkodási faktor, MT32 almavírus proteín), mind kisméretű (Ochratoxin A mikotoxin) ligandumokra. Ugyanakkor tekintettel arra, hogy ezek az aptamer - ligandum modellrendszerek – a trombin - anti-trombin aptamer rendszer kivételével – még nem felderítettek, vizsgáltuk az új aptamerek kötődési tulajdonságait.

Az aptamer-ligandum kötődést legérzékenyebben a nagy molekulatömegű ligandumok esetében tudtuk detektálni, és esetenként új reagenseket is előállítva, további jelerősítési lépéseket is sikerrel tudtunk alkalmazni.

**Új extrakciós módszer kidolgozása tetrabutil-ammónium-bromid komplexképzővel vízminták krómspeciációs elemzésére**

Nagy Alida Nóra, V. évf. környezettudomány, vegyész szakirány  
DE Természetudományi Kar

Témavezető: **Dr. Posta József** egyetemi tanár  
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A folyadék-folyadék extrakciót tetrabutil-ammónium-bromiddal sikeresen alkalmaztam vízminták Cr(VI) tartalmának grafitkemencés atomabszorpciós módszerrel való meghatározására. Ennek lényege, hogy a Cr(VI) ion-pár komplex vegyületet képez a tetrabutil-ammónium-bromiddal. Az így létrejött ion-pár komplex jól oldódik izobutil-metil-ketonban. Az optimálás keretén belül meghatároztam az optimális kénsav koncentrációt, ami  $0,01 \text{ mol/dm}^3$  lett.  $0,02 \text{ mol/dm}^3$ -es savkoncentráció felett abszorbancia csökkenést tapasztaltam, ami a Cr(VI) redukciója miatt következett be. A TBA koncentrációjára is elvégeztem az optimálást. Eredményképp elnyúló maximum görbét kaptam és az optimális koncentrációt  $1,6 \cdot 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$ -nek állapítottam meg. Egy bizonyos koncentráció felett az abszorbancia csökkent, ami a hamvasztási folyamat alatt a túl sok szerves anyag miatt következett be mivel, a Cr(VI) egy része illékony formában távozott. A módszer kiválóan használható króm(VI)-forma extrakciós elválasztására és dúsítására. A munkám során felvett kalibrációs görbe

$0-15 \mu\text{g/dm}^3$  tartományban lineáris volt. A kialakult komplex abszorbanciája 24 órás időtartamban jelentősen nem változott, a hőmérséklet nincs hatással a komplex képződésre. Az általam vizsgált zavaró ionok sincsenek hatással a Cr(VI) meghatározásra. A kidolgozott módszert házilag előállított referencia anyaggal hitelesítettem.

**Diasztereomerek elválasztása normál fázisú folyadékkromatográfiával**

**Oláh Erzsébet**, I.évf. Ph.D.  
BME Vegyész és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Fekete Jenő** egyetemi tanár  
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék

Munkám során módszert fejlesztettem ki a piretroidok családjába tartozó  $\beta$ -cipermetrin diasztereomerjeinek meghatározására.

Vizsgáltam mind az állófázis, mind a mozgófázis hatását az elválasztást jellemző paraméterekre. A fordított fázisú rendszerek vizsgálatakor C30-as töltetekkel értem el a legjobb elválasztást, azonban ekkor csak a cisz és transz diasztereomereket sikerült elválasztani.

Következő lépésben normál fázisú kromatográfiás oszlopokat vizsgáltam. Ebben az esetben már sikeres volt az elválasztás. Az állófázisok között voltak szilikagél alapú, alumínium-oxid alapú és kémiailag módosított töltetek. Optimálva a mozgófázis összetételét egyes oszlopoknál sikerült elérni a diasztereomerek elválasztásának csúcspontokra vonatkozó feltételét ( $R_s > 2$ ).

A poláris modifikátorok vizsgálata új eredményt hozott. Vizsgálataim során a különböző oldószerek közül az acetonitril a többioldószerhez (etil-acetát, di-izopropil-éter, terc-butil-metil-éter, diklór-metán) képest másképp bontotta fel a diasztereomer csúcsokat. Az eltérő viselkedés annak köszönhető, hogy az acetonitril a szilárd fázis részecskéinek pórusait szinte teljes mértékben kitölti. Így ebben az esetben folyadék-folyadék megoszlásról beszélhetünk, míg a többi oldószer esetén szilárd- folyadék megoszlás van.

Mérési eredmények alapján kiválasztottam a cipermetrin diasztereomerek elválasztására legjobbnak bizonyult kolonna-oldószer párt: NovaPak Silica ( $4 \mu\text{m}$ ,  $3,9 \times 150 \text{ mm}$ , Waters), 4% diizo-propil-étert/hexán. Következő lépésben vízminták  $\beta$ -cipermetrin tartalmának meghatározhatóságát vizsgáltam.

Mérésekkel bizonyítottam, hogy a  $\beta$ -cipermetrin megkötődik a vízben lévő szilárd szennyezőkön. Végső következtetésként elmondhatjuk, hogy vízből történő mérések során nem végezhetünk kvantitatív meghatározást, mivel a pontos kimutatást túl sok tényező nehezíti. Módszerünk kvalitatív.

**Az Ionkromatográfia Sztochasztikus Retenciós Elmélete és Alkalmazása Szerves és Szervetlen Anionok Elválasztásában**

**Olajos Marcell**, okleveles környezetmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Hajós Péter** egyetemi docens  
Analitikai Kémia Tanszék  
**Horváth Krisztián** PhD hallgató  
Analitikai Kémia Tanszék

A kromatográfia sztochasztikus elmélete egy molekuláris szintű modell, amely valószínűleg a legegyszerűbb képet festi a kromatográfias folyamatról. A kromatográfias csúcs kialakulását a részecskék véletlenszerű vándorlásával írja le, adszorpció-deszorpció folyamatokkal kombinálva, amely szintén véletlenszerűen lép fel. Vonzó alternatívát kínál a hagyományos makroszkopikus modellekkel szemben, amelyek egy differenciális tömegmérleget írnak fel a kromatográfias folyamat kívánt részletességű fizikai-kémiai leírására, s melyek megoldása néha igen bonyolult matematikai módszereket igényel.

Munkám során szerves és szervetlen anionok (fluorid, formiát, klorid, bromid, nitrát, szulfát, oxalát, foszfát) retenciós tulajdonságait vizsgáltam különböző koncentrációjú és pH-jú karbonát/hidrogénkarbonát eluensrendszert alkalmazva. Görbeillesztéssel meghatároztam az egyes komponensek kromatográfias csúcsalakját leíró exponenciálisan módosított Gauss (EMG) görbék paramétereit. A vissza nem tartott komponens csúcsalakjának ismeretében, dekonvolúciós technika segítségével az egyes kromatogramokból olyan kromatográfias csúcsokat állítottam elő, melyek csak az oszlop állófázisával való kölcsönhatás okozta sávszélesedés hatásait hordozták magukon. Meghatároztam a sztochasztikus folyamatokat leíró jellemzőket. Az eredmények ismeretében megállapítottam a mintainonok tölteten való megkötődésének gyakoriságát. A vizsgálatok során nyert retenciós adatbázis alapján a többszörös analit/eluens (multispecies eluent/analyte) retenciós modell paramétereit iterációs úton meghatároztam. Ezek segítségével és a sztochasztikus modell paramétereinek felhasználásával szerves és szervetlen anionok kromatogramját jósoltam nagy pontossággal.

A két eljárás (sztochasztikus elmélet és többszörös analit/eluens retenciós modell) együttes alkalmazásának jelentős előnye, hogy nem csak a kromatográfias csúcs helyét (minőségi információ), hanem a csúcs alakját (kinetikai információ) is becsülni képes analitikai elválasztások céljára.

**Az adszorpciós izotermák és az adszorpciós energiaeloszlások meghatározása  
folyadékkromatográfiában**

Vajda Péter, V. évf. biológia-kémia  
PTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Felinger Attila** egyetemi tanár  
PTE Analitikai Kémia Tanszék

Folyadékkromatográfiában a mozgófázis és az állófázis határfelületén lejátszódó folyamatok leírására alapvető a nemlineáris egyensúlyi izotermák ismerete. Az egyes vegyületek retenciós mechanizmusa sokkal megbízhatóbban tanulmányozható a nemlineáris kromatográfia módszereivel, mint az analitikai kémiában szokásos nagyhígítású minták (lineáris kromatográfia) retenciós adatai alapján.

Kísérleteink célja, hogy egy újonnan, speciálisan a karotinoid vegyületek elválasztására kifejlesztett C-30-as porózus töltetű oszlop retenciós tulajdonságait tanulmányozzuk. Vizsgált vegyületnek a fenolt választottuk. Elsőként frontális analízissel meghatároztuk az izoterma adatpontjait, majd iterációval ezen adatpontokra illesztettük az egyes izoterma modelleket, ezzel kinyerve a megfelelő izoterma-paramétereket. Az illeszkedések jellemzésére a maradékok négyzetes összegét (RSS) használtuk.

Az egyes izoterma modelleket első közelítésben statisztikai módszerrel értékeltük ki, hogy kizárhassuk a szignifikánsan rosszabb illeszkedésű modelleket.

Az affinitásienergia-eloszlás kiszámítására a várhatóérték-maximalizálásának módszerét használtuk, amely segítségével kiválasztható az adott kísérleti körülmények között legmegfelelőbb izoterma modell.

A kísérleteink alapján az adott kísérleti rendszerben a fenol adszorpciós tulajdonságait a bi-Langmuir modell írja le. A bi-Langmuir modell két különböző energiájú, független adszorpciós helyet feltételez. Méréseink alapján a két különböző adszorpciós hely átlagos kötési energiájának különbsége 6,12 kJ/mol.

Ezen energiakülönbség annak tulajdonítható, hogy a rendezett és rendezetlen állapotban lévő állófázis részeken a vizsgált anyag eltérő kötési energiával kötődik meg.

**Aminosavak elválasztása ciklodextrinekkel kapilláris elektroforézis technikával**

**Varga Erzsébet**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Iványi Róbert**  
Cyclolab Kft.

Az élő szervezetek alapvetően királis jellegéből adódóan az optikai izomerek (enantiomerek) rendkívül hasonló szerkezetük ellenére gyakran eltérő biológiai hatásúak. Az enantiomer párok egyes alkotóinak eltérő hatása miatt az enantiomer-tiszta termékek gyártása ma már alapvető követelmény a gyógyszeriparban. A téma jelentőségét jól mutatja, hogy az enantiomer-szelektív szintézisek kutatását 2001-ben kémiai Nobel-díjjal jutalmazták.

A királis elválasztásokat bonyolulttá teszi, hogy a kölcsönható csoportoknak nemcsak fizikailag, kémiailag kell egymásnak megfelelniük, hanem térbeli elrendezésükben is. A kölcsönhatások bonyolultsága rendkívül megnehezíti az elválasztás sikerének előrejelzését.

Kapilláris elektroforetikus módszert dolgoztam ki származékolatlan aromás királis aminosavak elválasztására ciklodextrin alkalmazásával. Sikeresen demonstráltam, hogy bázikus körülmények között semleges és negatív töltésű CD-ekkel a negatív töltésű aminosavak elválaszthatók.

Az elválasztott aminosavak között olyan enantiomerpárok is szerepelnek ( $\beta$ -metil-aminosavak) amelyeket elsőként sikerült kapilláris elektroforézis technikával megvalósítani. Összehasonlítottam a különböző üregmérettel rendelkező natív  $\alpha$ -,  $\beta$ - és  $\gamma$ -CD-ek és azok karboximetilezett és karboxietilezett származékainak királis elválasztó képességét. Leghatékonyabb királis szelektornak a karboximetil- és karboxietil- $\alpha$ CD bizonyultak.

A látszólagos enantiomer-szelektor komplex stabilitási állandók meghatározását a semleges CD-ek esetében több esetben sikerült elvégezni, a kapott értéket összehangban álltak a Wren-féle mobilitás-különbség elmélettel. A triptofán esetében a semleges  $\alpha$ CD és a negatív töltésű CM $\alpha$ CD szelektorokkal eltérő migrációs sorrendet sikerült elérnem (azonos felismerési képesség ellenére), amelynek hasznos következménye lehet megfelelő, rugalmas királis tisztaságvizsgálati analitikai módszerek fejlesztése.



**Áttetsző, gázzáró alumínium-oxid kerámia égőtestek szintereléses előállításához kapcsolódó analitikai vizsgálatok**

**Varga Péter Pál**, I. évf. PhD  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Madarász János** egyetemi docens  
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék  
**Szemán Norbert** fejlesztő mérnök  
General Electric Consumer & Industrial

A kerámia-fémhalogén (CMH – Ceramic Metal Halide) lámpák a nagynyomású kisülőlámpák csoportjába tartoznak. Ezt a lámpatípust a kiváló színvisszaadás, a nagy fényerő és a hosszú élettartam jellemzik. A fényforrás színe a természetes fehér fényhez közelít, amihez ritkaföldfém adalékokat alkalmaznak. A kerámia fémhalogén lámpákban a fényt kerámiafalú kisülőcső szolgáltatja. Az égőtest nagy tisztaságú alumínium-oxid kerámiából készül, melyet speciális kerámiagyártási eljárással, magas hőmérsékletű szinterelési lépésekben állítanak elő. A kerámia test három részből áll, egy csőből és annak mindkét végét lezáró dugókból. Előzetesen a csövet extrudálással, míg a dugót kerámia-fröccsöntési technológiával formázzák meg.

Dolgozatom célja volt megismerni és kémiai analitikai módszerek segítségével megvizsgálni a CMH alumínium-oxid kerámiaacsovek szintereléses gyártásának alapanyagait, köztitermékeit és a készterméket, megkísérelni bepillantást nyerni az egyes gyártási folyamatok során végbemenő fizikai és kémiai változásokra és értelmezni a technológia egyes lépéseit a vizsgálati eredmények alapján. További méréseimmel a kerámiagyártás szinterelési segédanyagaként alkalmazott magnézium-nitrát adalék gyártási folyamat során játszott szerepére próbáltam rávilágítani, illetve a magas hőmérsékleten lejátszódó szinterelés során kibocsátott, szerves kötőanyagok bomlásából származó környezetszennyező gázokat is vizsgáltam.

A felhasznált analitikai kémiai mérési módszerek pedig a következők voltak: röntgendiffrakció, Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia, fénymikroszkópos szemcseméret-elemzés, pásztázó elektronmikroszkópia és elemanalízis energiadiszperzív röntgen analizátorral és C, H, N-elemanalízis. Méréseim törzsét termóanalitikai vizsgálatok alkották, úgymint szimultán termogravimetria és differenciális termóanalízis, ill. a termomérlegekkel on-line módon összekapcsolt fejlődő gázanalízis tömegspektrométerrel és FTIR spektroszkópiás gázcellával.

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

## Fizikai kémia II. tagozat

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

**Gyökök vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával**

**Bazsó Gábor**, II. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Tarczay György** egyetemi adjunktus  
ELTE Szeretlen Kémiai Tanszék

Régóta ismeretes, hogy a kémiai reakciók jelentős hányada gyökös mechanizmusú. Ezen reakciók megértésében fontos a gyök-intermedierek tulajdonságainak ismerete. A gyökök a gyakorlatban is fontosak, például légkörkémiail, biológiai folyamatokban rengeteg gyökös reakciót ismerünk. A gyökök hétköznapi módszerekkel történő vizsgálatára azonban reaktivitásuk miatt ritkán van mód.

Ahhoz hogy el tudjuk tartani a reaktív részecskéket, meg kell akadályozni az egymással, valamint más anyagokkal való reakcióikat. Ennek egy lehetséges módja a mátrixizoláció, amikor a vizsgálandó részecskéket egy inert, kölcsönhatásoktól mentes közeg veszi körül, izolálva egymástól a reaktív specieszeket.

Az ELTE Molekulaspektroszkópiailaboratóriumában foglalkozunk mátrixizolációs infravörös spektroszkópiával, gyökök előállítására azonban eddig csak ultraibolya-fotolízist tudtunk alkalmazni, melynek használhatósága gyakran korlátokba ütközik.

Munkám során egy gyökök előállítására, és mátrixban történő izolációjára alkalmas ún. pirolízis-jet építésével foglalkoztam. A pirolízis-jet működésének lényege, hogy a bomlékony prekuzort nagy hígításban tartamazó gázelegyet nagy nyomáson, magas hőmérsékleten, nagyon rövid ideig tesszük ki a pirolizáló körülményeknek, majd adiabatikus jet-hűtést alkalmazva a képződő reaktív, és bomlékony részecskék hűtése révén megakadályozzuk azok monomolekulás bomlását.

Hosszú ideig tartó kísérletezés, és fejlesztés során a hőmérsékletmérés megbízhatóságának, és stabilitásának biztosítását máig sem sikerült megvalósítani azonban azt elértük, hogy 1000°C-ig hőmérsékleten a jet már használhatóvá vált, így teszt-kísérletekbe kezdhettünk. Először jó-d-benzol pirolízisét kíséreltük meg. Sajnos az 1000°C-os felső hőmérsékleti korlát miatt ez nagyon rossz hatásfokkal működött, ezért második kísérletünkhöz lényegesen bomlékonyabb anyagot, izopropil-nitritet választottunk. Ez a kísérlet sokkal sikeresebbnek tekinthető, a spektrumban rengeteg új csúcs jelent meg, melyek egy részét már sikerült azonosítani.

A hőmérsékletmérés megoldása után a pirolízis-jet várhatóan alkalmas lesz C-I kötés hasítására, lehetőséget teremtve számos eddig még nem vizsgált gyök jó hatékonysággal történő előállítására, ezzel lendületet adva laboratóriumunkban az ilyen irányú kutatásoknak.

**A peroxomonoszulfát-ion reakciója trisz-1,10-fenantrolinátó-ferrát(II)  
komplexszel**

**Bellér Gábor**, II. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Lente Gábor** egyetemi adjunktus  
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A peroxomonoszulfát-ion környezetbarát oxidációs módszerekben  $H_2O_2$ -ot helyettesítő oxidálószerként használható. Alkalmazása akkor ajánlott, ha a  $H_2O_2$ -dal végbemenő reakció lassú, vagy a  $H_2O_2$  folyamat közben bekövetkező diszproporciója miatt nagy oxidálószer-felesleget igényel. A peroxomonoszulfát-ion reakciónak részletes vizsgálata a természetben előforduló anyagokkal hozzájárulhat ahhoz, hogy ipari alkalmazása (pl. fertőtlenítőszerként is [1]) szélesebb körben elterjedjen. Jelen munkában spektrofotometriás módszerrel tanulmányoztuk a peroxomonoszulfát-ion reakciójának kinetikáját trisz-1,10-fenantrolinátó-ferrát(II) komplexszel és 1,10-fenantrolinnal.

A komplexszel lejátszódó reakció vizsgálatokor összetett kinetikát tapasztaltunk. A kezdeti reakciósebesség koncentrációfüggése mindkét reaktáns esetében telítésbe hajló görbét adott, mely ionpárképződéssel magyarázható. Ezt a feltételezést bizonyítja az is, hogy az ionpár kimutatható tömegspektrometriás vizsgálattal. A mérési eredmények alapján kinetikai modellt javasoltunk a reakció kezdeti szakaszának értelmezére, a modell segítségével felírtuk a sebességi egyenletet és meghatároztuk a sebességi állandót, valamint az ionpár képződésének egyensúlyi állandóját.

A reakció további szakaszában fontos szerepet játszik a ligandum oxidálása. Ezt UV-spektroszkópiás és tömegspektrometriás eredmények is alátámasztják. A ligandum és a peroxomonoszulfát-ion reakciójának terméke 1,10-fenantrolin-mono-N-oxid, melyet több módszerrel is azonosítottunk. A kinetikai vizsgálatok során bizonyítottuk, hogy a reakció mindkét reaktánsra nézve elsőrendű. A reakciósebesség pH-függését széles tartományban vizsgálva megállapítottuk, hogy a reakciósebességnek maximuma van 6,2-es pH környékén, ilyen körülmények között az oxidálószer egyszerűen protonált, a redukálószer deprotonált formában van jelen. A többi forma esetén a reakció csak sokkal lassabban játszódik le. A pH-függés alapján felírt sebességi egyenlet segítségével meghatároztuk a protonálódási állandókat.

[1] Wong, M. K.; Chan, T. C.; Chan, W. Y.; Chan, W. K.; Vrijmoed, L. L. P.; O'Toole, D. K.; Che, C. M., *Environ. Sci. Technol.*, **40**, 625 (2006)

**Gyümölcs pektinek enzimes hidrolízisének kinetikai vizsgálata**

Cserjési Petra, V. évf. környezetmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Béla**finé **Dr. Bakó Katalin** tudományos főmunkatárs  
PE Műszaki Kémiai Kutatóintézet

A pektin azoknak a nagy molekulájú, szénhidrátszerű, különböző poliszacharidokból felépülő, savas karakterű vegyületeknek az összefoglaló neve, amelyek funkciója a növényi sejtfalban az erős vázat biztosító hemicellulóz, cellulóz hálózat összetartása. Az élelmiszeripar számára ezek a vegyületek egyfelől hasznosak, hiszen elősegítik a gélesedést, így lekvárok, ömlesztett sajtok, fagylaltok készítéséhez használják őket. Másfelől viszont víz-visszatartó hatásuk miatt sok gondot okoznak a gyümölcslegyártás során, mivel megnehezítik a lé kinyerését a gélesedett gyümölcszúzalékból. Így fontos feladat mind a pektinek előállítása, mind szerkezetük megbontása. Mindkét célhoz szükséges a pektinek felépítésének, tulajdonságainak, illetve kémia, biokémiai viselkedésének megismerése, feltérképezése, mivel a különböző gyümölcsökből származó pektinek vizsgálatáról szinte alig áll rendelkezésre információ. Nem elhanyagolható szempont az sem, hogy az élelmiszeriparban keletkező magas pektin tartalmú hulladékokat megfelelő enzimes kezelésnek alávetve értékes terméket nyerhetünk, megvalósítva ezzel a hulladék felhasználását.

Ebben a dolgozatban szerepelnek azon kísérletek eredményei, amelyek során piros- és fekete ribizliből, valamint almából nyertem ki pektint a bevett gyakorlatnál kíméletesebb módszerrel. Az így kapott gyümölcs pektinek különböző koncentrációjú oldatait enzimes kezelésnek vetettem alá. *Aspergillus niger*-ből származó poligalakturonáz enzimet használtam, ami a pektin poliszacharid monomerek közti  $\alpha$ -1,4-glikozid kötések hidrolízisét katalizálja. A hidrolízist a keletkezett termék, a D-(+) galakturonsav DNS módszerrel történő meghatározásával követtem nyomon. Vizsgálataim bebizonyították, hogy a különféle forrásból származó pektinek szerkezete, felépítése, s ennek következtében enzimes hidrolízisük kinetikája is egymástól eltérő.

**Elektrosztatikus kölcsönhatások vizsgálata spermin és EDTA, valamint poliamino-metilfoszfonsavak között**

**Fehér Anikó**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Labádi Imre** egyetemi docens  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az élőszervezetekben lejátszódó folyamatokban számos úgynevezett molekula felismerési jelenség figyelhető meg. Ezen folyamatok során nagy molekulatömegű makromolekulák létesítenek egymással egyedi kölcsönhatásokat. A molekula felismerésben atomi szinten fellépő kölcsönhatások között szerepelnek az ellentétes töltésű részecskék közötti elektrosztatikus kölcsönhatások és a hidrogénhid-kötések kialakulása.

E két elemi kölcsönhatással értelmezhető az élőszervezetekben előforduló poliaminok szerepe is. A biológiai jelenségek között számos olyan található, ahol ezek a poliaminok a kation-anion és hidrogénhid kölcsönhatásaik révén szabályozó szereppel bírnak. Ezek a vegyületek az élőszervezet pH-ján kationos formában vannak jelen, és a DNS és RNS molekulák negatív töltésű részeivel lépnek kapcsolatba. E kölcsönhatás folytán az egyes biokémiai folyamatokban a poliaminok versengenek a szintén pozitív töltésű fémionokkal, valamint különböző hatással lehetnek a nukleinsavak bioszintézisére, és metabolizmusára is.

Vizsgálataim célja a természetben előforduló poliaminok és polifoszfát-ionok, valamint az EDTA közötti kölcsönhatás tanulmányozása, és a kölcsönhatás erősségét befolyásoló tényezők megállapítása volt. Ennek érdekében vizsgálatokat végeztem sperminnel, EDTA-val, valamint polifoszfát anionokkal (EDTMP, PDTMP).

Potenciometriásan meghatároztuk a spermin, az EDTA és a polifoszfátok saját pK-értékeiket. Az elektrosztatikus kölcsönhatás erősségét az egyes reaktánsok együttes jelenlétében bekövetkező látszólagos pK-értékeinek változásával jellemeztük. A négyyszeresen protonált sperminben a belső szekunder nitrogén atomok is töltést hordoznak, a pozitív töltések közelsége pedig növeli a molekulára jellemző helyi töltéssűrűséget, ami nagy aktivitást eredményez a negatív töltéseket hordozó ionokkal szemben.

Megállapítottuk, hogy a megfigyelt elektrosztatikus kölcsönhatásokban a legfontosabb befolyásoló tényező a reagáló ionokon kialakuló töltéssűrűség.

Mikrokalorimetria segítségével meghatároztuk a reakcióhőt a spermin és az EDTA/EDTMP/PDTMP közötti reakcióban, ezután a mólarány- ill. a Jobb-módszer segítségével meghatároztuk, hogy a komponensek milyen arányú elegyedésekor alakul ki a legerősebb kölcsönhatás. A reakcióhőket különböző hőmérsékleteken is meghatároztuk, a hőmérsékletfüggésből kiszámoltuk a szabadentalpiát.



### Illatanyagok terjedésének vizsgálata levegőben, számítógépes szimulációs kísérletekkel

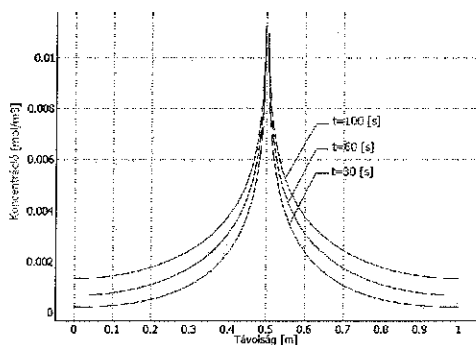
Járvás Gábor, VI. évf. vegyész-mérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Dallos András** egyetemi docens  
PE Fizikai Kémia Tanszék

A számítógépes szimulációk lényegesen meggyorsítják a különböző jelenségek és folyamatok vizsgálatának menetét a hagyományos kísérletekkel szemben, használható alternatívát nyújtva a kutatóknak és ipari szakembereknek egyaránt. Hátrányuk, hogy minden esetben szükséges a kapott eredmények hitelességének és megbízhatóságának ellenőrzése.

Munkánk során különböző illatanyagok gázfázisbeli diffúziós-konvekciós transzportját vizsgáltuk a COMSOL Multiphysics nevű szimulációs szoftverrel. A program a transzport-egyenletekkel leírt modell parciális differenciál-egyenleteinek megoldását végzi jól definiált kezdeti és peremfeltételek mellett. Lehetőség van különböző geometriai alakzatok felhasználásával a diffúzió, a lamináris konvekció és a turbulens konvekció külön-külön vagy egyidejű hatásainak vizsgálatára 2, illetve 3 dimenzióban. Kiindulási adatként a vizsgált illatanyagok koncentrációjának, illetve diffúziós állandójának ismerete szükséges. Mérési adatok hiányában a diffúziós állandók a Wilke módszerrel becsülhetők.

A szimulációval kapott eredmények megjelenítésére számos ábrázolási technika áll rendelkezésre, és lehetőség van animáció készítésére is. Az animációkkal jól szemléltethetők a transzportfolyamatok időbeni és térbeli alakulása.



Egy modell illatanyag koncentrációprofiljai a transzportfolyamat különböző időpillanataiban

**Halogenidionok vizes oldatbeli fotolízise**

**Kalmár József**, III. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Lente Gábor** egyetemi adjunktus  
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Laboratóriumi munka során elterjedten alkalmazott vegyszer a sósav. A kloridion, és más halogenidionok vizes oldatokban mutatott fotokémiai viselkedéséről azonban gyakran nem veszünk tudomást, holott befolyásolhatják, akár kiértékelhetetlenné tehetik azokat a kísérleteinket, amelyekben a fenti ionok legkülönbözőbb vegyületeit csak inert vegyszerként akartuk használni. A halogenidionok fotolízisét már vizsgálták vizes fázisban hagyományos fotokémiai vizsgálómódszerekkel [1].

A diódasoros spektrofotométer elterjedten használt analitikai műszer. Előnye, hogy rövid idő alatt széles hullámhossztartományú spektrum felvételére képes. A vizsgált mintát egy nagy intenzitású, polikromatikus fénynyalábbal sugározza be, így ebben a viszonylag egyszerű eszközben fotokémiai vizsgálatok végezhetők, mivel egyszerűen lehet benne iniciálni és detektálni a fotoreakciókat [2].

Munkánk során az általunk vizsgált rendszerekben észlelt, a kloridion, a bromidion és a jodidion vizes oldatban, savas közegben lejátszódó fotolíziséhez köthető jelenségeket tanulmányoztuk. A reakciók fényintenzitás-függését elsőrendűnek tapasztaltuk különböző optikai szűrők és változtatható átmérőjű rés segítségével végzett vizsgálatokban. A reakciók kinetikájának hőmérsékletfüggése a várakozásoknak megfelelően csekély volt.

A folyamat oxidációs termékei az elemi halogének illetve a trihalogenidionok. A fotoreakciók során fotometriásan csak az utóbbiak voltak detektálhatók. Meghatároztuk a trihalogenidionok egyensúlyi állandóit és moláris abszorbanciáikat. A fotolízisekhez kinetikai modellt javasoltunk, mely a reakciók pH-függésével és az irodalmi előzményekkel összhangban van.

A hidrogén-jodid vizes oldatbeli fotolízisét hosszabb időtartamon követve jelentős sebességcsökkenést észleltünk, mely nem volt magyarázható sem a hidrogén-jodid koncentrációcsökkenésével, sem a trijodidion vagy az elemi jód fotoredukciójával, sem a trijodidion belső szűrőhatásával. A trijodidionokat öninhibítornak feltételezve a kinetikai modellt már leírja az észlelt jelenségeket.

[1] Jortner, J.; Ottolenghi, M.; Stein, G. *J. Phys. Chem.*, **68**, 247 (1964)

[2] Lente, G.; Espenson J. H. *J. Photochem. Photobiol. A*, **163**, 249-258 (2004)

**Káliummal adalékolt TiO<sub>2</sub>(110) felület szerkezete: STM és AES vizsgálatok**

**Majzik Zsolt**, IV. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Berkó András** tudományos tanácsadó  
MTA Reakciókinetikai Kutatócsoport

A TiO<sub>2</sub> az egyik legtöbbet tanulmányozott oxid, fontos a fotokatalitikus tulajdonsága miatt és fém katalizátorok hordozójaként is általánosan elterjedt. A TiO<sub>2</sub> hordozóra felvitt arany nanorészecskék meglepően nagy katalitikus aktivitást mutatnak. A CO-ot képes hidrogén atmoszférában alacsony hőmérsékleteken (250-400 K) katalitikusan CO<sub>2</sub>-á oxidálni úgy, hogy erre a termékre vonatkozóan igen nagy a szelektivitása. Ezzel a módszerrel lehetővé válik a hidrogén gáz CO mentesítése. A katalitikus aktivitás függ a részecskemérettől és ezt, pl. a hordozó előzetes felület módosításával lehet változtatni. Számos publikáció jelent meg arról, hogy az alkálifémek milyen módon lépnek kölcsönhatásba a felületekkel. A fémhez hasonlóan, az átmenetifém oxidokon is az adszorpció során elektron donorként hatnak, de a felületi oxigénnel történő kölcsönhatásukat is figyelembe kell venni.

Munkánk célja az volt, hogy különböző mennyiségben felvitt káliumot lépcsőzetesen, termikusan deszorbeáltassuk és eközben megvizsgáljuk a felületen lévő K mennyiségében valamint a felület morfológiájában bekövetkezett változásokat. Méréseink során pásztázó alagút mikroszkóppal (STM) képeztük le a felületet és Auger-elektron spektroszkópiával (AES) határoztuk meg a K-borítottságot.

A kísérleteink eredményeként azt kaptuk, hogy lényegesen másképp viselkedik a TiO<sub>2</sub>(110)-(1x1) felületen lévő K alacsonyabb (0,1 monoréteg) ill. magasabb K (közel 1 monoréteg) felületi borítottság esetén. A legerősebb kötéssel kapcsolódó K atomokat még az 1100 K-re történő felfűtéssel sem lehet eltávolítani (<0,05 monoréteg). Magasabb K borítottságnál teljesen más képet láttunk. 700-800 K-ig történő felfűtés hatására a K mennyisége jelentősen lecsökken. Az STM képek azt mutatják, hogy ebben az állapotban 2-3 nm széles, többé kevésbé párhuzamos [001] irányú bemélyedések keletkeztek. 900K-en viszont jól rendezett 1x2-es sorok jelentek meg a felületen, ami annak egyenesletes redukálódásával magyarázható. 1100 K-re történő felfűtés hatására a TiO<sub>2</sub>(110) lap visszaalakult 1x1-é, azaz az eredeti szöchiometriájú összetételűvé. A redukálódási folyamatot deszorbeálódó kálium-titanáttal értelmezhetjük, a visszaoxidálódást pedig a tömbi oxigénnel történő reakcióval.

**A hidrogénkötés hatása a 4-(dimetilamino)piridin fotofizikai folyamataira**

**Mile Viktória**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Demeter Attila** tudományos tanácsadó  
MTA KK AKI Reakciókinetikai Osztály  
**Dr. Tóth Gergely** egyetemi adjunktus  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A 4-(dimetilamino)piridin a legegyszerűbb olyan molekula, amely mutatja az oldószerfüggő kettős fluoreszcencia jelenséget[1]. Jelenleg két elfogadottabb modell – a csavart intramolekuláris töltésátvitel (TICT[2]) és a planáris intramolekuláris töltésátvitel (PICT[3]) – létezik a jelenség magyarázatára. Jól ismert tulajdonsága a piridin származékoknak, hogy erős hidrogénkötés kialakítására képesek.

Megvizsgáltuk a 4-(dimetilamino)piridin hidrogénhíd-képző tulajdonságát, és tanulmányoztuk, hogy a hidrogénhidas komplexálódás hogyan befolyásolja a modell vegyület spektroszkópiai és fotofizikai sajátosságait.

Szobahőmérsékleten, széntetrakloridban végzett mérések alapján Abraham[4] empirikus összefüggést talált a komplexálódási folyamat egyensúlyi állandójának logaritmusára és a reakcióban résztvevő molekulák karaktere között. Meghatároztuk a 4-(dimetilamino)piridin Abraham-féle hidrogénhíd-bázicitási paraméterét.

Tanulmányoztuk a 4-(dimetilamino)piridin, hexafluorpropán-2-ollal képzett komplexének oldószerkompatibilitását. A komplexátlatlan 4-(dimetilamino)piridin esetében a méréseinkből az ICT gerjesztett állapot dipólus momentumára alacsony érték adódott, így elképzelhető, hogy a 4-(dimetilamino)piridin ICT gerjesztett állapota PICT szerkezetű. A hidrogénhidas komplex esetében apoláris tartományban  $\Delta\mu$  értékére 12,9 Debye adódik, míg a polárosabb oldószerekben  $\Delta\mu$ -re egy rendkívül magas érték 22,9 Debye származtatható. Egy lehetséges magyarázat, hogy az apoláros oldószerekben a PICT szerkezetű gerjesztett ICT állapotú komplexet látjuk, míg a polárosabb tartományban a komplex 4-(dimetilamino)piridin dimetilamino-csoportja a TICT szerkezetnek megfelelő merőleges beállást veszi fel.

[1] E. Lippert és W. Lüder és H. Boos, *Advances in Molecular Spectroscopy; In European Conference on Molecular Spectroscopy, Bologna, Italy, 1959*

[2] K. Rotkiewicz, K.H. Grellmann és Z.R. Grabowski, *Chem. Phys. Lett.*, **21** (1973) 315

[3] K.A. Zachariasse, *Chem. Phys. Lett.*, **320** (2000) 8.

[4] M. H. Abraham, P. P. Duce, D. V. Prior, D. B. Barrat, J. J. Morris és P. J. Taylor, *J. Chem. Soc. Perkin Trans., II* (1989) 1355

**A tetrametil-diarzán előállítása és fotoelektron-spektroszkópiás vizsgálata**

**Pongor Csaba István**, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Sztáray Bálint** egyetemi adjunktus  
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

Bár az arzén a köztudatban mint erős mérge szerepel, szervetlen és szerves származékainak számos hasznos gyakorlati alkalmazása lehet. Felhasználhatók többek között növényvédők szerként, takarmányadalékként, félvezető eszközökben, ötvözetek készítésében, de alkalmazzák őket a gyógyászatban is, például különböző paraziták és kórokozók ellen, homeopátiás készítményekben illetve roborálásra. Bár toxicitásuk határt szab a felhasználásuknak, biológiai szerepük mára tagadhatatlanná vált. Az arzén és antimon nyomelemként megjelenik mikroorganizmusokban (gombákban, baktériumokban, algákban), de fontos szerepet játszanak magasabb rendű élőlényekben is. Szerepük illetve hatásuk sokféle, ezért kémiájuk további tanulmányozása még sok érdekességre vezethet.

Munkám során a tetrametil-diarzán előállításával, elméleti és fotoelektron-spektroszkópiás vizsgálatával foglalkoztam. A preparatív munka egyik célja a kérdéses vegyület előállítására költség-hatékony és jól kivitelezhető eljárás kidolgozása.

Az előállítandó vegyület nitrogén-analógjának érdekessége, hogy magános elektronpárjai döntő mértékben befolyásolják sztereokémiai tulajdonságait. A tetrametilhidrazin e magánospár-kölcsönhatások miatt kizárólag gauche konformációban van jelen gőzfázisban. Nehezebb analógjaiknál ( $\text{Me}_4\text{P}_2$ ,  $\text{Me}_4\text{As}_2$ ,  $\text{Me}_4\text{Sb}_2$ ) azonban a gauche és anti konformer stabilitása hasonló, így mennyiségük is összemérhető. Bár mindhárom vegyületet vizsgálták spektroszkópiai módszerekkel, és meghatározták a konformer arányokat, a kísérleti eredmények egymásnak gyakran ellentmondanak.

A fotoelektron-spektroszkópiás kísérletek feladata kettős. Egyrészt célunk volt az UV-fotoelektron spektrumok irodalomban megtalálható újabb asszignációjának spektroszkópiai úton való bizonyítása. Másrészt lehetőség nyílik a folyamat termokémiájának tanulmányozására is.

**Kalkokarbonil komplexek fotoelektron-fotoion koincidenciaspektroszkópiás vizsgálata**

Révész Ágnes, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Sztáray Bálint egyetemi adjunktus  
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

Jelen munkában a karbonil  $\rightarrow$  kalkokarbonil csere hatását vizsgáltuk a ciklopentadienil-mangán-trikarbonil,  $\text{CpMn}(\text{CO})_3$  kalkokarbonil analógjaiban ( $\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CS}$  és  $\text{CpMn}(\text{CO})_2\text{CSe}$ ) fotoelektron-fotoion koincidenciaspektroszkópiás (TPEPICO) módszerrel. Megállapítottuk a konszekutív karbonil-, majd kalkokarbonil-vesztési reakciókban keletkező fragmensionok megjelenési energiáját, az egyes ionokban a mangán-karbonil, illetve mangán-kalkokarbonil kötési energiákat. Meghatároztuk az összes disszociáló ion és a semleges molekula képződéshőjét is.

A kísérleteket az Észak-Karolinai Egyetemen (UNC) működő TPEPICO készüléken végeztük. A detektált spektrumokat a disszociációs reakciók sebességi állandójának közvetlen meghatározásához, valamint a letörési görbe megszerkesztéséhez használtuk. A kísérleti adatokból az egyes fragmensionok pontos 0 K megjelenési energiáit a spektrométerben zajló folyamatok RRKM-elméleten alapuló szimulációjával határoztuk meg a szimulációs letörési görbék és repülésiüidő spektrumok a kísérletekre illesztésével. Ezekből adódott a kísérletek során disszociáló kötések disszociációs energiája. A ciklopentadienil-mangán ion irodalmi képződéshőjével pedig az egyes ionok, valamint a semleges komplexek képződéshője is számítható.

Mivel mindkét vegyület esetében elsőként a két karbonil-ligandum távozott, és a harmadik lépésben disszociált a kalkokarbonil-ligandum, a  $\text{CpMn}(\text{CO})_3$  komplex korábban publikált mérési adataiból származó képződéshőkkel együtt nemcsak az utolsó, hanem valamennyi Mn-C[S/Se] kötési energia meghatározható volt, noha ezek a kötések a kísérletek során nem disszociáltak. A semleges komplexek képződéshőjéből, a  $\text{CpMn}(\text{CO})_3$  megfelelő adatával pedig a semleges molekulákra vonatkozó karbonil  $\rightarrow$  kalkokarbonil szubsztitúciós energia is adódik. A kapott termokémiai adatok alapján érdekes megfigyeléseket tehetünk a Mn-CO, Mn-CS és Mn-CSe kötések természetével és a karbonil-kalkokarbonil csere stabilizáló szerepével kapcsolatban.

### Kalixarén-fenol komplexek stabilitását meghatározó molekuláris háttéranyagok vizsgálata

Szabó Kornélia, V. évf. kémia-környezettan  
PTE Természettudományi Kar

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

A kémiai érzékelőkben is széleskörűen alkalmazott kalixarén származékok komplexképződése során kialakuló gyenge 'host-guest' kölcsönhatások molekuláris háttéranyagait vizsgáltuk. Ennek során az entrópiának a komplexképződésre gyakorolt meghatározó szerepét állapítottuk meg magas permittivitású közegben [1, 2, 3]. Ugyanakkor szenzorkémiai alkalmazások céljából szükségessé vált az alacsony permittivitású környezet hatásának tanulmányozása is, mert pl. az elektrokémiai érzékelőkben a szelektív felismerést végző molekulákat alacsony permittivitású, többnyire PVC membránban immobilizálják. Ezért kalix[4]arének egyes fenolszármazékokkal létrejövő komplexképződését vizsgáltuk  $\text{CCl}_4$  oldószerben. Az aromás gyűrű elektronsűrűségét *para*-pozícióban elektronszívó Cl, ill. elektronküldő  $\text{CH}_3$  és *tercier*-butil (tBu) csoportokkal változtattuk. A  $\pi$ - $\pi$  kölcsönhatáson alapuló gyenge 'host-guest' komplex képződésének termodinamikai paramétereit a korábban alkalmazott fluorimetriás módszerünkkel határoztuk meg. A tapasztalt szokatlan entrópiaváltozás okaként az oldószermolekulák komplexképződés során bekövetkező újrendeződését feltételeztük, így kísérleti igazolásként oldószer dinamikai méréseket végeztünk. Méréseket végeztünk továbbá a fenolos OH csoportoknak a komplex stabilizálásában játszott szerepének felderítésére.

