

**XXIX. Országos Tudományos
Diákköri Konferencia**



Kémiai és Vegyipari Szekció



**Debreceni Egyetem Természettudományi Kar
DEBRECEN
2009. április 6-8.**

Analitikai kémia I. tagozat

Analysis of Aristolochic Acids from Birthwort using UPLC

Anamaria Craciun, 1st year MSc student, QSAR

West University of Timisoara, Chemistry Department,

Supervisors: **Sabina Danciu**

Dr. Vasile Ostafe professor

Chemistry Department, West University of Timișoara, Romania

Aristolochic acids are extracted from the *Aristolochia sp.* and are a mixture of structurally related nitrophenanthrene carboxylic acids, out of which the most commonly known compounds are the aristolochic acids I, II, C and Ia, the 7-hydroxyaristolochic acid I and the aristolic acid. In the present study we separated the aristolochic acids I and II.

Aristolochic acids and *Aristolochia sp.* have been a subject of debate for about five decades, but led to an even bigger interest in 1991, when the aristolochic acids were found to be responsible for Chinese Herbs Nephropathy. This rapidly progressive renal fibrosis was associated with the prolonged intake of a slimming regimen containing of Chinese herbs, at a clinic from Belgium. The nephropathy was traced back to *Aristolochia fangchi* which contained the aristolochic acids [1]. This led to a series of studies which proved that aristolochic acids formed adducts with the DNA [2]. Moreover, there is a hypothesis stating that the long-term ingestion of aristolochic acids is the reason for Balkan Endemic Nephropathy [3].

Although banned from sale, products based on *Aristolochia sp.* are still sold on web and advertised in various magazines. In Romania there are some newspapers that still provide recipes for treating various diseases with extracts from birthwort plants. This is why a rapid and sound method for quantification of aristolochic acids in products for human consumption is required.

A variety of methods for the rapid and accurate estimation of the aristolochic acids was published. This study is the first use of an Ultra Performance Liquid Chromatography method for the separation of aristolochic acids from different anatomical parts of *Aristolochia clematitis*. The separation of these acids was performed in 2.2 minutes. The best solvent for the extraction of the aristolochic acids was assessed and out of methanol, ethanol, chloroform, ethylic ether and acetone, it turned out that the best solvent for the extraction was acetone. The extraction of the aristolochic acids was also performed at two different temperatures, room temperature (~ 25°C) and 50