A méréseink 1:2, illetve 1:1 sztöchiometriájú komplexek kialakulására utalnak. Megállapítottuk, hogy az 1a kalixarén esetében, amikor a felső perem nem szubsztituált, akkor az alsó peremen 1 és 3 pozícióban található benzil-oxi csoportokkal szubsztituált gyűrűk képesek annyira összehajolni, hogy egy újabb fenol vendégmolekula szendvicsszerű beépülését elő tudják segíteni. A kvantumkémiai számítások és az oldószer-relaxációs mérések igazolták, hogy a szokatlan entrópiaváltozás hátterében valóban az oldószer molekulák kalixarén-fenol komplex körüli átrendeződése áll. Raman vizsgálataink rámutattak, hogy a fenolos OH csoportok nem vesznek részt a komplex stabilizálásában. Reményeink szerint eredményeink hozzájárulnak a kémiai érzékelők alapanyagául szolgáló szelektív molekulák célirányos tervezéséhez.

[1]Kunsági-Máté S., Szabó, K., Lemli, B., Bitter, I., Nagy, G., Kollár, L., *Thermochimica Acta*, **425** (1-2), 121-126 (2005)

[2]Kunsági-Máté, S., Szabó, K., Bitter, I., Nagy, G., Kollár, L., *J. Phys. Chem. A*, **109**, 5237-5242 (2005)

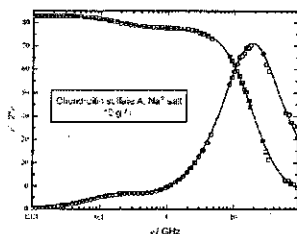
[3] Kunsági-Máté, S. et al., *Supramolecular Chemistry*, **18** (3), 245-250 (2006)



### Nátrium- és magnézium-kondroitin-6-szulfát hidratációs számának meghatározása dielektromos relaxációs spektroszkópiával

Tóth Ildikó, IV. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Sipos Pál** egyetemi docens  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék  
**Prof. Richard Buchner** Universität Regensburg  
Institute für Physikalische und Theoretische Chemie



Munkánk során egy természetes eredetű poliszacharid, a kondroitin-6-szulfát (amelynek ismétlődő dimer egységét CHSA<sup>2-</sup>-tal jelöljük) nátrium és magnézium sója vizes oldatainak dielektromos relaxációs spektroszkópiai (DRS) viselkedését tanulmányoztuk a  $0,01 < \nu$  (GHz)  $< 90$  frekvenciatartományban. A spektrumok alapján lehetőség nyílt a polimer és az oldószer víz relaxációs folyamatainak egyidejű tanulmányozására. Kísérleteink alapján megállapítottuk, hogy a poliszacharid mindkét sója vizes oldatának DRS spektrumán a tiszta vízre jellemző  $\sim 18$  GHz-nél található relaxációs folyamat mellett  $\sim 0.2$  GHz körül egy újabb, feltehetően a poliszacharidhoz tartozó relaxációs folyamat jelenik meg (ld. ábra). Ez vagy a makromolekula forgómozgásával, vagy a polielektrolithoz „atmoszférikusan kötött ellenionok” polimer láncsal párhuzamos irányú fluktuációjával magyarázható. Az oldatokban a víz relaxációs ideje megegyezik, a (vízkoncentrációval arányos) amplitúdója azonban jelentősen kisebb, mint a tiszta vízre kapott megfelelő irodalmi adat. Ez azt jelenti, a víz teljes mennyiségének csak bizonyos részét képes DRS detektálni, a „hiányzó” oldószer minden bizonnyal a hidratáció miatt vált relaxációjában gátolttá.

A hidratáció mennyiségi jellemzésére szisztematikus vizsgálatokat végeztünk. Mindkét só vizes oldataiban esetében megmértük a DRS spektrum koncentráció-, hőmérséklet- és pH-függését. Megállapítottuk, hogy a polimerkoncentrációtól és az ellenion minőségétől függetlenül a polimer hidratációs száma  $Z_{ib}(\text{CHSA}^{2-}) = 18,0 \pm 3,5$ . Sósav hozzáadására, amikor is a polimer karboxilát csoportja ( $pK = 3,2$ ) részlegesen protonálódik, az  $Z_{ib}$  a kísérleti hibahatáron belül állandónak adódott, a CHSA<sup>2-</sup>-hidratációs számát tehát elsősorban a töltetlen, poláros csoportok vízmegkötése határozza meg. A  $Z_{ib}(\text{CHSA}^{2-})$  a hőmérséklet növelésének hatására csökken, 5 °C-on 20, míg 65 °C-on 13 körüli érték. Ez a jelenség jól értelmezhető a hidratációnak a hőmozgás növekedés hatására bekövetkező csökkenésével.

**Szemcsés rendszerek kisszögű röntgenszórásának modellezése**

**Wacha András, IV. évf. mérnök-fizikus**  
BME Természettudományi Kar

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

Dolgozatomban nanométeres sugarú gömbökből összeállítható különféle struktúrák jellemző tulajdonságainak megnyilvánulását vizsgáltam kisszögű röntgenszórási görbékben, saját magam által létrehozott számítógépes modell segítségével. A struktúrákat bizonyos építkezési szabályokat alkalmazva raktam össze, s így meg tudtam szabni az elkészülő struktúrák, szemcsés rendszerek kiterjedéseit, szemcseméret-eloszlásait, térbeli rendeződési tulajdonságait.

Megállapítottam, hogy a modell alapján minél kiterjedtebb, bonyolultabb lesz a létrehozott halmaz, minél többféle sugarú gömbből áll össze, annál inkább „uniforimizálódnak” a szórési görbék: alakjuk és lefutásuk hasonló jellegűvé válik, mint a dolgozatomban legelőször vizsgált, legegyszerűbb esetben. Ezen kívül észrevettem, hogy a létrehozott alakzatok tulajdonságai közül a szórési görbére számottevő hatása csak az alakzatok térbeli, egy- illetve többdimenziós kiterjedésének van. E hatás abban nyilvánul meg, hogy a görbe első szakaszának meredeksége csökken, s e meredekség abszolút értéke kapcsolatba hozható az irodalomban részletesen ismertett tömegfraktál-rendszerek fraktáldimenziójával. Az általam létrehozott alakzatok térbeli konfigurációjának és az őket alkotó gömbi egységek méreteinek szórásváltozásai szépen egyeznek azzal a ténnyel, hogy a közel egydimenziós kiterjedésű alakzatok tömegfraktál-dimenziója 1-hez közeli, ennél tömörebb rendszereknél pedig 2 körüli, vagy nagyobb értéket vesz föl.

Dolgozatom megközelítési módja általános: az alkalmazott módszerrel bármilyen alakú, morfológiájú rendszer leírható. Különösen makromolekulák leírásában nyújthat nagy segítséget ez a fajta tárgyalásmód, mert azok is felépíthetők kicsiny gömbökből.

A felhasznált gömbök azonban nem lehetnek tetszőlegesen kicsinyek, hiszen a kisszögű röntgenszórás a legjobb felbontásban sem képes 2-3 Å-nél kisebb méreteket érzékelni. Ez a „kirakós” modell az irodalomban már ismert, ebből a szempontból dolgozatom már ismert elvekre épít. Ugyanakkor az alkalmazott lépésről lépésre elv továbbfejleszthető, ha figyelembe vesszük az egységek között fellépő kölcsönhatásokat. Ebből a szempontból hasznosnak ígérkezik a munkám, s errefelé kívánom majd a későbbiekben továbbfejleszteni.

## Elméleti kémia és kémiai informatika tagozat

**Fehérjeszerkezetek gyors azonosítása NMR kényszerfeltételek alapján**

**Ángyán Annamária**, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Gáspári Zoltán** tanársegéd  
ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium  
**Dr. Perczel András** egyetemi tanár  
ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium

A fehérjék térszerkezetének NMR-spektroszkópiával történő meghatározása bonyolult és hosszadalmas feladat. A térszerkezet-meghatározás kulcslépése a szerkezetre jellemző kényszerfeltételek iteratív felhasználása [1]. Munkám során egy olyan egyszerű statisztikai alapokon nyugvó eljárás kidolgozását tűztem ki célul, amely jelentős segítséget nyújthat e folyamat lerövidítéséhez. A tervezett módszer csupán a távolság jellegű kényszerfeltételek ismeretében képes a kérdéses makromolekulát pillanatok alatt más, már meghatározott térszerkezetű fehérjékkel rokonítani. A megvalósításnál a PRIDE [2] algoritmusra támaszkodtam, eljárásomat ahhoz hasonló elvek alapján építettem fel. A PRIDE módszer a  $C\alpha$ -atomok távolságeloszlását hasonlítja össze a vizsgált fehérjékben, és ennek alapján határozhatók meg a hasonló térszerkezetek. Ennek mintájára a NOE adatokból kapott H-H távolságok alapján előállított eloszlásokat vettem össze az NMR-szerkezetek térbeli koordinátáiból számolt H-H eloszlásokkal. Fontos szempont volt, hogy az eljárás eltérő szekvenciák esetén is használható legyen. A módszer fejlesztéséhez RECOORD adatbázis [3] adataival dolgoztam. A kifejlesztett módszer jól alkalmazható az NMR-es fehérjeszerkezet-meghatározásban. Kizárólag az NMR kényszerfeltételek alapján egy első, hozzávetőleges képet ad a fehérje térszerkezetéről. Alkalmazható eltérő szekvenciák esetén is, valamint segíthet a jelhozzárendelés során felmerülő nehézségek kiküszöbölésében. Az algoritmus terveink szerint hamarosan elérhető lesz a világhálóról.

[1] Wüthrich, K., *NMR of Proteins and Nucleic Acids*, John Wiley & Sons, Inc., New York, (1986)

[2] Carugo, O., Pongor, S., *J. Mol. Biol.*, 315, 887-898 (2002)

[3] Nederveen, A.J et al., *Proteins*, 59, 662-672 (2005)

**Víz-metanol elegy adszorpciós egyensúlyának vizsgálata zeoliton molekuláris szimulációval**

**Csányi Éva Mária**, IV. évf. informatikus vegyész  
PE, Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Kristóf Tamás** egyetemi docens  
PE Fizikai Kémia Tanszék

A zeolitok napjainkban egyre szélesebb körben használt anyagokká válnak. Nagyon jó anyagmegkötő képességüknek és szelektivitásuknak köszönhetően a benzinyártástól kezdve a szennyvíztisztásig szinte mindenhol használják őket. Kedvező tulajdonságaik magyarázata az adszorpciós sajátságaikban rejlik. A fizikai-kémiai jelenségek modellezésében egyre elterjedtebben használnak számítógépes szimulációkat. Ezen belül az adszorpciós folyamatok mind jobb megértéséhez és az adszorpciós tulajdonságok vizsgálatához a molekuláris szimulációk mindinkább elengedhetetlen eszközökké válnak.

A zeolitok vizsgálatára az egyik legalkalmasabb szimulációs módszer a Monte Carlo technika. Munkánk során ezen eljárás használatával vizsgáltuk metanol és víz adszorpcióját víztelenített NaA-4 zeolitikristályon. Az adszorbens szelektivitása mögött rejlő hajtóerők tanulmányozása érdekében a számításokat az adszorbens atomi szinten definiált modelljén végeztük. A vízre és a metanolra olyan realiztikus potenciálmodelleket használtunk fel, amelyekkel a tiszta anyagok termodinamikai tulajdonságai jól reprodukálhatók. A modellrendszer szelektivitásinverziót jósol a vizsgált nyomástartományban. Az adszorpció mértékének változása az összetétellel és a nyomással részben magyarázható a rendszer szerkezeti sajátságaival.

**Túl a nem-relativisztikus és a Born-Oppenheimer közelítéseken**

**Fábri Csaba**, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Császár Attila** egyetemi tanár  
ELTE Molekulaspektroszkópai Laboratórium  
**Czakó Gábor** PhD hallgató  
ELTE Molekulaspektroszkópai Laboratórium

TDK munkámban kísérletet tettem a kvantumkémia két legfontosabb közelítésén, a Born Oppenheimer (BO), valamint a nemrelativisztikus közelítésen történő túllépésre. Jelen munka keretein belül a  $H_2^+$ , a  $D_2^+$  és a  $HD^+$  molekulaionok rezgési-forgási színképeit vizsgáltam variációs számítások és a Jacobi-koordináták segítségével. Ehhez el kellett végezni a vizsgált rendszerek Hamilton-operátorának és a D1 és MV relativisztikus energia korrekcióknak a transzformációját Jacobi-koordinátákba. Czakó és munkatársai [1] mutatták meg először, hogy végezhető olyan nemadiabatikus számítás is, ahol a BO közelítésben alkalmazott végtelen magtömegek helyett véges magtömegekkel végezhető el a kvantumkémiai számítás, s egyben a magok helyzete rögzíthető, és így potenciális energia függvény számítható anélkül, hogy egyébként szétválasztanánk a magok és elektronok mozgását. Ezáltal nem veszítjük el a potenciális energia felület (PES) fogalmát, mely központi jelentőséggel bír a kémiában. A vizsgált izotóphelyettesített származékok Schrödinger-egyenlete a variációs elv szerint megoldható, ez az eljárás vezet el véges magtömegeket alkalmazva az adiabaticus Jacobi korrekció (AJC) fogalmához, mely a BO energiához járul korrekcióként. Megvizsgáltam a végtelen magtömegekkel (BO közelítés) és a nemadiabatikus hullámfüggvénnyel számolt D1 korrekciók eltérését és ennek az eltérésnek a rendszer geometriájától való függését. Az ACESII elektronszerkezet számító programmal számított MVD1 korrekció okozta effektust a forgási-rezgési átmenetekre a BO közelítés keretein belül vizsgáltam. Emellett összevettem a BO PES és az AJC-vel korrigált PES alkalmazásával számított spektrumokat. A  $J=1$  forgási szintre számolt átmeneteknél a forgást kétféle megközelítéssel kezeltem. Először a magok mozgását meghatározó Schrödinger-egyenletben a kinetikus energia tagban vettem figyelembe (itt  $J=0$ -ra számoltam AJC-t), ezután elvégeztem az AJC-k számítását a  $J=1$  forgási szintre is, ezért a forgás az így kapott forgási kvantumszámtól függő potenciálfelület alkalmazásával extrapotenciális tagként kezelhető a magmozgás Schrödinger-egyenletében. A különböző módon számított rezgési-forgási energiaszintek és átmenetek egymástól való eltérése kicsi, de a különbségek szignifikánsak és a számítások maradvány hibájával összevethető mértékűek.

[1] Czakó, G.; Császár, A. G.; Szalay, V.; Sutcliffe, B. T., *J. Chem. Phys.*, 2006, közlés alatt

**Alkáli-decilszulfát adszorpciója ellenionfüggésének tanulmányozása számítógépes szimulációval**

**Hantal György**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Jedlovsky Pál** tudományos ösztöndíjas  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Munkánk során különböző alkáli kationt tartalmazó decilszulfát tenzidek víz/levegő határfelületen kialakuló adszorpciós rétegének vastagságát vizsgáltuk számítógépes szimulációval. Korábbi, ionos tenzidek adszorpcióját leíró elméletek felvetették, hogy az adszorpciós kettősréteg  $\delta$  vastagsága nagyban befolyásolhatja a tenzid adszorpciós tulajdonságait. Egyes elméletek a  $\delta$  paraméter értékében mutatkozó eltéréseket a kationok eltérő méretére vezetik vissza. Az elvégzett molekuláris dinamikai szimulációkkal azt kívántuk megvizsgálni, hogy hogyan befolyásolja az ellenionok mérete  $\delta$  értékét, amihez öt különböző alkáli kationt ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Rb}^+$  és  $\text{Cs}^+$ ) tartalmazó decilszulfát tenzidek oldatait szimuláltuk. A szimulációkat kanonikus sokaságon végeztük kétféle potenciálmodell, illetve kétféle felületi koncentráció ( $2 \text{ mol/m}^2$  és  $4 \text{ mol/m}^2$ ) alkalmazásával. A két modell alapján kapott eredményekkel kívántuk igazolni, hogy a vizsgált jelenség nem függ az alkalmazott modelltől, a két felületi koncentráció alkalmazásával tanulmányoztuk, hogy az adszorpciós réteg vastagsága függ-e a határfelületen lévő tenzidek számától. Eredményeink megerősítették, hogy a jelenségnek nincs modelfüggése, továbbá az adszorpciós réteg vastagsága valóban függ a kationok méretétől, még hozzá oly módon, hogy növekvő kationméret esetén egyre nagyobbak adódik  $\delta$  értéke. A felületi koncentrációtól való függésre vonatkozó megfigyeléseink azt a nem várt eredményt szolgáltatották, hogy a felületi koncentráció is befolyásolja az adszorpciós réteg vastagságát, és ez a hatás erősebbnek mutatkozott, mint az eredetileg megfigyelni kívánt effektus.



**A furoxán krómkomplexeinek vizsgálata**

**Kapuvári Éva**, IV. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Pasinszki Tibor** egyetemi docens  
BME Szervetlen Kémia Tanszék

Munkám célja a furoxán krómmal alkotott különféle komplexeinek feltérképezése, szerkezetük, valamint relatív stabilitásuk meghatározása volt. A vegyületek kvantumkémiai vizsgálatához a B3LYP módszert és a 6-31+G(d,p) bázist választottam, melyek használhatóságát számítások és irodalomból vett adatok összehasonlításával igazoltam.

A furoxánok esetében kétféle,  $n$ - és  $\pi$ -donor komplex képződésére van lehetőség. Az  $n$ -donor komplexeket a  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  egy CO ligandumának, valamint a  $\text{Cr}(\text{CO})_3(\text{CH}_3\text{CN})_3$  egy acetonitril ligandumának furoxánra történő cseréjével vizsgáltam.

Az elképzelt  $\pi$ -komplexek számítása során azt tapasztaltam, hogy a furoxángyűrű felnyílik, és  $n$ -donor komplexek keletkeznek, melyek nem tesznek eleget a tizennyolc elektron szabálynak, és további ligandumokkal stabilizálhatók. Több, a „tizennyolc elektron szabálynak” megfelelő komplexet határoztam meg, megvizsgáltam ezen vegyületek relatív stabilitását, és bennük a felnyílt furoxángyűrű szerkezetét.

Valamennyi komplexben a furoxán felnyílásával dinitrozo-etilénhez hasonló ligandum keletkezett. Belátva, hogy a felnyíló furoxán – bár némely komplexben igen nagy a krómatom töltése – nem fejt ki oxidáló hatást a krómra, szerkezete összehasonlítható a dinitrozo-etilénnel. Az összehasonlítás alapján kijelenthető, hogy a furoxán felnyílásával dinitrozo-etilén komplexek keletkeznek.

A dinitrozo-etilént instabil vegyületeként ismerve, érdekes lehetőség komplex-ligandumként való előállíthatósága. Szubsztitúciós reakciókat feltételezve, a számolt reakciószabaddentalpiák értékeire hagyatkozva azt állapítottam meg, hogy e vegyületek előállítása megfelelő kiindulási anyag (pl.  $(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)_2\text{Cr}$ ,  $(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)\text{Cr}(\text{CO})_3$ ,  $\text{Cr}(\text{CO})_3(\text{CH}_3\text{CN})_3$  esetleg  $\text{Cr}(\text{CO})_6$ ), valamint jól megválasztott reakciókörülmények esetén kivitelezhetőnek tűnik.

Munkám során a legegyszerűbb furoxán krómmal alkotott komplexeit vizsgáltam, azonban számos lehetőség nyílhat más fématomokkal, illetve szubsztituált furoxánokkal történő komplexképződésre is. Ezen vegyületek szerkezetére, előállíthatóságára és tulajdonságaira irányuló kérdések további érdekességet tartogatnak a jövő számára.

**Vegyipari folyamatszintézis matematikai programozási modelltípusainak  
összehasonlító vizsgálata**

**Kocsis Tibor**, V. évf. vegyész  
BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

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

A vegyipari beruházások rendkívül tőkeigényesek, különösen fontos tehát az optimális feltételek megvalósítása mind tervezési, mind üzemeltetési szinten. A folyamatszintézis olyan döntések sorozata, amely a rendelkezésre álló egységekből, azok lehetséges összekapcsolásaiból az optimális struktúrát és üzemeltetést igyekszik kiválasztani. A matematikai programozás (optimalizálás) egzakt matematikai modellek megoldásával törekszik a rendszer szintézisére.

Dolgozatom témája az optimalizálás modellalkotási stratégiáinak összehasonlító vizsgálata. A stratégiákat kisebb méretű tesztfeladatokon vizsgáltam és hasonlítottam össze. Végső célom, hogy a módszerek közül kiválasszam azt, amelyiket további kutatásaink során használni fogunk a globális optimalizálásra alkalmas szoftverekkel.

Kutatásaim során a logikai megadást (GDP-feladat) közvetlenül kezelő, továbbá az algebrai megadásban szereplő bináris változók számának csökkentése illetve a bináris változók kiküszöbölése segítségével dolgozó stratégiákat vizsgáltam kisebb tesztfeladatokon alkalmazhatóság, hatékonyság szempontjából. Kisebb példán teszteltem a globális, több szempontból előnyös intervallum-módszert.

Távlati célunk az, hogy a legjobbnak bizonyult stratégia segítségével NLP problémákra kidolgozott globális optimalizálási módszereket alkalmazzuk (eredetileg) MINLP problémákra. Kutatásaim eredményei azt mutatják, hogy a globális optimalizálásra történő áttéréskor legcélszerűbb az MINLP  $\rightarrow$  NLP átalakítások, illetve a BMMR reprezentáció valamilyen kombinációját alkalmazni.

Fázisegyensúlyi jellemzők és a Hansen-féle oldási paraméterek becslése  
COSMOtherm programcsomaggal

Kondor Anett, VI. évf. vegyészmérnök  
PE Méchnöki Kar

Témavezető: Dr. Dallos András egyetemi docens  
PE Fizikai Kémia Tanszék

A mérési eredményeket tartalmazó adatbázisokra épülő korrelációs módszerekhez képest egyre nő a gyakorlatban az olyan módszerek szerepe, melyek kvantumkémiai számítások alapján, pusztán a molekulaszervezet ismeretéből képesek termodinamikai tulajdonságok viszonylag pontos becslésére.

A COSMOlogic kifejlesztett egy olyan szoftvert, amivel a modern kvantumkémiai technikák és a molekula modellezés felhasználásával a vegyületek különböző tulajdonságait lehet megbecsülni. A termodinamikai adatok becslését a COSMOtherm a komponensek kísérleti adataitól és a komponenseket felépítő atomcsoportok kölcsönhatási paramétereitől függetlenül végzi. Ez az alapvető előnye a csoport járulékos módszerekkel és más aktivitási koefficiens modellekkel szemben. Ha ismert a molekula szerkezete, a TURBOMOLE kvantumkémiai program képes a molekulát alkotó atomok helyzetéből felületi töltéssűrűség ( $\sigma$ ) adatokat számolni, melyek a COSMO számítások kiinduló adatai.

A COSMO számítások során kapott  $\sigma$ -momentumokat intermolekuláris kölcsönhatási-paraméterként alkalmazva, korrelációt és becslést végeztünk különböző szerves molekulák olívaolaj-gáz megoszlási hányadosára ( $\log L_{og}$ ), a szerves széntartalomra vonatkoztatott talaj-adszorpció koefficiensére ( $\log K_{oc}$ ) és a Hansen-féle oldhatósági paraméterek ( $\delta_D$ ,  $\delta_P$ ,  $\delta_{HB}$ ) értékére. A korrelációk során kapott LSER egyenletekkel számított  $\log K_{oc}$ ,  $\log L_{og}$  és a Hansen paraméterek értékei igen jó egyezést mutatnak a kísérleti értékekkel. Munkám során az általam használt becslési módszert más becslési módszerekkel is összehasonlítottam.

Megállapítottam, hogy a COSMOtherm által számított  $\sigma$ -momentumok jól korrelálnak a fázisegyensúlyi jellemzőkkel és egyéb molekuláris tulajdonságokkal, ezért LSER egyenletek független változóként alkalmazva őket, felhasználhatók komplex fázisok közötti megoszlási egyensúlyok előrejelzésére.

**Genetikus algoritmus alkalmazása femtokémiai spektrumok értelmezésében**

Mizsei Réka, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Keszei Ernő** egyetemi tanár  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A femtoszekundumos időfelbontású vizsgálatok különösen érdekesek a vegyészek számára, hiszen számos elemi reakció időskálája a molekularezgések karakterisztikus idejének nagyságrendjébe esik, ami a kemény rezgések esetén 10 fs körül van, míg lágyabb rezgések esetén elérheti a 100 fs-ot.

Nem egyszerű feladat azonban a zajjal terhelt spektrumokból a rendszer torzítatlan kinetikai válaszfüggvényének megfejtése, a dekonvolúció. Dolgozatomban egy olyan modellfüggetlen módszert mutatok be, amely nem igényel előzetes ismeret a rendszer belső működéséről. A felhasznált genetikus algoritmus egyszerre több szálon folytat keresést, működése a biológiai evolúció alapelveire támaszkodik, és mindig a legéletképesebb egyedet adja végeredményül. A program felépítése mellett bemutatom a szimulált és kísérleti adatok elemzésével nyert eredményeket, összehasonlítva azokat a megfelelő publikációkban megjelent dekonvolváltakkal.

**A BamHI restrikciós endonukleáz katalitikus mechanizmusának felderítése számítógépes szimulációval**

**Mones Letif**, okleveles vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Fuxreiter Mónika** tudományos főmunkatárs  
MTA SZBK Enzimológiai Intézet

A restrikciós endonukleázok az egysejtű élőlények szervezetét védik idegen örökítőanyaggal szemben. A II típusú enzimek az idegen DNS-t egy meghatározott szekvencián belül hasítják, miközben a saját DNS-t épségét metilezéssel biztosítják. A II típusú restrikciós endonukleázok által katalizált foszfodiészter hidrolízis elengedhetetlen feltétele a kétértékű fémionok jelenléte [1]. Röntgenkristallográfiai és biokémiai mérések azonban ellentmondó eredményekre vezettek a katalízishez szükséges fémionok számát illetően [2]. A II típusú restrikciós endonukleázok alacsony szekvencia homológiájuk ellenére jelentős szerkezeti hasonlóságot mutatnak [3]. Mindezek alapján felmerül a kérdés, hogy közös ősből kiindulva, vagy konvergens evolúcióval fejlődtek-e. Ennek megválaszolásához feltétlenül szükséges azonban az ilyen enzimek reakciómechanizmusának ismerete.

Kutatásaim célja a BamHI restrikciós endonukleáz katalitikus mechanizmusának felderítése volt számítógépes szimulációk segítségével, különös tekintettel a támadó nukleofil képződésére, valamint a katalízishez elengedhetetlen fémionok számának meghatározására. Munkám során szabadenergia perturbációs technikával kombinált empirikus vegyértékkötés módszerrel (EVB-FEP) [4] kiszámítottam a foszfodiészter hasítási reakció három lehetséges útjának aktiválási szabadentalpia-változását ( $\Delta G^\ddagger$ ). Az egyes lépések enzimatisz stabilizációjának összehasonlításából arra következtettem, hogy a foszfodiészter kötés hidrolízise nem általános bázis közreműködésével történik, hanem a támadó  $\text{OH}^-$  a tömbfázisból érkezik. Az erre a mechanizmusra számított  $\Delta G^\ddagger$  jó egyezést mutat a kísérleti értékkel. Kiszámítottam továbbá a BamHI aktív helyén található két fémionnak az aktiválási szabadentalpia csökkentéséhez való egyedi hozzájárulását is. Ezek arra utalnak, hogy a két fémion közül a támadó nukleofil stabilizáló ion kulcsszerepet játszik a katalízisben, míg a másik fémion lényegesen kisebb mértékben segíti a reakciót.

Az eredmények alapján kísérletet tettem egy átfogó jellegű mechanizmus kidolgozására, mely közelebb juttat a II típusú restrikciós endonukleázok evolúciós fejlődésének megértéséhez.

[1] Pingoud, A., Fuxreiter, M., Pingoud, V., Wende, W., *Cellular and Molecular Life Sciences*, 2005. 62: p. 685-707.

[2] Vipond, I.B., G.S. Baldwin, Halford, S.E. *Biochemistry*, 1995. 34: p. 697-704.

[3] Aggarwal, A.K., *Curr Opin Struct Biol*, 1995. 5(1): p. 11-9.

[4] Lee, F.S., Z.T. Chu, and A. Warshel, *J. Comp. Chem.*, 1993. 14: p. 161-185.

**Alkalmazott informatika az érzékszervi profilanalízisben**

**Papp Eszter**, V. évf. biomérnök  
BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Kollárné Dr. Hunek Klára** egyetemi magántanár  
BME Általános és Analitikai Kémia Tanszék

A profilanalitikus leíró érzékszervi vizsgálatok alkalmazása napjainkban egyre jelentősebb eszközzé válik a piaci versenyképesség megtartására illetve növelésére irányuló törekvések támogatásában. Az élelmiszerminőség meghatározásában elengedhetetlen szakértői érzékszervi vizsgálatok, így a profilanalízis tervezési és kivitelezési folyamataiban is komoly támogatást jelent a megfelelő informatikai háttér.

2001-ben alakult kutatócsoportunk, amelyhez 2003 májusában csatlakoztam, céljál a profilanalízis vizsgálatok informatikai támogatását tűzte ki a Visual Basic for Excel alapú ProfiSens szoftver kifejlesztésével.

A szoftver támogatja a bírálat csoportos tervezését, amit a korábbi értékelési szempontokat tároló adatbázis használatával jelentősen gyorsít. Az automatikusan létrehozott elektronikus bírálati lapok kezelését helyi hálózaton keresztül teszi lehetővé. Önállóan is működtethető feldolgozó modullal rendelkezik, amely elvégzi a szükséges statisztikai elemzéseket és valós időben megjeleníti a bírálati eredményeket.

A gyakorlati háttérrel és a fejlesztési irányvonalakat a Corvinus Egyetem Érzékszervi Minősítő Laboratóriumában folyamatosan végzett nagyszámú bírálat tervezése, kivitelezése és értékelése során felhalmozódó tapasztalatok adják. TDK munkámban először a korai ProfiSens verzió kódjának optimalizálását, a redundanciák megszüntetését és a változók hatókörének felülvizsgálatát végeztem el. Ezután önálló bővítéseket készítettem, amelyek elérhetővé teszik többek között a kétnyelvű (angol és magyar) kommunikációt egyazon verzió belül, a profilanalízisben használatos optimum skálák alkalmazását ill. a tulajdonságok adatbázisból való lehívását. Ez utóbbi fejlesztés tette lehetővé a ProfiSens ipari alkalmazásának megkezdését, amelynek háttértámogatási tevékenységét 2005 nyarától a szoftver fejlesztőgazdájaként végzem.

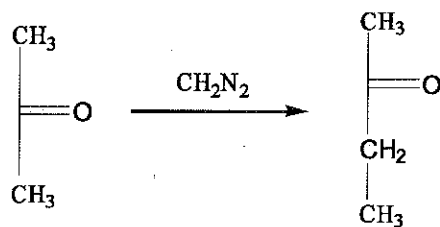
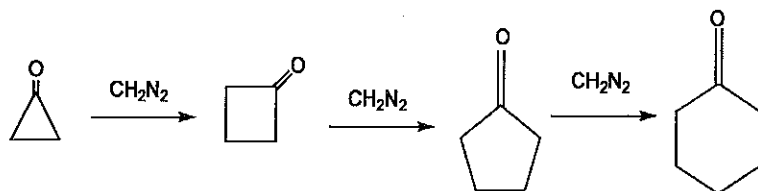
A ProfiSens szoftvert már az első verziója (2002) óta rendszeresen használjuk a BCE Érzékszervi Minősítő Laboratóriumában, elsősorban oktatásban és kutatásban, valamint egyre növekvő mértékben ipari célokra is. A szoftver alkalmazása 2004 óta része a BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék szakmérnöki képzéseinek is. A ProfiSens támogatásával teljesen elektronikusan végzett bírálatok száma közel kétezer. Kutatócsoportunk eredményeiről több cikkben, valamint hazai és nemzetközi konferenciákon előadásokban és poszttereken számoltunk be.

## Karbonilvegyületek és diazometán reakciójának vizsgálata

Seres Boglárka, V. évf. vegyész  
PE Mérnöki KarTémavezető: Dr. Kégl Tamás tudományos munkatárs  
PE Szerves Kémia Tanszék

A gyűrűs és alifás ketonok is reagálhatnak a diazometánnal, a reakció során a gyűrűbővülés történik illetve a szénlánc növekszik és a dinitrogén eliminálódik.

A ciklopropanon, ciklobutanon, ciklopentanon és az acetone diazometánnal való reakcióját mutatom be. A reakció kétféle mechanizmussal mehet végbe az orbitálok átlapolásának megfelelően. Mindkét esetben kétlépéses reakcióról van szó, először a diazometán koordinálódik és így kialakul egy intermedier szerkezet, majd ebből kihasad a dinitrogén mialatt a gyűrűtágszám illetve a szénlánc növekszik. A dolgozatban a kétféle reakciómechanizmust ismertetem részletesen, az intermedierek és az átmeneti állapotok bemutatásával, valamint a reakciók és a reakciómechanizmusok energiaviszonyait ismertetem és hasonlítom össze.



**Káosz vagy konvergencia - kvantumkémiai iterációk stabilitásvizsgálata**

Szakács Péter, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Surján Péter egyetemi tanár  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A dolgozatban három iteratív eljárást tanulmányozunk: az N-elektron Schrödinger-egyenlettel ekvivalens Bloch-egyenlet megoldását, egy Hartree-Fock szinten alkalmazható algoritmust a sűrűségmátrix közvetlen meghatározására, valamint a CCSD módszert. A két első eljárásban közös, hogy olcsón tudunk energiát számolni, mert egyikben sincs szükség mátrixok diagonalizálására

A dolgozat első részében bevezetjük a hullámoperátort, majd ennek segítségével levezetjük a Bloch-egyenletet. A Bloch-egyenlet rekurzív alakját iterálva diagonalizálás nélkül számolhatunk energiát. Az iterációs paraméter ( $\eta$ ) változtatásával azt tapasztaljuk, hogy kaotikus eredmények léphetnek fel. Levezetünk egy összefüggést, melynek segítségével a Bloch-egyenlet Ljapunov-exponensét számolni lehet, és megvizsgáljuk a H<sub>2</sub> molekula és a He atom esetén, hogy mennyire megbízhatóan jósolja az iteráció instabillá válását.

A dolgozat második részében a sűrűségmátrix (P) Bloch-típusú iterációjával foglalkozunk. A P-iteráció megőrzi az idempotenciát és a spurt. A P-iterációt a dolgozatban legtöbbször Hückel-közelítésben használjuk, de az algoritmus minden további nélkül általánosítható ab initio Hartree-Fock, vagy Kohn-Sham (DFT) szintre is [1]. Ennek az iterációnak is vannak kaotikus megoldásai. Legrészletesebben a butadién példáján tanulmányozzuk a kaotikus iterációk tulajdonságait: nemcsak az iterációs-, hanem a konfigurációs-, illetve a fázistérben is ábrázoljuk a kapott eredményeket. A Bloch-egyenlettel analóg levezetést végzünk a Ljapunov-exponens számolásra, majd különböző molekulákra teszteljük ennek predikciós képességét. Végzünk P-iterációs számolást egy 60 vízmolekulából álló klaszterre, egy lineáris fémes poliénre, valamint egy királis nanocsőre. A víz klaszterre történt számítás ab initio Hartree-Fock szinten történik.

A dolgozat harmadik részében a CCSD (Coupled Cluster Singles and Doubles) egyenletek stabilitását vizsgáljuk. Röviden bemutatjuk a CCSD elmélet fontosabb alapjait, majd erre a módszerre is elvégezzük a Ljapunov-analízist. A stabilitási mátrix elemeire vonatkozó összefüggéseket ebben az esetben más módon vezetjük le, mint az első két részben, mivel a ezek az egyenletek jóval bonyolultabbak. A konkrét analízist a Be atom példáján végezzük el kétféle bázisban (STO-3G, illetve 6-31G), illetve kétféle iterációs sémával. Ezen példán bemutatunk egy bifurkációs diagramot, és kiszámítjuk a probléma Ljapunov-exponenseit is.

[1] D. Kőhalmi, Á. Szabados, P. Surján, *Phys. Rev. Letters* 95, 013002 (2005).



**Folyamatszimulációs módszer kidolgozása összetett spinrendszerek dinamikus NMR spektrumainak számolására**

Szalay Zsófia, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Rohonczy János** egyetemi docens  
ELTE Szervetlen Kémia Tanszék

Az NMR spektroszkópia hosszú detektálási ideje miatt egyedülálló szerkezetvizsgálati módszer a molekulák konformációs mozgásának tanulmányozására. A hőmérséklet változtatásával a konformerek élettartama jelentősen változik, ami az NMR spektrumban markáns jelalakváltozást eredményez. E jelenségkör kísérleti megfigyelése és elméleti leírása a dinamikus NMR spektroszkópia tárgya. Az elméleti leírás sarkalatos pontja a hőmérsékletfüggő spektrumsorozatok szimulációja. Az NMR spektrumok szimulációjának alapvető problémája, hogy egy  $n$  maggal és  $m$  állapottal jellemezhető rendszer számítása  $2^{4mn}$  memóriaigényű. Emiatt az exponenciális növekedés miatt már egy 8-9 csatoló magot tartalmazó rendszer szimulációja is megvalósíthatatlan számítási feladat.

A dolgozat témája egy olyan, folyamatszimuláción alapuló DNMR spektrumok szimulációjára alkalmas, új megközelítésű program (MC-DNMR) kifejlesztése és tesztelése, amely lényegesen kisebb memóriaigényű az eddig használtaknál. A program a cserefolyamatok félig fenomenologikus - félig kvantummechanikai megközelítése helyett a rendszer statisztikus viselkedését modellezve a nagy számok törvénye alapján számolja ki a spektrumot. Így a teljesíthetetlenül nagy memóriaigény elfogadható mértékűre csökken. A számítások algoritmusát többszálúvá alakítva, lehetőség nyílt a multiprocesszoros gépek előnyeinek kihasználására. Ennek megvalósításával (Java RMI technika) a futásidőt jelentősen csökkentettük.

A program alapja az NMR spektroszkópiában használatos, egyetlen magra értelmezett vektormodell, amelynek keretein belül a dinamikus jelenség egyszerűen leírható. A modell értelmezését olyan esetekre is sikerült kiterjesztenünk, ahol több, egymással csatolásban lévő mag van jelen, azaz az NMR elméletben rendszeresen használt szorzatfüggvények nem sajátfüggvényei a Hamilton-operátornak.

A megírt program helyességét két hipotetikus és három valós rendszeren ellenőriztük. Ez utóbbiak a  $2 \times 1$  maggal modellezhető N,N-dimetil-acetamid, a  $2 \times 4$  magos nitrozo-anilinszármazék és a  $4 \times 7$  maggal leírható N,N-diizopropil-karbaminsav-trimetilszililészter  $^1\text{H}$  spektrumai voltak. A tesztek igazolták a modell és a szimulációs program helyességét.

**A treonin gázfázisú konformerei és azok detektálási lehetőségei**

Szidarovszky Tamás, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Czakó Gábor** PhD hallgató  
ELTE Molekulaspektroszkópai Laboratórium  
**Dr. Császár Attila** egyetemi tanár  
ELTE Molekulaspektroszkópai Laboratórium

Napjaink kémiájának fontos fejlődési iránya a biomolekulák, köztük a peptidok és az aminosavak térszerkezetének és tulajdonságainak feltérképezése. A természetes aminosavak preferált illetve lehetséges térszerkezeteinek ismerete hasznos lehet a vegyész számára például az organokatalízis tudományterületén, valamint a bioelektronikai vonatkozású, szén-nanocsövek aminosavakkal, illetve félvezető kvantum pontok peptidokkal való funkcionálizálásakor.

Az aminosavakra vonatkozó nagy pontosságú számítások sorába illeszkedik jelen TDK dolgozat első része, a semleges (gázfázisú) treonin, mint egy kissé már bonyolultabb szerkezetű aminosav, összes lehetséges konformerének, továbbá a legfontosabb konformerek egyensúlyi szerkezetének, relatív energiájának, valamint rezgési és forgási színeképeinek meghatározása. A treonin potenciális energia felületének feltérképezése során, a kis számításigényű RHF/3-21G szinten számítva, 87 konformert találtam. A szerkezetek végső optimalizálását a megbízhatóbb szerkezeti eredményeket szolgáltató B3LYP/6-311++G(d,p) szinten végeztem. A hat legmélyebb energiájú konformer relatív energia sorrendjét a *focal-point analysis* (FPA) eljárással határoztam meg.

A dolgozat második felében egy olyan konformer detektálási lehetőségre teszek javaslatot, mely metil csoporttal rendelkező molekulákban, ilyen a treonin, a metilcsoport belső forgási mozgása által meghatározott színekép vizsgálata alapján kívánja meghatározni, hogy a különböző hőmérsékleteken mely konformerek járulnak hozzá a színekép megjelenéséhez. Az utóbbi számításorozatot a treonin legalacsonyabb energiájú konformereire végeztem el, hiszen csupán ezekre valószínűsíthető, hogy a hőre érzékeny treonin esetében az elméleti jóslatok kísérleti úton ellenőrizhetők lesznek. A treonin esetében tett számítások azt mutatják, hogy az átmenetek a különböző konformerekre többnyire eléggé eltérnek ahhoz, hogy azok gázfázisú spektroszkópai azonosításának bázisául szolgáljanak.

**A szén-oxigén és a szilícium-oxigén kötés savkatalizált hidrolízise**

**Terleczy Péter**, PhD hallgató  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

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

A számításhoz kémia alkalmas eszköz reakciómechanizmusok részletes feltárására, azonban a számításokat általában izolált molekulákra végzik el, melyek a gázfázist modellezik. Kondenzált fázisban már nem lehet figyelmen kívül hagyni ezeket a kölcsönhatásokat. Leírásukra implicit és explicit modelleket alkalmazhatnak [1]. Ez utóbbi módszer alkalmazhatóságát több cikk is említi hidrolízisreakciók esetére [2,3,4], azonban eddig csupán kis számú explicit vízmolekulát vettek figyelembe. Ezek a munkák nem adtak megfelelő termodinamikai leírást az általam vizsgált hidrolízisreakciókra: a sziloxán, alkoxiszilán és éterkötés savkatalizált hasítására. Ezen kötések hidrolitikus hasadásának illetve kialakulásának mechanizmusa kulcsfontosságú a kolloid szilícium - dioxidot tartalmazó szilikagél tetraalkoxi-szilánokból történő előállításának szol-gél folyamatában. Hasonlóképpen ismeretes, hogy az SiOSi láncot tartalmazó rendszerek (pl. polysziloxánok) képesek savas körülmények között hidrolizálni, míg az éterkötés (COC) hasítása csak jóval nehezebben megy végbe. A dolgozatban bemutatok lehetséges reakcióutakat a dimetil -, metil - szilil -, és diszilil - éter savkatalitikus bomlására gáz fázisban (potenciálmentes térben). Igazolom az oldószer hatását az energiagátakra az egyetlen vízmolekulával komplexált esetek példáján, majd a négy vízmolekulát tartalmazó rendszereken keresztül. Kísérletet teszek a solvatáció leírására, a vízmolekulák számának és orientációjának függvényében. Az irodalomban leírt 20-293 vízmolekulából felépülő klaszterek [5,6] mintájára elkészítettem a modellvegyületek és termékek elsőrendű hidrátburkát, amelynek segítségével korrigáltam a reakció termodinamikáját. A számított eredmények alapján felvázolom a kolloid szilícium - dioxid alkoxiszilánból való kialakulásának elemi lépését.

- [1] Cramer, C. J., Truhlar, D.G., *Chemical Reviews*, **99**, 2161-2020 (1999)
- [2] Cypryc, M., Apeloig, Y., *Organometallics*, **21**, 2165-2175 (2002)
- [3] Okamoto S., Fujita N., Yamabe S., *Journal of Physical Chemistry A*, **102**, 3991-3998 (1998)
- [4] Kudo T., Gordon M.S., *Journal of Physical Chemistry A*, **104**, 4063 (2000)
- [5] Ludwig, R., Appelhagen, A., *Angewandte Chemie International Edition*, **44**, 811-815 (2005)
- [6] Fanourgakis G. S., Apra E., Xantheasa S. S., *Journal of Chemical Physics*, Vol. **121**, No **6**, (2004)

# Makromolekuláris és műanyagkémia tagozat



**Poli(N-vinil-imidazol)-l-poli(propilén-oxid) kotérháló**

**Fodor Csaba**, okleveles vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék  
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Az amfifil kotérháló 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. A munkám során sikerült egy teljesen új, a szakirodalomban eddig még le nem írt poli(N-vinil-imidazol)-l-poli(propilén-oxid) (PVI $l$ -PPO) kotérháló sorozatot előállítani. A PVI $l$ -PPO kotérháló előállításához szükséges volt a poli(propilén-oxid)dimetakrilát telekelikus makromonomer és az N-vinil-imidazol sikeres kopolimerizációjához az alkalmazott iniciátor megfelelő mennyiségének meghatározása. A kotérháló összetevőit többféle analitikai módszerrel vizsgáltam meg ( $^1\text{H-NMR}$ , gélpermeációs kromatográfia) és ezeknek a méréseknek az eredményeit kiértékeltem, valamint értelmeztem. Ezt követte a kotérháló szintézise. A képződött kotérháló extrakcióját követően tanulmányoztam apoláros és poláros oldószerekben való duzzadásukat, aminek eredményei egyértelműen igazolták az amfifil tulajdonságát ezeknek az új anyagoknak. A PVI $l$ -PPO kotérháló minták fémionnal komplexképző képességéről infravörös spektroszkópia alkalmazásával kaptam kvalitatív képet. Láng atomabszorpciós spektrometriás analízissel pedig meghatároztam a PVI $l$ -PPO kotérháló összetételtől függő  $\text{Cu}^{2+}$ -ion megkötő képességét. Az előállított új poli(N-vinil-imidazol)-l-poli(propilén-oxid) kotérháló sorozat kiindulópontja lehet további kutatásoknak, melyek céljai között szerepelhet – az imidazol csoport erős komplexképző sajátosságát alapul véve – szervesetlen nanorészecskék beépítése, beágyazása a kotérhálóba, valamint szennyező és mérgező nehézfém ionok eltávolítására (megkötésére) alkalmas membránok létrehozása.

**Kémiai környezetre érzékenyen reagáló poliaminosav-gélek**

**Gyarmati Benjám**in, IV. évf. vegyész-mérnök  
BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

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

A fizikai kémia manapság egyik legfontosabb kutatási területe a gélek vizsgálata: előállításuk, szerkezetük és viselkedésük közötti kapcsolat feltárása. A csoportunk által is kutatott „intelligens” gélekre jellemző, hogy jól definiáltan (nem-lineáris módon, azaz ugrásszerűen) reagálnak bizonyos környezeti paraméterek változására, változtatására (pH, hőmérséklet, fémion-koncentráció).

Munkám során olyan gél kifejlesztése volt a célom, amely esetében ez a környezeti paraméter a redoxpotenciál; tehát a gél jellemző tulajdonságai, duzzadásfoka illetve keménysége reverzibilisen változtatható a környezet redoxpotenciáljának változtatásával.

A gél poliszukcinimidből állítottam elő, természetes alapú keresztkötőkkel gésítve. A polimer láncokat redukálószerrel bontható és redukálószernek ellenálló molekulákkal egyszerre kapcsoltam össze különböző arányokban. A gél különlegessége, hogy teljesen biokompatibilis, az emberi szervezet számára ártalmatlan, mivel nem toxikus keresztkötőkre és aszparaginsav molekulákra bomlik. Ebből adódóan kiemelt szerepe lehet a szabályozott hatóanyag-leadás területén: szervezetünk meghatározott kémia környezetű (esetünkben: redoxpotenciálú) pontján a gél nagymértékben duzzad anélkül, hogy teljesen felbomlana, miközben leadja a hordozott hatóanyagot.

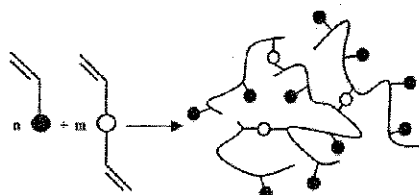
Az előállított gélek fizikai tulajdonságait és duzzadását vizsgáltam a pH, redukáló- illetve oxidálószer jelenlétének, valamint a keresztkötő molekulák arányának függvényében.

### Hiperelágazásos poli(metil-metakrilát) atomátadásos gyökös kopolimerizációval

Hellner Ákos, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Iván Béla egyetemi magántanár  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Munkám során egy újnak számító eljárással, az atomátadásos gyökös polimerizációval (ATRP) állítottam elő hiperelágazásos polimereket az ábrán látható kopolimerizáció útján.



Hiperelágazásos polimer szintézise kopolimerizációval

Kísérleteimben új ATRP-s körülmények között egy hiperelágazásos polimert állítottam elő monofunkciós metil-metakrilát (MMA) és bifunkciós etilén-glikol-dimetakrilát (EGDMA) kopolimerizációjával rézkomplex katalizátor alkalmazásával. A munkám célja a MMA monomer, az EGDMA bifunkciós monomer és az iniciátor olyan arányának megtalálása volt, amely közel 100%-os konverzió mellett tömör, nagy elágazottságú polimer molekulák képződéséhez vezetett a gélesedés jelenségének fellépése nélkül. Megállapítottam, hogy az iniciátor koncentráció növelésének hatására ugyanolyan polimerizációs idő alatt nagyobb konverzióval képződött polimer. Állandó iniciátor koncentráció mellett az EGDMA mennyiségének növelésével azonban gélesedést észleltem 1:1-nél nagyobb EGDMA iniciátor arányoknál. Az irodalommal összevetve gélesedés szempontjából jelentős eredményt kaptam, mivel a hagyományos gyökös polimerizációhoz képest nagyobb bifunkciós monomer aránynál sem lépett fel gélesedés. A gélpermeációs kromatográfiás analízis eredményei alapján leszögezhetjük, hogy nagy elágazottságú polimereket sikerült előállítani ezzel a módszerrel. Eredményeink azért tekinthetők jelentősnek, mert ezzel az eljárással tömör, nagy elágazottságú, további reakciókra képes funkciós csoportokat tartalmazó hiperelágazásos polimerek előállítására nyílik lehetőség, melyek alkalmazására többféle területen nyílik lehetőség.

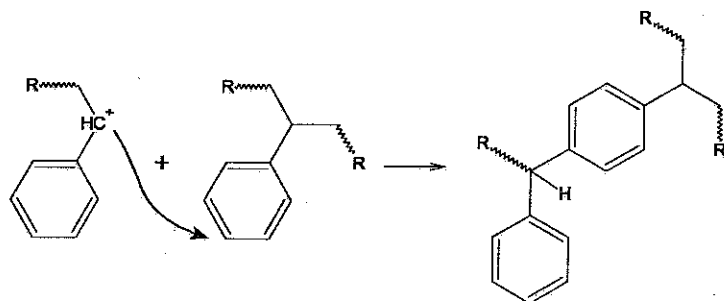
### Hiperelágazásos polisztirol előállítása karbokationos polimerizációval

Kasza György, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető  
ELTE Kémiai Technológiai és Környezetkémiai Tanszék  
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Napjainkban a polimer kutatások egyik fontos irányvonalát képezik a hiperelágazásos polimerek. Ez annak köszönhető, hogy kedvező tulajdonságaik mellett előállításuk egyszerűen megvalósítható. Munkám során a kváziélő karbokationos polimerizációval előállított polisztirol önojtásos reakcióját vizsgáltam. Az irodalomban feltehető, hogy ez a hiperelágazásos polimer a 1. ábrán látható önojtásos Friedel-Crafts alkilezéssel alakul ki, de a hiperelágazások képződése során megváltozó szerkezeti és oldattulajdonságokról a korábbi beszámolók nem adnak felvilágosítást.

Kutatásom célja az volt, hogy a hiperelágazásos polisztirol képződése során meghatározott időközönként történő mintavétellel, és a minták megfelelő elemzésével átfogó képet kapjak a lejátszódó reakcióról és a keletkező polimer tulajdonságairól.



1. ábra Elágazás kialakulása kváziélő karbokationos polimerizációval előállított polisztirolban

Az előállított minták gélpermeációs kromatográfiai és  $^1\text{H-NMR}$  spektroszkópiai analízisével követtem az elágazási reakciót. Ezen vizsgálatok eredményei egyértelműen igazolják a 1. ábrán látható reakció lejátszódását, valamint lehetőséget biztosítottak a hiperelágazásos polisztirol képződése menetének feltárására is.



**Stabilizátorok reakciómechanizmusának tanulmányozása Phillips típusú polietilénben**

**Kriston Ildikó**, okleveles vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Földes Enikő** tud. csoportvezető  
MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

A polietilén az egyik legnagyobb mennyiségben gyártott és felhasznált műanyag. A polimer azonban érzékeny a degradációra, ezért stabilizátorokkal védeni kell a káros kémiai reakcióktól. A polietilén feldolgozása magas hőmérsékleten, kismennyiségű oxigén jelenlétében, nyíró igénybevétel mellett történik. A degradáció megakadályozására általában sztérikusan gátolt fenol típusú primer antioxidáns, valamint szerves foszforvegyület (szekunder antioxidáns) kombinációját keverik a polimerhez. A BME Műanyag- és Gumiipari Tanszéken folytatott korábbi kutatások azt bizonyították, hogy a foszforvegyület típusa és kémiai felépítése jelentősen befolyásolja a kémiai hatékonyságot és a stabilizálás mechanizmusát. A dolgozatban bemutatott munka közvetlenül kapcsolódik a Tanszéken folytatott kutatásokhoz, amelyek célja feltárni az összefüggést a foszfortartalmú stabilizátorok kémia szerkezete, hatásmechanizmusa és hatékonysága között.

Munkám során Phillips katalizátorral gyártott polietilénben vizsgáltam egy aromás foszfit hatását és hatásmechanizmusát a koncentráció függvényében. A foszfit hatékonyságát fenolos antioxidáns jelenlétében tanulmányoztam. Infravörös spektroszkópiával és folyadékromatográfiával meghatároztam a polimer feldolgozása során elfogyott stabilizátor mennyiségét. A stabilizátorok fogyásának függvényében elemeztem a polimer kémiai és reológiai tulajdonságainak, valamint színének változását, továbbá a maradék stabilitást. A kísérleti eredmények összehasonlítása alapján következtettem a gátolt fenolt és foszfitot tartalmazó adalékrendszer hatásmechanizmusára.

**Gyógyszerhordozó polimer felületének kémiai módosítása és jellemzése felületanalízissel és nedvesedés mérésével**

**Kutnyánszky Edit**, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kiss Éva** egyetemi docens  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A tejsav glikolsavval alkotott kopolimerje (PLGA) jól alkalmazható biodegradábilis gyógyszer-hordozóként, mert bomlástermékei a szervezetben is előforduló, nem toxikus anyagok. Mikro- és nanogömböcske formájában a szervezetbe juttatva, hidrolitikus degradációja során szabályozott módon szabadul fel belőle a hatóanyag.

A programozott gyógyszerleadás megvalósulását nagymértékben akadályozza a PLGA kopolimer felületi hidrofóbítása. *In vivo* kísérletek mutatják, hogy a szervezet védekező mechanizmusát beindítva nem kívánatos reakciókat váltana ki, vagy gyorsan kiürülnek a szervezetből. Biológiai rendszerekkel érintkezésbe kerülő felületek hidrophil jellegének kialakításához és ezáltal a biokompatibilitásának fokozásához az utóbbi években bevált módszer lett a poli (etilén-oxid) (PEO) nem ionos, hidrophil tulajdonságú polimer rögzítése a szilárd felszínhez.

Célunk az volt, hogy 85 %-os tejsav és 15 %-os glikolsav tartalmú PLGA kopolimerből készített film felületén kémiai kötések kialakítva, a polimer felületére stabil módon rögzítsünk poli(etilén-oxid)-ot. PLGA kopolimer film felületi aminolízise során további reakcióra alkalmas aminocsoportokat alakítottuk ki. Az így funkcionálizált felületet aktivált PEO-vegyülettel reagáltattunk. A felületmódosítási lépések eredményét nedvesedés vizsgálatával követtük. Ezzel párhuzamosan a felületi réteg összetételét röntgensugár-fotoelektron spektroszkópiával (XPS) határoztuk meg.

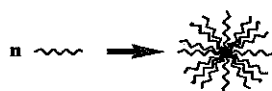
A felületmódosítás eredményeképpen olyan PLGA felületet nyertünk, amelyre 5-6 szén atom %-nak megfelelő mennyiségű PEO-t tudunk beépíteni, és lényegesen jobban nedvesedett, tehát hidrophilebb tulajdonságú, mint az eredeti PLGA felület. Mind a peremszög mérések, mind az XPS analízis azt mutatta, hogy a vizsgált hőmérsékleti tartományban (4-20 °C) a hőmérsékletnek nincs hatása a PEO-kapcsolására. A biodegradábilis polimer felületi funkcionálizálása és hidrophilizálása várhatóan hozzájárul a koloidális gyógyszerhordozók fejlesztéséhez, mivel a biokompatibilitás javítása lehetővé teszi a hosszabb idejű hatóanyag leadását, míg a felületi funkcionálizálás segítségével jelent a hatóanyag szelektív célbajuttatásában.

**Polisztirol csillag polimer szintézise kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációval és a polimer analízise**

**Podlaviczki Tamás**, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár  
ELTE Kémiai Technológiai és Környezetkémiai Tanszék  
MTA KK AKI Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

A csillag polimer a különleges térbeli felépítésű makromolekulák érdekes tulajdonságokkal rendelkező csoportját képezik. Ezekben a polimerekben egy központi magból több száz vagy több ezer polimer lánc nyúlik ki. A csillag polimer szintézise és vizsgálata napjainkban még mindig egy kiaknázatlan és rengeteg lehetőséget rejtő terület mind a tudomány, mind pedig az ipar számára.



Csillag polimer szintézise „arm-first” módszerrel

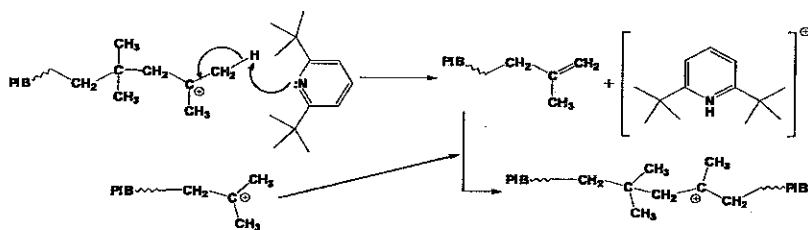
Munkám során egy újnak számító eljárással, az atomátadásos gyökös polimerizációval (ATRP) állítottam elő csillag polimereket az úgynevezett, a fenti ábrán látható „arm first” módszerrel. Kísérleteimben lineáris, brom végű polisztirol (PSt-Br) karkokat ATRP-s körülmények között divinil-benzollal (DVB) reagáltatva képződtek a csillag alakú polimer. Szisztematikus kísérletsorozatok kivitelezésével tanulmányoztam a polisztirol átlagos hosszának és a reakcióidőnek a hatását a csillag polimer képződésének folyamatára. A képződött anyagokat multidetektoros gélpermeációs kromatográfiával (GPC) és  $^1\text{H-NMR}$  spektroszkópiai mérésekkel analizáltam. A GPC kromatogramokból számolt molekulatömeg-eloszlás görbék kiértékelése azt az érdekes eredményt szolgáltatta, hogy a kisebb  $M_n$  értékű polisztirolból gyorsabban képződnek csillag polimer. A viszkozitás detektorral kapott eredmények meglepő módon azt mutatták, hogy bizonyos molekulatömeg értékek felett a csillag polimer viszkozitása nem nő, hanem csökken a molekulatömeg növekedésével. A fényszóródással nyert abszolút molekulatömegek és a hidrodinamikai térfogattal kapcsolatos elució térfogat közötti kapcsolat kísérleti eredményei is egyértelműen igazolták a kompakt, gömbszerű szerkezetű csillag polimer képződését. Tudásunk szerint ez az első olyan szisztematikus vizsgálatsorozat, amely ATRP alkalmazásával a csillag polisztirol képződésének menetét, különösen pedig a csillag-csillag kapcsolódások szerepét felderítette.

**Poliizobutilén láncapcsolódása izobutilén 2,6-di-terc-butilpiridin jelenlétében  
zajló karbokationos polimerizációjában**

Szabó Ákos, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék  
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Munkám során a 2,6-di-terc-butilpiridin (DtBP) protoncsapda hatását vizsgáltam izobutilén kváziélő karbokationos polimerizációjára. Az irodalmi adatok [1] szerint DtBP jelenlétében a poliizobutilén láncok összekapcsolódnak (1. ábra), de ennek részletei nem ismeretesek. Kutatásaim célja ennek a folyamatnak az átfogó vizsgálata volt különböző reakciókörülmények között.



1. ábra: A DtBP által kiváltott láncösszekapcsolódás feltételezett mechanizmusa

Két kísérleti elrendezést valósítottam meg. Az egyikben az izobutilén karbokationos polimerizációját végeztem el DtBP jelenlétében. A másik kísérleti elrendezés sorozatban először szűk molekulatömeg-eloszlású poliizobutilént állítottam elő, és azt követően adtam a rendszerhez a DtBP-t. Ekkor jól elkülöníthetők a reakció során lejátszódó folyamatok. A polimer minták analízise gélpermeációs kromatográfiával (GPC) és  $^1\text{H-NMR}$ -rel történt. Vizsgálataim során két paramétert, a DtBP koncentrációját és a polimerizációs közeg polaritását változtattam. Mind a DtBP koncentrációjának, mind a közeg polaritásának növelése a láncösszekapcsolódás mértékének növekedését eredményezte. Mindkét paraméter együttes növelése az összekapcsolódott láncok arányának további növekedését eredményezte. Mindez igazolja a fenti mechanizmust.

[1] Held D., Iván, B., Müller, A. H. E., de Jong, F., Graafland, T., *Adv. Chem. Ser.*, **665**, 63 (1997)

**Cellulóz-acetát külső és belső lágyítása  $\epsilon$ -kapolaktonnal**

**Számel György**, V. évf. vegyész  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Pukánszky Béla** egyetemi tanár  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék  
**Klébert Szilvia** PhD hallgató  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

Biológiailag lebomló műanyagokra elsősorban a csomagolóiparban, a mezőgazdaságban, valamint a gyógyászatban van nagy igény. A természetes polimerek - például a keményítő és a cellulóz - ideális alapanyagai lehetnének ezeknek a műanyagoknak, mivel amellet, hogy teljesen lebomlanak, még megújuló nyersanyagforrásokon is alapulnak. A természetben a legnagyobb mennyiségben előforduló bioszintetikus polimer a cellulóz, azonban műanyagipari elterjedését rossz feldolgozhatósága korlátozza. Tulajdonságai származékképzéssel javíthatók, és így alkalmas lehet biodegradálható polimerként történő felhasználásra. Kereskedelmi szempontból a legjelentősebb cellulózszármazék a cellulóz-acetát. A cellulóz-acetát biopolimerként való felhasználásának két akadálya van. Egyrészt magas üvegesedési hőmérséklete miatt a feldolgozhatóság javítása érdekében a cellulóz-acetátot lágyítani kell. Szokványos lágyítói azonban gyakran kimigrálnak, veszélyeztetve ezzel a környezetet és az emberi egészséget. A kivézés belső, más néven reaktív lágyítással, azaz a lágyítószer és a cellulóz-acetát között kémiai kötést létesítve elkerülhető. Másrészt a magas helyettesítési fokú cellulóz-acetát biodegradációja lassú. Más biológiailag lebomló polimerrel keverve, vagy kopolimerizálva a cellulóz-acetátot a degradáció feltehetőleg gyorsítható.

Alifás poliészter láncokat ojtva a cellulóz-acetatra, könnyebben feldolgozható és gyorsabban lebomló kopolimerek állíthatók elő. Az alifás poliészterek közül napjainkban a poli( $\epsilon$ -kapolakton) a legelterjedtebb, mely annak ellenére, hogy szintetikus, biokompatibilis és tökéletesen lebomló. Sajnos, sok más alifás poliészterhez hasonlóan mechanikai tulajdonságai rosszak, olvadáspontja pedig túl alacsony, ami számos felhasználási területen megakadályozza elterjedését. Ezek a hátrányai más polimerrel történő fizikai, vagy kémiai módosítással kiküszöbölhetők. Olcsó bioszintetikus polimerrel módosítva a poli( $\epsilon$ -kapolakton)-t még a kapolakton monomer magas ára is kompenzálható.

Munkám során cellulóz-acetát-poli( $\epsilon$ -kapolakton) ojtott kopolimereket készítettem, a reakciókörülményeknek (reakcióidő, reakcióhőmérséklet és lágyító mennyisége) a keletkező termékek szerkezetére és tulajdonságaira gyakorolt hatását vizsgáltam. A külső lágyítás elkerülése érdekében a reakciókörülmények optimalizálásával a lehető legnagyobb mértékű ojtást kívántam elérni.

**Szerkezet-tulajdonság összefüggések poliuretán elasztomerekben**

**Szőke Imre, V. évf. vegyész**  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Pukánszky Béla** tanszékvezető egyetemi tanár  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék  
**Bagdi Kristóf** PhD hallgató  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

Az artériákon előforduló aneurizmák (*verőértágulatok*) túlnyomó része érfejlődési rendellenesség következtében alakul ki. Az erek fala ezeken a helyeken meggyengül, ami az aneurizma megrepedéséhez, és vérzés kialakulásához vezethet. Különösen az agyi erekben keletkező aneurizmák veszélyesek, ugyanis ezek vérzését a betegek közel 50 %-a nem éli túl, és még szerencsés lefolyás esetén is nagyon nagy a maradandó agyi károsodások kialakulásának veszélye. Az aneurizmák kezelése csak műtéti úton lehetséges. A műtétekhez egyre gyakrabban alkalmaznak éren belüli technikát, mely a sebészeti eljárásokhoz képest kedvezőbb indikációkkal rendelkezik. A különböző embolizáló rendszert használó módszerek közül a legújabb a polimer alapú anyagot felhasználó eljárás.

A Tudományos Diákkörben végzett munkámmal a BME Műanyag- és Gumiipari Tanszékén folyó lineáris poliuretán (PUR) elasztomer alapú embolizáló anyag fejlesztésébe kapcsolódtam be. Munkám során különböző összetételű PUR elasztomereket szintetizáltam, és vizsgáltam ezek szerkezetét, tulajdonságait, valamint az ezek között fellelhető összefüggéseket. Kutatómunkám fő célja különböző láncvégi csoportok kialakítása volt eltérő összetételű poliuretán láncokon, amiktől azt reméltük, hogy jelentősen befolyásolni fogja a polimerek tulajdonságait, különös tekintettel az oldhatóságra, ami az embolizáló anyagként való felhasználás talán legfontosabb kritériuma.

Eredményeink azt mutatták, hogy – feltételezéseinknek megfelelően – a tulajdonságokat jelentősen befolyásolja az összetétel és a láncvégi csoportok minősége. A minták mechanikai tulajdonságai széles tartományban változtathatók az összetétellel. Az egyes minták átlátszósága jelentősen különbözik egymástól, ami igen eltérő szupermolekuláris szerkezetek létrejöttére utal. A dimetil-szulfoxidban végzett kísérletek azt mutatták, hogy az oldhatóságot mind az összetétel, mind a láncvégi csoportok jelentősen befolyásolják. A jól oldható mellett voltak olyan mintáink, amelyek az oldószer csak duzzasztott, amit feltételezésünk szerint kismértékű térhálosodás, vagy a láncok közötti erős kölcsönhatás okoz. Az általunk készített minták tulajdonságait egy a klinikai kísérletekben már bevált és kedvező tulajdonságokkal rendelkező referenciaanyag hasonló tulajdonságaival is összehasonlítottuk. Egyes tulajdonságok esetén jó egyezést találtunk, míg más tulajdonságokat még javítani kell, hogy az anyag megfeleljen a klinikai felhasználás összes kritériumának.

**Epoxigyanták égésgátlása foszfortartalmú reaktív adalékkal és nanorészecskékkel**

**Tóth Nikoletta**, okleveles vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Az epoxigyantákat számos vonzó tulajdonságuk miatt széles körben használják. Legnagyobb hátrányuk azonban éghetőségük, amelynek csökkentése dolgozatomban fontos feladata volt. Az égésgátlás egyre fontosabb szerepet játszik a műszaki alkalmazási területeken. A kismolekulájú szerves foszforvegyületeknek nagy előnye a halogéntartalmú adalékokkal szemben, hogy a környezetre és az egészségre gyakorolt hatásuk kedvezőbb.

Tudományos diákköri munkám során egy olyan egyszerű és gazdaságos eljárás kifejlesztése valósult meg, amely segítségével foszfor funkciót vihetünk be az epoxigyanták térhálósítására általánosan használt alifás aminba. Ezáltal olyan foszfortartalmú amin előállítására került sor, mely egyszerre betölti a térhálósító és az égésgátló szerepét az epoxigyantákban.

Az előállított vegyület termikus viselkedése alapján megállapítottam, hogy alkalmas lehet égésgátlásra, hiszen a hő hatására végbemenő folyamatok endoterm jellege, valamint a nagymértékű felhabosodás az égésgátlás szempontjából kedvező. További jelentős előnye a hagyományos adalékokkal szemben, hogy nem növeli meg az epoxigyanta viszkozitását.

A szintetizált foszfortartalmú amint epoxigyantába építettem be. A DSC-vel mért térhálósodási entalpia értékek alapján megállapítottam, hogy valóban képes kiváltani a hagyományos térhálósító szert. Emellett - amint azt az LOL, UL 94, cone caloriméteres és izzóhuzalos vizsgálatok bizonyítják - égésgátló hatása is kitűnő. Az epoxigyanta oxigénindexét 21-ről 33-ra javítottam, valamint az anyag elérte az UL94 szerinti legjobb, V-0-s besorolást, miközben a hőkibocsátása is ötödére csökkent. Nanorészecskék hozzáadásával további javulást értem el.

Izzóhuzalos vizsgálat során az új foszfortartalmú égésgátlóval a szabvány szerinti legjobb értéket sikerült elérnem, ami azt jelenti, hogy az így égésgátlott epoxigyanta bármilyen elektronikai alkalmazásra megfelel, akár folyamatosan áram folyhat a belőle készült részekben, anélkül, hogy felügyelni kellene az eszközt.

Az Európa Parlament által hozott, 2006. júliusától érvénybe lépett jogszabály szerint az Európai Unió országaiban betiltották a halogén tartalmú égésgátlók alkalmazását az elektronikai- és villamosiparban. Így az előállított új, reaktív adalékkal égésgátlott epoxigyanta felhasználása az elektronikai iparban nagymértékben elősegítheti a jelenleginél biztonságosabb számítógépek és egyéb elektronikai eszközök kifejlesztését.

**Sztirol karbokationos polimerizációja benzotrifluoridban, egy környezetileg előnyös oldószerben**

**Verebélyi Klára**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék  
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Munkám során a sztirol karbokationos polimerizációját tanulmányoztam az irodalomban tudomásunk szerint még le nem írt körülmények között, benzotrifluorid (BTF) oldószerben. Célunk az volt, hogy ezt a polimert olyan környezetileg ártalmatlannak minősített oldószerben tudjuk előállítani, ami helyettesítője lehet az eddig és napjainkban is széles körben használt, környezetre káros diklór-metánnak (DCM). E célunk megvalósításához kétféle Lewis savat és polimerizációs adalékot próbáltunk ki.

$\text{TiCl}_4$  katalizátor és TMEDA nukleofil jelenlétében rövid, azaz 5 perc reakcióidő alatt  $-20^\circ\text{C}$ -on BTF-ben hasonló tulajdonságokkal rendelkező polimereket állítottunk elő, mint DCM-ben. Ezen kívül szobahőmérsékletű polimerizációt is végrehajtottunk nagy konverzióval.

Az  $\text{SnCl}_4$  katalizátor és a TMEDA alkotta komplex nem volt hatásos a karbokationos polimerizáció lehetséges mellékreakciója, a lánctörés visszaszorítására. Ezért másik adalékanyagot kerestünk a szakirodalomban. A tetrabutil-ammóniumkloridot már többször sikeresen alkalmazták  $\text{SnCl}_4$  katalizátorral együtt, azonban minden esetben klórozott oldószerben. Megkíséreltük a használatát benzotrifluoridban. Alkalmazásával BTF-ben valamivel lassabban ment végbe a polimerizáció, mint DCM-ben. A számolt számátlag molekulatömeg ( $M_n$ ) értékek kis konverziónál alatta voltak a mért értékeknek, ami az iniciátor kisebb mértékű hatékonyságával magyarázható. A két oldószerben tapasztalt különbségek miatt kinetikai vizsgálatokat végeztünk. Mindkét oldószerben azt tapasztaltuk, hogy 20 percig nem képződött polisztirol. Ez az irodalomban eddig még le nem írt indukciós periódusra utal. Az  $M_n$  értékek függése a konverziótól lassú iniciálásra utal.

Munkánk során tehát elsőként valósítottuk meg a sztirol karbokationos polimerizációját a környezetileg előnyös benzotrifluoridban. Arra a következtetésre jutottunk, hogy a benzotrifluorid valóban helyettesítője lehetne a számos, környezetkémi szempontból hátrányos tulajdonságokkal rendelkező DCM-nek.



Vertical text or barcode-like markings on the right edge of the page.

## Anyagtudomány tagozat

**Ultravékony, multifunkcionális bevonatok előállítása nedves, kolloidkémiai  
eljárással**

**Ábrahám Nóra**, IV. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi docens  
BME Fizikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Naszályi Livia** PhD hallgató  
BME Fizikai Kémia Tanszék

Munkám során ultravékony, multifunkciós bevonatokat állítottam elő, melyek a felhasználás szempontjából előnyös fotokatalitikus (öntisztító) és optikai (antireflexiós) tulajdonságokkal egyaránt rendelkeznek.

A ZnO és SiO<sub>2</sub> részecskékből a Langmuir-Blodgett technikával előállított komplex filmek tulajdonságait többféle módszerrel jellemeztem.

A filmek szerkezetét, valamint morfológiáját pásztázó elektronmikroszkópos (SEM) felvételeken tanulmányoztam, és megállapítottam, hogy mind a ZnO, mind a szilika részecskékből tömör szerkezetű rétegek állíthatók elő.

A bevonatok optikai tulajdonságait UV-Vis spektroszkópiai módszerrel vizsgáltam. A transzmittancia spektrumok alapján megállapítottam, hogy az általam épített többrétegű, komplex filmek megnövelik a transzparens (üveg) hordozó fényáteresztését széles hullámhossz-tartományban, tehát antireflexiós hatásúak.

A fotokatalitikus tulajdonság igazolására az üveghordozós filmet szerves festékanyag (metilnatanacs) vizes oldatába tettem, majd különböző ideig tartó UV-besugárzást követően vizsgáltam a festék bomlását az oldatok UV-Vis abszorbanciájának tanulmányozásával. A leghatékonyabb film esetében kétórás bevilágítás hatására a festékanyag mintegy 90%-a elbomlott. Ezzel megmutattam, hogy az általam előállított, ultravékony filmek valóban rendelkeznek mindkét kedvező tulajdonsággal.

Tanulmányoztam a filmek fotokatalitikus kapacitását, valamint újrafelhasználásuk lehetőségét is. Nagyobb méretű ZnO-szemcsék hatását is tanulmányoztam. Megállapítottam, hogy a kisméretű ZnO-szemcsék egy része fotokorróziót követően kioldódik a filmből, de még így is számottevő fotodegradációs képességgel rendelkeznek. A nagyobb méretű ZnO-részecskék növelik az ismételt felhasználás eredményességét. Távolatlag célszerű a ZnO-szemcsék felületét úgy módosítani, hogy kedvező fotokémiai aktivitásuk megmaradjon, de ellenállóbbak legyenek a fotokorrózióval szemben.

**Módosított felületű adszorbensek előállítás és vizsgálata**

**Biczó Edina**, IV. évf. vegyészmérnök  
PE Mérnöki Kar

**Rádi György**, III. évf. vegyészmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kristóf János** egyetemi tanár  
PE Analitikai KémiaTanszék

**Vágvölgyi Veronika** PhD hallgató  
PE Analitikai KémiaTanszék

Az agyagásványok szerkezetének, reaktív tulajdonságainak szisztematikus vizsgálatát széleskörű ipari felhasználásuk, valamint a természetben található agyagásványok és szerves komponensek között lejátszódó kölcsönhatások megismerése indokolja. A kísérleti munkánk a Pannon (Veszprémi) Egyetem Analitikai Kémia Tanszékén folyó felületanalitikai kutatásokhoz illeszkedik.

A konkrét vizsgálatok célja a különböző előfordulásokból származó, felületmódosított kaolinit szerkezetének, stabilitásának vizsgálata, melyhez termoanalitikai, tömegspektrometriai illetve molekuláspektroszkópiai technikákat alkalmazunk. Különböző előfordulásból származó, mechanokémiai úton aktivált (szárazon őrölt), formamiddal interkalált Szegilongból illetve Zettlitzből származó kaolinit minták vizsgálatát végeztük el.

A korábban elvégzett vizsgálatok alapján az volt tapasztalható, hogy a mechanokémiai aktiválás és a termikus deinterkaláció együttes alkalmazásával úgynevezett „szuperaktív” felülethez juthatunk. Az alkalmazott felületmódosító technológiákkal eltérő sav-bázis jellegű aktív centrumok alakíthatók ki. Megállapítható, hogy a technológiai paraméterek változtatásával befolyásolhatjuk az adszorbens felületének tulajdonságait.

Célunk a kialakított aktív centrumok részletesebb (kvantitatív) tanulmányozása a katalizátorok felületanalitikai vizsgálatában már jól bevált technikák (felülettesztelő molekulák adszorpciója) adoptálásával.

A témában elért eredmények referált külföldi szakmai folyóiratokban publikálásra kerültek, melyekre építve a jelenlegi munka során tervezhető felületi tulajdonságokkal rendelkező ipari adszorbens fejlesztéséhez járulunk hozzá.

**Korrózióálló Gyémántréteg előállítása MW-PECVD módszerrel**

**Csorbai Ádám**, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

**Témavezetők:** **Kováchné Csorbai Hajnalka** PhD hallgató  
MTA KK FKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály  
**Dr. Kálmán Erika** tudományos főosztályvezető  
MTA KK FKI Felületmódosítás és Nanoszerkezetek Osztály

A gyémánt számtalan egyedi tulajdonságának köszönhetően a jövő iparának rendkívül fontos alapanyagává válhat. Mechanikai szilárdsága kiemelkedően nagy, kopásálló, alacsony sűrűlódási együtthatóval, emellett jó hővezető, ráadásul alacsony dielektromos állandója mellett sugárzással szemben is ellenálló, széles tilossávú félvezető. Kémiai szempontból inert anyag, amelyet az is jelez, hogy 700 °C-ig nem lép reakcióba vele semmilyen lúg, sav, vagy szerves oldószer. Ezen tulajdonságai alkalmassá teszik többek között korrózióvédelemre, a nagyfrekvenciás és nagyteljesítményű elektronika, valamint, az optika területén történő felhasználásra is. Alkalmazhatóságának egyedül a technológia szabhat határt.

TDK munkám során a gyémánt alkalmazásai közül a korrózióálló bevonatként történő felhasználására törekedtem, ehhez elsődleges célom „tűlyukmentes” filmréteg kialakítása volt. Ehhez az MTA Kémiai Kutatóközpont Felületmódosítás és Nanoszerkezetek osztályán működő, mikrohullámmal aktivált kémiai gőzfázisú leválasztó berendezést (MW-PE CVD) használtam. A réteg leválasztása során 750-950 °C-os szilícium hordozóra metán-hidrogén plazmából gyémántot állítottam elő. A leválás elősegítésére elektromos előfeszítést alkalmaztam. A kísérletek során azt vizsgáltam, hogy a különböző leválasztási paraméterek milyen hatással vannak a filmnövekedésre. Az elkészült rétegeket többek között, optikai, és pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) is vizsgáltam. Ezeknek a vizsgálatoknak a segítségével a növesztés eredményességéről, nukleációsűrűségről, valamint a gyémántszemcsék méretéről, orientációjáról kaptam információkat. Az általam használt módszerrel sikerült összefüggő, tűlyukmentes gyémánt védőréteget előállítani, ami korrózióálló bevonatként jól használható. Kutatásom további célja a gyémánt vékonyréteg tanulmányozása és alkalmazásának bővítése.

A TDK munkámban ezeket a kísérleti eredményeket és következtetéseimet ismertetem.

**Polipropilén keverékek és  $\beta$ -nukleált változatainak előállítására és vizsgálata**

**Faludi Gábor**, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Varga József** ny. egyetemi tanár  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

Konzulens: **Menyhárd Alfréd** egyetemi tanársegéd  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

Izotaktikus polipropilén (iPP) és poliamid 6 (PA6) (iPP/PA6) keverékek és ezek  $\beta$ -nukleált változatait állítottam elő. Részletesen tanulmányoztam a keverékek kristályosodását és polimorf összetételét a receptura függvényében.  $\beta$ -iPP alapú mátrix kialakítása céljából nagy hatékonyságú, szelektív  $\beta$ -gócképzőt használtam. A korábbi vizsgálatok szerint a PA6 jelenlétében az iPP  $\beta$ -módosulata nem képződik a nagy hatékonyságú és szelektív gócképző jelenléte ellenére sem, mert a gócképző szelektíven enkapszulálódik a PA6 fázisban. A jelen munka célja az volt, hogy a kompatibilizátor hozzáadásával módosítsuk a gócképző megoszlását a fázisok között. Az iPP/PA6 keverékekhez nagy mennyiségben használnak maleinsav anhidriddel módosított polipropilént (MAPP) kompatibilizátorként. A munka során három különböző anhidrid tartalmú kompatibilizátor hatását vizsgáltuk az iPP/PA6 keverékekben. A vizsgálatok egyértelműen igazolták a MAPP kompatibilizáló hatását, mert a PA6 cseppek mérete nagymértékben csökkent és eloszlásuk is egyenletesebbé vált az iPP mátrixban. Az eredmények szerint MAPP jelenlétében a mátrixmódosulat formájában kristályosodik az iPP/PA6 keverékekben, ellentétben a kompatibilizátort nem tartalmazó keverékek esetén tapasztaltakkal. Ennek oka, hogy a kompatibilizátor jelenléte megváltoztatta a gócképző megoszlását a fázisok között, ami lehetővé tette  $\beta$ -iPP mátrix alapú iPP/PA6 keverék készítését. A gócképzők fázisonkénti megoszlására és a kompatibilizátorok szerepére vonatkozó eredmények újszerűek, és a munka alapján készült kéziratot az European Polymer Journal című folyóirat közlésre elfogadta.

**Magnetit nanorészecskék stabilizálása fiziológiás körülmények mellett  
mágnesez folyadék előállítása céljából**

**Hajdú Angéla**, okleveles klinikai kémikus  
SZTE Természettudományi Kar

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

A vizes mágnesez folyadékok az utóbbi évtizedben kerültek a nemzetközi érdeklődés középpontjába, elsősorban az újszerű orvosbiológiai alkalmazások lehetőségei miatt. A mágnesez folyadékok szuperparamágneses nanorészecskék stabilizált kolloid diszperziói. Az emberi szervezetben való alkalmazhatóság megköveteli a vizes fázist, mivel az élő rendszerek vizes közegűek, az életfolyamatok megfelelő pH-n (a vér pH-ja 7,4) és elektrolit összetételnél, fiziológiás körülmények között mennek végbe. Egy vizes mágnesez folyadék stabilitása főleg a töltéshordozó részecskék közötti elektrosztatikai taszítástól függ. A nanorészecskéket biomolekulákkal burkolva funkcionálizálhatók, és külső mágnesez térrel irányíthatók. Ezáltal számos biológiai alkalmazást tesz lehetővé: hatóanyag szállítás, hipertermiás kezelés, MRI kontrasztanyag vagy mágnesez sejtszeparáció [1].

Munkám során, különféle módon (felületi komplex, ill. ionpár képzés, amfilikettősréteg kialakítás) próbáltam stabilizálni a magnetit vizes szuszpenzióját, négyféle vegyület (citromsav, glicin, foszfát puffer és Na-oleát) alkalmazásával. A célom az volt, hogy egy stabil mágnesez folyadékot állítsak elő, mely alkalmas ezen molekulákon keresztüli funkcionálizálásra, így lehetőséget adva a jövőbeni biológiai rendszerekben való felhasználásra. Vizsgáltam a vegyületek magnetit felületén való adszorpcióját, a részecskék felületi töltésállapotának és stabilitásának változását az adszorbeált mennyiséggel és a pH-val zéta-potenciál mérés (lézer Doppler elektroforézis) és átlagos részecskeméret meghatározás (dinamikus fényszórás) segítségével. A stabilizált rendszerek elektrolittűrését koagulációs kinetikai vizsgálatokkal jellemeztem.

Sikeres előkészítő kísérleteket folytattam a jövőbeni in vitro vizsgálatokhoz, mint például a mágnesez folyadék só-tűrő képessége, mely fontos szerepet játszik az intravénás vagy intraartériás alkalmazások során, hogy a mágnesez folyadék a nagy koncentrációjú elektrolit jelenlétében ne aggregálódjon ezzel előidézve egy embólus kialakulását.

[1] ZM Saiyed, SD Telang and CN Ramchand: *BioMagnetic Research and Technology* (2003)

[2] E. Tombácz, E. Illés, A. Hajdú In: *Humic Substances – Linking Structure to Functions* (Eds. F. Frimmel, G. Abbt-Braun), Karlsruhe, Germany, 2006. (accepted)

**Nanorendszerek előállítása a kitozán és a poli- $\gamma$ -glutaminsav önrendeződésével**

**Hajdu István**, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Borbély János** egyetemi docens  
DE Kolloid-, és Környezatkémiai Tanszék

A nanotudomány napjaink egyik legdinamikusabban fejlődő tudományterülete. Intenzív munka folyik olyan nanorendszerek kifejlesztésére, melyek alkalmazásával az eddigieknél jóval hatékonyabb gyógyszerek, valamint vizsgálati és kezelési módszerek fejlesztetők ki.

Munkám során stabil hidrofil nanorészecskéket állítottam elő kitozán, mint polikation, és poli- $\gamma$ -glutaminsav, mint polianion felhasználásával. A nanorészecskék kialakulása a polielektrolitok önrendeződésével történt, a közöttük létrejövő ionos kölcsönhatáson alapulva.

Munkám során vizsgáltam a kialakuló nanorendszerek stabilitását, a rendszer turbiditásának, zavarosságának mérésével, a részecskék méretét, és alakját fényszórás fotometriai és transzmissziós elektronmikroszkópiás mérésekkel, és a felületi töltöttségét a részecskék mobilitásának mérésével. A méréseket a pH, a biopolimerek koncentrációja és aránya, valamint az összeöntés sorrendjének függvényében végeztem.

Tapasztalataim azt mutatják, hogy a kialakult részecskék oldhatóságát, méretét és felületi töltöttségét döntő mértékben a kitozán szabad aminocsoportjai határozzák meg. Minél nagyobb a kialakult nanorészecskében a szabad aminocsoportok száma, annál stabilabb a részecske, és ezt a stabilitást széles pH tartományban megőrzi.

Kutatómunkám során tervezem további nanorendszerek előállítását széles pH tartományban, a kialakult nanorészecskék tulajdonságainak optimalizálását, stabilitásának vizsgálatát pH=7,4-n. A vizsgálatok célja olyan nanohordozók kifejlesztése, amelyek alkalmasak lehetnek gyógyszerhatóanyagok és DNS szakaszok töredezés-mentes szállítására.



**Alacsony higanytartalmú, ólommentes kompaktfénycső-amalgámok modellezése, tesztelése, ill. újszerű amalgámminták analitikai kémiai és termoanalitikai vizsgálata**

**Janke Dénes**, V. évf. vegyészmérnök, analitika szakirány  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Lukács Sándor** CFL Systems Manager  
GE Hungary ZRt. GE C&I Lighting Technology

**Dr. Madarász János** egyetemi docens  
BME Általános és Analitikai Kémiai Tanszék

A fluoreszcens kompaktfénycsövek fejlesztésében [1] a higanygőz nyomásának szabályozása és az optimális nyomás ( $6 \cdot 10^{-3}$  torr, [2]) magasabb hőmérsékletek felé történő eltolása végett a folyékony higany helyett alkalmazott amalgámokat használnak napjainkban. Legalkalmasabb amalgámvadékképzőnek 6-12% higany alkalmazása mellett előálló InHg ötvözeteket [2-4], eutektikus kiindulási arányú BiIn intermetallikus vegyület és fém bizmut keverékét [2-3, 5], ill. eutektikus arányú Pb és Bi mintákhoz adott Sn keverékét találták [2-3].

A jogosan egyre szigorodó környezetvédelmi EU-rendeletek nem engedélyezik a lámpaamalgámokban jól bevált Pb alkalmazását, valamint a Hg mennyiségét lámpánként 5 mg-ra korlátozzák. Mindez szükségessé teszi az új, ill. más összetételű lámpaamalgámok kifejlesztésére irányuló erőfeszítéseket, és ez szolgált egyben témám kiindulópontjaként is.

Ezzel kapcsolatban feladatul kaptam a fellelhető fizikai-kémiai irodalom, valamint szabadalmak tanulmányozását, új összetételű amalgámok modellezését és az ígéretes amalgámok tesztelését. A konkrét feladatom 5 mg-nál kevesebb higanyt tartalmazó BiIn alapú lámpa számítógépes tervezése, modellezése és a legyártott lámpák vizsgálata volt (hőkamrás és Ulbricht-gömbös mérésekkel).

Munkám másik részében különböző adalékokkal (Ag, In) kiegészített, Bi és  $\text{Sn}_x\text{Hg}$  ( $x=6-12$ ) alapkivonatokból [6-7] álló amalgám-képző anyagminták, kísérleti lámpákban történő alkalmazását megelőző elemi- és fázis-összetételi, valamint termoanalitikai vizsgálatait végeztem el (SEM-EDX, XRD, DSC), azon célból, hogy azok összetételét ellenőrizzem és összehasonlítsam a névleges értékekkel.

[1] Serres, A.W., Taelman, W., *J. Illum. Eng. Soc.*, **22 (2) (1993) 40.**

[2] Bloem, J., Bouwknegt, A., Wesselink, G.A., *J. Illum. Eng. Soc.*, **6 (1977) 141.**

[3] Lankhorst, M.H.R., Niemann, U., *J. Alloy Compd.*, **308 (2000) 280.**

[4] Coles, B.R., Merriam, M.F., Fisk, Z., *J. Less Common Metals*, **5 (1963) 41.**

[5] Dinsdale, A.T., Forsdyke, G.M., Mucklejohn, S.A., *Proc. 9th International Conference in High Temperature Materials Chemistry*, (1997) **44.**

[6] Che, G.C., Ellmer, M., Schubert, K., *J. Mater. Sci.*, **26 (1991) 2417.**

[7] Nosek, M.V., Semivratova, N.M., *Izv. Akad. Nauk SSSR Metally*, **1 (1970) 178.**

**Ón-dioxid nanorészecskék mechanokémiai szintézise és karakterizálása**

**Kozma Gábor**, V. évf. környezettudomány  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kukovecz Ákos** egyetemi adjunktus  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Az ón-dioxid széleskörű felhasználása félvezető tulajdonságának (szenzorok, nap-elemek, akkumulátorok, stb. előállítás) köszönhető. Jelen munkánkban az ón-dioxid mechanokémiai, bolygó golyós malomban történő előállítását végeztük el, kiindulási anyagként NaCl mátrixban  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ -ot és  $\text{SnCl}_2$ -ot felhasználva. A mechanokémiai szintézis előnye, hogy olcsó, gyors, nem vegyszerigényes, és a termék egyszerűen tisztítható.

Az őrléssel készített  $\text{SnO}$ -ot levegőn történő 2 órás kalcinálással  $600^\circ\text{C}$ -on  $\text{SnO}_2$ -dá oxidáltuk, majd desztillált vizes mosással a só mátrixot eltávolítottuk. Az általunk alkalmazott reakciókörülmények mellett (120 perces őrlési idő, 400 rpm fordulatszám, 50 darab 10 mm átmérőjű acélgolyó, 250 ml-es acél őrlőedény) a konverzió  $\text{SnCl}_2$ -ra számítva 98 % volt. A terméket spektroszkópiás mérésekkel (MID-IR, UV-Vis, Raman) és elektronmikroszkópiás vizsgálatokkal (transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkóp) jellemeztük. A spektroszkópiás mérések az  $\text{SnO}_2$  jelenlétét, valamint a lehetséges melléktermékek illetve maradék reaktánsok hiányát igazolták, míg az elektronmikroszkópos felvételekkel a nanorészecskék alakját, aggregáltságát, és azok átlagos átmérőjének hőmérsékletfüggését vizsgáltuk.

A továbbiakban a folyamat optimalizálása céljából az őrlést változó mennyiségű desztillált víz hozzáadásával is elvégeztük. A vizsgálatok alapján az őrlés szükséges időtartama desztillált víz jelenlétében jelentősen csökkenthető. E mellett a reaktánsok, valamint a reakcióterben szereplő anyagok (víz,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) fizikai állapotának, illetve arányainak változtatásával vagy jelenlétük kizárásával, az  $\text{SnCl}_2$  és  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  reakciókinetikájának értelmezését kezdtük meg.

**Többfalú szén-nanocsövek szervesetlen anyagokkal alkotott kompozitjainak előállítása golyósmalommal**

**Major Judit**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Hernádi Klára** egyetemi tanár  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék  
**Korbély Barbara** doktorandusz hallgató  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A Szegedi Tudományegyetem Természettudományi Karának Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszékén már évek óta folynak kutatások többfalú szén nanocsövekkel. A kutatások egyik iránya a nanocsövek szervesetlen anyagokkal kontrollált módon történő beborítása [1, 2]. Ebbe a kutatásba kapcsolódtam be én is.

Munkám során CVD módszerrel szintetizált és tisztított többfalú szén nanocsövek (MWNT) felületére szervesetlen réteg felvitelét kíséreltük meg golyósmalom („pulverisette 6” típusú bolygó-monomalom) segítségével, oldószermentes körülmények között.

A kísérletek során három fajta prekuzort alkalmaztam: tetraetil-ortoszilikátot, alumínium-izopropilátot, valamint tetraetil-ortotitanátot. Vizsgáltuk az őrlési idő (10-240 perc között), a golyószám (10-30), valamint a fordulatszám (100-400 fordulat/perc között) változásának hatását a többfalú szén nanocsövek felületén kialakuló réteg minőségére. Az őrlés végén a szén nanocsövek felületére adszorbeálódott prekuzort víz hozzáadásával hidrolizáltattuk. A kialakult réteget, azaz a minták szerkezetét normál és nagyfelbontású transzmissziós elektronmikroszkóppal vizsgáltuk.

A kísérletek alapján megállapítható, hogy golyósmalom segítségével a többfalú szén nanocsövek felületére szervesetlen réteg vihető fel, és ezen réteg minősége függ az alkalmazott kísérleti körülményektől.

[1] K. Hernadi, E. Ljubović, J.W. Seo, L. Forró, *Acta Materiala* 51 (2003) 1447-1452

[2] K. Hernadi, E. Couteau, J.W. Seo, L. Forró, *Langmuir* 2003, 19, 7026-7029

**Csípőprotézis implantációhoz használatos biomimetikus, csontüregben felszívódó dugó kifejlesztése**

Rideg Nóra, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

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

Biomimetikus anyagok orvosi biológiai alkalmazása igen széleskörű. Elindult Magyarországon egy olyan kezdeményezés, melynek célja olyan biomimetikus, fiziológiai körülmények között felszívódó dugó kifejlesztése, ami forradalmasítaná a csípőprotézis beültetését. A biomimetikus dugóval szemben támasztott követelmények: rendelkezzen megfelelő mechanikai szilárdsággal, hőstabilitással, illetve a testnedvek enzimek képesek legyenek lebontani, a bomlástermékek pedig megfelelő sebességgel szívódjanak fel a csontüregben.

A követelményeket kielégítő dugó előállítására kitozánból, zselatinból, natroszorból történt kísérlet. Irodalmi adatok alapján érdemesnek tűnt hialuronsav alapú dugó kifejlesztésére kísérletet tenni [1]. Mivel a hialuronsav igen drága, feladatomban hialuronát alapú dugó viselkedésének modellezése volt poliakril-savval [1]. Az előállított filmeket vizsgáltam a megadott szempontok alapján: mechanikai, fiziológiai körülmények közötti stabilitás, hőfűrés. Ezek mellett a dugók reológiai jellemzőit RheoStress RS 150 reométerrel határoztam meg, statikus és dinamikus tesztek egyaránt alkalmazva.

Az eredmények alapján indokoltnak tűnt a minták tulajdonságainak javítása: a már korábbi, a tanszéken végzett kísérletek során bevált hidroxil-apatitot és - az orvosi technológiában általánosan lágyítóként alkalmazott - glicerint használtam.

Megfigyeltem, hogy a filmek a száradás során elérték egy optimális nedvességtartalmat, amelynél megfelelően alkalmazhatók, de hosszabb idejű állás során használhatatlanná váltak. Vizsgálnom kellett, hogy milyen körülmények biztosítják az optimális tulajdonságokat.

Tapasztalataim alapján, az előállított filmek kedvező tulajdonságúak, további vizsgálatok elvégzésére érdemesek.

[1] Dillow A. K., Lowman A. M. (Eds): *Biomimetic Materials and Design, Biointerfacial Strategies, Tissue Engineering and Targeted Drug Delivery*, Marcel Dekker, New York, 191-193.(2002)

**Hiperelágazásos poli(metil-metakrilát) előállítás fogtömőanyagként alkalmazott monomerekből**

**Soltész Amália**, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék és  
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

A polimer alapú fogtömő kompozitok megjelenése óta problémát okoz a fogtömés elkészítése közben fellépő polimerizációs zsugorodás. Munkám célja ennek a problémának a megoldására irányul. Metil-metakrilát és különböző, elágazást eredményező, fogtömőanyagként alkalmazott bifunkciós monomerek kopolimerizációjával olyan hiperelágazásos polimerek előállítását kíséreltem meg, amelyek tartalmaznak további polimerizációra alkalmas kettős kötéseket, ugyanakkor gélesedés nem lép fel. Az előállított hiperelágazásos polimerek a megmaradt kettős kötések révén alkalmasak lehetnek további polimerizációra, amit a fogban elvégezve előáll a kívánt térháló. Ekkor is fellép zsugorodás, de ennek mértéke jelentősen kisebb, mintha a monomerekből állítják elő a térhálót.

A tudományos diákköri kutatásaim fő célja elsősorban az volt, hogy fogtömő alapanyagok, azaz metil-metakrilát és bifunkciós monomerek kopolimerizációjával előállíthatók-e gélesedés bekövetkezése nélkül hiperelágazásos polimerek. A hiperelágazásos polimerek előállítását kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációs (ATRP) körülmények alkalmazásával kíséreltem meg.

Metil-metakrilátot polimerizáltam különböző bifunkciós komonomerekkel (bisz-fenol-A-glicerolát-dimetakrilát, di(etilén-glikol)-dimetakrilát, 1,4-butándiol-dimetakrilát), illetve referenciaként azok nélkül (homopolimerizáció). Az iniciátor rendszer etil-2-bróm-izobutirátból, réz-bromidból és bipiridilből állt. A polimerizációt argon atmoszférában, 90 °C-on végeztem, három órás reakcióidővel.

A termékeket  $^1\text{H-NMR}$ -spektroszkópiával és gélpermeációs kromatográfiával analizáltam. A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy valamennyi esetben gélesedés nélkül hiperelágazásos polimerek képződtek, és a kopolimerizáció eredményeként maradtak a mintában elreagálatlan kettős kötések a félig beépült bifunkciós monomerekből. Eredményeink azt mutatják, hogy a vizsgált fogtömőanyagok kváziélő atomátadásos gyökös kopolimerizációja alkalmas további polimerizációra képes kettős kötéseket tartalmazó hiperelágazásos polimerek előállítására.

**Bór- és vanádiumtartalmú foszfátüvegek szerkezete**

Szalay Zsófia, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Rohonczy János** egyetemi docens  
ELTE Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Az üveges oxidok alapvetően olyan oxoanionokból épülnek fel, amelyek egymáshoz oxigénhidakon keresztül kapcsolódnak. A központi atom körül az oxigének szabályosan, többnyire tetraéderesen (esetleg síkháromszög csúcsain) helyezkednek el, a hosszútávú szerkezet azonban mégsem kristályos. Ez azzal magyarázható, hogy az összekapcsolódó poliéderek egymáshoz viszonyított helyzete változó, ennek köszönhetően rendezetlen háló vagy lánc alakul ki.

A foszfátüvegekben egy, két vagy három oxigénhíddal egymáshoz kapcsolódó foszfátcsoportok alkotnak hálót. Előnyös tulajdonságuk a szilikátüvegekkel szemben, hogy viszonylag alacsony hőmérsékleten széles összetétel-tartományban elegyednek sokféle, más hálóképző anyaggal, például boráttal vagy vanadáttal. Ez olyan mértékű is lehet, hogy a foszfátcsoportok már csak különálló szigetekként épülnek be a borát- vagy vanadát-hálóba.

Az üveg tulajdonságain tovább változtathatunk úgynevezett hálómódosítók, azaz nem hálóképző oxidok hozzáadásával. Ezek az oxidáló negatív töltését növelik, a hálót lánccá depolimerizálják. A d-mező elemei különösen érdekesen viselkedhetnek az üvegekben, hiszen oxidációs állapotuktól függően hálóképző vagy -módosító szerepet is betölthetnek. E két szerep nem választható el élesen, mivel az olvasztás során, magas hőmérsékleten az oxigénvesztést nem lehet megakadályozni.

A dolgozatban olyan üvegekkel foglalkoztunk, amelyek foszfát, borát és vanadát hálóképzőt, valamint nátrium hálómódosítót tartalmaznak. Ezeket olvasztással állítottuk elő és szerkezetüket szilárd fázisú  $^{31}\text{P}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{51}\text{V}$ ,  $^{23}\text{Na}$  NMR, valamint Raman-spektroszkópiával vizsgáltuk. A mérések eredménye alapján a hálóképzők szerepére lehetett következtetni. A vanádiumtartalmú üvegek színe a  $\text{V}^{4+}$  tartalomtól függően változó, amire hatással van a bór-tartalom is. Ennek vizsgálatára a színes üvegek  $\text{V}^{4+}/\text{V}$  redox-arányát is meghatároztuk.



# Fémorganikus kémia és szerves katalízis tagozat

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

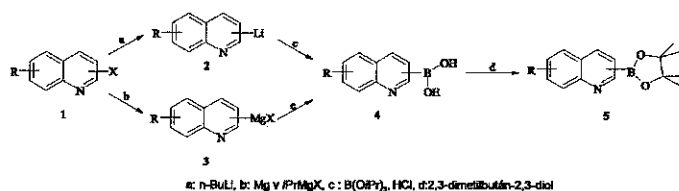


## Kinolinboronsavak előállítása

Bogányi Borbála, V. évf. biológia-kémia  
Ubichem Kutató Kft., ELTE Természettudományi Kar

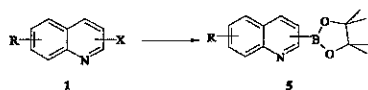
Témavezetők: **Dr. Kámán Judit** okleveles vegyész  
Ubichem Kutató Kft.  
**Dr. Kotschy András** egyetemi docens  
ELTE Szeretlen Kémiai Tanszék

Az aromás boronsavak szintetikus szempontból igen jelentős és továbbalkítható egységek. A nitrogéntartalmú heteroaromás vegyületek között azonban meglepően kevés származékuk ismert, a kinolinvázas boronsavak és észterek közül pedig csak néhány található meg az irodalomban, kereskedelmi forgalomban azonban ezek sem kaphatók. Ennek oka elsősorban az, hogy ezen vegyületek előállítása a boronsavak klasszikus szintézisével nehezen végezhető el.[1] (1. ábra)



1.ábra

Az utóbbi években a boronsavak pinakolésztereiének közvetlen előállítására egyszerű, palládium katalizálta módszert dolgoztak ki, bisz(pinakolato)diborán reagens felhasználásával[2]. Munkánk során szeretnénk a kinolinboronsav pinakolésztereiének lehetséges izomerjeit előállítani a fent említett módszer segítségével. (2. ábra)



2. ábra

[1] Li, W., Nelson, D.P., Jensen, M.S., Hoerrner, S.R., Cai, D., Larsen, R.D., Reider, P.J., *J. Org. Chem.*, **67** (15), 5394-5397 (2002)

[2] Miyaura, N., Suzuki, A., *Chem. Rev.*, **95** (7), 2457-2483 (1995)

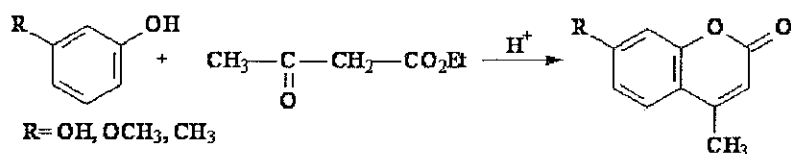
**Szubsztituált kumarinok szintézise szilárd savas katalizátorok és mikrohullámú besugárzás hatására**

**Daru János**, I. évf. kémia (BSc)  
ELTE Természettudományi Kar, KDOSZ

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

A kumarinok és származékaik fontos vegyületek a szintetikus szerves kémikus kezében, könnyű továbbalakítási lehetőségeik miatt. Nagy számban fordulnak elő a természetben, ugyanakkor számos kumarinvázat tartalmazó vegyület biológiai aktivitással rendelkezik, alkalmaznak a gyógyszerkémiai, agrokémiai iparban.

A kumarinok szintézisére számos eljárás ismert. Egyik használatos eljárás, az úgynevezett Pechmann-reakció fenolokból és  $\beta$ -oxokarbonsav észterekből indul ki.



A hagyományos eljárásokban katalizátorként általában kénsavat, foszforpentoxidot, foszforoxikloridot, cink kloridot használnak, amelyek eltávolítása a reakcióelegyből többletmunkát kíván, nem beszélve ezen anyagok korrozív tulajdonságairól, melléktermékképző hatásáról. Újabban a savas katalízissel végbemenő folyamatokban katalizátorként egyre gyakrabban alkalmazzák a szilárd savakat, amelyek eltávolítása a reakcióelegyből egyszerű szűréssel megoldható, és sok esetben regenerálással újra használatba vihetők. Ilyen kísérletek történtek már a Pechmann-reakció kivitelezésében is.

Célkitűzésem volt, hogy az hallgatói laboratóriumi gyakorlatok során, könnyedén kivitelezhető eljárást dolgozzak ki a szubsztituált kumarinok előállítására, illetve, hogy megállapítsam az e célnak megfelelő reaktánsokat és reakciókörülményeket.

Szubsztituált fenolok és acetacetészter úgynevezett Pechmann reakciója - ami a szubsztituált kumarinok előállításának egyik lehetséges útja- esetében vizsgáltam a szilárd savas katalizátorok felhasználási lehetőségét oldószeres közegben hagyományos hőközléssel és mikrohullámú aktiválással.

**Diaminoferrocén-származékok**

**Károlyi Benedek Imre, III. évf. vegyész**  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Csonka István** tudományos munkatárs  
ELTE Fizikai Fémorganikus Kémia Laboratórium

A tudományos diákköri munkám célja az 1,1'-diamino-ferrocénhez vezető új, biztonságosabb reakcióutak kidolgozása volt. Ennek oka az, hogy az elmúlt egy-két évtizedben több katalizátorrendszer iránt is megnőtt az érdeklődés, melyekben alkalmazható lenne a célvegyület. Olyan vonzó tulajdonságokkal bír ez a molekula, mint a redox-aktivitás, a prokiralitás és a speciálisan flexibilis szerkezet, ami a reakciócentrumként szolgáló különböző méretű fématomok koordinálásakor igen hasznos lehet. Az 1,1'-diamino-ferrocént mind a mai napig több lépésben, robbanásveszélyes azid-vegyületeken keresztül állítják elő. Amennyiben az 1,1'-diamino-ferrocén előállítására új, egyszerűbb mód nyílik, akkor a molekula és származékai hasonló karriert futhatnak be fémorganikus ligandumként, mint az 1,1'-bisz(difenilfoszfino)-ferrocén.

Megkísértem a ferrocén-dikarbonsav Curtius-lebontását különböző alkoholokkal végzett reakciókkal savazidon keresztül, és egy módosított Gabriel-szintézist is végrehajtottam. Az elmúlt egy évtized kémiai eredményeit is felhasználtam, többek között alkalmaztam palládium-katalizált Buchwald-Hartwig keresztkapcsolást és réz(I)-katalizált Ullmann-kapcsolást annak érdekében, hogy 1,1'-dibenzilamino-ferrocént állítsak elő, amely reményeim szerint hidrogenolízissel átalakítható a célvegyületté, illetve saját maga is érdekes ligandum lehet. Végül megpróbáltam a ma bevettnek mondható, ferrocén-diazidon át vezető szintetikus úton is előállítani a 1,1'-diamino-ferrocént.

Az eredmények alapján kijelenthető, hogy nem véletlenül nem tudtak kifejleszteni eddig egy jóval hatékonyabb eljárást az 1,1'-diamino-ferrocén előállítására. Minden alkalmazott eljárás vagy egyáltalán nem, vagy csak minimális mértékben adta a vegyület prekursorát, vagy a célterméket. Ennek oka: a molekula térbelileg igen kiterjedt, ami szterikusan nem kedvező egyes átmenetifém-katalizált kapcsolási reakcióknak. Több esetben a diszubsztitúció okozott problémát: a két Cp-gyűrűn lévő csoportok egymással reakcióba lépve hiúsították meg a tervezett szintézist.

A kísérletek megnyugtató tapasztalata viszont, hogy az eddigiek során az 1,1'-diazido-ferrocén oldatfázisban stabilnak mutatkozott, így valószínűleg érdemes ezen az első pillantásra veszélyesnek tűnő úton folytatni a munkát.

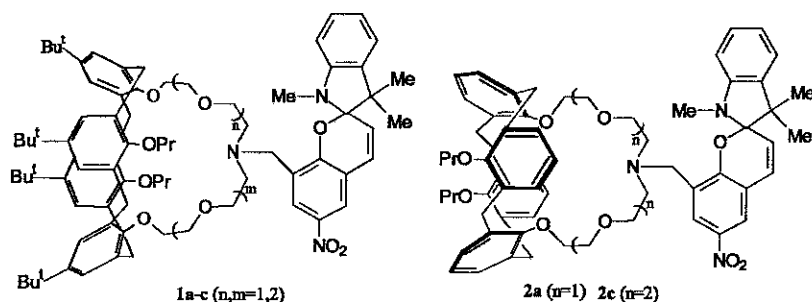
### Fotokrom kalix[4](azakorona)éter ionoforok előállítása és spektrofotometriás vizsgálata

Kerekes Péter Gergő, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Grün Alajos** adjunktus  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék  
**Dr. Bitter István** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Tudományos diákköri munkám során fotokrom kalix[4](azakorona)éter ionoforok előállításával, és komplexképzésük UV-VIS spektroszkópiával történő tanulmányozásával foglalkoztam. Az általam tanulmányozott szintelen spiropirán csoport UV besugárzás, vagy komplexképzés hatására, sötétben reverzibilisen átalakul a színes merocianin formává.

Ezt a fotokrom csoportot építettem be a kónikus és 1,3-alternáló konformációjú kalix-azakorona alapvázbá. Az ionok felenlétében végzett spektrofotometriás vizsgálatokból megállapítottuk, hogy míg az alkálifém ionok nem váltottak ki jelentősebb izomerizációt, addig az alkáliföldfém ionok hatására új, a merocianin formára jellemző maximumok jelentek meg a spektrumban. Meghatároztam a színesedési folyamat kinetikai állandóit. Átmeneti- és nehézfémionokkal ( $Zn^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$ ,  $Ag^+$ ) végzett méréseink során azt tapasztaltuk, hogy ezek az ionok is nagymértékben befolyásolták a spektrumot. A méréseim alapján a kónikus konformációjú molekulák (1a-c) általában nagyobb izomerizációt mutattak, mint az 1,3-alternáló (2a,c) konformációjúak.



**Szilikába zárt szulfonsav funkciós csoporttal módosított ionos folyadék felhasználása szerves szintézisekben**

Kiss Ferenc, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Molnár Árpád** egyetemi tanár  
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

Az ionos folyadékok az utóbbi évtizedekben tűntek fel, és jelentős kutatások csak 2000-től kezdve történtek tulajdonságaik felderítésére. Az ionos folyadékoknak rendkívül sok kedvező tulajdonságuk van, pl. a környezetre nem károsak. Talán legfontosabb tulajdonságuk mégis az, hogy számtalan szerves kémiai reakció kitűnő katalizátorai, ugyanakkor többnyire újra felhasználhatók. Az általunk használt Brønsted-savas ionos folyadék az N-butil-N'-(bután-4'-szulfonsav)-imidazolium-trifluormetánszulfonát, amit önmagában és szilikába zárt (10 és 40 %-os tartalmú) változatban is vizsgáltuk. A tiszta ionos folyadékot kétféle reakcióban vizsgáltuk:

a.) *Toluol Friedel-Crafts-alkilezése benzil-alkohollal*: A más katalizátorokkal órákig történő refluxáztatással szemben a reakció szobahőmérsékleten szinte pillanatszerűen lezajlott.

b.) *Benzol alkilezése dodec-1-énnel*: 24 óra refluxálás után a kiindulási anyagok eltűntek, és a reakcióban jó (80 % fölötti) hozammal a nem elágazó származékok keletkeztek.

A szilikába zárt folyadékkal az alábbi reakciót teszteltük:

1.) *Toluol alkilezése benzil-alkohollal*: Néhány óra alatt teljes átalakulás volt megfigyelhető refluxhőmérsékleten. A másik alkilezési folyamatra ez az anyag nem alkalmas, nem sikerült kimutatnunk dodecylbenzolt több napos reakció után sem.

2.) *Tetrahidropiránil-éterek képzése és a védőcsoport eltávolítása*: A közismert reakcióban alkoholt és dihidropiránt reagáltatva THP-étert kapunk. Legyen szó alifás, alicikusos vagy aromás alkoholokról, a reakció minden esetben 1 órán belül befejeződött. A védőcsoport eltávolítása kissé hosszabb reakcióidőkkel ugyancsak sikeres volt.

3.) *Aldehidek diacetáttá alakítása*: A különféle aromás és alifás aldehidekkel elvégzett reakcióban gyors átalakulás (15-30 min) után kitűnő (~ 90 %) hozamokat sikerült elérnünk.

Kitűnő eredményeket kaptunk a katalizátorok újrafelhasználására vonatkozóan is.

**Szteroid-kezonok kemoszelektív hidrogénezési reakciói Ru-komplexeken**

**Madácsi Ramóna**, IV. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Zsigmond Ágnes** egyetemi docens  
SZTE Szerves Kémiai Tanszék  
**Dr. Wölfling János** egyetemi docens  
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A dolgozat fő témája a fent említett kemoszelektív hidrogénezési reakció kiterjesztése volt,  $\alpha,\beta$ -telítetlen kezonokra. Kiindulási anyagként egy nagy gyakorlati jelentőséggel bíró vegyület család, a szteroid-kezonok kerültek felhasználásra.

A szelektív szintézisek megvalósítására szolgáló átmenetifém-komplexek egy része kereskedelmi forgalomban kapható, de meglehetősen drágák, ezért csak olyan értékes termékek előállítására alkalmazhatók, amelyeknél a katalizátor ára beépíthető a termékek árába. Ezért nagyon fontos, hogy a katalizátort a reakció után vissza tudjuk nyerni és ismételten fel tudjuk használni. A dolgozatban ismertetett kísérletek során két homogén - a  $[\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3]$  és a  $[\text{RuCl}_2(\text{TPPMS})_2]_2$  - komplex és ezen katalizátorok heterogenizált változatai kerültek tesztelésre. A két kiindulási anyagom; az öszttron-3-metiléter ill. a tesztoszteron-fenil-propionát volt, amelyeknek C=O kötése a korábban bázikusnak nevezett reakciókörülmények között hidrogéneződött, és a megfelelő alkohol két epimerje keletkezett. A katalizátorok jellemzése FT-IR spektroszkópiával, a reakció analízálása TLC-vel és HPLC-vel, a reakció kemoszelektivitásának bizonyítása NMR-el történt.

Homogén és a heterogenizált katalizátor szelektivitását összehasonlítva érdekes szelektivitás változás figyelhető meg. Öszttron-3-metiléternél az  $\alpha$ -epimer a nagyobb mennyiségben képződő termék a heterogenizált katalizátorokon, míg homogén közegben a  $\beta$ -epimer a főtermék. A tesztoszteron-fenil-propionát esetében a  $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3$  a  $\beta$ -OH csoport, a  $\text{RuCl}_2(\text{TPPMS})_2$  az  $\alpha$ - és  $\beta$ -OH csoport keletkezését egyaránt katalizálta, majdnem azonos mértékben. Ez a megfigyelés a heterogenizált mintákra is igaz.

**Alternáló kiralitású  $\beta$ -peptid homooligomerek szintézise és szerkezetvizsgálata****Mándity István, I. évf PhD**

SZTE Gyógyszerésztudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Martinek Tamás** egyetemi adjunktus

SZTE Gyógyszerkémiai Intézet

**Dr. Hetényi Anasztázia** tudományos segédmunkatárs

SZTE Gyógyszerkémiai Intézet

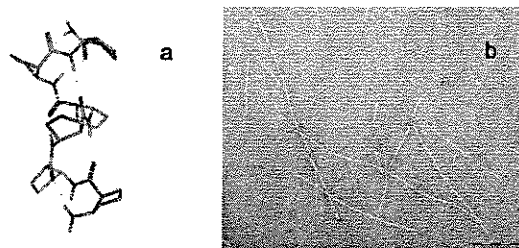
**Dr. Fülöp Ferenc** tanszékvezető egyetemi tanár

SZTE Gyógyszerkémiai Intézet

A  $\beta$ -peptidok szerkezetileg közeleli rokonságban állnak az  $\alpha$ -peptidekkel, H-hidak által stabilizált szabályos másodlagos szerkezeteket alakítanak ki. Fontosságukat a növekvő számú farmakológiai alkalmazások jelentik. Aliciklusos oldalláncú  $\beta$ -aminosavakból idáig csak homokirális oligomereket hoztak létre. A transz-aminociklopentánkarbonsav (transz-ACPC) homooligomerei 12-hélixet, [1] míg a cisz-aminociklopentánkarbonsav (cisz-ACPC) homooligomerei 6-szálat alkottak. [2]

Célkitűzésünknek megfelelően a vizsgált alternáló kiralitású transz-ACPC és cisz-ACPC homooligomereket szilárd fázison Boc-kémiával szintetizáltuk. A másodlagos szerkezeteket NMR, ECD és VCD mérésekkel, az asszociációt a homokirális oligomerekhez hasonlóan TEM felvételekkel vizsgáltuk, [3] melyek eredményét molekulamodellezéssel és ab initio kvantumkémiai számolásokkal támasztottuk alá.

Az alternáló kiralitású cisz-ACPC homooligomer 10/12-hélixet (1a. ábra), míg a transz-ACPC-ből felépített alternáló kiralitású homooligomer poláris szálat hoz létre, mely nanostruktúrált fibrillumokat alkot (1b. ábra).



1. ábra. (a) 10/12 hélix és (b) poláris szál asszociációját bizonyító TEM felvétel

[1] Appella, D. H., Christianson, L. A., Klein, D. A., Richards, M. R., Powell, D. R., Gellman, S. H., *J. Am. Chem. Soc.*, **121**, 7574-7581 (1999)

[2] Martinek, T. A., Tóth, G. K., Vass, E., Hollósi, M., Fülöp, F., *Angew. Chem., Int. Ed.*, **41**, 1718-1721 (2002)

[3] Martinek, T. A.; Hetényi, A.; Fülöp, L.; Mándity, I. M.; Tóth, G. K.; Dékány, I.; Fülöp, F. *Angew. Chem., Int. Ed.* (2006) (DOI: 10.1002/anie.200504158)

**Katalitikus kondenzációs reakciók vizes közegben és kétfázisú rendszerekben**

Nagy Csilla Enikő, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Joó Ferenc** egyetemi tanár  
DE Fizikai Kémiai Tanszék

**Papp Gábor** tudományos segédmunkatárs  
DE Fizikai Kémiai Tanszék

Az iparban és az alap kémiai kutatásban is jelentős szerepet játszanak az úgynevezett kondenzációs reakciók, melyeknek több típusát különböztetjük meg. Egyik típusa a Knoevenagel kondenzáció, amely aldehidek, ritkábban ketonok reakciója olyan anyagokkal, amelyek kellő reakciókészségű, lazított hidrogén atomokat tartalmaznak.

Yadav és munkatársai eredményes Knoevenagel kondenzációt hajtottak végre trifenil-foszfín (PPh<sub>3</sub>) katalizátor segítségével. [1]. Az irodalomban leírtak alapján én a trifenil-foszfín vízzeloldható analógját a meta-szulfonátofenil-difenil-foszfint (*mtpms*) alkalmaztam. Murahashi és munkatársai [RuH<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub>] katalizátort találtak a legeredményesebbnek. [2].

Vízilépéssel lejátszódó Knoevenagel kondenzációs reakciókat tanulmányoztam vizes közegben és kétfázisú rendszerekben. Azonos reakció körülmények mellett különböző vízzeloldható katalizátorok alkalmazásával hajtottam végre a benzaldehid és ciánecetsav-etilészter közötti kondenzációt.

A kondenzációs reakció mellett mellékreakciók is lejátszódtak, mind a kiindulási észter, mind a termék észter hidrolizált. Az alkalmazott kétfázisú reakcióelegyben sem a hőmérséklet emelése, sem a savkoncentráció növelése nincs jelentős hatással a hidrolízisre. A reakció kivitelezéséhez használt katalizátorok mindegyike katalizálja az észter hidrolízisét, azonban [RuCl<sub>2</sub>(*mtpms*)<sub>2</sub>] estén a ligandum egyszeres feleslegét alkalmazva némileg visszaszoríthatjuk ezt a hatást.

Végrehajtottam a [RuCl<sub>2</sub>(*mtpms*)<sub>2</sub>]<sub>2</sub> reakcióját molekuláris hidrogénnel vizes közegben, illetve megvizsgáltam a kialakuló [H<sub>2</sub>Ru(*mtpms*)<sub>3</sub>] kölcsönhatását ciánecetsav-etilészterrel. <sup>1</sup>H NMR mérések és irodalmi analógiák alapján azonosítottam a [RuH(NCCH<sub>2</sub>COOEt)<sub>2</sub>(*mtpms*)<sub>3</sub>] jelét. Hasonlóan a nem-szulfonált trifenil-foszfint tartalmazó Ru-dihidridhez a szulfonált trifenil-foszfint tartalmazó Ru-dihidridből is kialakul egy katalitikusan aktív, Ru-monohidrid jellegű átmeneti termék.

[1] J. S. Yadav, B. V. S. Reddy, A. K. Basak, B. Visali, A. V. Narsaiah, K. Nagaiagh *Eur. J. Org.Chem.*, (2004) 546-551

[2] S-I. Murahashi, T. Naota, H. Taki, M. Mizuno, H. Takaya, S. Komiya, Y. Mizuho, N. Oyasato, M. Hiraoka, M. Hirano, A. Fukuoka *J. Am. Chem. Soc.*, (1995), 117, 12436-12451



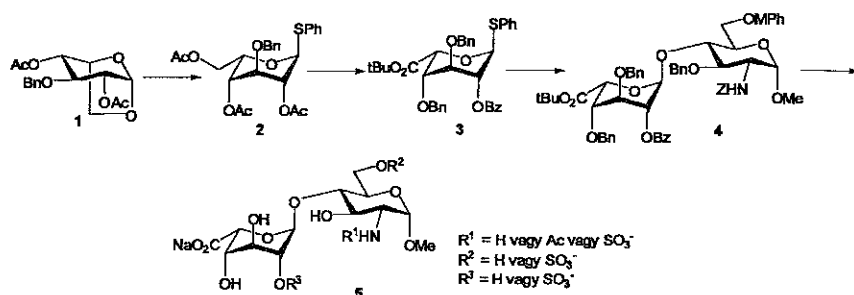
### Heparin oligoszacharidok szintézise: új, hatékony módszer iduronsav tioglikozidok segítségével

Osztrovszky Györgyi, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Fügedi Péter** tudományos osztályvezető  
MTA KK BKI Széhidrátkémiai Osztály  
**Tatai János** tudományos segédmunkatárs  
MTA KK BKI Széhidrátkémiai Osztály

A heparin-fehérje kölcsönhatások tanulmányozásához elengedhetetlen homogén szerkezetű heparin oligoszacharidok szintézisére kutatócsoportunkban ortogonális védőcsoportok használatán alapuló szintézisstratégiát dolgoztak ki. Ebben a stratégiában azokba a pozíciókba amelyek a végtermékekben szulfát csoportokat tartalmazhatnak, egymástól függetlenül szelektíven eltávolítható védőcsoportokat alkalmaznak.

Bekapcsolódva az Osztályon folyó kutatómunkába a szintézisstratégiánkhoz elengedhetetlen 3 L-iduronsav tioglikozid donor előállítására új, hatékony módszert dolgoztunk ki. A kulcsvegyület szintézisét az 1 1,6-anhidro származék sztereospecifikus tiolízisén keresztül valósítottuk meg. Megmutattuk, hogy a nagy mennyiségben szintetizált 3 tioglikozid az irodalomban közöltekkel ellentétben jól használható glikozil donorként, így kiváló termeléssel adja a 4 védett diszacharidot. E vegyületből lehetőség van az R1, R2 és R3 csoportok valamennyi lehetséges permutációjának megfelelő heparin oligoszacharid (5) előállítására.



**Suzuki-kapcsolás ferrocénszármazékokon**

**Szönyegi Zoltán**, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Csonka István** tudományos munkatárs  
ELTE Fizikai Fémorganikus Kémia Laboratórium

Tudományos diákköri munkám célja annak vizsgálata volt, hogy ferrocén-boronsavakból és ferrocén-boronsav-származékokból hogyan lehetséges Suzuki-kapcsolás segítségével új szén-szén kötést tartalmazó szubsztituált ferrocénszármazékokat előállítani. Ennek jelentősége az, hogy a ferrocénszármazékok széleskörűen alkalmazható, különleges tulajdonságokkal rendelkező vegyületek. Felhasználási területük a gyógyszer-, és biokémiától kezdve a különleges polimerekig, és katalizátorokig igen változatos, ezért indokolt olyan eljárások kidolgozása, amelyek segítségével könnyebben, olcsóbban, és minél szelektívebben állíthatók elő. A Suzuki-kapcsolásra épülő szintézisek önmagukban is olyan területet képeznek a preparatív kémián belül, amelyet szintén széleskörű alkalmazhatóság jellemez. A reakció sztereoszelektív, jó hatásfokkal végezhető nagy méretekben is, könnyű a melléktermék elválasztása. A két téma közös jellemzője, hogy nagy gyakorlati jelentőséggel bíró vegyületek előállításában játszanak szerepet, emiatt is érdemes a kettőt összekapcsolni. A téma irodalmi áttekintése példákat szolgáltat az előbbi állítások alátámasztására.

A kutatás fő irányvonala a borátészterek alkalmazhatósága a kapcsolási reakcióban. Mivel a boronsavak kapcsolása is igényli bizonyos segédanyag (erős bázis) jelenlétét, nem nyilvánvaló, hogy az észterek, amelyekben a katalizátorra transzmetallálódó szerves csoport nukleofilítása gyengébb, mint a deprotonált boronsavakban, használhatók lennének a Suzuki-kapcsolás körülményei között. Ennek felderítése volt az egyik fontos cél. Ha sikerülhet a borátészterek felhasználása a kapcsolat kiindulási anyagaiként, akkor azzal időt, és anyagot lehet megtakarítani, mivel általában magukat a boronsavakat is a borátésztereken keresztül állítjuk elő.

Az általam végzett kísérleti munkát ismertető leírásban szerepel a ferrocén bór-származékainak sikeres előállítása, ennek műszeres analitikai igazolásával. A kísérleti rész továbbá beszámol az előállított ferrocénszármazékok sikeres Suzuki-kapcsolásáról, alátámasztva tömegspektroszkópiás mérésekkel. A reakciók sikeres kivitelezése igazolja, hogy a kitűzött cél megvalósítható, ezért van értelme az ilyen irányú további kutatásoknak. Lehetséges az alkalmazott kapcsolási módszerek használata a ferrocén bórvegyületeinek átalakítására, továbbfejleszthetők a felhasznált módszerek jobb eredmény elérése érdekében.

**Fenotiazin tartalmú 5,10,15,20-tetraaril porfirinek előállítása**

**Tóth Brigitta Heléna**, IV. évf. kémia  
Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Lovász Tamás** egyetemi tanársegéd  
BBTE Szerves Kémiai Tanszék

A porfirinek fontos szerepet töltenek be a biológiai folyamatokban, alapvázát képezik a heteroproteideknek (hem), klorofillnak, B-12 vitaminnak és különböző enzimeknek (oxidáz, kataláz). Aporfirinek gyakorlati alkalmazásai biokémiai szerepükön alapszik: a királis fémporfirinek regioszelektív, enantioszelektív folyamatokat katalizálnak, fényelnyelő tulajdonságaik felhasználhatók a rák elleni fotodinamikus terápia kifejlesztésében. Jelentősebb alkalmazási területei közé tartoznak a napcellák készítése, valamint a mesterséges fotoszintézis modellezése [1].

Általános módszer *mezo*-tetraaril porfirinek előállítására: pirrol és aromás vagy alifás aldehid kondenzációja. Az aldehid és a pirrol közti átalakulás többlépéses folyamat, ami kondenzációt és ezt követő oxidációt tartalmaz [2].

Kutatásaim során egyszerű és fenotiazin tartalmú egyes tetraaril porfirineket állítottam elő több módszer felhasználásával. A keletkezett vegyületeket oszlopkromatográfiával tisztítottam.

[1] Yfrach, S., Lidell, G., Hung, P. A., Moore, A. L., *Nature*, **385**, 239-241 (1997)

[2] Lindsey, J. S., Wagner, R. W., *J. Org. Chem.*, **828-836** (1989)

# Fizikai kémia I. tagozat



**Vas(III)-oxalát tartalmú vezető polimerek előállítása és jellemzése**

**Bencsik Gábor**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

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

A kompozit anyagok vizsgálata egy dinamikusan fejlődő kutatási terület. A szerves vezető polimerekből származtatott összetett anyagok iránt fokozódó érdeklődés nyilvánul meg. Ennek háttérében az áll, hogy az elektromosan vezető polimer mátrixába beépített egyéb részecskék sajátosságai ötvöződnék a hordozóéval, és olyan összetett anyagok alakíthatók ki, melyek speciális elektródként történő alkalmazásai ígéretesek.

A vas(III)-oxalát fotokatalitikus tulajdonsága miatt került az érdeklődés középpontjába. Egy közelmúltban leírt eljárás szerint a polianilinba hidrogén-peroxid adagolása mellett beépített vas-oxalát komplex a kompozit vizsgálata alapján egyes vegyértékű vas-ionokat tartalmazhat [1]. Ezen eljárást alkalmaztuk poli(3-oktiltiofén) és polipirrol esetében, tanulmányozva a hidrogén-peroxid mennyiségének hatását. Vizsgálatainkat kiegészítettük a vas-oxalát tartalmú polipirrol kompozit in situ elektrokémiai előállításával is. A mintákat elemanalízissel, FTIR spektroszkópiával, négyponos vezetésmérési módszerrel, röntgendiffrakcióval és Mössbauer spektroszkópiával vizsgáltuk.

Jóllehet mintáink vastartalma a kimutathatósági határ körül mozgott, és direkt bizonyítékot sem az ICP-AAS, sem az infravörös spektroszkópiás vizsgálatok nem szolgáltatottak, a hordozó polimer sajátosságainak változását mind a röntgendiffrakciós, mind a váltóáramú impedancia, mind indirekt IR vizsgálati eredményei jelezték. Polipirrol esetén a röntgendiffrakció alapján a vastartalmú komponens jelenlétét két csúcs megjelenése mutatta, a politiofén-származék esetében a hordozó polimer réteges szerkezetére utaló csúcsok gyengültek a kompozitban. Feltételezhető ez alapján, hogy az oktiltiofén láncok rövidtávú és hosszabbtávú kölcsönhatásait egyaránt gyengítette a beépülő szerves komponens. Ezt a következtetést erősítették meg a négyponos vezetésmérés eredményei is, melyek a láncok közötti kölcsönhatások gyengítésének a vezetés csökkenésében megnyilvánuló hatását mutatták. A minták folyamatban lévő Mössbauer-spektroszkópiás vizsgálatának eredményei várhatóan kiegészítik a kompozitok tulajdonságainak és valószínű összetételének teljesebb megismerését.

[1] R. Mathur, D. R. Sharma, S. R. Vadera, N. Kumar, *Acta Mater.*, **49**, 181-187 (2001)

**A tioszulfát ion vizes oldatban mért UV-spektrumának értelmezése**

Csekő György, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Peintler Gábor** egyetemi docens  
SZTE Fizikai Kémia Tanszék

TDK munkám előtt a  $\text{Fe(III)-S}_2\text{O}_3^{2-}$  kinetikai vizsgálatával kezdtem foglalkozni. A kísérletek során kiderült, hogy a rendszer nem vizsgálható eredményesen a tioszulfát protonálódási állandóinak ismerete nélkül. Ezen állandók meghatározását tájékozódó jellegű mérésekkel kezdtem, melyeknek célja a hidrogén- és a tioszulfát ion azon koncentrációtartományának meghatározása volt, amelyben egy percen belül nincs kénkiválás. Azonban azt tapasztaltam, hogy csak hígítás hatására exponenciálisan változik a tioszulfát oldat elnyelése, akár 0,1 abszorbancia egységet is néhány percen belül. Megpróbáltam a jelenséget megszüntetni: kicseréltem a vegyszereket, az oldószert, más megvilágítási időt alkalmaztam, mind a savat, mind az ionerősség beállító só-t elhagytam, de ugyanazt az exponenciális lefutást kaptam. A jelenség akkor szűnt meg, amikor  $0,1^\circ\text{C}$  pontossággal előtermostáltam az összeöntendő oldatokat. További vizsgálatok azt is megmutatták, hogy a folyamat gyors, a tapasztalt exponenciális lefutás a termostát teljesítményétől függött. Ezek után hígítási sort készítettem tioszulfátból a 0,01-0,0004 M-os tartományban és mértem az oldatok spektrumát. A mért abszorbanciák tökéletesen követték a Lambert-Beer törvényt, így asszociátum képződése kizárható.

További értékeléshez mértem a színeképeket  $12$  és  $83^\circ\text{C}$  között. Jelentős változást tapasztaltam, pl.  $266\text{nm}$ -en az abszorbancia  $0,2$ -ről  $0,9$ -re változott. Egy adott hőmérsékletre visszaállva a színeképek reprodukálhatók. Ezek a kísérleti tények egyértelműen mutatják, hogy egy gyors,  $P \rightleftharpoons Q$  sémával megadható folyamatról van szó. Alkalmas illesztéssel megállapítottuk a folyamat entalpia és entrópia változását:  $\Delta H \sim 22\text{ kJ/mol}$   $\Delta S \sim 50\text{ J/(Kmol)}$ . Ezekből arra lehet következtetni, hogy hidrogén híd kötések átrendeződéséről van szó.

A jelenség okának megismerésére különböző hőmérsékleteken megmértük a tioszulfát oldat Raman spektrumát. A spektrumok között egyáltalán nem volt különbség, a tioszulfát ion szerkezete a hőmérséklet növelésével nem változik. Termoanalitikai méréseket is végeztünk, amelyek során kiderült hogy  $<90^\circ\text{C}$ -ig egy endoterm folyamat játszódik le, amely a tömegvesztéséből számolva két kristályvíz elvesztését jelenti, így a legvalószínűbb folyamat a tioszulfát ion hidrátburkának változása.

TDK munkám egy példa lehet arra, hogy egyszerű UV-Vis mérésekkel egy ion koordinációs szférája módosulásának entalpia és entrópia változása meghatározható.

**Folyadék-folyadék-folyadék fázisegyensúlyi számítások**

**Dénes Ferenc**, IV. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Láng Péter** egyetemi docens  
BME Gépészeti Eljárástechnika Tanszék

**Dr. Lángné Lázi Márta** egyetemi docens  
BME Analízis Tanszék

Az iparban a hulladék oldószerkegyek, melyek gyakran két, sőt három folyadékfázist képeznek, regenerálását többnyire extrakcióval és desztillációval végzik. E folyamatok tervezése és modellezése megköveteli a fázisegyensúlyok pontos leírását és számítását. A fázisok számát csak a számítások során lehet meghatározni az adott összetételű elegyre. Az elmúlt évtizedben az izoterm fázisegyensúlyi problémák numerikus megoldását többen is tanulmányozták ([1], [2], [3]). A kezdeti értékek megfelelően pontos becslése minden esetben kulcsfontosságú.

Lucia és munkatársai [2] a problémát a dimenziómentes szabadentalpia (G/RT) minimalizálásaként tekintették, és általános algoritmust javasoltak a többfázisú folyadék-egyensúlyi számításokra, melynek a fő elemei a következők:

- az alproblémák (LE, LLE, LLEL) egymást követő megoldása, amíg el nem érjük G/RT globális minimumát,
- minden részlegesen elegyedő komponenspár megtalálása kettős érintő síkok meghatározásának segítségével, és egy domináns nemelegyedő pár kiválasztása,
- kezdeti értékek generálása a következő alproblémához a kettős érintősík-elemzés és az előző megoldott alprobléma alapján,
- a fázisok stabilitásának utólagos ellenőrzése.

Elkészítettük a fenti módszer MAPLE ill. MATLAB programját, és a módszert különböző típusú folyadékelegeyen teszteltük (2 fázisú: pl. etil-acetát-víz-1-butanol, 3 fázisú: pl. 1-hexanol-nitrometán-víz).

Számítási tapasztalataink alapján továbbfejlesztettük a domináns komponensek meghatározásának módját és a komponensáramok kezdeti értékének becslését. E módosításokkal jobb eredményeket kaptunk, mint az eredeti módszerrel. Számításainkat irodalmi eredményekkel [3] is igazoltuk.

[1] Guo M., S. Wang, J.U Repke, G. Wozny, *AIChE Journal*, 50, 2571-82 (2004).

[2] Lucia A., L. Padmanabhan, *Comput. Chem. Eng.*, 24, 2557-69 (2000).

[3] Wasylkiewicz S. K. et al., *Ind. Eng. Chem. Res.*, 35, 1395-1408 (1996).

[4] Denes F., Lang-Lazi M., Lang P., *Distillation & Absorption 2006 London, IChemE Symposium Series, No. 152, Rugby*, 877-890 (2006).

**Mágneses nanorészecske vezető polimer alapú kompozitjának előállítása és jellemzése**

Janáky Csaba, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

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

A nanométeres mérettartományba ( $10^{-9}\text{m}$ ) eső anyagok a megjelenő újszerű, különleges tulajdonságaiknak köszönhetően az elmúlt években a tudományos és ipari érdeklődés középpontjába kerültek. A nanokompozit anyagok sikerrel kombinálják, esetlegesen erősítik több „nanoméretű” anyag előnyös tulajdonságait.

Az elektronvezető polimerek -30 évvel ezelőtti- felfedezésük óta egyre szélesebb körben vizsgált és alkalmazott vegyületek. A belőlük előállítható összetett anyagok, egyszerre mutatják a beépített szerves részecske tulajdonságát, és a polimer mátrix vezető sajátságát. Ilyen megfontolásból állítottak már elő katalitikus-, fotoelektrokatalitikus-, szuperkapacitív-, mágneses-, stb. tulajdonsággal rendelkező nanokompozitokat.

Korábban számos vizes közegben előállítható vezető polimer (polipirrol, polianilin, stb.) mágneses nanorészecskével alkotott kompozitját létrehozták[1], ugyanakkor szerves közegben kevés próbálkozás történt. Munkánkban célul tűztük ki  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ -poli(3-oktiltiofén) nanokompozit szerves közegű előállítását és jellemzését.

A maghemit nanorészecskéket inverz micelláris szintézissel állítottuk elő, majd kloroformban újra diszpergáltuk[2]. Ezt követően a monomer polimerizációját a vas-oxid részecskék jelenlétében hajtottuk végre.

A kapott terméket vizsgáltuk ultraibolya-látható-, fotoakusztikus infravörös-spektroszkópiával, tömegspektrometriával (MALDI-TOF), röntgendiffrakcióval (XRD), transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkóppal (TEM, SEM) valamint 4 pontos vezetésméréssel.

Az eredmények azt mutatják, hogy a vas-oxid beépülésével a polimer molekuláris szerkezete (moláris tömeg, effektív lánchossz) nem változik, ugyanakkor a kompozit szupramolekuláris szerkezete eltérő. A szintézis során a nanorészecskék jelenléte, egy tömörebb, gömbszerű struktúrát eredményez. Ez a szerkezeti változás megjelenik az elektromos sajátságok változásában is (vezetés, kapacitás). A dolgozatban a szerkezet-tulajdonság összefüggések is bemutatásra kerülnek.

[1] R. Gangopadhyay, A. De., *Chemistry of Materials.*, 12, 608, (2000)

[2] T. Nakanishi, H. Iida, T. Osaka., *Chemistry Letters.*, 12, 1166-1167 (2003)



**Vezető polimerek a korrózióvédelemben**

**Kiss László**, okleveles vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kutsán György** egyetemi adjunktus  
SZTE Fizikai Kémiai Tanszék

Az utóbbi időben a vezető polimerek egyre nagyobb teret nyernek az iparban, különösen a fémek korrózióvédelmében. Ezek közül is a polianilin a leginkább elterjedt, aminek oka az, hogy könnyen előállítható, termikusan stabil, és a környezeti behatásoknak is eléggé ellenáll, így időben sokáig betöltheti funkcióját. Még nem teljesen tisztázott, mi lehet a védelem mechanizmusa. A polianilin esetében feltételezték egyes kutatók, hogy a passzív réteg kialakulását segítik elő azáltal, hogy a felületen megtapadva katalizálják az oxigén redukcióját, aminek köszönhetően viszonylag tömör oxidréteg keletkezik. A polimer tehát elektronokat közvetít a fém felől az  $O_2$ -molekulák felé.

Vizsgálataink célja az volt, hogy más, kevésbé elterjedt vezető polimerek (politiofének) sajátságait tanulmányozzuk. Az is beletartozott a vizsgálatok körébe, hogy bizonyos típusú bevonatok a fém felületén hogyan segítik elő a polimerfilm tapadását, és ezen keresztül a jelenlétük hogyan befolyásolja a passzív rétegek védősajátságait. Előzetesen a pH-függést vizsgáltuk meg, és azt tapasztaltuk, hogy a politiofének enyhén lúgos közegben mutatnak korróziócsökkentő hatást. Néhány vegyületet, többek között oxidálószerket is kipróbáltunk, hogy megnézzük, mennyire segíti elő az általuk kialakuló passzív rétegek a tapadást.

A mérésekhez elektrokémiai módszereket alkalmaztunk, nevezetesen galvanosztatikát és az elektrokémiai impedanciaspektroszkópiát.

**Metán tüzelőanyagú szilárd oxidos tüzelőanyag-elemek anódterében lejátszódó reakciók vizsgálata**

**Kramarics Áron**, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Zsély István Gyula** tudományos segédmunkatárs  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék  
**Dr. Turányi Tamás** egyetemi docens  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Napjaink egyik fontos feladata jó hatásfokú áramforrások kifejlesztése hordozható berendezések (mobiltelefonok, laptopok) működtetésére, elektromos autók hajtására és épületek áramellátására. Erre a feladatra a tüzelőanyag-elemek látszanak legalkalmasabbaknak. A számos tüzelőanyag-elem közül a szilárd oxidos tüzelőanyag-elemek (angol rövidítése alapján SOFC-ek) alkalmazása tűnik a legbiztatóbbnak. A szilárd-oxidos tüzelőanyag elemek egyik legnagyobb előnye éppen az, hogy többféle tüzelőanyagot használhatunk fel, így például hidrogént, szén-monoxidot, metánt, propánt, butánt és akár biogázt is.

Az anódtérbe kerülő tüzelőanyag-elegyben a magas hőmérsékleten homogén gázfázisú kémiai reakciók zajlanak, és ennek hatására döntően megváltozhat, hogy mely anyagfajta fognak elektrokémiai úton oxidálódni. Ahhoz tehát, hogy egy SOFC berendezést modellezni tudjunk, az egyik fontos lépés a tüzelőanyag-elegyben végbe menő gázfázisú reakciók vizsgálata.

Ez a TDK dolgozat egy nemzetközi kooperációhoz kapcsolódik. A *Colorado School of Mines* egyetemen, Anthony Dean és csoportja foglalkozik az SOFC-ek anódcsatornájában lejátszódó reakciók leírásával. A Dean-féle mechanizmus (350 anyagfajta, 6874 irreverzibilis reakciólépés) a reakciókörülmények széles tartományában használható, de nagysága miatt nem építhető be egy összetett SOFC-modellbe. Emiatt megvizsgáltuk, le lehet-e írni ezeket a kémiai átalakulásokat egy sokkal kisebb reakciómechanizmussal?

A részletes reakciómechanizmusból előbb a felesleges anyagfajtaikat, majd a felesleges reakciókat távolítottam el a reakciómechanizmusok analízisére korábban kidolgozott eljárásokkal. Az így kapott redukált mechanizmus 165 anyagfajta 1861 irreverzibilis reakcióját tartalmazza, a felhasználásával kapott eredmények pedig néhány százalékon belül visszaadják a kiindulási mechanizmussal számított móltörtet a vizsgált reakcióidő-tartományban. A kapott redukált mechanizmus a homogén gázkinetikai reakciók gyorsabb számítását teszi lehetővé.

**Ekvidisztáns csapadékmintázatok tervezése reakció-diffúzió rendszerekben**

**Molnár Ferenc**, II. évf. informatikus-vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Lagzi István László** tudományos munkatárs  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A legrégebben dokumentált, tudatosan tervezett kémiai mintázatképződés Ralph Eduard Liesegang nevéhez kötődik. A később róla elnevezett jelenség egy csapadék-képződési reakció eredménye, aminek kialakulásában a diffúziónak fő szerepe van. A jelenség ugyan már 110 éves, de még mindig maradnak olyan megválaszolatlan kérdések, melyek a kutatókat foglalkoztatják.

Manapság egyre nő a jelentősége a mikroméretű struktúrák pontos kialakításának. Az elmúlt két év során számos külföldi kutatócsoport publikált olyan kísérleti eljárásokat, amelyekben a reakció-diffúzió rendszerekben végbemenő folyamatokat használták fel mikro- és nanostruktúrák kialakításához. A Liesegang-jelenség révén olyan kisméretű mintázatokat tudunk létrehozni, amelyeket fotólitográfiával már nem lehetséges. Az eddig használt technikákkal nyert mintázatok karakterisztikus mérete akár két nagyságrenddel csökkenthető.

Célkítűzésem az volt, hogy keressék egy lehetőséget tisztán reakció-diffúzió rendszerben ekvidisztáns csapadékmintázat előállítására. Elméletemet numerikus szimulációkkal támasztottam alá, amelyek a szol-koagulációs modellre épültek. Kiderült, hogy a csapadék kiválásának határát exponenciálisan csökkenteni kell az ekvidisztáns mintázat megvalósításához. Ezt kétféleképpen lehet elérni: helyfüggő és stacionárius, vagy időfüggő és térben állandó koagulációs határral. A kiválási határokat a szimulációs program módosított változatával állítottam elő. Ezeket felhasználva, mindkét módszer szimulációs eredményeit bemutattam. A megjelenő csapadékszónák helyét a sorszámuk függvényében ábrázolva azok egy egyenesre illeszkedtek, bizonyítván hogy a kapott mintázat valóban ekvidisztáns. A kísérleti megvalósításhoz és a technológiai alkalmazáshoz azonban pontosan ismerni kell az adott reakció-diffúzió rendszer komponenseinek fizikai paramétereiktől való függését, hogy meg tudjuk határozni a megfelelő csapadékkiválási küszöböt, ami az ekvidisztáns mintázatképződés kulcsa.

**Tetracián-kinodimetán mikrokristályok elektrokémiai viselkedése**

Németh Katalin, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Inzelt György** egyetemi tanár  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

TCNQ mikrokristályok elektrokémiai reakcióit vizsgáltuk ciklikus voltammetriával, kronoamperometriával és EQCM-mel különböző minőségű és koncentrációjú vizes elektrolitoldatok jelenlétében.

A PIGE-elektrodon végzett mérések alapján kiderült, hogy a kationok minősége és koncentrációja hatással van az elektrokémiai folyamatokra azáltal, hogy a redukció során képződő  $\text{TCNQ}^{\cdot-}$ -nal és  $\text{TCNQ}^{2-}$ -nal sőt képeznek, továbbá a reakció során hidrátvizük egy részét is magukkal viszik a réteg belsejébe.

Megállapítottuk, hogy a reakciók sebességmeghatározó lépése egyértelműen a szilárd-szilárd fázisátalakulás, ezen belül is a göcök képződése és növekedése.

Külön figyelmet szenteltünk a tömény LiCl-oldatban végbemenő folyamatoknak, amelyeket EQCM-mel is vizsgáltunk. Megállapítottuk, hogy a LiCl-koncentráció növelésével a víz aktivitása annyira lecsökken (18 mol/kg LiCl-koncentráció esetén 0,21) [1], hogy a vízben egyébként rendkívül jól oldódó, a TCNQ mikrokristályok redukciója során egy elektron felvételével képződő  $\text{Li}^+\text{TCNQ}^{\cdot-}$  só oldódása teljes mértékben visszaszorítható, így lehetőség nyílik a folyamat megbízható követésére és még a második elektron felvételekor képződő  $\text{Li}^+\text{TCNQ}^{2-}$  só szilárd fázisban, vizes közegben történő vizsgálatára is.

12 mol·dm<sup>-3</sup>-es LiCl-koncentráció esetén a Li<sup>+</sup>-ionok 2-3 vízmolekulát visznek magukkal a felületi rétegbe.

A méréseink során alkalmazott stratégia, vagyis hogy a víz aktivitását jelentős mértékben lecsökkentettük a vezető elektrolit nagy koncentrációban való alkalmazásával, alkalmazható minden olyan esetben, amikor az egyik reakciótermék (főleg sók) vízben nagymértékben oldódnak. Más inert vegyületek, pl.  $\epsilon$ -kaprolaktám is alkalmazhatók a vízaktivitás nagymértékű csökkentésére.

[1] M. J. Blandamer, J. B. F. Engberts, P. T. Gleeson, J. C. R. Reis, *Chem. Soc. Rev.*, **34** (3), 440-458 (2005)

**Különféle csapadékmintázatok képződésének vizsgálata**

**Ripszám Mátyás**, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Lagzi István** tudományos munkatárs  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

**Dr. Izsák Ferenc** egyetemi tanársegéd  
ELTE Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék

A kémiai mintázatképződés vizsgálata a nemlineáris kémiai dinamika egy igen dinamikus kutatott és fejlődő ága. Mintázat akkor keletkezhet, amikor a kémiai reakciók csatolódnak a reakcióban résztvevő anyagfajta anyagtranszportjával, amely a legegyszerűbb esetben a diffúzió. A legrégebbi kontrollált kémiai mintázatképződés a Liesegang-jelenség, amely a csapadékmintázatok egy speciális osztályát képezi. A nemlineáris kémiának egy igen részletesen tanulmányozott ága foglalkozik a gerjeszthető közegben létrejövő dinamikus mintázatok az úgynevezett kémiai- vagy Belouszov-Zsabotyinszj hullámok elméletével. Köztudott tény, hogy a kémiai hullám terjedési sebessége függ a hullám görbületétől, így a görbületnek fontos hatása van a mintázat időbeli fejlődésére. Eddig még nem vizsgálták a görbületnek a klasszikus Liesegang mintázatra gyakorolt hatását, habár több mint száz éve az egyik igen elterjedt elrendezés a kétdimenziós kísérleti összeállítás. Munkánk egyik célja az volt, hogy először mutassunk rá a külső elektrolit kezdeti görbületének a hatását a mintázat fejlődésére, illetve végső megjelenésére.

Olyan új kísérleti rendszert és összeállítást dolgoztunk ki, amellyel először nyílt lehetőség több csapadékfront indítását kihasználva a csapadék (alumínium-hidroxid) amfoter tulajdonságát.

Az utóbbi években egyre több szakcikk foglalkozik a reakció diffúzió rendszerek felhasználhatóságát mikrostruktúrák tervezésénél (pl. optikai rácsok). Ugyanezt az amfoter tulajdonságot lehet felhasználni mikroskálájú mintázatok tervezésére és a mintázatok célzott torzítására. A dolgozatomban számos ilyen példát dolgoztunk ki és mutatunk be. Végül ugyanebben a kémiai rendszerben érdekes spirál-duplaspirál minták képződését figyelhetjük meg, amely egy jó példája a csapadékrendszerekben található önszerveződésnek.

**Perklorátionok elektrokémiai redukciója ródiumon**

Sas Norbert, IV. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Láng Győző** egyetemi tanár  
ELTE Fizikai Kémia Tanszék

A perklorátionok redukciója két alapvető ok miatt került érdeklődésünk középpontjába. Az első egyértelműen gyakorlati jellegű: a perklorátion szennyezi a talajvizet és a felszíni vizet, ahová ammónium-, ólom-, magnézium- vagy káliumsók oldódása során kerül. A szennyezés egyik fő forrása, az ammónium-perklorát, amely oxidáló-összetevője és elsődleges alkotóeleme szilárd hajtóanyagú rakétáknak, lövedékeknek és tűzijátékoknak. Orvosi vizsgálatokból tudjuk, hogy a perklorát gátolja a jodid-felvételt a pajzsmirigyben. A második ok annak a szakirodalomban elterjedt vélekedésnek a kísérleti ellenőrzése, miszerint a perklorátionok igen stabilak, nem redukálhatóak, ezért elektrokémiai mérések során a perklorosav és sói igen tág potenciáltartományban kiválóan alkalmazhatóak alapelektrolitként [1].

Munkánk során a perklorátionok elektrokémiai redukcióját tanulmányoztuk ródiumon. Első lépésként reprodukáltuk a szakirodalomban már ismert mérési eredményeket, s azokat saját kísérleteink alapján új megfigyelésekkel ki is egészítettük. Ciklikus voltammetriás méréseink során igazolni tudtuk a redukciós folyamat jelenlétét, ugyanis perklorátionokat tartalmazó elektrolitoldat esetében a voltammetriás görbéken a pozitív irányú pászta a perklorátmentes közegben tapasztalt „normális” viselkedéshez képest torzul, negatív áramértékek figyelhetők meg. Részletesen tanulmányoztuk a perklorátionok redukciója során képződő kloridionok adszorpcióját, és deszorpcióját az elektród felületén, ugyanis ezek inhibíciós hatást fejtenek ki a redukciós folyamatokra. Részletes vizsgálatokat folytattunk azon potenciálok értékeinek meghatározására, ahol a redukciós folyamat kinetikájának felderítése érdekében impedancia-spektroszkópiás méréseket érdemes végezni. Megvizsgáltuk az elektródon lejátszódó folyamatok hőmérsékletfüggését, különös figyelemmel a perklorátionok redukciójára. A szisztematikus impedancia-spektroszkópiás mérések előtt néhány tájékoztató jellegű mérést végeztünk, különböző potenciálokon és hőmérsékleten, s ezek alapján a rendszer néhány fontos tulajdonságára adtunk becslést.

Eddigi kísérleti eredményeink egyértelműen bizonyítják, hogy Rh jelenlétében a  $\text{ClO}_4^-$ -ionok elektrokémiai redukciója biztosan nem hagyható figyelmen kívül.

[1] G.G. Láng, G. Horányi, *J. Electroanal. Chem.*, 2003. 552: p. 197-211

**Ipari szennyvizek lúgmentesítése elektrokémiai adszorpciós módszerrel**

**Szakály Roland**, V. évf. vegyészmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Horváth Géza** tanszékvezető egyetemi docens  
PE Vegyipari Műveleti Tanszék

A nagy vegyipari eljárásoknál jelentős mennyiségű ipari szennyvíz keletkezik. Ezek kezelése komoly problémát jelent. A technológiában felhasznált folyadékok recirkuláltatása csak úgy oldható meg, hogy visszavezetés előtt eltávolítjuk a benne levő szennyező anyagokat, fémionokat. A szennyvíz iontartalmának eltávolítása egyelőre nem megoldott olyan technológiák esetében, amelyek nagymennyiségű lúgos mosófolyadékot használnak pirogázok tisztítására. Ha a fémion mentesítés problémáját sikerül megoldani, akkor ezek a technológiák sokkal gazdaságosabbá tehetők, és a környezetbe való káros anyag kibocsátásuk is jelentősen csökkenthetővé válik.

Célunk olyan eljárás kidolgozása, amellyel a szennyvízből kis energia befektetéssel és nagy hatásfokkal távolíthatóak el a környezetre veszélyes fémionok.

Az oldatban lévő fémek kationos formában vannak jelen, tehát pozitív töltéssel rendelkeznek. Ha egy ilyen oldatba merített elektródra negatív potenciált kapcsolunk, a felületén feldúsultak a kationok. Ekkor az elektródot kiemeljük az oldatból és egy másik oldatba merítjük, ahol megváltoztatjuk a polaritását. Ennek hatására a kationban dús felületű katód anód lesz, amelyről az elektromos tér hatására az oldatba diffundálnak a kationok. Ezt az eljárást nevezzük feszültségváltoztatásos adszorpciós eljárásnak. Több ciklust kövözően a szegényftendő oldat koncentrációja lecsökkenthető annyira, hogy a folyadék újra felhasználhatóvá válik a technológiában. Eközben a másik oldat nagymértékben betöményíthető, és ismételten felhasználható.

Kutatásaink célja a tisztítási eljáráshoz megfelelő elektródok készítése és ezek fajlagos felületének, fizikai-, kémiai stabilitásának, valamint adszorpciós kapacitásának vizsgálata. Ezeken kívül vizsgáljuk az elektród felületén kialakuló ionokban dús réteget, a Helmholtz-réteg és a diffúziós-réteg kialakulását különböző polarizációs feszültségek mellett, valamint ezeknek a rétegeknek a stabilitását és kapacitását. Továbbá célunk az anyagátviteli folyamat optimális paramétereinek meghatározása, mint a megfelelő polarizációs feszültség, műveleti idő, adszorpciós felület- oldatmennyiség arány meghatározása.

Távolabbi tervünk megfelelő hatások esetén, az automatizált készülék méretnövelése.

**Kémiai hullámok és reakciófrontok terjedésének szimulációja sejtautomata modellekkel**

**Szakály Tamás**, III. évf. informatikus-vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Izsák Ferenc** egyetemi tanársegéd  
ELTE Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék  
**Dr. Lagzi István** tudományos munkatárs  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A nemlineáris kémia egy igen részletesen tanulmányozott ága foglalkozik a gerjeszthető közegben létrejövő dinamikus mintázatok, az úgynevezett kémiai vagy Belouszov-Zsabotyinkszij (BZ) hullámok elméletével. A BZ hullámokat először a 60-as évek végén figyelték meg, amely azóta is egy tipikus példája a nemlineáris kémiai reakciók és a diffúzió együttes hatásának. Ilyen rendszerekben számos térbeli mintázat jöhet létre akár spontán módon is: planáris, koncentrikus hullámok, spirálok, duplaspirálok és egyéb érdekes alakzatok.

Az ilyen rendszereket reakció-diffúzió rendszereknek nevezzük, és a leírásukra reakció-diffúzió modelleket használunk. Ezek a vizsgálatok azért fontosak, mert az élő és élettelen természet számos jelensége magyarázható hasonló modellekkel (pl. ingerületvezetés, erdőtüzek, stb.).

Munkánk célja egy olyan sztochasztikus sejtautomata modell létrehozása, illetve ez alapján olyan szimulációk végrehajtása volt, amelyek a fent leírt jelenségeket jól reprodukálják. E célunkat megvalósítottuk, modellünkkel sikeresen reprodukálhatók a reakció-diffúzió rendszerekre jellemző mintázatok (célábla-mintázat, duplaspirál, spirálkarok, stb.). A sztochasztikus átmeneti függvény alkalmazásával elér-tük, hogy a frontok alakja független legyen a cellák hálózatának alakjától. Mindezek mellett elmondhatjuk azt is, hogy modellünk rendkívül gyors szimulációt tesz lehetővé.





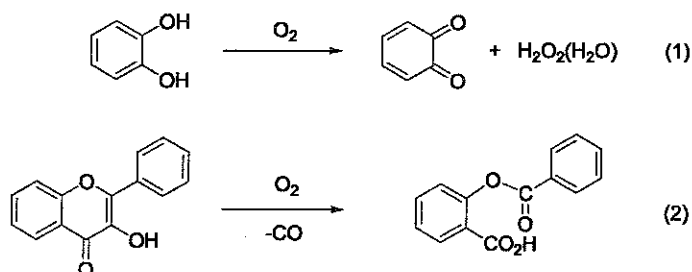


Oxigenázok és oxidázok modellreakciói (flavonol 2,4-dioxigenáz, pirokatechin oxidáz, kataláz)

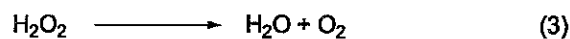
Baráth Gábor, V. évf. vegyész  
PE Mérnöki Kar

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

A dolgozatban bemutatásra kerülő kutatómunka céljával a pirokatechin oxidáz (1) és a flavonol 2,4-dioxigenáz (2) enzimek működésének megismerését tűztük ki un. biotánczó modellrendszerek előállításán keresztül. A fenti enzimek közös jellemzője, hogy aktív centrumukban átmenetifémet (Mn; Cu; Fe) tartalmaznak, valamint az általuk katalizált folyamatokhoz dioxigént használnak fel.



A modellrendszerek vizsgálatához Fe(II)-, Fe(III)- és Mn(II)-tartalmú vegyületeket állítottunk elő. A komplexek szerkezetét spektroszkópiai módszerekkel (IR, UV-vis, Mössbauer) és röntgendiffrakcióval határoztuk meg, majd segítségével un. biotánczó reakciókat dolgoztunk ki. Vizsgáltuk továbbá a melléktermékként keletkező hidrogén-peroxid fémkatalizált bomlását, amely a kataláz enzimek (3) funkcionális modelljének tekinthető.



A modellrendszerek kinetikai vizsgálata alapján javaslatot tettünk a reakciók mechanizmusára vonatkozólag.

**Az As(III) kölcsönhatása ditio-eritritollal vizes közegben**

**Benedeczki Tamás**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Gyurcsik Béla** egyetemi adjunktus  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az EU-ba történő belépés következtében az ivóvíz arzéntartalmára bevezetett határértékek miatt fontos probléma a természetes ivóvizekben lévő arzéntartalom csökkentése. Ugyanilyen fontos az As(III) biológiai hatásának felderítése is.

Munkám során az arzénessav és a DTE között lejátszódó folyamatokat próbáltam feltérképezni, pH-metriás, NMR- és UV-spektroszkópiás, ICP és RD mérésekkel, valamint csapadékképződési reakciók vizsgálatával. A pH-metriás titrálás szerint a rendszer úgy viselkedik, mintha a tiol csoportok bázikussága As(III) jelenlétében megnőtt volna.

Az oldatok  $^1\text{H-NMR}$  és spektrofotometriás méréseiből arra következtettünk, hogy kétfajta ligandum található a képződött termékben. Az egyik valószínűleg gyengén köt, míg a másik tioéteres és/vagy észteres kötést alakít ki az arzénessavval kondenzációs reakcióban.

A szilárd minták  $^{13}\text{C-NMR}$  vizsgálatából arra következtettünk, hogy kétfajta ligandum kapcsolódik az As(III)-hoz, különböző módon. Az 1:1-es összetételű csapadékot etanolból átkristályosítva, RD mérésnek vetettük alá, és az alábbi kristályszerkezetet kaptuk:



Jelenleg affinitáskromatográfias és ICP módszerekkel azt vizsgáljuk, hogy az L7 peptiddel, amely két egymás melletti ciszteint tartalmaz, megköthető-e az arzén? Ha a kísérletek pozitív eredményt mutatnak, akkor genetikailag módosított arzéntűrő baktériumokkal szeretnénk elérni a mérgező anyag sejten belüli felhamozódását, ami aztán egy egyszerű szűrési művelettel eltávolítható.

A fentiek alapján közelebb juthatunk az As(III) biológia szerepének megismeréséhez és esetleg újszerű víztisztítási stratégiák kidolgozásához.

**Szuperoxid-dizmutáz (SOD) utánzó fémkomplexek előállítása vizsgálata és enzim tesztreakciói**

**Benkő Mária**, IV. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

**Markó Kata**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Labádi Imre** egyetemi docens  
SZTE Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A szuperoxid-dizmutáz utánzó fémkomplexek előállítása a bioszervetlen kémia tárgykörébe tartoznak. A SOD a szervezetben keletkezett, vagy a szervezetbe került szabadgyököket alakítja át. Az élőlény fejlettségi szintétől függően különböző fémionok találhatók benne. Az élővilágban három alapvető formáját azonosították. Attól függően, hogy milyen fémet tartalmaz, és hol fordul elő, megkülönböztetünk Cu/Zn-SOD-t, Mn-SOD-t, Fe-SOD-t.

Az emberi szervezetben a réz(II) és cink(II)tartalmú SOD található meg. Az enzim a szuperoxid ( $^{\bullet}\text{O}_2^-$ ) dizmutációját katalizálja. Az így keletkezett hidrogén-peroxid ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ) pl. kataláz segítségével alakul át vízzé és oxigénné.

Mivel az enzimek igen jó katalizátorok (szelektivitás és hatékonyság) a kutatók gyakran szeretnének hasonló tulajdonságú katalizátorokat előállítani vagy ipari célból vagy orvosi gyógyászati célból.

Amióta a természetes enzimek aktív centrumainak pontos szerkezetét különféle szerkezetvizsgáló módszerek segítségével megismerték, megindultak a kutatások olyan enzimutánzó fémkomplexek irányába, amelyekkel modellezni lehet a természetes enzimeket.

Jelen dolgozat célja a fentihez hasonló komplexek előállítása, jellemzése és a SOD aktivitás tesztelése volt. Ezt úgy kívántuk elérni, hogy a rézoldalon az alifás aminosavat kicseréltük más ligandumokra. Ligandumként DL-2,3-diaminopropionsavat, 3-amino-1,2-propándiolt, valamint 2-amino-2-metil-1,3-propándiolt választottuk, majd réz és cinkoldalon az alifás aminosavat kicseréltük aromás ligandumokra. Aromás ligandumként a bipiridilt és a terpiridilt választottuk.

**A tetraammin-cink(II)-klorid és a 3,5-dimetilpirazol-1-karboxamidium-nitrát reakciói**

**Holló Berta**, IV. évf. kémia  
ÚE Természettudományi Kar – *versenyen kívüli*

Témavezetők: **Dr. Leovac Vukadin** egyetemi tanár  
ÚE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék  
**Dr. Mészáros Szécsényi Katalin** egyetemi tanár  
ÚE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszék

A pirazolszármazékok átmeneti fémionokkal alkotott komplexei széleskörű alkalmazhatóságának köszönve (modellvegyületek biomolekulák aktív centrumainak tanulmányozása, ipari katalizátorok, gyógyszeripari termékek, permetezőszerek) a tudományos kutatásoknak gyakori témáját képezik.

Kutatásaink elsődleges célja, hogy megállapítsuk, mely tényezők befolyásolják a komplexképződés folyamatát. Ehhez a keletkezett vegyületek lehető legátfogóbb jellemzésére van szükség. Éppen ezért arra törekszünk, hogy a vegyületeket egykristály alakban állítsuk elő, mert ezesetben a kristályszerkezet röntgendiffrakciós módszerrel meghatározható. Egykristály előállítására alkalmasnak mutatkozott az analitikai kémikusok által régóta ismert eljárás: a homogén közegből történő leválasztás módszere. Amennyiben savas protont tartalmazó ligandumhoz a központi iont amminkomplex formájában adagoljuk, a reakcióelegy pH-ja a komplexből felszabaduló ammónia segítségével szabályozható. A pH-érték folyamatos változása megszabja a komplexképződés sebességét, ami elősegíti, hogy a vegyület megfelelő minőségű, kristályszerkezet meghatározására alkalmas formában váljon ki az oldatból.

E munkánkban a tetraammin-cink(II)-klorid és a 3,5-dimetilpirazol-1-karboxamidinium-nitrát reakcióit vizsgáltuk. A keletkezett vegyületek szerkezetének jellemzőit és termikus viselkedését tárgyaljuk szerkezetük és a reakciófeltételek változtatásának tükrében.

## A 3L4H peptid fémkomplexeinek vizsgálata

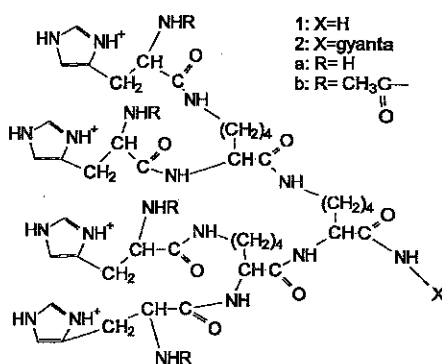
Iványi Zoltán, IV. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Gyurcsik Béla egyetemi adjunktus  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A metalloenzimek tervezése és előállítása napjainkban több szempontból is jelentőséggel bír, hiszen a természetes enzimek modellezésén túl ezen vegyületekkel kapcsolatban gyógyászati, környezetvédelmi alkalmazások is felmerülhetnek. A foszfoészteráz enzimek végzik az élő szervezetben a foszfátészter kötés hasítását. A foszfoészterázok közé tartozó nukleázok kiemelt jelentőséggel bírnak, mivel ezek az enzimek végzik a nukleinsavak specifikus hasítását. Kézenfekvő megoldásnak kínálkozik, ha ezen metalloenzimeket kis tagszámú peptidekkel modellezzük.

Munkám során hisztidinben gazdag, elágazó (ún. dendrimer szerkezetű) peptid ligandumokat állítottam elő. Az alapvegyület három lizinből, és négy hisztidinből álló peptid (1a), melynek egy részét acetileztük (1b), ezzel zárva le a négy láncvégi szabad aminocsoportot. A ligandumok mindegyikének előállításához szilárd fázisú peptidszintézist (SPPS) alkalmaztuk. A peptidok tisztítását HPLC-vel végeztük, a terméket tömegspektrométerrel azonosítottuk. A tiszta peptidet pH-potenciometriás módszerrel titráltuk a pK, ill a réz(II) és cink(II)-komplekek stabilitásának meghatározása céljából. A továbbiakban terveink között szerepel, hogy a kötőhely szerkezetét spektroszkópai mérésekkel is megvizsgáljuk, illetve katalitikus vizsgálatokat is végzünk.

A peptidokat egy újabb szintézis alkalmával rajtahagytuk a gyantán (2a, 2b). A már említett környezetvédelmi alkalmazás lehetősége a ligandum szelektív fémion-megkötő képességében rejlik, ilyen módszerrel ugyanis szennyező fémionokat vonhatunk ki a tisztítani kívánt vízből. Ezért azt tervezzük, hogy a gyantán hagyott peptidok fémion-kötő tulajdonságait is tanulmányozzuk.



**Új arzán- és stibánszubsztituált kobaltkomplexek szintézise és  
elektronszerkezetük vizsgálata**

**Kiss András, III. évf. vegyész**  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Sztáray Bálint** egyetemi adjunktus  
ELTE Szeretlen Kémiai Tanszék

Napjainkban egyre jelentősebb a fémorganikus vegyületek szerepe a vegyiparban is, köszönhetően annak, hogy számos reakciót katalizálnak. Ezért rendkívül fontos elektronszerkezetük vizsgálata, különös tekintettel arra, hogy egyes szubsztitúciós reakciók hogyan befolyásolják. Ennek megértése segíthet nekünk új katalizátorok tervezésében, valamint a már létező katalizátorok hatékonyabbá vagy stabilisabbá tételében, hiszen a ligandumok változtatásával tetszés szerint változtatható a katalitikus aktivitás.

A kobalt fémorganikus vegyületei közül különösen érdekes a kobalt-trikarbonil-nitrozil,  $\text{Co}(\text{CO})_3\text{NO}$ , mert több folyamatban is használható homogén fázisú katalizátorként. A vegyületet éppen ezért változatos vizsgálati módszerekkel tanulmányozták már. Változatos foszfánszármazékait állították már elő, és vizsgálták meg ezen származékok elektronszerkezetét. Az arzán és stibán származékok előállítására és vizsgálatára viszont kevés példa található az irodalomban.

Munkánkban két új komplex, a kobalt-dikarbonil-nitrozil-trimetil-arzán ( $\text{AsMe}_3\text{Co}(\text{CO})_2\text{NO}$ ) és kobalt-dikarbonil-trimetil-stibán ( $\text{SbMe}_3\text{Co}(\text{CO})_2\text{NO}$ ) előállítását, valamint elektronszerkezetük ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiás vizsgálatát tűztük ki célul.



**Az N-nitrozo-N-fenil-hidroxil-amin (kupferron) néhány di- és triorganoórn(IV) komplexének előállítása és szerkezetvizsgálata**

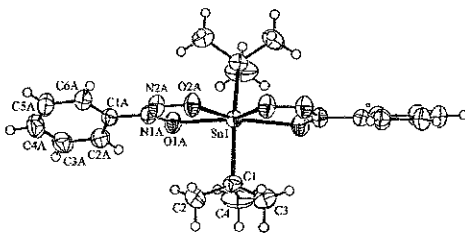
**Kökény István, V. évf. vegyész**  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Nagy László** egyetemi tanár  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék  
**Dr. Szorcsik Attila** tudományos segédmunkatárs  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Jól ismert az a tény, hogy az ón(IV)organikus vegyületeknek jelentős biológiai hatása van. A hatás erősségét (milyenségét) alapvetően meghatározza a központi ón-atomhoz kapcsolódó szerves szubsztituensek száma és minősége. Az eddigi kutatások eredményei azt mutatták, hogy egyes ón(IV)organikus komplexek rákellenes hatással rendelkeznek, ahol a vegyületek szerkezete és antitumor aktivitása közt összefüggés van.

A SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékén folyó bioszervetlen kémiai kutatások egyik területe az ón(IV)organikus kationok komplexeinek egyensúlyi- és szerkezetvizsgálata. Az 1990-es évek derekán a kupferron és származékai a figyelem középpontjába kerültek, mint olyan lehetséges „prodrug”-ok, amelyek kontrollált körülmények között nitrogén monoxidot szabadítanak fel. Korábbi munkák során tanulmányozták a ligandum  $\text{Me}_2\text{Sn(IV)}$ -,  $\text{Me}_3\text{Sn(IV)}$ - valamint a  $\text{Ar}_2\text{Sn(IV)}$ -komplexeinek szerkezetét. Azt találták, hogy a ligandum általában, az átmene-tifémion komplexeihez hasonlóan, ötagú kelátkötés kialakítása révén kötődik az ón(IV)organikus kationhoz. Néhány esetben ettől eltérő, híd típusú koordinációt tapasztaltak.

Tudományos diákköri munkám célja annak vizsgálata volt, hogy a fenti ón(IV)-organikus kationhoz képest nagyobb tér-kitöltésű  $\text{Et}_2\text{Sn(IV)}$ -,  $\text{Bu}_2\text{Sn(IV)}$ -,  $\text{tBu}_2\text{Sn(IV)}$ -,  $\text{Oc}_2\text{Sn(IV)}$ - és  $\text{Ph}_3\text{Sn(IV)}$  kationok komplexeiben a szerves-csoportok minősége hogyan befolyásolja a kialakult szerkezetet. Ezért előállítottuk e komplexeiket és szerkezetüket röntgendiffrakciós, Mössbauer- és FTIR-spektroszkópiai módszerekkel tanulmányoztuk. Az így kapott szerkezetek helytállóságát kvantumké-miai modellszámításokkal próbáltam igazolni. A számításokhoz a kiindulási paramétereket a  $\text{tBu}_2\text{Sn(IV)}$ kupferronát komplex röntgendiffrakciós vizsgálati eredményeiből nyertük, mely szerkezete az ábrán látható.



**Kalcium-szilikát biokerámia előállítás szol-gél módszerrel**

**Meiszterics Anikó**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Sinkó Katalin** egyetemi docens  
ELTE Analitikai Kémia Tanszék

Jelen TDK munka célkitűzése nagyszilárdságú kalcium-szilikát biokerámia előállítása volt, melynek megvalósítására az energiatakarékos szol-gél módszert választottuk. E nagyszilárdságú kalcium-szilikát rendszerek előállítását és szerkezetvizsgálatát orvos-biológia jelentősége motiválta, implantátumok alapanyagaként vehetők számításba akár önállóan, akár kompozit összetételben.

A kísérleteink során kifejlesztett szol-gél módszer a kalcium-szilikátok szintézisére elterjedt olvasztásos technikánál jóval alacsonyabb hőmérsékletű előállítást tett lehetővé. A szol-gél eljárás másik fontos előnye, hogy a kialakuló szerkezetet már molekuláris szinten, nanoméret-tartományban is előre lehet tervezni. A szol-gél technológia kiindulási anyagai között szervesen (Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O) és szerves perkurzorok (TEOS) egyaránt található, alkoholos közegben különböző katalizátorok (desztillált víz; ecetsav; ammónia; salétromsav) szerkezet módosító hatását tanulmányoztuk. Az ammóniás és salétromsavas katalízis során a kalcium-szilikát rendszerben fáziszeváparáció lépett fel, a rendszerekben csapadék jelent meg, ily módon nem lehetett homogén rendszert kialakítani. A víz jelenléte erős viszkoelasztikus géleket eredményezett, amelyek a hőkezelés során könnyen repedeztek. Az ecetsav és víz együttes alkalmazásakor megfelelő szárítás után porózus kalcium-szilikát tömb keletkezett. A legjobb homogenitású és szilárdságú mintának az ecetsavval katalizált gélesedéssel előállított anyag bizonyult. A TEOS gélesedése tömbfraktál szerkezetet eredményezett savas közegben, melyet 600-700°C-ig is megőrzött, ez segítette elő az anyag koherens száradását, melynek a tömörebb, nagyobb szilárdságú anyagok kialakulásában van jelentősége. A jobb mechanikai szilárdság érdekében a mintákat különböző hőmérsékleteken szintereltük.

A keletkezett tömbök kémiai kötésrendszerét totál reflexió (ATR) fourier transzformációs infravörös spektroszkópiával (FTIR) igazoltuk, kisszögű röntgenszórással (SAXS), ultra kisszögű röntgenszórással (USAXS), valamint por-röntgendiffrakcióval (XRD) a szupramolekuláris szerkezetet határoztuk meg. A színtereléshez szükséges hőmérsékletet termoanalitikai mérésekkel (TG/DTA) állapítottuk meg. A tömbök keménységét penetrométerrel vizsgáltuk.

**Nem-kovalens kölcsönhatások szerepe a Gd(III)-aminopolikarboxilát komplexek egyensúlyi és kinetikai viselkedésében**

**Pálinkás Zoltán**, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Brücher Ernő** professor emeritus  
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Tudományos diákköri munkám során Gd(III)-aminopolikarboxilát komplexek egyensúlyi és kinetikai viselkedését tanulmányoztam.

Az orvosi diagnosztikában elterjedten használt MRI vizsgálatok során Gd(III)-aminopolikarboxilát komplexeket mint proton relaxációs reagenseket alkalmaznak kontrasztanyagként. A gadolínium(III)-komplexek és a vérplazmában található fehérjék között kialakuló nem-kovalens kölcsönhatások modellezésére a  $\beta$ -CD és a dtpa-bBza ligandum benzil csoportja közötti, ún. „gazda-vendég” kölcsönhatást használtuk fel. Arra voltunk kíváncsiak, hogy ezen kölcsönhatás milyen módon befolyásolja a Gd(III)-komplexek stabilitási állandóját, valamint a Cu(II)-ionokkal és ttha ligandummal lefolyó cserereakciók sebességét.

pH-potenciometriás módszerrel meghatároztuk a Gd(dtpa-bBza) stabilitási állandóját  $\beta$ -CD jelenlétében ( $\log K = 16,51$ ) és távollétében ( $\log K = 15,59$ ).

Spektrofotometriás módszerrel vizsgáltuk a  $\beta$ -CD hatását a Gd(dtpa-bBza) és a Cu(II)-citrát között lejátszódó fémioncsere reakció sebességére.

Megállapítottuk, hogy a komplex spontán disszociációjával a csere nem megy végbe, és meghatároztuk a protonkatalizált ( $k_1$ ) és a Cu<sup>2+</sup>-ion katalizált ( $k_3$ ) reakcióutakon lefolyó cserereakciók sebességi állandóit. A  $\beta$ -CD-nel kialakuló kölcsönhatás kismértékben megnöveli a komplex kinetikai inertségét.

Vizsgáltuk a Gd<sup>3+</sup> dtpa, eob-dtpa, bopta, dtpa-bBua és dtpa-bBza ligandumokkal képződő komplexei és a ttha közötti cserereakciók sebességét.

Megállapítottuk, hogy a pH növelésének gyakorlatilag nincs hatása a Gd(dtpa)<sup>2-</sup> és a Gd(bopta)<sup>2-</sup> komplexek ttha-val lejátszódó ligandumcsere reakciói sebességére. A dtpa-amid származék komplexek cserereakcióinak sebessége viszont egyértelműen nő a pH növekedésével, és ezen komplexek ligandumcsere reakciói sokkal gyorsabban játszódnak le, mint a Gd(dtpa)<sup>2-</sup>, vagy a Gd(bopta)<sup>2-</sup> reakciói. Ugyanakkor a cserereakciók sebessége jelentősen nő a ttha koncentráció növelésével. Ezek az eredmények azt mutatják, hogy a reakció a ttha közvetlen támadásával, egy vegyes-ligandumú köztitermék képződésével játszódik le.

**Kinetikailag labilis, vízoldható bizmut(III)-porfirin komplexek képződése, reakciókinetikai, fotofizikai és fotokémiai tulajdonságainak vizsgálata**

**Patonay Katalin**, V. évf. vegyészmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Horváth Ottó** tanszékvezető egyetemi tanár  
PE Általános és Szeretlen Kémia Tanszék  
**Valicsek Zsolt** PhD hallgató  
PE Általános és Szeretlen Kémia Tanszék

A különböző porfirinszármazékok és fém-komplexeik – különleges fényelnyelő, töltésközvetítő és koordinációs tulajdonságaik révén – jelentős szerepet játszanak az élővilágban (pl. a klorofill, a citokrómok és a hemoglobin). Fotoaktivitásukat pl. katalitikus folyamatokban [1a], gyógyászati célokra (egyes daganattípusok, bakteriális fertőzések fotodinamikus terápiája) [1b], vagy az analitika területén (optikai érzékelők) hasznosítják [1c].

A porfirin-komplexeik általában egy fémiont tartalmaznak a sík ligandum közepén, a négy nitrogénatom határolta magban. Ha azonban a fémion sugara meghaladja a 80 pm-t, túl nagy ehhez a térhez képest. Ekkor ún. *sitting atop* (SAT) komplex jön létre; ebben a központi fémion kiemelkedik a ligandum síkjából és torzítja is azt. Így ezek a koordinációs vegyületek sajátos fotofizikai és fotokémiai tulajdonságokkal rendelkeznek [2].

Mérete alapján a Bi<sup>3+</sup> ion (sugara 103 pm) is ilyen vegyületek kialakítására hajlamos. Munkám során egy anionos és egy kationos porfirinszármazék bizmut(III)-komplexeit vizsgáltam. Sikertült a hidrolízisre rendkívül hajlamos fémion 1:1 (fém:porfirin) összetételű komplexeit előállítani és egyensúlyi állandóikat meghatározni. Tanulmányoztam képződésük kinetikáját; a reakció mindkét porfirin esetében összetett folyamatnak bizonyult, melyben a végtermék egy másik, eltérő szerkezetű komplexen keresztül keletkezik. A kationos porfirin esetében ezt a köztiterméket olyan mennyiségben is elő tudtam állítani, hogy egyedi színképeit felvegyem.

A vizsgált vegyületek abszorpciós és emissziós színképében a szabad porfirinéhoz képest észlelt eltolódások és intenzitásváltozások alátámasztják, hogy SAT komplexekről van szó. Megerősíti ezt jellegzetes fotoindukált LMCT (ligandumról fémionra irányuló töltésátviteli) reakciójuk is.

[1]

a) Gerdes, R., Wöhrle, D., et al., *J. Photochem. Photobiol. A.*, **111**, 65-75. (1997)

b) Tabata, M., Sarker, A. K., Nyarko, E., *J. Inorg. Biochem.*, **94**, 50-58. (2003)

c) Smith, V. C., Batty, S. V., et al., *Thin Solid Films*, **284-285**, 911-912. (1996)

[2] Horváth, O., Huszánk, R., Valicsek, Z., Lendvay, G., *Coord. Chem. Rev.* **250**, 1792-1803. (2006)

**Al<sup>3+</sup>-glifozát komplexek vizes oldatban és Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-felületen**

**Takács Zoltán**, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Staffan Sjöberg** egyetemi tanár  
UmeåUniversity, Department of Inorganic Chemistry, Sweden  
**Dr. Tóth Imre** egyetemi tanár  
DE Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A glifozát (N-foszfonometil-glicin, PMG) egy széles spektrumu, nem szelektív herbicid, melyből gyomirtó hatásának felismerése óta (1971) több százszazer tonnát alkalmaztak a mezőgazdaságban. Fémekkel oldatban alkotott komplexei termodinamikai stabilitási állandóinak, szerkezetének, valamint a különböző ásványokon való adszorpciójának részletes ismerete elengedhetetlen, hiszen ezek befolyásolják hatékonyságát, toxicitását, lebomlását, ezáltal a környezetre gyakorolt hatását egyaránt.

A jelen munka a glifozát Al<sup>3+</sup> ionnal vizes oldatban képzett komplexeit, valamint a bayerit ásványon való adszorpcióját, felületi komplexeit vizsgálja. Célunk a stabilitási állandók meghatározása, valamint az adszorpció kvantitatív leírása. Vizsgálati módszereink közé tartozik a <sup>27</sup>Al és <sup>31</sup>P NMR, a potencimetrikus titrálás, a BET felület meghatározás és az ionkromatográfia.

Az Al<sup>3+</sup> ion vizes oldatokban stabilis komplexeket képez a PMG-nel. Méréseink bizonyítják, hogy dimer komplexek is képződnek. Kis pH értékeknél (1 < pH < 2,5) és 1:1 fém-ligandum aránynál a monomer, míg nagyobb pH-nál a dimer a kedvezményezett. Ligandumfelesleg szükséges az AlL<sub>2</sub> komplexek képződéséhez. A komplexek (de)protonálódási folyamatokban vesznek részt. A pH=4 feletti tartományok egyensúlyi vizsgálata nem lehetséges az Al(OH)<sub>3</sub>(s) csapadék képződése miatt. A dimer szerkezete nem ismert, de irodalmi analógiák alapján vélelmezhető, hogy Al<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>L<sub>2</sub> típusú a komplex. A <sup>31</sup>P NMR spektrumok nagyon jelgazdagak, ami izomerek keletkezését jelzi.

Adszorpciós kísérleteink megmutatták, hogy a glifozát erősen kötődik a bayerit felszínéhez. A pH=5-10 tartományban az adszorpció mértéke elérheti a 75-100 %-ot, egyezésben az elméleti megfontolásokkal, a kristály szerkezetével. A felületi komplexek képződése a Basic Stern 1pK<sub>a</sub> modellel jól leírható.

**Több hisztidint tartalmazó pentapeptidok nikkell(II)- és kobalt(II)komplexei**

**Timári Sarolta**, IV. évf. angol-kémia szak  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Várnagy Katalin** egyetemi docens  
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A Cu,Zn-szuperoxid-diszmutáz enzim aktív centrumának modellezésére csoportunkban több hisztidintartalmú pentapeptidet állítottak elő. Ezek közül az Ac-His-Ala-His-Val-His-NH<sub>2</sub>, az Ac-His-Gly-His-Val-His-NH<sub>2</sub> és az Ac-His-Val-His-Gly-His-NH<sub>2</sub> pentapeptidok komplexképző sajátságait tanulmányoztuk nikkell(II)- és kobalt(II)ionok jelenlétében. A kialakuló komplexeket pH-potenciometriás és UV-látható spektrofotometriás módszerekkel vizsgáltuk.

Méréseink alapján megállapítható, hogy mindkét fémion az imidazol nitrogénekhez koordinálódik. Savas pH tartományban a két hisztidinen keresztül történő koordináció az [MLH]<sup>3+</sup> komplex, a három hisztidinen keresztül történő koordináció pedig az [ML]<sup>2+</sup> komplex kialakulását eredményezi. Ez utóbbi koordinációs mód jelentősen megnöveli az [ML]<sup>2+</sup> komplex stabilitását. A korábbi eredmények alapján látható, hogy az [MLH]<sup>3+</sup> és [ML]<sup>2+</sup> komplexek stabilitási sorrendje a Cu<sup>2+</sup> > Ni<sup>2+</sup> > Zn<sup>2+</sup> > Co<sup>2+</sup> sorban csökken, ami megfelel az Irving-Williams sornak.

A nikkell(II)ionokat tartalmazó rendszerekben nagyobb pH-n a két amidnitrogén kooperatív deprotonálódása figyelhető meg. Az egymagvú komplexekben feltételezzük izomerek kialakulását. A ligandumok két nikkell(II)ion megkötésére is képesek. Fémionfelesleget tartalmazó oldatokban [Ni<sub>2</sub>LH<sub>-2</sub>]<sup>2+</sup>, [Ni<sub>2</sub>LH<sub>-4</sub>] és [Ni<sub>2</sub>LH<sub>-5</sub>]<sup>-</sup> komplexek keletkeznek, ahol a fémionok a hisztidin imidazolnitrogénjéhez és az amidnitrogénekhez koordinálódnak.

A kobalt(II)ionot tartalmazó rendszerekben a pH emelésével csapadék vált ki a töményebb oldatokban. Hígabb oldatokban nagyobb pH-n a [CoLH<sub>-2</sub>] komplex keletkezése feltételezhető, és az amidnitrogének deprotonálódása sem kizárható.

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

## Biokémia és biotechnológia tagozat



**Az Észak-budapesti Szennyvíztisztító Telep költségkímélő  
hatékonyságnövelésének kidolgozása folytonos üzemű, helyszíni  
modellkísérletben**

**Bakos Vince**, okleveles biomérnök  
BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Jobbágy Andrea** egyetemi docens  
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

Az Európai Unióhoz történő csatlakozás révén hazánkban is meg kell felelnie a tisztított szennyvíz nitrogéntartalmára vonatkozó szigorú határértékeknek. Az Észak-budapesti Szennyvíztisztító Telep jelenleg nem képes a lassan szaporodó, autotróf mikroorganizmusok által végzett nitrifikációra. A TDK kutatás célja a BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszéke által kidolgozott, más megoldások behurkázási költségének kb. feléért megvalósítható hatékonyságnövelési technológia legkritikusabb, téli üzemmódban (12-14 °C-os reaktorhőfok) való vizsgálata helyszíni, összehasonlító modellkísérletben, a befolyó szennyvíz közvetlen felhasználásával. Az egyik rendszer referenciaként szolgált, ez esetben nem történt vegyszeradagolás, viszont az eleveniszap koncentrációt már a javasolt üleptőkapacitás bővítésnek megfelelő, magas értéken tartottuk: *Referencia  $x=3,0 - 4,0$  g/l*. A másik két rendszerbe a befolyó szennyvízhez az előüleptés hatékonyságának növelésére vas(III)-kloridot adagoltunk és azokat kétféle iszap koncentrációval üzemeltettük: *Vegyszeres  $x=2,0 - 3,0$  g/l* ill. *Vegyszeres  $x=3,0 - 4,0$  g/l*. A bioreaktorok összterfoglata rendszerenként 13,3 l volt. A befolyó szennyvíz térfogatárama megfelelt a nagyüzemi rendszer átlagos hidraulikai tartózkodási idejének. A kapott eredmények azt támasztották alá, hogy a modell-rendszerekbeli szennyvíz hőmérsékletét 21 napon át 12-14 °C között tartottuk és a megfelelő biomassza koncentráció tartományokat is biztosítani tudtuk. Bizonyítást nyert az, hogy a vegyszeres előüleptés valóban csökkentette az eleveniszapos bioreaktorok terhelését, miáltal adott iszapkoncentráció mellett az iszapkor növekszik. Az adott befolyó szennyvízparaméter értékeknél az új, 30 mg/l-es összes nitrogén koncentráció határérték mindhárom vizsgált rendszerben teljesült. A referencia rendszerben azonban a megnövekedett terhelésű időszakban a tisztított szennyvíz  $\text{NH}_4\text{N}$  koncentrációja meghaladta az 5 mg/l-es határértéket. Mivel a szimulációs számítások során azt állapíthattuk meg, hogy a vizsgált időszakokban feltehetően nem történt olyan mértékű inhibíció, amely a biológiai lebontó folyamatokat figyelemre méltóan gátolta volna. Az eredmények minden tekintetben alátámasztották a csupán utóüleptő bővítéssel és a téli időszakban az előüleptőbe történő vegyszeradagolással elérhető, költségkímélő hatékonyságnövelés lehetőségét, és egyben példát szolgáltattak a szimulációs modellezés és a kísérletek egymást kiegészítő alkalmazásának módszerére és előnyeire.

**Nagy áteresztőképességű vektor fejlesztése preparatív fehérje *in vitro* transzlációhoz**

Géczy Viktória, VI. évf. biomérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Mészáros Tamás** tudományos munkatárs  
BME Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszék

Az utolsó évtizedek forradalmi változásokat hoztak a biológiai kutatásokban, és ezen keresztül a kapcsolódó tudományokban is. Napjainkra számos élőlény teljes genom szekvenciája ismertté vált, és több tízezer mRNS expressziós szintjének egyidejű mérése is rutin feladattá lett az RNS detektáló mikrochipek elterjedésével. Az ily módon beköszöntött posztgenomikus korszak kihívása a gének által kódolt fehérjék funkcionális tanulmányozása. A proteomikai kutatásokat sok esetben már az első lépés, a tanulmányozandó fehérje előállítása limitálja. Napjaink legígéretesebb fehérje előállító rendszerei *in vitro* transzláción alapulnak. Ezek közül is kiemelkedő jelentőségre tehet szert a búzacspira fehérjekivonaton alapuló fehérje bioszintézis, ugyanis ezzel a megközelítéssel lehet a legköltséghatékonyabb módon előállítani eukarióta fehérjéket.

Munkánkkal a jelenleg elérhető búzacspira *in vitro* transzlációs rendszer könnyebb alkalmazhatóságát kívántuk elérni. Ennek során létrehoztunk egy, a modern proteomika elvárásainak megfelelő *in vitro* transzlációs vektort. Az optimalizált vektor lehetőséget teremt bármely tetszőleges DNS szakasz gyors klónozására, sikeres *in vitro* transzlálás esetén pedig a fehérje egyszerű tisztítására is. A kifejlesztett vektor nem csak csoportunk további kutatásainak fehérje igényét hivatott kielégíteni, hanem szélesebb körben alkalmazható más, proteomikai vizsgálatokat végző laboratóriumokban is.

**Rezisztens almafajták a statisztika mérlegén**

**Kollár Zsófia**, V. évf. biomérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki kar

Témavezető: **Dr. Kemény Sándor** egyetemi docens  
BME Vegyipari Műveletek Tanszék

A modern társadalom élelmiszerekkel szemben támasztott elvárásai sok esetben ellentmondanak egymásnak. Egyrészt állandó törekvés a vegyszer- és adalékanyag felhasználás csökkentése, másrészt bizonyos minőség állandó biztosításához az élelmiszeripari adalékok és a mezőgazdasági termelésben a megfelelő növényvédelem elkerülhetetlen.

A fentiek fényében dolgozatomban arra keresi a választ, hogy vajon a hazánkban termesztett Re-almák eladhatók-e az asztali-gyümölcs piacon. Ezek az almafajták a magyar mikroklíma speciális hatására az egyéb helyen termesztetteknél sokkal jobb tulajdonságúak, és természetük – mint minden Re-almáé – az egyéb fajtáknál jóval kevesebb vegyszert igényel.

Munkámmal 2004-ben egy olyan projektbe kapcsolódtam be, mely során nem csak az almákra vonatkozó fogyasztói igényeket mérjük fel, hanem egyidejűleg tárolási kísérletek és szakértői érzékszervi vizsgálatok is folynak.

A fogyasztói igények és elégedettség vizsgálata – az óriási adathalmazok feldolgozása és értékelése miatt – hatékony informatikai támogatással végzett matematikai statisztikai elemzéseket igényel. Csapatunk három egymást követő évben több mint 3000 embert vont be a fogyasztói tesztekbe és az ezekhez kapcsolódó interjúba. Munkám így három fő részre tagolódott:

- Részt vettem a Re-almákra vonatkozó adatgyűjtésben, mind a kérdőívek kialakításában, mind pedig a kiállításokon való rangsorolós tesztek és fogyasztói interjúk lebonyolításában.
- Az adathalmazok feldolgozásához és statisztikai értékeléséhez Visual Basic for Excel és Visual Basic for Statistica szoftvereket készítettem
- A szoftverekkel elvégeztem a 2004. és 2005. évi adatok teljes szűrését, valamint feldolgoztam és értékeltem a bírálóktól származó adatokat tartalmazó interjúkat

A statisztikai elemzés során elsősorban nemparaméteres módszereket alkalmaztam (multinomiális  $\chi^2$ -próba, Spearman-féle rangkorreláció, Kruskal-Wallis-próba). Logit-regresszióval valamint az általam definiált egyszerű mutatóval (preferencia-index) vizsgáltam a rezisztens almák fogyasztói elfogadottságát. Mindkét utóbbi módszer alapján megállapítottam, hogy a Re-almákat a fogyasztók bírálataik szerint szívesen fogadnák asztali almákként is.

**Új célfehérje a *Mycobacterium Tuberculosis* ellen, a MT-dut klónozása, karakterizálása és kristályosítása**

Nagy Nikolett, V. évf. biomérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

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

Munkám célja a *Mycobacterium tuberculosis* dUTP-áz enzimének karakterizálása és kristályosítása volt, valamint olyan szűrőmodszerek kidolgozása, melyek közepes illetve nagy áteresztő képességűek, így segítségükkel gyorsan és hatékonyan tudjuk szűrni a TBC dUTPáz-a ellen ható lehetséges antagonistákat.

Az eredmények a következők:

1. Sikeresült klónozni a natív fehérjét, az expresszió jónak mondható.
2. A fehérje katalitikus aktivitása igen alacsonynak bizonyult, de Mg ion jelenlétében az aktivitás növelhető.
3. A ligandindukált konformáció változás CD spektroszkópiával kimutatható.
4. Limitált tripszinolízissel azonosítottam az  $\alpha$ ,  $\beta$ -imino dUTP ligand által védett peptidkötést az enzimen belül.
5. Az enzimaktivitás mérése, valamint a limitált tripszinolízis módszere, nagyszámú antagonistá szűrésére alkalmazható. Mindkét esetben hozzávetőlegesen naponta 10 antagonistá vizsgálható.
6. Kilenc, részben különböző kicsapó ágens mellett, jól diffraktáló fehérje kristályokat nyertem. A számos különböző körülmény rendkívül ígéretesnek bizonyult, mivel valószínűsíthető, hogy ezek közül egy vagy több az antagonistákkal együtt kristályosítandó fehérje esetében is célravezető lesz.

**Daunomicin tartalmú oligoarginin konjugátumok szintézise és hatása Human leukémia (HL-60) tumorsejtekre**

**Peregi Balázs**, IV. évf. biológia-kémia  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Prof. Dr. Hudecz Ferenc** egyetemi tanár  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

**Bánóczy Zoltán**  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

A daunomicin hatásos, klinikumban alkalmazott szer különböző tumoros megbetegedések gyógyításában, azonban jelentős kardiotoxicitással rendelkezik. Hosszú ideig történő alkalmazása során pedig a rákos sejtekben rezisztencia alakulhat ki. Az oligoargininek a sejtpenetráló peptidok családjába tartoznak. Ezek a peptidok a hozzájuk kapcsolt vegyületeket bejuttatják a sejtekbe. Munkám során a daunomicin mellékhatásainak csökkentése érdekében a daunomicin szukcinilezett származékát oligoargininekhez konjugáltam. Irodalmi adatok szerint először kapcsoltam kovalens kötéssel tetra- és oktargininhez, mint hordozó peptidhez szukcinilezett daunomicint. A peptidokat szilárd fázison (Rink-amid gyantán) építettem fel, majd RP-HPLC-n megtisztítottam, és jellemeztem MS és analitikai RP-HPLC segítségével. Módszert dolgoztam ki a szukcinilezett daunomicin amid kötésen keresztül történő kapcsolására az oligoargininek N-terminális amino-csoportjához oldat fázisban. A célvegyületeket RP-HPLC-n megtisztítottam, majd MS és analitikai RP-HPLC segítségével jellemeztem.

A konjugátumokkal végzett stabilitási vizsgálatok azt mutatták, hogy a sejtes vizsgálatok körülményei között a konjugátumok megőrzik szerkezetüket, kellően stabilak. Tumorelles határuk in vitro vizsgálata során megállapítottuk, hogy az oktargininnel történő konjugálás után a daunomicin származék megőrzi a citosztatikus hatását. Ugyanakkor a tetraargininnel történő konjugálás rontotta a szukcinilezett daunomicin hatását. A konjugátumok hatásának vizsgálata MDR rezisztens tumorsejteken folyamatban van. A konjugátumokkal sejtbefutási vizsgálatokat végeztünk mind szenzitív mind rezisztens sejtekkel áramlási citométer segítségével. A konjugátumok sejtbefutása koncentrációfüggést mutatott. Alacsony koncentrációtartományban a tetraarginin tartalmú konjugátum nem mutatott sejtbefutást. Azonban magas koncentráció tartományban a sejtbefutása az oktaarginin tartalmú konjugátumnál is hatékonyabb volt. A tetraarginines konjugátum rosszabb citosztatikus hatása összefügg azzal, hogy csak nagy koncentráció esetén tapasztalunk sejtbefutást. Annak magyarázata, hogy miért jut be jobban a tetraarginines konjugátum magasabb koncentrációnál, további vizsgálatok elvégzését igényli.

**Genetikailag módosított kukorica DNS alapú meghatározása**

**Pézsza Nikolett**, V. évf. biomérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Szarka András** egyetemi adjunktus  
BME Biokémiai és Élelmiszertechológiai Tanszék

Napjaink egyik legaktuálisabb biotechnológiai, táplálkozási, élelmiszeripari problémája a genetikailag módosított termékek élelmiszerként történő felhasználása. Az idegen eredetű DNS szekvencia bevitele egyelőre még meg sem jósolható következményekkel járhat. Így érthető, hogy az Európai Unió rendelkezett a 0,9%-nál magasabb részarányban genetikailag módosított anyagot tartalmazó termékek jelöléskötelezettségéről. A jelöléskötelezettség miatt komoly igény jelentkezett pontos DNS alapú mennyiségi élelmiszeranalitikai eljárások kifejlesztésére. Célunk olyan DNS alapú analitikai eljárások kifejlesztése volt, amelyek alkalmasak a genetikailag módosított anyagok kimutatására nyersanyagokból, valamint különböző feldolgozottsági szintű termékekből.

A kísérletes munka során különböző DNS izolálási technikák segítségével DNS-t nyertünk az egyik legfontosabb ipari növényből a kukoricából, valamint a belőle készült különböző termékekből. A genetikai manipuláció detektálását minőségi PCR analízis, valamint a mennyiségi DNS meghatározást lehetővé tevő real-time PCR segítségével végeztük.

**Egy acilaminoacil-peptidáz szubsztrátkötő helyének röntgendiffrakciós vizsgálata: szélesebb specifitást igazoló kísérlet**

**Rádi Krisztina**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

**Hornung Balázs**, III. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Harmat Veronika** tudományos segédmunkatárs  
MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport  
**Sztáray Bálint** egyetemi adjunktus  
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

A biomolekulák hidrolízisét katalizáló szerin-peptidáz család alcsaládját alkotják a prolin-oligopeptidázok. Közéjük tartozik az acilaminoacil-peptidáz-csoport (APH). Tagjai számos alacsony- és magasrendű élőlényben előfordulnak, többek között az emberben is. Az ingerületátvivő foszfát-észter típusú molekulák ezen enzimek specifikus szubsztrátjai, ezért a tudat kémiai folyamataiban jelentős szerepe lehet az enzimeknek. Kimutatták, hogy hiánya összefügg a vesében és tüdőben kialakuló kissejtes rákkal. Az acilaminoacil-peptidázok közül eddig egyedül az *Aeropyrum pernix*-ben előforduló acilaminoacil-peptidáz, az apAPH szerkezetét írták le.

Munkánk során az enzim AcPhe és GlyPhe inhibitorokkal alkotott komplexének röntgendiffrakciós szerkezetét határoztuk meg. Ezáltal elsőként írhattuk le az acilaminoacil-peptidázok valós szubsztrát kötésének szerkezeti jellemzőit. Igazoltuk, hogy a hidrolizálendő molekulát apoláros szubsztrátkötő helyek rögzítik az enzimhez. Továbbá feltérképeztük a második szubsztrátkötő helyet és javaslatot tettünk a harmadik és negyedik zseb helyére. Az enzim szerkezetének vizsgálatakor felmerült, hogy endopeptidáz aktivitást mutathat. Az enzim mutánsát, együttkristályosítottuk egy oligopeptid szubsztráttal, amelyet az enzim elhasított. E szerkezettel igazoltuk az endopeptidáz aktivitást és leírtuk a harmadik szubsztrátkötő helyet. Az észlelt fenilalaninban dús régió magyarázatot ad az apAPH hidrofób aminosavakat, elsősorban a fenilalanint tartalmazó oligopeptideknél mutatott szokatlan endopeptidáz aktivitására.

**Kemotaxisra épülő irányított gyógyszer célbajuttatás vizsgálata DD monocitákkal**

**Tarcsay Ákos**, IV. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kőhidai László** egyetemi docens  
SE Genetikai, Sejt- és Immunbiológia Intézet

**Dr. Láng Orsolya** egyetemi tanársegéd  
SE Genetikai, Sejt- és Immunbiológia Intézet

Konzulens: **Dr. Sveiczter Ákos** egyetemi docens  
BME Mezőgazdasági Kémiai Technológia Tanszék

Napjainkban a sebészeti beavatkozások és a sugárterápia mellett egyre nagyobb szerepet játszik a kemoterápia a daganatos betegségek gyógyításában. Ezen gyógyszerek egy új csoportja célzott terápiát alkalmaz, melynek során adott sejtekre fejti ki hatását specifikus kapcsolódások révén. A GSI SE, Kemotaxis Munkacsoport által szabadalmi eljárás alatt álló technika a mobilis sejtek kemotaktikus mozgására építve specifikus receptor-ligandum kölcsönhatások segítségével tervezi gyógyszerek célbajuttatását.

Méréseim során a humán, leukémiás, monocita (DD) sejtvonal kemotaxisának első vizsgálatait végeztem el. A vizsgálatok célja, citosztatikumot (methotrexat) tartalmazó konjugátumok sejtekhez való eljuttatásának modellezése volt. A célsejt-specifitást biztosító kemotaktikus ligandumok bakteriális formilált tripeptidek (fMLF, fNLeF) voltak. A hordozó-molekula szerepét egy oligopeptid, a tetratuftsin (T20) töltötte be, s ehhez kapcsolódott az említett methotrexat (MTX) molekula is. Eredményeim szerint a legerősebb kemoattraktáns hatást a hordozó molekulaként alkalmazott T20 mutatta, de a vizsgált két gyógyszer tartalmú konjugátum esetében is kemoattraktáns hatást tapasztaltam.

A kemotaktikus gyógyszer célbajuttatás során a kemotaktikus ligandumok által kifejtett citosztikus hatást citotoxicitási vizsgálatokkal mértem. Ennek eredményei a szerint az attraktáns hatású konjugátum megtartotta a gyógyszerre jellemző hatását.

A kemotaktikus ligandumok térszerkezete és a kiváltott biológia jelenség között felismert összefüggéseink alapján kezdtem meg a vizsgált ligandumok számítógépes molekulaszervezeti modelljeinek elkészítését molekula mechanikai számításokkal. E vizsgálatokkal magyarázatot sikerült adni a formilált peptidek konjugátumokban is megőrzött kemotaktikus hatására.



**Az uracil DNS-hiba molekuláris felismerésének vizsgálata**

**Tóth Ágnes**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Fuxreiter Mónika** tudományos főmunkatárs  
MTA SZBK Enzimológiai Intézet

Az élő szervezetek számára elengedhetetlen a DNS épségének megőrzése. Mivel naponta kb. 10000 DNS-hiba keletkezik minden egyes sejtben, ezért hatékony DNS-hibajavító mechanizmusok alakultak ki az evolúció során. Kérdés, hogyan képesek a fehérjék a DNS-kódot „olvasni”, olyan állapotban, mikor a kölcsönható partnerek teljesen hidratáltak és közöttük közvetlen kapcsolat nincs. Feltételezésünk szerint létezik egy általános DNS-felismerési mechanizmus, mely minden DNS-szekvencia/hely azonosítására alkalmazható. Munkám során olyan molekuláris tulajdonságokat kerestem, melyek információt hordoznak a fehérje számára a DNS összetételéről a felismerés korai szakaszában, anélkül, hogy specifikus kötés-mintázat kialakulna. E célból az U és T hibát tartalmazó DNS molekulák statikus és dinamikus szerkezeti tulajdonságait, valamint hidratációs sajátosságait tanulmányoztam molekuladinamikai szimulációk segítségével és megkísérreltem összefüggéseket felállítani a hiba jelenlétével, valamint a hibát javító uracil-DNS-glikoziláz (UDG) enzim felismerési mechanizmusával. Eredményeim alapján a hibás bázist tartalmazó DNS-molekulák lényegesen nagyobb flexibilitással rendelkeznek, mint az ép szekvencia. A sérült DNS molekulák deformálhatósága különösen azon koordináták mentén kiemelkedő, melyek irányába jelentős konformáció-változás történik az UDG-vel történő komplex kialakulásakor. Az U bázishiba felismerését segíti, hogy a hiba körüli foszfátcsoportok összenyomhatóbbak, mint az ép bázisnál, melyek deformálása a DNS meghajlásához vezet, ezzel megkönnyítve a báziskinyílás folyamatát. A DNS-sel való asszociáció során először a DNS hidratáburkával lép kölcsönhatásba a fehérje, melynek kitüntetett szerepe lehet a felismerés ezen fázisában. A DNS-t hidratáló víz szerkezete és kötéserőssége erős szekvencia-függést mutat. A vízmolekulák a hibás bázis környezetében lazábban kötődnek, azaz könnyebben helyettesíthetők a komplex kialakulásakor. A hibával szomszédos foszfátcsoportok hidratációs száma is lényegesen csökken az ép szekvenciához képest, tehát első kapcsolódási pontként működhetnek. Munkám során tehát két olyan tényezőt sikerült azonosítanom, amelyek a hibás DNS-szakaszok korai felismerését segítik. Az egyik a DNS-t körülvevő víz szekvenciafüggő mintázata és kötéserőssége, amely ún. „hidratációs ujjlenyomat-ként” szolgálhat a fehérje számára. A másik pedig a hibás DNS-ek nagyobb lokális flexibilitása, mely energetikailag kedvezőbbé teszi a komplex-képződés folyamatát.

**Feltételezeten működő enzimek igazolása humán szérumban és patkánymáj lizoszóma-preparátumban**

**Varga Renáta**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Hudecz Ferenc** egyetemi tanár  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

**Dr. Tugyi Regina** tudományos munkatárs  
MTA Kémiai Kutatóközpont

Munkám során humán szérumban, illetve patkánymáj lizoszómapreparátumban működő enzimek vizsgálatával foglalkoztam. Ehhez enzim inhibitoros kísérleteket végeztem el két biológiailag aktív, epitóp sajátosságokkal rendelkező modell peptid felhasználásával. Az egyik a mucin 2 (MUC2) glikoproteinből származó <sup>15</sup>TPTPTGT-QTPT<sup>25</sup> epitóp szakasz volt, míg a másik a Herpes Simplex vírus 1 (HSV-1) D glikoprotein egyik epitóp peptidje: <sup>278</sup>LLEDPVGTVA<sup>287</sup>.

Korábbi kutatások során a fent említett epitóp tulajdonsággal rendelkező peptidok stabilitását vizsgálták ebben a két komplex biológiai mátrixban, és a peptidok bomlásprofilja alapján feltételezéseket tettek a hasításokat végző enzimekre [1].

Munkám célja az volt, hogy a feltételezett enzimek részvételét a peptidok lebontásában inhibitoros vizsgálatokkal igazoljam - vagy megerősítő eredmény hiányában elvessem. Ennek érdekében először irodalmi adatokat kerestem a feltételezett enzimek specifikus inhibitoraira, illetve azok hatásos koncentrációjára.

Következő lépésként optimalizáltam a kísérleti körülményeket, mely magában foglalta az inhibitorok oldhatóságának vizsgálatát, illetve a megfelelő inhibitor-koncentrációk beállítását.

Humán szérumban vizsgáltam a dipeptidil peptidáz IV, az aminopeptidáz N és a leucin aminopeptidáz közreműködését a peptidok lebomlásában, míg lizoszómapreparátumban a prolil karboxipeptidáz, a neprilizin, illetve a tripeptidil peptidáz I és a katepszin D szerepét vizsgáltam.

Az inhibitorok hatására bekövetkező változásokat a lebomlásban RP-HPLC segítségével követtem, a fragmenseket tömegspektrometriás módszerrel azonosítottuk. Az eredményekből következtetéseket vontam le a feltételezett enzimek részvételére vonatkozóan.

Összességében megállapítható, hogy a legtöbb esetben minden bizonnyal a feltételezett enzimek végzik a hasítást. Minden esetben szükséges azonban további kísérleteket elvégezni izolált enzimekkel, illetve jól definiált enzim-keverékekkel a feltételezések és következtetések végső igazolására vagy cáfolására.

[1] Tugyi Regina: *Doktori értekezés*, (2005)

**Mozgékony fehérje térszerkezeti elemek konformációs egyensúlyának vizsgálata („Izgága”  $\beta$ -redők)**

**Várnai Csilla**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Perczel András** egyetemi tanár  
ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium  
**Kiss Róbert** doktorandusz  
ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium

A fehérjefeltekeredés és -kitekeredés kritikus pontja a biológiai aktivitás szabályozásának. Az egyre jobban megismert konformációs vagy „aggregációs” betegségek közös jellemvonása a hibásan vagy részlegesen feltekeredett fehérjék aggregációja. Erre jó példa az Alzheimer- és a Parkinson-kór, melyben a kitekeredett fehérjék – kikerülve a sejt védekező mechanizmusa alól – oldhatatlan plakkokat képeznek a sejtben illetve sejtközi térben. Az aggregációs, ún. amiloid betegségekben alapvetően hasonló szerkezetűek az aggregátumokat felépítő amiloid szálak; törzsszerkezetük  $\beta$ -redőzött rétegekből formálódik, amelynek szálai gyakran merőlegesek az amiloid szál fő tengelyére. Ahhoz, hogy hatékonyan küzdhessünk ezek ellen a betegségek ellen, fontos, hogy megértsük a fehérjefel- és kitekeredés atomi szintű mechanizmusát, s ehhez elengedhetetlen a peptidok illetve fehérjék konformációs egyensúlyának kvantitatív vizsgálata.

E munka keretein belül  $\beta$ -redőzött réteg térszerkezetű modellpeptidek (Betanova [1] és SETE [2]-származékok) konformációs egyensúlyát vizsgáljuk. Homonukleáris NMR-spektrumok analízisével nyert  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  NOE-kényszerfeltételek segítségével molekuladinamikai számításokat végeztünk a modellpeptidekre, valamint a homonukleáris NOE-keresztcsúcsok vizsgálatát végeztük el a Betanova esetében *ab initio* módon kiszámolt feltételezeten ideális térszerkezetű poli(Ala) modell esetén várható NOE keresztcsúcsokkal való összehasonlítással. Modellpeptideinken történő vizsgálaton keresztül igazoljuk a konformációs egyensúly meglétét, valamint arra a következtetésre jutottunk, hogy ennek pontos megértéséhez *ab initio* számításokon alapuló módszer szükséges, s bemutatunk egy, a  $\beta$ -redőzött réteg térszerkezetű peptidok konformációs egyensúlyának kvantitatív vizsgálatára alkalmas új módszert.

[1] Kortemme T., Ramírez-Alvarado M., Serrano L., *Science*, 281, 253 (1998)

[2] Santiveri C. M., Pantoja-Uceda D., Rico M., Jiménez M. A., *Biopolymers*, 79, 150 (2005)

# Kémiai technológia tagozat

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

**Módosított diszpergens adalékok motorolaj kompozíciókban kifejtett hatásának vizsgálata**

**Beck Ádám**, okleveles vegyészmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Bartha László** tanszékvezető egyetemi tanár  
PE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék  
**Sági Richárd** okl. vegyészmérnök  
PE Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

A legújabb műszaki-, gazdaságossági- és környezetvédelmi követelményeket is kielégítő motorolajokat a korábbinál kisebb fém-, kén- és foszfortartalmú adalék-kompozíciókkal kell a jövőben előállítani. A kutatás fontos feladata az utóégető katalizátorokat károsító jelenlegi adaléktípusoknak új, de hasonlóan hatékony adalékokkal történő kiváltása. A jövőbeni megoldások egyike lehet különböző vegyületekkel módosított, többfunkciós poliizobutilén (PIB)-szukcinimidek előállítása és ezek felhasználása a formulázások során.

Ezért kutatómunkám célja az volt, hogy a Tanszéken előállított molibdénkomplexszel, kén- illetve kalciumvegyülettel módosított (PIB)-szukcinimidek felhasználásával olyan motorolaj kompozíciókat állítsak elő, amelyek a lehető legkisebb adalék-tartalom mellett is hasonló vagy kedvezőbb tulajdonságokkal rendelkeznek, mint a kereskedelmi forgalomban kapható, közepes teljesítményszintű motorolaj formulák. Kutatásaim során különböző módosított diszpergens adalékok alkalmazásával és eltérő koncentrációarányok mellett vizsgáltam a motorolajok detergens-diszpergens hatékonysága, termikus- és oxidációs stabilitása, valamint a kopás- és súrlódáscsökkenő hatása, illetve a kompozíciók összetétele között összefüggéseket.

Az elvégzett hatásvizsgálatok alapján megállapítottam, hogy megfelelő mennyiségi arányok mellett alkalmazva a kereskedelmi és a módosított (PIB)-szukcinimideket kiválaszthatók olyan motorolaj kompozíciók, amelyek – detergens és kiegészítő antioxidáns adalék nélkül is – hasonló tulajdonságokkal rendelkeztek, mint a kereskedelmi, közepes teljesítményszintű motorolajok. Továbbá sikerült a környezetvédelmi szempontból kedvezőtlen tulajdonságú cink-dialkil-ditiofoszfát (ZnDDP) típusú antioxidáns és kopásgátló adalék koncentrációját felére csökkenteni jelentősebb hatékonyságromlás nélkül.

**Gyógyszerhatóanyagok resolválása szuperkritikus extrakcióval**

**Bóna-Lovász Judit**, okleveles biomérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Simándi Béla** egyetemi docens  
BME Vegyipari Műveletek Tanszék

Munkámban *2-(4-izobutil-fenil)-propionsav* (ibuprofén) és *N-metil-1-fenilpropán-2-amin* (metamfetamin) resolválhatóságát vizsgáltam. Kísérleteimben a resolválások során elválasztási műveletként szuperkritikus extrakciót alkalmaztam, amelynek lényege, hogy az extraháló oldószer szuperkritikus állapotú szén-dioxid.

Az ibuprofén resolválásánál részletesen megvizsgáltam a mintaelőkészítésnél használt oldószerek minőségének, illetve a hordozó mennyiségének hatását a resolválás eredményességére. Tanulmányoztam továbbá az oldószermentes mintaelőkészítéssel történő enantiomer elválasztást egy tisztább technológia alapjainak kifejlesztése céljából.

Mindkét vegyületnél kipróbáltam egy új eljárást, az ún. „holland resolválás”-t, amelynek lényege, hogy több rokon szerkezetű resolválószert adva a racém vegyülethez nagyobb tisztaságú termék várható.

Az ibuprofén resolválása során (reszolválószert: R-(+)-feniletilamin, extrakciós paraméterek: 150 bar, 33 °C) a mintaelőkészítésnél használt oldószer jelentős hatással volt a termelésre és az enantiomertisztaságra. Az alkalmazott hordozó mennyisége befolyásolta a látszólagos oldékonyságot. A nagy mennyiségű hordozót alkalmazó resolválás irodalmi érték feletti látszólagos oldékonyságot eredményezett. Az oldószermentes mérések esetében kristályosodási körülmények (kristályosodási idő, hőmérséklet) a resolválás eredményességében meghatározónak bizonyultak.

A metamfetamin resolválásánál (160 bar, 39 °C) három resolválószert keverékét próbáltam ki: a (2*R*, 3*R*)-(-)-borkósavat (BS), (2*R*, 3*R*)-(-)-*O,O'*-dibenzoil-borkósav monohidrátot (DBBS) valamint a (2*R*, 3*R*)-(-)-*O,O'*-di-paratoluil-borkósavat. Azt tapasztaltam, hogy a DBBS resolváló képessége a mólarány függvényében maximum görbe mentén alakul. A leghatékonyabb elválasztás 0,25 mólaránynál érhető el. A BS minden mólarányánál kismértékű resolválást eredményezett. A kutatás eredményeiről két nemzetközi publikáció készült [1,2].

[1] P. Molnár, E. Székely, B. Simándi, S. Keszei, J. Lovász, E. Fogassy, *Journal of Supercritical Fluids*, **37**, 384-389, (2006)

[2] I. Kmezc, B. Simándi, E. Székely, J. Lovász, E. Fogassy, *Chirality*, (közlésre elfogadták)

**PVC hulladékok kezelése: termikus és katalitikus bontás módosított hidrotalcit eredetű katalizátorok jelenlétében**

**Faragó Tímea Zsanett**, V. évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

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

Napjainkban a műanyagokat nagy mennyiségben gyártjuk, az élet minden területén általánosan használjuk, így egyre nő a hulladékba kerülő mennyiségük is. A használat szempontjából kedvező, de a hulladékkezelés vonatkozásában kedvezőtlen bomlási tulajdonságaik miatt a műanyag hulladékok ártalmatlanítása még nem megoldott, ezért jelentős környezeti terhelést jelent. A klórtartalmú műanyag hulladékok ártalmatlanítását kiemelt figyelem kíséri, mivel a kezelés során veszélyes átmeneti termékek képződhetnek. A műanyagok pirolízise az egyik legjobb módszer a kevert műanyag hulladékok ártalmatlanítására és energiaként való újrahasznosítására. A pirolízis szilárd anyagok (pl. töltőanyagok, katalizátorok) jelenlétében más termékspektrumot eredményezhet, mint a homogén reakció, ezáltal jobban szabályozható.

Munkám során a PVC hulladékok ártalmatlanításának egyik lehetséges technikájával, a katalitikus bontással foglalkozom. A PVC ártalmatlanítás veszélyének oka a klórtartalom, illetve, hogy a nem megfelelő hőmérsékleten (1200 °C alatt) történő hőkezelés során környezet- és egészségkárosító anyagok (pl. dioxinok) keletkeznek. A katalitikus bontás vizsgálatában gyári ill. különböző fémionokkal ( $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ) módosított Mg-Al-hidrotalcit, ill. hidrotalcit alapú vegyesoxid katalizátorokat alkalmaztam. Termikus analitikai mérésekkel követtem a lejátszódó folyamatokat, majd laboratóriumi állóágvas reaktorban, 400 °C hőmérsékleten, nitrogénáramban végeztem a bontást. A gáznemű termékek analízisét gázkromatográfiásan, a mineralizált klór meghatározását NaOH-os csapdázással, argentometriásan végeztem.

A termikus analitikai mérések bizonyították, hogy a PVC termikus bontása két lépcsővel jellemezhető folyamat; katalizátorok jelenlétében a reakció hőmérséklete alacsonyabb, mint a pirolízis során alkalmazott hőmérséklet. Ugyanakkor a HCl valamennyi esetben teljes mértékben eltávozik a rendszerből, így a később távozó szerves származékok már nem tartalmaznak klórt, és újrahasznosításuk mind energiaként, mind pedig nyersanyagként lehetséges.

Laboratóriumi reaktorban vizsgáltam a gyári PVC por, a lágyítót tartalmazó PVC kábelburkolat és a PVC/PP 1:1 arányú keverékének termikus és katalitikus bomlási tulajdonságait. Érdekes kiemelni, hogy amíg a gyári PVC por esetében a Fe-Mg-Al vegyesoxid jelenlétében végzett bontás során marad vissza a legkevesebb koks, addig a PVC kábelburkolat esetén a katalizátor nélküli, ill. a Mg-Al vegyesoxid katalizátor mellett kapunk hasonló eredményt.

**Fél-len szövetek folyékony ammóniás kezelése és műgyantás kikészítése**

**Kis Andrea**, VI. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Csiszár Emília** egyetemi docens  
BMEgyetem Műanyag- és Gumiipari Tanszék  
**Dornyai Barbara** doktoráns  
BME Műanyag- és Gumiipari Tanszék

A textilkikészítésben a folyékony ammóniás duzzasztást elsősorban pamutból készült textíliák tulajdonságainak javítására alkalmazzák, főként a könnyű kezelhetőség, a simára száradás, a jó gyűrődésseljáró képesség, a mérettartás, a megfelelő szilárdsági tulajdonságok, a fogás és a kopásállóság egyensúlyának kialakítására. Az elérhető kedvező tulajdonságok miatt különösen indokolt, hogy a folyékony ammóniás kezelés hatását fél-len szövetek esetében is megvizsgáljuk. A Műanyag- és Gumiipari Tanszék Textilkémiai laboratóriumában 2000 óta foglalkoznak a lenszövetek folyékony ammóniás kezelésével. Részletesen vizsgálták már a 100 % len tartalmú szövetek folyékony ammóniás kezelése során elérhető eredményeket. Én három éve kapcsolódtam be a kutatómunkába. Feladatom fél-len (pamut/len) szövetek tulajdonságainak jellemzése volt.

TDK dolgozatomban tehát fél-len szövetek folyékony ammóniás kezelésével és műgyantás kikészítésével foglalkoztam. A kísérleti munka első részében három fél-len szövetet vizsgáltam folyékony ammóniás kezelés előtt és után. Mértém a szövetek szilárdsági jellemzőit, használati tulajdonságait, a szubmikroszkópos szerkezetben bekövetkezett változásokat, valamint a színváltozást.

A munka második részében a folyékony ammóniával kezelt fél-len szövetek műgyantás kikészítésével foglalkoztam. Két különböző műgyantát használtam, és vizsgáltam a kondenzálás (száraz, nedves) és a vegyszerkoncentráció hatását a szövet-tulajdonságokra.

Kísérleti eredményeim alapján egyértelműen megállapítható, hogy fél-len szövetek műgyantás kikészítését kizárólag nedves kondenzációs eljárással, és a vegyszergyártó javaslatához képest kismértékben csökkentett vegyszerkoncentrációval célszerű megvalósítani. A folyamat során elsősorban a nedves gyűrődésseljáró képesség és a simára száradás javulása várható. Folyékony ammóniás előkezelés alkalmazása mérsékli a szilárdsági jellemzők romlását és javítja a gyűrődésseljáró képességet.



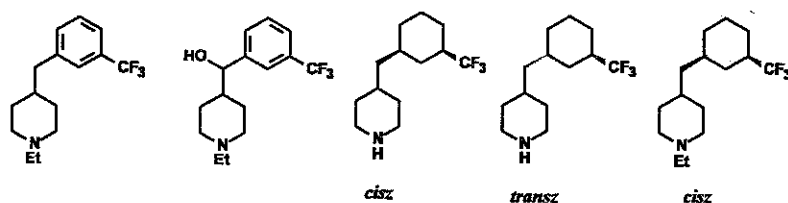
### Aril-piridil-metanolok katalitikus redukciójának vizsgálata

**Komáromi Anna**, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Ágai Béla** egyetemi docens  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Vida László** tudományos munkatárs  
BME Kémiai Technológia Tanszék

A Szerves Kémiai Technológia Tanszéken egyszerű, jól általánosítható, méretnövelhető eljárást dolgoztak ki a gyógyszeripar fontos intermedierjének számító helyettesített benzilpiperidinek szintézisére. Feladatom a Grignard-reakcióval előállított aril-piridil-metanolok Heraeus K 0128 típusú 10%-os Pd/C katalizátorral történő hidrogénezésének technológiai célú vizsgálata volt. A korábban alkalmazott Montecatini és Selcat katalizátorok esetében elő nem forduló mellékreakciókat tapasztaltam etanos oldatban. Megállapítottam a melléktermékek szerkezetét (GC-MS, IR,  $^1\text{H-NMR}$ ).



Javaslatot tettem az eddig ismeretlen N-etilezési reakció mechanizmusára. Kidolgoztam a redukció vizes oldatban történő megvalósítását, elimináltam a mellékreakciókat. Sikeresen bizonyítottam a katalizátor többszöri, aktivitáscsökkenés nélküli felhasználhatóságát. A feldolgozásban oldószer váltással környezetvédelmi, biztonságtechnikai és munkaegészségügyi szempontok szerint tettem kedvezőbbé a technológiát. Végrehajtottam a redukció méretnövelését 0,2 mólos méretig 850 ml autoklávban. Rendszert állítottam össze izobár körülmények biztosítására.

**Komplex vegyipari műveletek tervezése  
Szakaszos reaktív desztilláció****Lukács Tímea Gizella**, okleveles biomérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki KarTémavezetők: **Dr. Lelkes Zoltán** egyetemi docens  
BME Vegyipari Műveletek Tanszék**Dr. Rév Endre** egyetemi docens  
BME Vegyipari Műveletek TanszékKonzulens: **Stéger Csaba** doktoráns  
BME Vegyipari Műveletek Tanszék

A vegyipari műveletek hatékonyságnövelésének egyik lehetősége a már létező eljárások kombinációja, hibrid megvalósítása. A reaktív desztilláció azon hibrid művelet, amely során a reakció és a desztilláció egyazon berendezésben történik. A két művelet ötvözésével csökkenthetők a beruházási költségek, a melléktermékek mennyisége és jobb kihozatal, illetve nagyobb szelektivitás érhető el [1]. A hibrid műveletek széleskörű elterjedését gátolja a kapcsolt műveletek miatti bonyolult tervezés.

A szakaszos reaktív desztilláció olyan általános megvalósíthatósági módszerét mutatom be, amellyel több egyensúlyi reakciót tartalmazó hibrid rendszerek is vizsgálhatók. A kidolgozott módszert a dimetil-karbonát etanolos átészterezésén mutatom be, amely során dietil karbonát és metanol képződik [2]. A desztilláló oszlop reaktív szakaszait leíró egyenletekhez transzformált moltörteket alkalmaztam, így az ötkomponensű reaktív elegy síkba kiterítve ábrázolható. Az ötkomponensű nemreaktív elegy síkban nem ábrázolható, ezért lehetséges termékeit az egyes azeotrópok és a tiszta komponensek forráspontjai alapján, szinguláris pontok meghatározásával vizsgáltam.

A szakaszos reaktív desztilláció részletes tervezéséhez dinamikus modellt építettem fel gPROMS környezetben, s ezt sikeresen validáltam nemreaktív extraktív desztillációs műveletre.

[1] Malone, F.M., Doherty, M. F., *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **39**, 3953-3957, (2000)

[2] Luo, H-P., Xiao W-D, *Chemical Engineering Science. Elsevier*, **56**, 403-410. (2001)

**Toxikus szerves anyag tartalmú ipari szennyvizek oxidációs ártalmatlanítása**

**Major Zsuzsanna**, IV. évf. környezetmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

**Miklós Katalin**, IV. évf. környezetmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Tungler Antal** tanszékvezető egyetemi tanár  
BME Kémiai Technológia Tanszék

Napjainkban nagymértékű a finomkémiai-ipari tevékenység, melynek során olyan szennyvizek keletkeznek, melyeket a hagyományos biológiai szennyvíztisztítási eljárásokkal nem lehet az előírt mértékben ártalmatlanítani. Ezért kifejlesztették a nedves levegős oxidációs szennyvíztisztítási módszereket. Dolgozatunkban az eljárások kidolgozásához vezető utat ismertetjük, bemutatjuk a különböző oxidációs szennyvíztisztítási eljárásokat, és összehasonlítjuk az egyes eljárások hatékonyságát.

Laboratóriumi méretekben vizsgáltuk, hogy elérhető-e a szakirodalomból megismert eljárások segítségével az a megfelelő tisztítási hatások, amely megvalósítása után az oxidált szennyvizek biológiai szennyvíztisztításra bocsáthatók, vagy közvetlenül befogadóba engedhetők. Célunk az volt, hogy lehetőleg minél enyhébb körülmények között minél hatékonyabb oxidációt hajtsunk végre. Kísérleteinkben kétféle valódi szennyvízmintát (FCSM 1 és FCSM 2 jelűeket) oxidáltunk mind katalitikus, mind pedig nem katalitikus módon. Az oxidációt autoklávban végeztük. A végrehajtott oxidáció hatékonyságát KOI és TOC mérésekkel ellenőriztük. Kísérleteinkben különböző módszereket alkalmaztunk.

Az FCSM 1 minta nagyobb mértékben oxidálódott, mivel már nyomokban eleve tartalmazott katalitikus hatású fémeket. Felállítottuk a katalizátorok, ill. a módszerek hatékonysági sorrendjét. Mindkét minta esetében a Ru/Ti háló volt a leghatékonyabb katalizátor, amit a CuSO<sub>4</sub> katalizátor követett. A kísérletek során alkalmazott többi katalizátor esetében nagyon különböző tisztítási hatásfokokat tapasztaltunk.

A reakciókörülményeket katalizátor alkalmazásával sem tudtuk enyhíteni. A katalizátorok alkalmazása csupán az oxidáció mértékének növelését segítette elő. Az oxidálhatóság mértékét befolyásolja a minták összetétele, valamint az, hogy a mintákban lévő szerves anyagoknak mekkora hányada alakul át kis szénatom számú karbonsavvá, amelyek nagymértékben ellenállnak a további oxidációnak.

**Szilárd gyógyszerkészítmények nedvességzáró felületmódosítása**

**Nagy Zsombor Kristóf**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Fekete Pál** címzetes egyetemi docens  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

A gyógyszer-tablettákat napjainkban egyre gyakrabban látják el filmbevonattal. Vízre érzékeny hatóanyagot tartalmazó tabletták magok esetén jelentős stabilitásnövekedést érhetünk el, ha a filmbevonat lassítja, illetve gátolja a mag nedvességfelvételét. Erre a célra újfajta, nanoszerkezetű nedvességzáró bevonatot fejlesztettem ki, más területen már alkalmazott és bevált bevonóanyag ill. rétegszilikátok alkalmazásával. Az általam használt montmorillonit 1 nm vastagságú lemezein keresztül a diffúzió gátolt, ezáltal csökkenthető a film nedvesség-áteresztése. A kereskedelmi forgalomban kapható különböző bázisú nem nedvességzáró filmbevonó polimereket montmorillonittal (Veegum<sup>®</sup> HS) adalékoltam, és ezeket hasonlítottam össze a piacon már megjelent nedvességzáró filmbevonatokkal. Vizsgáltam a szabad filmek és filmtabletták vízfelvételét, a diszperziók száradási tulajdonságait (AR 2000 típusú reométerrel), valamint a filmtabletták szétesését (Erweka készülékkel). Az új nanokompozit szerkezetét pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) határoztam meg. A bevonat szerkezetének lokális kémiai jellemzése Raman mikroszkóppal történt. A vizsgálatok alapján megállapítottam, hogy a nanokompozit típusú bevonóanyag jó nedvességzáró filmet képez, szétesése megfelelő és az iparban várhatóan jól alkalmazható.

**Nanokompozitok termikus tulajdonságainak mérésére alkalmas műszer fejlesztése**

Sápi András, V.évf. vegyész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kónya Zoltán** egyetemi docens  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék  
**Dr. Kukovecz Ákos** egyetemi adjunktus  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Manapság egyre fontosabb szerepet töltenek be a jó termikus tulajdonságokkal rendelkező anyagok. Felhasználóik közé tartozik például az építőipar, a vegyipar, a járműipar és az elektronikai ipar is. Elég, ha az egyre gyorsabban működő mikrochipekkel járó növekvő hűtési problémákra gondolunk, melyek még mindig megoldásra várnak. Rengeteg kutatás a jó termikus tulajdonságú nanokompozitok kifejlesztésére irányul. Ezek fejlesztése magával vonta az új, precízebb analízáló módszerek megjelenését is, melyekkel teljes körű jellemzést kaphatunk a szilárd anyagok termikus tulajdonságairól.

Munkánk során egy ún. periodikus módszeren alapuló termikus analízáló rendszert építettünk fel, amely lehetőséget ad különböző nanokompozitok hővezetési és hődiffúziós együtthatójának egyidejű meghatározására. A mintát két olyan fémlap közé helyezük, melyekbe előzőleg termoelemeket rögzítettünk. Egy termoelektromos hűtőberendezés segítségével az egyik fémlapon keresztül a minta egyik oldalának hőmérsékletét periodikusan változtatjuk redukált nyomáson és szobahőmérsékleten. A periodikus perturbáció hatására a minta másik oldalának hőmérséklete is változik. A két oldalon mért hőmérsékletváltozás értékeiből az ún. tapasztalati hőátadási együttható számítható. Ezen értékek és az egy dimenziós hőkvadropólus-elmélet alapján számított ún. elméleti hőátadási együtthatóból nemlineáris paraméterbecsléssel határozzuk meg a minta hővezetési és hődiffúziós együtthatóját.

A periodikus módszeren alapuló berendezéssel elvégeztük a Brabender plasztográfos bedolgozással készült titanát nanocső/nagy sűrűségű polietilén, többfalú szén nanocső/nagy sűrűségű polietilén, és többfalú szén nanocső/polipropilén nanokompozitok termikus tulajdonságainak vizsgálatát.

Diákköri dolgozatomban bemutatom a rendszer felépítésének és kalibrálásának fázisait, a hozzá tartozó vezérlő és kiértékelő szoftver fejlesztését, valamint beszámolok a nanokompozitokon végzett mérések eredményeiről is.

**Reaktorok elfutásának előrejelzésére alkalmas eszközök fejlesztése**

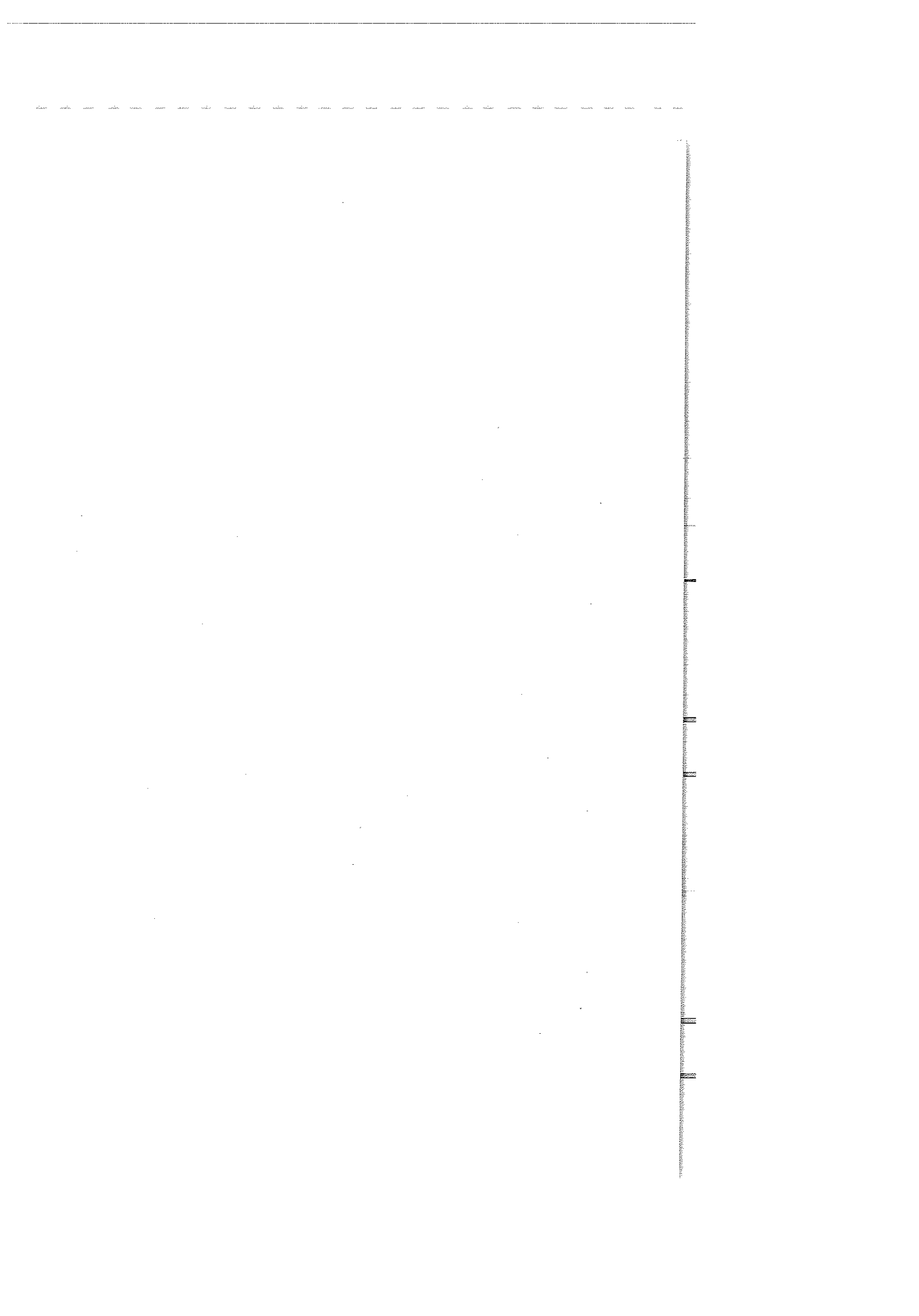
**Varga Tamás**, okleveles vegyészmérnök  
PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Szeifert Ferenc** egyetemi docens  
PE Folyamatmérnöki Tanszék

**Dr. Abonyi János** tanszékvezető egyetemi docens  
PE Folyamatmérnöki Tanszék

A reaktorok elfutása a technológia állapotváltozóinak, például a reaktor hőmérsékletének, a hirtelen bekövetkező nagymértékű változását jelenti, melynek előfordulása az iparban gyakran felmerülő probléma. A reaktor elfutásának megfelelő időben történő felismerése biztonsági és technológiai okokból egyaránt fontos lehet, pl. a katalizátor megóvásának szempontjából. A dolgozat alapjául egy ipari csőreaktor elfutásának vizsgálata szolgált. Az elfutás bekövetkezésének jelzésére alkalmas technikákat két megközelítésmód alapján csoportosíthatjuk. Az adat-alapú megközelítésmódot alkalmazó technikák, például a technológiai változó idősorának inflexiós pontján alapuló módszer, legnagyobb hátránya, hogy későn, csak a bekövetkezést követően jelzi a reaktor elfutását. A modell alapú módszerek ezzel szemben alkalmasak lehetnek arra, hogy még az elfutás bekövetkezése előtt figyelmeztessenek. E technikák azonban stabilitás-vizsgálatra vezethetők vissza, így alkalmazásukhoz elengedhetetlenül szükség van a reaktor részletes modelljének, illetve paramétereinek ismeretére, melyek nem mindig állnak rendelkezésre.

A dolgozatban egy döntéstámogató adat-, illetve egy modell alapú rendszert tanulmányozunk. Célul a reaktor elfutásának előrejelzésére alkalmas eszköz kifejlesztését tűztük ki, mely a betáplálási körülmények alapján kell, hogy előre jelezze a reaktor elfutását. Egy könnyen értelmezhető módszer előállítása volt a célunk, amely alkalmas a különböző jellegű működési tartományok feltárására. A dolgozatban erre a célra döntési fák alkalmazását javasoljuk, mivel ezek könnyen áttekinthetően definiálják az elfutás jelenségét generáló bemeneti változók által definiált működési tartományokat. A dolgozat ismerteti a vizsgált ipari reaktor stacionárius modelljét és viselkedését, illetve az alkalmazott döntési fa identifikálásának technikáját. Az eredmények jól mutatják, hogy az általunk kidolgozott eszköz nemcsak az elfutás pontos előrejelzésére, hanem a fontos technológiai változók feltárására is alkalmas, így az operátorok döntéseit támogató szakértői rendszer részeként is funkcionálhat.



## Környezeti kémia tagozat

1. Környezeti kémia tagozat



**Szerves szennyezők sorsának tanulmányozása felszíni vízben és üledékben**

**Álló Anita**, V. évf. környezettudomány  
PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Szakácsné dr. Földényi Rita** egyetemi docens  
PE Környezetmérnöki és Kémiai Technológia Tanszék

A növényvédőszer gyártásából származó szerves vegyipari hulladékok a környezetbe jutva veszélyeztetik a talajt, talajvizet, felszíni vizeket és azok üledékét. A Nitrokémia 2000 Rt. környékén található Séd patak szennyezettségének vizsgálatát tűztem ki a kutatásom céljaként. Évszakosan vizsgáltam az üledéket és a felszíni vizet az ipari területen leggyakrabban előforduló növényvédőszerre (acetoklór, propizoklór) és egy intermedierre (2,4-diklór-fenol). Munkám másik alapvető célja, hogy a kiválasztott komponensek meghatározásához olyan vizsgálati módszert, illetve módszereket dolgozzak ki - mind a hatóanyagok vízmintából és üledékmintából történő kinyerése, mind a műszeres mérések tekintetében -, melyek megfelelnek a mai kor követelményeinek. A hatóanyagok minőségi, mennyiségi analízisét ECD detektorral összekötött gázkromatográffal végeztem.

Elsősorban a növényvédőszer üledékből való leghatékonyabb kinyerési módszerét kerestem. Három eljárást hasonlítottam össze: az üledékből történő kioldást követő folyadék-folyadék-, Soxhlet- és a szuperkritikus fluidummal történő extrakciót. Visszanyerési vizsgálatokkal támasztottam alá a módszerek hatékonyságát acetoklór, propizoklór, 2,4-diklór-fenol esetében. Ezek alapján a szuperkritikus fluid extrakció bizonyult az üledék minták leghatékonyabb kinyerési módszerének acetoklórra és propizoklórra nézve. A 2,4-diklór-fenol extrakciójának hatékonyságát növelve az extrahálószer (CO<sub>2</sub>) polaritásának módosítójaként n-hexánt alkalmaztam, amely növelte a 2,4-diklór-fenol visszanyerését.

Másodsorban a felszíni vizek extrakciójára kerestem megfelelő módszert. Két eljárást, a folyadék-folyadék- és az ennél sokkal korszerűbb szilárd-fázisú extrakciót hasonlítottam össze. Kutatómunkámban e két eljárás közül az acetoklór és a propizoklór esetében egyértelműen a szilárd fázisú extrakció bizonyult hatékonyabbnak. A 2,4-diklór-fenol kinyerésére nem volt kellően megfelelő ez a módszer sem, ezért további változtatásokra volt szükség, úgymint a vizsgálandó közeg pH-jának megváltoztatása, mely növelte az eljárás hatékonyságát.

**Talajszuszpenziók víztartalmának hatása a fontosabb reológiai paraméterekre**

**Benyhe Zsuzsa**, IV. évf. környezettudomány  
SZTE Természettudományi Kar

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

A talaj teszi lehetővé az elsődleges biomassza megtermelését, biztosítja az anyagok biológiai körforgását, feltételeken megújuló természeti erőforrás, ezért fokozott figyelmet érdemel. A diákóri munka célja a talajszuszpenziók reológiai paraméterei és a víztartalom közötti összefüggés vizsgálata. Talajmintából készített szuszpenzió reális plasztikus testként viselkedik, a nyíróerő ( $\tau$ ) sebességgradiens ( $D$ ) függvény, a folyásgörbe jellegzetes alakú. Meghatározható az a kritikus nyírófeszültség, amely-nél a lamináris áramlás megindul, jellemző értéke a folyáshatár, pl. a Bingham-féle ( $\tau_B$ ). Egyszerűbb esetben a folyáshatár felett a  $\tau$ - $D$  összefüggés lineáris, ilyenkor:  $\tau = \tau_B + \eta_{pl} \cdot D$ , ahol  $\eta_{pl}$  a plasztikus viszkozitás. Általánosabb esetben a folyáshatár feletti folyásgörbe nem lineáris, hanem a  $D$  tengely felé hajlik. A szuszpenziók reológiai jellemzőit a rendszer számos tulajdonsága befolyásolja, gyakran vizsgált a viszkozitás koncentráció függvénye. A rendszer töménységét szilárdanyag térfogat hányadával ( $\Phi$ ) adják meg, amely dimenzió nélküli 0-1 intervallumon értelmezett paraméter. A szuszpenziók reológiai paramétereit nem lehet a teljes  $\Phi$ -tartományon mérni, mivel a diszpergált anyag mennyiségének növekedésével egy jellemző értéken túl a reológiai paraméterek értékei a végtelenbe szöknek. A maximális térfogathányad ( $\Phi_m$ ) értéke függ a részecskék közeggel való nedvesíthetőségétől, méretétől és alakjától, általában 0,5-0,75 közötti. Krieger és Dougherty a következő formulát adta meg, koncentrált szuszpenziókra, a részecskék méretének, alakjának, egymásra hatásának figyelembe vételével:  $\eta = \eta_s \cdot (1 - \frac{\Phi}{\Phi_m})^{-[\eta] \cdot \Phi_m}$ , ahol  $[\eta]$  az úgynevezett belső viszkozitás. Ezt a modellt alapul véve dolgoztam ki a talajszuszpenziók reológiai paramétereinek víztartalomtól való függésének leírását. A Krieger és Dougherty egyenlettel analóg egyenletet alkalmaztunk, egy konstans vezettünk be, mely figyelembe veszi azt a feltételt, hogy a folyáshatár értéke 0 folyadékokra, azaz ha a rendszerben nincs szilárd részecske diszpergálva. Az illesztett görbék jól leírják a reológiai jellemzők változását a szuszpenziók víztartalmának függvényében, így számolhatók olyan nedvesség-tartalmú minták paraméterei is, amelyeket nem mérünk. Ez fontos a különböző mértékben degradált talajok összehasonlításakor.

**Égészátlók hatása a polikarbonát hőbomlására  
Pirólízis-GC/MS vizsgálatok**

**Bozi János, okleveles vegyész**  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Blaszó Marianne** tudományos tanácsadó  
MTA KK AKI Környezatkémiai Osztály

Az elektronikai ipar termékeinek számos alkatrészét műanyagból készítik, amelyek gyúlékonysága miatt égészátlókat kell alkalmazni. A műanyagokba kevert égészátlók legtöbbször bróm, foszfor tartalmú aromás vegyületek, vagy szeretlen anyagok, illetve ezek keveréke. Környezetvédelmi szempontból fokozott figyelmet érdemelnek a halogén tartalmú égészátló anyagok. Az általában sok komponensből álló elektronikai hulladékok újrahasznosítására alkalmas módszer a pirolitikus lebontás. A különféle műanyagok hőbomlási termékei vegyipari, műanyagipari alapanyagként, vagy fűtőanyagként szolgálhatnak.

Dolgozatom célja az elektronikai iparban elterjedten használt polikarbonát hőbomlási folyamatainak megismerése, az égészátlók hatásának megfigyelése, és a környezetszennyező bomlástermékek elemzése.

Jól meghatározott körülmények közt, ismert mennyiségű és tiszta modell anyagokkal végezve a kísérleteket lehetőség nyílik a lejátszódó folyamatok és kémiai reakciók nyomon követésére. Éppen ezért tiszta állapotban, valamint három különböző égészátlóval ismert mennyiségben összegyűrva, pirolízis-gázkromatográfiatömegspektrometria módszerrel elemeztem a polikarbonát hőbomlásának termékeit, és vizsgáltam, hogy az égészátlók milyen hatást gyakorolnak a főbb termékek eloszlására.

Megállapítottam, hogy az összes illékony anyag mennyisége 550 °C pirolízis hőmérsékleten az égészátlók hatására nem változott, vagy kis mértékben megnőtt. Összehasonlítva a polikarbonát főbb pirolízis termékeinek mennyiségi változását az egyes égészátlók esetén, azt tapasztaltam, hogy míg az aromás brómvegyületet és a szerves foszfátot tartalmazó polikarbonát egyes illékony hőbomlástermékeinek mennyisége nem tér el jelentősen a tiszta polikarbonátéitól, addig az ammónium-polifoszfát égészátló alkalmazása esetén figyelemreméltó eltérés mutatkozik.

**A tribenuron-metil és hasonló szulfonil-karbamid típusú herbicidek mint talajszennyezők**

**Érsek Csaba**, V. évf. kémia-környezettan  
PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Szakácsné Dr. Földényi Rita** egyetemi docens  
PE Környezetmérnöki és Kémiai Technológia Tanszék

Munkám során négy hasonló szerkezetű szulfonil-karbamid (tribenuron-metil /TbM/, klórszulfuron /ChS/, metszulfuron-metil /MsM/, tifenszulfuron-metil /TfsM/) típusú gyomirtószer talajszennyező hatását tanulmányoztam két különböző hazai talajon (csernozjom és barna erdőtalajon) és egy talajalkotó ásványon, a kvarcon. Az adszorpció két fajta közegből (0,01 mol/L foszfát-puffer, 0,1 mol/L nátrium-klorid-oldat) történt.

Adszorpció vizsgálatok eredményeképpen elmondható, hogy a négy hatóanyag közül a TbM kötődött meg legnagyobb mértékben. Barna erdőtalajon kezdeti koncentráció tartományban a MsM, míg magasabb koncentrációnál a TfsM adszorpciója a nagyobb. Foszfát-puffer oldatból való adszorpció során a MsM megkötődése a legnagyobb. Kvarcon huminsav nátriumsó hozzáadásával végrehajtott kísérletek alapján megállapítható, hogy a szerves anyag elősegíti a hatóanyagok adszorpcióját. A szerves anyag jelenléte a ChS adszorpcióját növelte a legnagyobb mértékben. Az adszorpciót TbM esetében a formázószer megkönnyíti, ezáltal a talajt a hatóanyag mozgása révén kevésbé szennyezi, mert jobban kötődik a talajrészecskékhez.

A szerek környezeti sorsának jobb megismerése érdekében bomlásvizsgálatoknak is alávettem a hatóanyagokat.

Bomlásvizsgálatok során bebizonyosodott, hogy a négy hatóanyag közül a TbM csak bázikus körülmények között stabil, mert savas kémhatású közegben a hatóanyag felezési ideje 3 nap. A többi hatóanyag adott körülmények között elég stabil, de savas körülmények elősegítik a bomlást. Kivételt képez a TfsM hatóanyag, mert bázikus közeg megkönnyíti a bomlást.

A barna erdő és csernozjom talaj jelenlétében minden hatóanyagból keletkezett 2-amino-4-metoxi-6-metil-1,3,5-triazin (tribenuron-metilből ennek 2-amino-metil származéka), ami hidrolízis eredménye. A bomlástermékek nagy része a talaj feletti oldatban és a talajban is megjelent.

**Tátrai minták radioaktivitásának meghatározása félvezető  
gamma-spektrometriával**

**Illés Erzsébet, III. évf. környezettudomány  
SZTE Természettudományi Kar**

Témavezető: **Dr. Novákné Dr. Hajdú Éva** egyetemi docens  
SZTE Szilárdtest- és Radiokémiai Tanszék

Az emberek általában félnek a radioaktivitástól, és talán ezzel kapcsolatban jut el a legtöbb téves információ hozzájuk.

Környezettudomány szakos hallgatóként a környezeti elemek radioaktivitása különösen érdekel, ezért választottam munkámnak egy olyan mérésorozatot, amellyel kimutatható, hogy a bioszféra minden elemében található radioaktív nuklid. A levegő-víz-talaj-növény-állat sorban található radioaktív nuklidok okozzák az emberek sugárterhelését.

A környezetünkben megtalálható radioaktív nuklidok két csoportra oszthatók: természetes eredetűek és mesterséges eredetűek. A természetes eredetű radionuklidok a kozmogén radionuklidok és a teresztriális (talajban, építőanyagokban található) radionuklidok. A mesterséges eredetű radionuklidok az atomrobbantásokkal, és az atomreaktorok működésével kerülnek ki az emberi környezetbe.

Mintáimat egy szlovákiai nyári kirándulásunk során gyűjtöttem: patakvízből, tóvízből, gyógyvízből és talajokból. Ezeket félvezető detektoros gamma-spektrometriával vizsgáltam, és a gamma-spektrumok alapján a mintáimban megtalálható gamma-sugárzó radionuklidokat azonosítottam, valamint meghatároztam az aktivitásaikat. Ezekből kiszámoltam a minták fajlagos aktivitásait. Mintáim jórésében találtam mesterséges eredetű radioaktív nuklidokat is.

- [1] C. M. Lederer, *Table of isotopes*. John Wiley & Sons. INC, New York, (1967)
- [2] Tóth Árpád, *A lakosság természetes sugárterhelése (A sugárterhelés újabb eredményei)* Akadémiai Kiadó, Budapest, 21-76 (1983)
- [3] Kanyár Béla, Somlai János, Szabó D. László, *Környezeti sugárzások, radioökológia* Veszprémi Egyetemi Kiadó, Veszprém, 18-39, 49-53 (1996)
- [4] Nagy Lajos György, Nagyné László Krisztina, *Radiokémia és izotóptechnika* Műegyetemi Kiadó, Budapest, 338-351 (1997)

**Az ibuprofen fotolitikus bomlásának vizsgálata**

**Megyeri Csilla**, III. évf. gyógyszerész  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Gajdáné Dr. Schrantz Krisztina** egyetemi adjunktus  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék  
**Dr. Dombi András** egyetemi docens  
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Napjainkban a legáltalánosabban használt gyógyszerek az új, nem szteroid típusú gyulladásgátlók (Non Steroid Antiinflammatory Drugs, NSAID) [1]. Ezek közé tartozik a dolgozatomban témájaként választott Ibuprofen is, amit enyhe és közepes súlyos reuma, izom, fej, fog és menstruációs fájdalom esetén nemcsak embereknél, hanem állatgyógyászatban is gyakorta alkalmaznak. Kutatások bizonyították, hogy a gyógyszerek a szervezetből nagy részben kiürülnek, és így bekerülnek a víz körforgásába. A jelenleg működő szennyvíztelepi technológiák szinte egyike sem alkalmas azonban a kis koncentrációban jelenlévő gyógyszermaradványok eltávolítására [2]. Erre a célra az irodalmi tapasztalatok alapján legígéretesebbnek a fotólízis ill. a szabad gyökök generálásán alapuló nagyhatékonyságú oxidációs eljárások mutatkoznak [3].

Dolgozatomban a témájaként az Ibuprofen fotolitikus bomlásának vizsgálata és a bomlás nyomon követésére alkalmas analitikai módszerek kidolgozása volt. Koncentrációjának csökkenését spektrofotometriásan és HPLC-vel követtem. Eredményeim alapján elmondható, hogy 254 nm-es UV fény hatékonyan bontja az anyagot, amelynek koncentrációja 1 óra alatt majdnem 90 %-al csökken. A teljes szerves széntartalom (TOC) ugyanezen idő után majdnem 40 %-al kisebb a kiindulási értékénél, ami jelentős mértékű teljes bomlásra (mineralizációra) utal.

[1] Kümmerer, K., Al-Ahmad, A., *Chemosphere*, **40**, 701-710 (2001)

[2] Halling-Sørensen, B., Nors Nielsen, S., Lankzky, P.F., Ingerslev, F., Holten Lützhøft, H.C., Jørgensen, S.E., *Chemosphere*, **36**, 357-393 (1998)

[3] Ilisz, I., Dombi, A., Mogyorósi, K., Farkas, A., Dékány, I., *Applied Catal. B. Environ.*, **39**, 247-256 (2002)

**Pt- és Co- tartalmú zeolitkatalizátorok alkalmazása klórfenolok redukatív lebontásában**

**Mészáros Szilvia, I. évf. PhD**  
SZTE Természettudományi Kar

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

A klórozott szerves vegyületeket széles körben stabilitásuk miatt használják, ami a lebontásban hátrányt jelent. A környezetben felhalmozódva különböző problémák kiváltói: üvegházhatás növekedése, O<sub>3</sub>-bontás, toxikus hatás. Biológiailag nem bomlanak le, így fizikai-kémiai eljárások alkalmazása szükséges. Az ártalmatlanítás lényege, hogy a klórtartalmú vegyületekből a klórt (esetleg más halogén atomokat) a környezet szempontjából semleges, stabilis, szervesetlen vegyületbe vigyük át, míg a szerves rész felhasználható, vagy CO<sub>2</sub>-dá és vízzé alakítható. A legegyszerűbb eljárás az égetés, de a lebontás csak nagy mennyiségű segéd-tüzelőanyag hozzáadásával érhető el, ráadásul lehetőség nyílik dioxinok és furánok képződésére. Teljes lebontásuk környezeti hőmérsékleten csak katalitikus úton lehetséges, oxidatív illetve redukatív módon.

A redukció során a levegő helyett a drágább H<sub>2</sub>-t használjuk, ezért hogy az eljárás gazdaságos legyen, tiszta, újrahasznosítható termékeket kell nyernünk.

Munkám célja a hidrodeklórozási reakció számára megfelelő (aktív, szelektív, stabil) katalizátort találni. A tudományos diákköri munkám során Co-, Pt- és Co, Pt-ZSM-5, illetve Pt- és Co,Pt-Y(FAU) zeolitkatalizátorokat alkalmaztam a 2- és a 4-klórfenol hidrogénezési reakciójában, 300 és 400 °C-on, folyamatos reaktorban, gázkromatográfiás analízissel. A katalizátorokat ioncserével és impregnálással állítottam elő. Az előállítás lépéseit XRD, termikus analitikai, nitrogén adszorpciós és TEM módszerekkel követtem nyomon, és a jellemzésüket is ezekkel végeztem.

Az Y(FAU) katalizátor szerkezete összeomlott a keletkezett HCl következtében, így aktivitását hamar elveszíti, a mineralizált klór mennyisége minimális.

A Pt-tartalmú ZSM-5 viszonylag stabil, az átalakulás nagy kezdeti sebességgel ciklohexanonig megy végbe, a klórmérleg kedvező. Co-ZSM-5-ön a hidrodeklórozás a meghatározó (főtermék a fenol), de a konverzió és a mineralizálódott klór mennyisége alacsony. A kétfémes katalizátor esetén az átalakulás fenolig megy végbe. A leválasztott klór mennyisége nagy, de a stabilitás kisebb, mint a Pt-ZSM-5-é. A Pt-ZSM-5 tűnik legalkalmasabbnak a klórfenolok hidrodeklórozási reakcióiban, de a gyakorlati alkalmazáshoz további optimalizálás szükséges.

A keletkező termékek jó vegyipari, gyógyszeripari alapanyagok lehetnének, ezáltal a direkt erre a célra előállított fenol gyártását is csökkenteni lehetne.

**Biodízel technológiák: az etanol felhasználása biodízeli előállítására**

Nagy Katalin, V. évf. környezettudomány  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Halász János** egyetemi docens  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék  
**Dr. Kiricsi Imre** egyetemi tanár  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A kőolajkészletek rohamos csökkenése, valamint az energiatermeléssel jelentkező környezetszennyezés az emberiség figyelmét az alternatív energiaforrások felé irányítja. A ma használt motorhajtóanyagok helyettesítésére a környezetkímélőbb, a biomasszából nyert „*bioüzemanyagok*” alkalmazhatók. A biodízel, és a bioetanol alkalmazásával jelentősen csökkenhet a gépjárművek bruttó szennyezőanyag kibocsátása, viszont előállítási költségük jelenleg még magas. A szélesebb körű alkalmazáshoz új, gazdaságosabb előállítási technológiákat kell kidolgozni, munkám ehhez a témához, nevezetesen a növényi olajok bioetanollal történő átészterezési eljárásának vizsgálatához kapcsolódik.

A biodízel előállításához szükséges olajat növények (pl. napraforgó vagy repce) magvaiból sajtolással nyerik ki. Mivel ezen olajok viszkozitása és magas lobbánáspontja a hajtóanyagként való felhasználást korlátozza, ezért átészterezést igényelnek, amire eddig döntően metanolt használtak. A katalitikus átészterezés növényi alapanyagból gyártott etanollal is elvégezhető. Kísérleteink során először az irodalomból ismert KOH, NaOH, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> katalizátorokat próbáltunk ki. Az etil-észterek sűrűségének, viszkozitásának, lobbánáspontjának, illetve GC-analízisének értékeiből következtetünk az átészterezés hatékonyságára és a biodízel tulajdonságaira. Ezek a katalizátorok vízre érzékenyek, ezért olyan heterogén sav és bázis katalizátorok felhasználásával végezzük a további munkánkat, melyek alkalmazása nem kíván vízmentes reakciókörülményeket, így azeotróp etanol is használható.

Az etanollal végbemenő reakció kritikus pontjai egyrészt a katalizátor oldhatósága és reakciókészsége, ami NaOH vagy KOH alkalmazásakor az elszappanosításban jelentkezik. Ez utóbbi reakció eredményeként ugyanis olyan emulgeáló tulajdonságú szappanok képződnek, melyek emulzióként stabilizálják a reakcióban kialakuló zsírsav-etilészter/glicerin elegyet. Víz hozzáadásával az emulzió megbontható, azonban a víz egy része ilyenkor a biodízel-fázisban is megjelenik, ami a termék minőségét csökkenti, illetve további elválasztási (vízmentesítési) lépések alkalmazását teszi szükségessé.



**Mezopórusos szenek szintézise és jellemzése**

**Puskás Róbert**, II. évf. környezettudomány  
SZTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kiricsi Imre** tanszékvezető egyetemi tanár  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

**Dr. Kónya Zoltán** egyetemi docens  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

**Horváth Endre** PhD hallgató  
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A nanoszerkezetű anyagok előállítására és vizsgálatára napjainkban egyre több tudományos műhely szakosodik. Ez nem meglepő, hiszen a korunkban kibontakozó tudás alapú társadalom alap gondolata alapján a közeli, illetve távolabbi jövőnk új, remélhetőleg az emberiségre és környezetére kevésbé káros technológiai épülhetnek egy-egy új anyag előállításán alapuló szabadalomra.

Jelen dolgozat mezopórusos szénstruktúrák előállításával és vizsgálatával foglalkozik, melyeknek ígéretes felhasználási lehetőségei vannak az üzemanyagcellák, adszorpción alapuló metán, illetve hidrogén tárolás, elválsztás, katalízis területén.

Előállítási módszerként templátmódszert alkalmaztunk. Templátként a megfelelő nanométeres mérettartományba eső méretű szilika szol, illetve szolkeverék vákuumbepárlásával nyert, a primer részecskék aggregációjával kialakult mezopórusos szilikát alkalmaztunk. A szintézist a szén nanocsövek CCVD (Catalytic Chemical Vapor Deposition) előállítási módszerével megegyezően csőkemencében végeztük, acetilén forrást és nitrogén vivőgázt alkalmaztunk, azzal a különbséggel, hogy jelen esetben célszerűbb CVI (Chemical Vapor Infiltration) elnevezés használata. A 700 °C hőmérsékleten az acetilén gáz bomlása során a mezopórusos szilikatemplát hozzáférhető felületén vékony szénréteg rakódott le. A templáteltávolítás, azaz a szilikaváz kioldása 40 %-os HF oldattal történt.

A kísérletek során a minták jellemzésére transzmissziós elektronmikroszkópiás, N<sub>2</sub> adszorpciós - deszorpciós, röntgendiffrakciós, illetve termogravimetriás analízist végeztünk.

Eredményeink alapján kijelenthető, hogy minél kisebb szemcseméretű szilikából álló szilikavázat alkalmazunk templátnak annál nagyobb fajlagos felületű mezopórusos szénreplikát kapunk. Ezzel a módszerrel az alkalmazott templát szemcseösszetételének megfelelően a képződött mezopórusos szén fajlagos felülete és a hozzátartozó össz pórustérfogat 624-1630 m<sup>2</sup>/g, illetve 0,99-4,3 cm<sup>3</sup>/g között változtatható. Az előállított mezopórusos szeneket a jövőben adszorbensként, illetve katalizátorhordozóként kívánjuk tesztelni.

**Gyomirtókerek által veszélyeztetett, gyakori hazai talajok jellemzése - az izoproturon és propaklór, mint lehetséges talajszennyezők.**

Serfőző Nikoletta, V. évf. környezettudomány  
PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Szakácsné Dr. Földényi Rita** egyetemi docens  
PE Környezetmérnöki és Kémiai Technológia Tanszék

A peszticidek alkalmazása a növényvédelemben a termés hozamok szempontjából rendkívül nagy jelentőségű, viszont veszélyeket is rejt magában a szerek mezőgazdasági felhasználása során.

A növényvédőszer-hatóanyagok környezeti sorsának megismerésében fontos feladat, az adott vegyület szorpciós sajátosságainak tanulmányozása a talajon. Munkám során három talajminta - balatonfőkajári csernozjom talaj, dabronyi homok talaj és tési barnaerdő talaj - általános jellemzését végeztem el.

Az adszorpció vizsgálata céljából sztatikus egyensúlyi kísérleteket hajtottam végre csernozjom izoproturonnal és propaklórral. Az alkalmazott közeg 0,1 mol/l  $\text{NaNO}_3$ -oldat volt, mely az állandó ionerősséget biztosította. E két gyomirtószer adszorpcióját a megőrölt 0,5 mm-nél kisebb szemcseméretű talajon végeztem és külön vizsgáltam a 0,355-0,09 mm és 0,09 mm alatti szemcseméretű tartományokat.

Az egyensúlyi oldatot HPLC-UV rendszerrel elemeztem. Az adszorpciós izotermák görbéje mindegyik vegyület esetén kétlépcsős, ami arra enged következtetni, hogy adszorpciójuk is több lépcsőben zajlik le. Az első adszorpciós réteg telítődése után a következő rétegben folytatódik a megkötődésük a talaj felületén. A szemcseméret a 0,5 mm alatti, általam összehasonlított frakciókat tekintve lényegileg nem befolyásolja az adszorbeált növényvédőszer mennyiségét. Ennek oka az lehet, hogy az ásványokon történő adszorpció a szerves vegyületekre kevésbé jellemző, mint a fémionokra. Mindez azt eredményezi, hogy a korábbi kísérletek alapján feltehetően különböző ásványos összetételű frakciókon csekély mind az izoproturon, mind a propaklór adszorbeált mennyiségében jelentkező különbség.

**A poli(vinil-klorid) környezetileg előnyös termooxidatív átalakítása**

**Szarka Györgyi**, V. évf. vegyész  
ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék  
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Szisztematikus kísérleteket végeztünk a PVC oldatban végzett termooxidatív degradációja terén. Kísérleteink arra keresték a választ, hogy hogyan hat az ólom-sztearát ( $PbSt_2$ ) stabilizátor, és a 2,6-di-terc-butil-4-metilfenol (BHT) antioxidáns a poli(vinil-klorid) degradáció folyamataira. A stabilizátor vizsgálatánál kísérleteinket mind  $PbSt_2$  nélküli, mind stabilizátort tartalmazó 1%-os PVC oldatokban elvégeztünk. Oldószerként a PVC egyik leggyakrabban használt lágyítóját, a dioktil-ftalátot használtuk. A degradált minták gélpermeációs kromatográfiás analízise a PVC láncok jelentős mértékű, láncszakadását mutatta. Erre a folyamatra az ólom-sztearát nincs hatással. Ugyanakkor a HCl-lehasadás szempontjából az ólom-sztearát a PVC stabilizátorának bizonyult. A degradált PVC infravörös spektroszkópiás analízise szerint a láncszakadással egyidejűleg a PVC láncban oxo-csoportok képződnek.

A BHT antioxidáns hatásának tanulmányozását 1,2,4-triklór-benzollal és dioktil-ftaláttal készült oldatokban is elvégeztük, hiszen erről nem található adat az irodalomban. Kísérleteinket antioxidáns nélküli, 2 mmol/monomer egység, valamint 10 mmol/monomer egység BHT tartalmú PVC jelenlétében végeztük inert 1,2,4-triklór-benzol (TCB) és poláros dioktil-ftalát (DOP) oldószerben. A TCB-ben csak kismértékű láncszakadás történt, az antioxidáns jelenléte nem volt rá hatással. Ezzel szemben dioktil-ftalátban végezve a PVC termooxidatív degradációját jelentős láncszakadást tapasztaltunk, ami BHT jelenlétében fokozódott. A HCl-lehasadás szempontjából azonban hatékonynak bizonyult, mert növelte az indukciós időt. Tehát az antioxidánsként használt BHT DOP jelenlétében enyhe oxidatív körülmények között nem akadályozza meg a poli(vinil-klorid) termooxidatív degradációját. Az általunk alkalmazott termooxidatív eljárás olyan környezetileg előnyös folyamatnak tekinthető, amely alkalmazható stabilizátort és/vagy antioxidánst tartalmazó PVC termékek részleges lebontása vagy olyan PVC kialakítása szempontjából.

## Szintetikus szerves kémia tagozat

**A Biginelli reakció vizsgálata 10-etil-3-formil-fenotiazin felhasználásával**

**Csütörtöki Renáta**, IV. évf. kémia  
BBTE Kémia és Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Csámpai Antal** egyetemi docens  
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

**Dr. Lovász Tamás** egyetemi tanársegéd  
BBTE Szerves Kémia Tanszék

Kutatásaimat szerves heterociklusos vegyületeknek a Biginelli reakcióval történő előállításával kapcsolatban végeztem. A reakciót nagyobb hatásfok és rövidebb reakcióidő érdekében bórsavas katalizátorral hajtottam végre jégecetes közegben. A három komponensű reakciónak a termékei a 3,4-dihidropirimidin-2(1H)-onok és a 3,4-dihidropirimidin-2(1H)-ionok, amelyek mind kémiai, mind biológiai és gyógyászati szempontból is jelentős vegyületek. Biológiai aktivitásaik a következők: vérnyomáscsökkentő, vírusellenes, gyulladásgátló, kalcium csatorna blokkoló hatás [1,2]. Először előállítottam a Biginelli reakcióhoz szükséges aromás aldehidet, a 10-etil-3-formil-fenotiazint, ezt követően pedig az említett alapanyagból négy gyűrűzárási kísérletet hajtottam végre diketonok: acetyl-aceton és 1,3-ciklohexadion, illetve karbamid és tio-karbamid felhasználásával. A keletkezett vegyületeket oszlop-kromatográfiás eljárással, illetve átkristályosítással tisztítottam. A felhasznált diketonról függően 3,4-dihidropirimidin-2(1H)-on vagy 3,4-dihidropirimidin-2(1H)-ion (amikor acetyl-acetont használtam), illetve xantén-dion molekulák (amikor 1,3-ciklohexadiont használtam) keletkeztek.

A xantén-dion képződése kizárólag aldehid, illetve az 1,3-ciklohexadion reakciójának az eredménye a karbamid felhasználása nélkül.

A xantén-dionok keletkezésének mechanizmusa hasonlít az irodalomban leírt antakridin-dionok keletkezésének mechanizmusához.

[1] Inci, S. Z., Selma, S. Semra, C., Kevser, E. *Bioorg. Med. Chem.*,  
doi: 10.1016/j.bmc.2006.08.031 (2006)

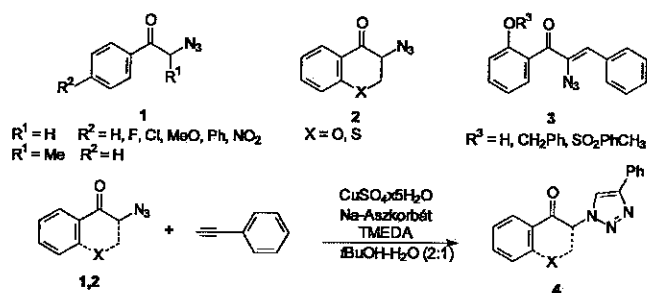
[2] Shujang, T., Fang, F., Chunbau, M., Hong, J., Youjian, F., Daqing, S., Xiangshan, W., *Tetrahedron Lett.*, **44**, 6153-6155 (2003)

## 1,4-Diszubsztituált 1,2,3-triazolok szintézise

Fekete Szabolcs, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

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

Növényvédőszerként, festékeként, korróziógátló anyagokként felhasználható, valamint fontos élettani hatással rendelkező (anti-HIV, antiallergiás és antibakteriális aktivitás) 1,2,3-triazolok előállításának általános módszere az azidok és alkinek Huisgen-féle 1,3-dipoláris cikloaddíciója [1]. Sharpless [2] egy új, regioselektív cikloaddíciót mutatott be, melyet „Click Chemistrynek” nevezett el. Ezen cikloaddíciók *in situ* előállított réz(I) katalizátor jelenlétében játszódnak le vizes alkoholban. Kutatócsoportunk korábbi munkájának kiegészítéseként célul tűztük ki 1-3  $\alpha$ -azido-*ketonok* cikloaddíciós reakcióinak vizsgálatát e körülmények között (1. ábra).



1. ábra

Sikeresen optimaltuk a reakciókörülményeket 1,2 szubsztrátok és fenil-acetilén esetében. A reakció 1,4-regioselektivitását NOESY NMR méréssel támasztottuk alá. Eredményes reakciókat végeztünk további alkinekkel (etil-propiolát, 2-metil-3-butin-2-ol) is. Meglepő módon a 3 azido-kalkonok nem adnak értékelhető cikloaddíciós reakciót a Sharpless-körülmények között.

[1] Kadaba, P. K., *Synthesis*, 71-84 (1973)

[2] Kolb, H., Finn, M. G., Sharpless, K. B., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 40, 2004-2021 (2001)

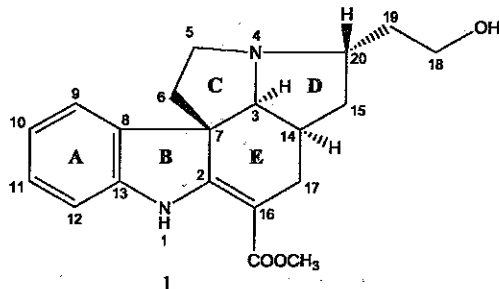
**Kísérletek az ibofillidinváz felépítésére**  
**A (±)-18-hidroxi-20-epiibofillidin első szintézise**

**Horváth Dániel Vajk**, V. évf. vegyészmérnök  
 BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Kalaus György** tudományos tanácsadó  
 BME Szerves Kémia Tanszék

Konzulens: **Tóth Flórián** PhD hallgató  
 BME Szerves Kémia Tanszék

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia Tanszékén működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban új, konvergens szintézisstratégiát dolgoztak ki az aszpidoszpermán- és a  $\Psi$ -aszpidoszpermánváz alkaloidok felépítésére. Eljárásukban egy alkalmasan kiépített triptamin-származékot, mint közös kiindulási anyagot, reagáltattak megfelelően kialakított aldehidekkel, vagy aldehid ekvivalensekkel, melynek eredményeként olyan tetraciklusos észterekhez jutottak el, melyekből néhány lépésben előállíthatók a célvegyületek. Erre a stratégiára építve célul tűztük ki a 18-hidroxi-20-epiibofillidin (**1**) előállításának a megvalósítását.



A konvergens szintézis kulcsmolekulájaként választott  $N_b$ -benzil-triptamin-származékot egy alkalmasan kiépített aldehiddel reagáltattuk. A reakcióelegyből egy termék különíthető el, mely a várt D-szeko- $\Psi$ -aszpidoszpermánváz molekulának bizonyult.

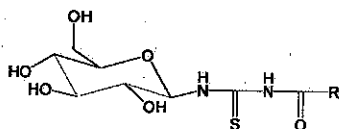
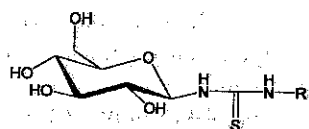
Követve a Kutatócsoportunkban kidolgozott stratégiát, az ibofillidinváz D-gyűrűjét a hidrogenolízist követő, teljes epimerizációval kísért intramolekuláris alkilezésel alakítottuk ki. Végül a D-gyűrűn lévő észter-csoport regioszelektív redukciójával jutottunk el a célként megjelölt alkaloid, a 18-hidroxi-20-epiibofillidin (**1**) racemátjához.

**N-( $\beta$ -D-glükopiranozil)-N'-aril- illetve -acil-tiokarbamidok, mint potenciális  
antidiabetikumok előállítása**

Hüse Csaba, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Somsák László egyetemi tanár  
DE Szerves Kémiai Tanszék

A diabetes mellitus ma már népbetegség. Új lehetőség nyílt a II. típusú diabeteses betegek kezelésére a glikogén foszforiláz enzim gátlása révén. A jelenleg leghatásosabb glükózanalóg inhibitor az N-(2-naftoil)-N'-( $\beta$ -D-glükopiranozil)-karbamid (17). E vegyületcsalád előállítására használt módszerrel sok probléma volt, amelyek nem tették lehetővé a hatékony szintézist. Munkám egyik célja volt, hogy ezen vegyületcsaláddal analóg szerkezetű molekulákat szintetizáljunk, ezek az N-szubsztituált-N'-( $\beta$ -D-glükopiranozil)-tiokarbamidok. Másik célkitűzés az volt, hogy egyszerűbb, reakcióútát találjunk e vegyületek szintézisére. A tiokarbamidok előállítását per-O-acetilezett  $\beta$ -D-glükopiranozil-amin (4) vagy  $\beta$ -D-glükopiranozil-ammónium-karbamát (5) és aril- vagy acil-izotiocianátok reakciójával végeztük. Az (5) vegyület alkalmazása elkerülhetővé tette a védőcsoportok alkalmazását, így jelentősen lerövidítette a szintéziseket, illetve magasabb összhozamot értünk el. Biológiai vizsgálatokhoz előállítottuk a következő nem védett N-szubsztituált-N'-( $\beta$ -D-glükopiranozil)-tiokarbamidokat.



R: 4-klór-fenil, 4-fluor-fenil, 4-klór-fenil, 2-metoxi-fenil, 4-metoxi-fenil, 4-trifluor-metil, 2-naftoil, stb.



## Glükopiranozil karbamid típusú glikogén foszforiláz inhibitorok előállítása

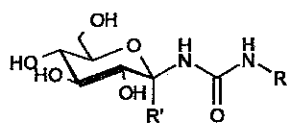
Kónya Bálint, V. évf. vegyész  
DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Somsák László egyetemi tanár  
DE Szerves Kémiai Tanszék

Munkám során a glikogén foszforiláz enzim glükopiranozil karbamid típusú gátolószereinek új előállítási lehetőségeit vizsgáltam. Ezek hozzájárulhatnak a kettős típusú cukorbetegség új gyógymódjának kifejlesztéséhez.

Az N-aril- illetve N-acil-N'- $\beta$ -D-glükopiranozilkarbamidok előállítására korábban számos módszert alkalmaztak. Ezeknek a szintézisutaknak több hátránya van: csoportvédelmet alkalmazó több lépéses reakciók, a reakciók során anomerizációt tapasztaltak, a védőcsoportok eltávolításakor karbamid acil szubsztituense könnyen lehasadhat. Így a munkám egyik célja az volt, hogy egy új, kevesebb reakciólépésből álló, az említett nehézségeket elkerülő szintézisutat találjunk ezen vegyületek előállítására.

Az új szintézisút kiindulási vegyülete a könnyen előállítható  $\beta$ -D-glükopiranozilammónium-karbamát. Ezt absz. piridinben a megfelelő izocianáttal vagy acil-izocianáttal reagáltatva előállítottuk az N-(fenil; 1-naftil; 2-naftil; 2-klór-fenil; 4-klór-fenil; 2-fluor-fenil; 4-nitro-fenil)-N'- $\beta$ -D-glükopiranozilkarbamidokat és az N-(2-naftoil)-N'- $\beta$ -D-glükopiranozilkarbamidot. Ezzel a szintézissel elkerültük az anomerizációt és a védőcsoportok alkalmazását, illetve a végtermékek összhozama jobb lett, mint a korábban alkalmazott módszerek esetén. Munkám másik részében megmutattam, hogy (ulozilkarbamid)onsavamid típusú vegyületek is előállíthatók. Ezek további képviselőinek elkészítése azért lehet fontos, mert egyesítik a jó gátlást mutatott karbamid és onsavamid származékok szerkezeti sajátosságait.



R = fenil, 2-klór-fenil, 4-klór-fenil, 2-fluor-fenil, 4-nitro-fenil, 1-naftil, 2-naftil, 2-naftoil

R' = H, CONH<sub>2</sub>

Az új vegyületek enzimgátló hatásának meghatározására a közeljövőben kerül sor.

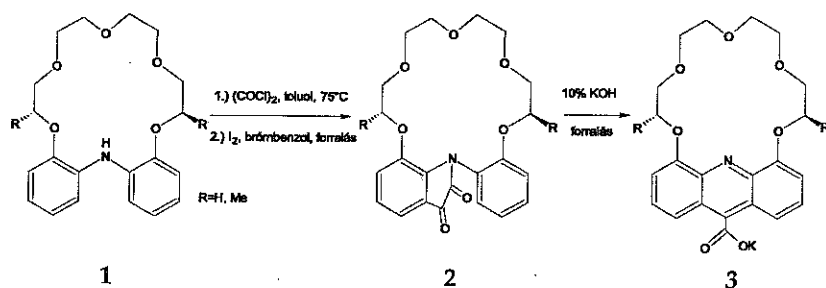
## Akridin-9-karbonsav egységet tartalmazó koronaéterek szintézise

Lakatos Szilvia, IV. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

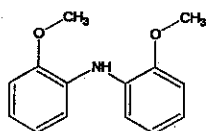
Témavezető: Dr. Fetter József egyetemi docens  
BME Szerves Kémia Tanszék

A királis koronaéterek jelentősége elsősorban racemátok rezolválása terén várható. Korábban előállítottak akridinegységet tartalmazó koronaétereket, melyek előnyös komplexképző tulajdonsággal rendelkeztek. Feladatunk volt az akridinegységen olyan funkciós csoportot tartalmazó koronaéterek előállítására, mely funkciós csoporttal azok szilikagél felületéhez köthetők.

Az általunk előállított 1 típusú vegyületekből kiindulva eljárást dolgoztunk ki új, az akridin egységen 9-helyzetben karboxil-csoportot tartalmazó koronaéterek szintézisére, mely az alábbi módon történik:



Kísérleteink során a legnagyobb nehézséget a 2 izatingyűrűjének kialakításakor fellépő mellékreakciók jelentették. A mellékreakciókat az alábbi modellvegyületen végzett kísérletekkel derítettük fel és dolgoztuk ki a visszaszorításukra alkalmas körülményeket:



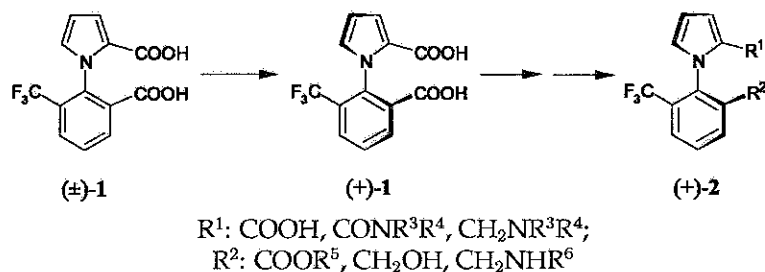
Az előállított vegyületeink (3a (R=H) és 3b (R=Me)) allilamidjai komplexképző tulajdonságának, illetve a szilikagélhez kötött optikailag aktív származék enantiomer elválasztó képességének vizsgálatával a BME Szerves Kémia Tanszékén Huszthy Péter és munkatársai foglalkoznak.

## Optikailag aktív 1-(2-trifluorometilfenil)pirrol származékok szintézise

Mátravölgyi Béla, V. évf. vegyész-mérnök  
BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

A BME Szerves Kémiai Technológia Tanszékén működő kutatócsoportban már több éve folynak új arilpirrol származékok szintézisét és tulajdonságaik vizsgálatát célzó kutatások. Munkám során optikailag aktív 1-(2-trifluorometilfenil)pirrol származékok előállítását vizsgáltam. Céлом volt egy új eljárás kidolgozása modellvegyületem (**1**) optikai izomereinek a korábbinál nagyobb hatékonysággal történő előállítására, a tiszta enantiomerek karboxil-funkcióinak szelektív átalakításával új származékok szintézise és bizonyos származékok redukciós reakcióiban korábban tapasztalt defluorozódási mellékreakció elkerülésével a tiszta, trifluorometil-csoportot tartalmazó célvegyületek (**2**) előállítása.



Kísérleteim során a racém, atropizomer vegyületre (**1**) a korábbinál egy négyszer hatékonyabb rezolválási módszert sikerült kidolgoznom, ami igen nagy előnyt jelent a további optikailag aktív származékok szintézise szempontjából.

Különböző sav-észter, savamid-észter, savamid-alkohol, amin-alkohol és savamid-amin funkciócsoport párokat tartalmazó vegyületeket (**2**,  $R^3-6$ : alkil-, benzil-csoportok) állítottam elő. Kidolgoztam a savamid-alkohol típusú vegyületek jó hozamú szintézisét. Az amin-alkohol típusú vegyületek előállítására olyan módszert dolgoztam ki, amellyel a korábban tapasztalt dehalogéneződési mellékreakció elkerülhető és a célvegyületek jó termeléssel kinyerhetők.

Az előállított vegyületek egyes csoportjai bizonyos reakciókban aszimmetrikus indukcióval rendelkezhetnek, ezért a  $C_1$ -szimmetriájú katalizátor ligandumok valamint organokatalizátorok egy új csoportját alkotják.

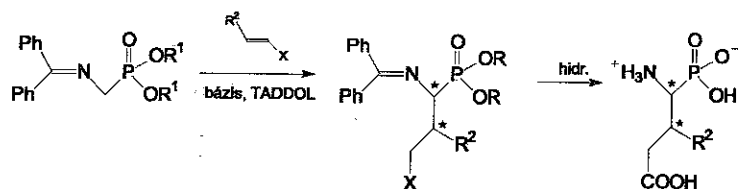
**$\alpha$ -Aminofoszfonsav-származékok előállítása aszimmetrikus Michael-addícióval**

Pham Truong Son, V. évf. vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Jászay Zsuzsa tudományos főmunkatárs  
BME Szerves Kémiai Technológia Tanszék

Az  $\alpha$ -aminofoszfonsavak az  $\alpha$ -aminosavak szerkezetanalogonjai, ún. átmeneti állapot analogonok. Számos érdekes biológiai hatással rendelkeznek mind önmagukban, mind peptid láncba építve. Ebből következik, hogy célszerű az egyes enantiomereket tiszta formában is előállítani. Az irodalomban számos módszer ismeretes, a kutatócsoportban egy új megközelítéssel próbálkoztak.

Az volt a feladatomban, hogy egy akirális védett foszfoglicin származékából kiindulva Michael-addícióval királis katalizátorok jelenlétében állítsak elő optikailag aktív aminofoszfonsav-származékokat.



Katalizátorként nagy térkitöltésű királis diolokat (*R,R*-TADDOL-okat) alkalmaztam. Három különböző akrilsav-származékkal ( $R^2=H$ ,  $X=COOEt$ ,  $COO^{t}Bu$ ,  $CN$ ) enantioszelektív Michael-addíciót, míg metil-krotonáttal ( $R^2=CH_3$ ,  $X=COOMe$ ) diasztereoselektív Michael-addíciót hajtottam végre. Az elsőben 72 %-os, a másodikban közel 100 %-os enantiomer felesleget (ee) sikerült elérni. Megvizsgáltam a katalizátor és a Michael-akceptor szerkezetének hatását a reakció sztereokémiai kimenetelére. A bázis mennyiségének és az alkalmazott katalizátor enantiomer tisztaságának változtatásából következtetéseket lehetett levonni a reakció mechanizmusára is.

Az enantioszelektív és diasztereoselektív reakcióban legjobb ee-vel képződő Michael-adduktból hidrolízissel felszabadítottam a szabad foszfoglutaminsavat és megállapítottam az abszolút konfigurációját.

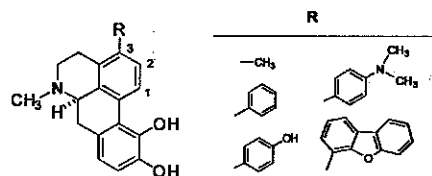
Az enantioszelektív Michael-addícióban elért eredményeinkből megjelent egy közlemény (*Tetrahedron: Asymmetry*, 16, 3837-3840, (2005)).

### Új, dopamin receptorra ható apomorfin származékok szintézise és farmakológiai vizsgálata

Szabó Renáta, IV. évf. gyógyszerész  
DE Gyógyszerésztudományi Kar

Témavezető: Dr. Berényi Sándor egyetemi docens  
DE Szerves Kémiai Tanszék

Az apomorfin a dopamin receptorokra hat és az utóbbi években több hatásterületen is forgalomba került gyógyszerként, így pl. APO-GO<sup>®</sup> néven a Parkinson-kór, Uprima<sup>®</sup> néven pedig a férfi impotencia kezelésére. Az irodalomból több adat ismert a C-2 szénatomon módosított származékok hatása és szerkezete közötti összefüggésekről [1]. Pályamunkámban az eddig nem ismert C-3 helyzetben alkil- és arilszubsztituált származékok előállításáról és farmakológiai vizsgálatáról számolok be.



Az új származékokat Suzuki keresztkapcsolási reakcióval állítottam elő. Két reakcióúton is végrehajtottam a szén-szén kötés kialakítását: egyik esetben vinil-halogenid típusú morfináندیénből, másik esetben pedig aril-halogenid típusú apokodeinből kiindulva [2]. A farmakológiai vizsgálatokat a Richter G. Rt.-ben végezték, eszerint a 3-szubsztituált származékok gyengébben kötődnek a receptorhoz, mint a 2-szubsztituált analogonok.

[1] Søndergaard, K.; Kristensen, J. L.; Palner, M.; Gillings, N.; Knudsen, G. M.; Roth B. L.; Begtrup M.: *Org. Biomol. Chem.* **3**, 4077-4081 (2005)

[2] Sipos, A.; Debreceni, Sz.; Szabó, R.; Gyulai, Zs.; Berényi S.: *Synth. Commun.* (in press)

**$\gamma$ -Keto foszfonátok és foszfin-oxidok előállítása foszfa-Michael-addícióval**

Takács Daniella, V. évf, vegyészmérnök  
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

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

A közelmúltban, a kutatócsoport tagjai - új katalizátorokban alkalmazható P-ligandumok ill. azok prekursorainak hozzáférhetővé tétele céljából - a 3-as helyzetben P-funkciót tartalmazó 1,2,3,6-tetrahidrofoszfinin-oxidokat állítottak elő P(O)H reagensek 1,2-dihidrofoszfinin-oxidokra történő addíciójával, amikor is a reakcióképes P(O)<sup>-</sup> aniont trimetil-alumíniummal képezték [1]. Felvetődött a kérdés, hogy lehet-e egyszerűbb körülmények között is megvalósítani a reakciót.

Célul tűztük ki, hogy egyszerű modellvegyületeken, pl. metilvinilketon és dietilfoszfit ill. gyűrűs >P(O)H vegyületek alkalmazásával tanulmányozzam a foszfa-Michael-addíciót és felderítsem, hogy megvalósítható-e más, praktikusabb reakciókörülmények között. Megpróbáltuk a metilvinilketon és a P(O)H-csoportot tartalmazó vegyületek reakcióját nátriumalkoholát/alkohol rendszerben lejátszani. Megkíséreltük továbbá fázistranszfer körülmények között, valamint diazabicikloundecén jelenlétében illetve mikrohullámú körülmények között is megvalósítani a reakciót [2]. A kapott eredmények birtokában a minél nagyobb termelés és tisztaság elérése céljából optimalizáltuk a foszfa-Michael-addíciót.

Az optimális reakciókörülmények meghatározása után kísérleteket végeztünk gyűrűs >P(O)H vegyületekkel is. Arra a következtetésre jutottunk, hogy mind a mikrohullámú besugárzás, mind a diazabicikloundecén alkalmazása eredményesnek bizonyult, de a leghatékonyabbnak az utóbbi eljárást találtuk.

[1] Keglevich, Gy., Sipos, M., Imre, T., Ludányi, K., Szieberth, D., Tőke, L., *Tetrahedron*, **60**, 6619-6627 (2004)

[2] Keglevich, Gy., Sipos, M., Takács D., Greiner I., *Heteroatom Chemistry*, **17** (2006) nyomdában

**Perfluorinated Organic Compounds with Superficial Activity (Fluorotensides)****Vlad Agotici**, IV. chemistryWUT Faculty of Chemistry, Biology, Geography – *versenyen kívüli*Supervisors: **Dr. Teodor Dehelean** senior researcher

WUT, Faculty of Chemistry, Biology, Geography

**Dr. Constantin Bolcu** associate professor

WUT, Faculty of Chemistry, Biology, Geography

This work presents a short characterization of the perfluorinated organic compounds, the most significant ways of synthesis and the most important applications of these compounds.

The aim of our work was to study the influence of the hydrophilic group on the characteristics of the perfluorinated compounds. We studied the effects of the hydrophilic group on the perfluorocarboxylic acids derivatives and perfluoroalkyl-sulfonate salts. We also studied the superficial characteristics of fluorotensides and hydrocarbonated compounds mixtures.

All these perfluorinated organic compounds have remarkable superficial activity, even in small concentrations or in mixtures. This is the reason why these compounds have a wide range of applications.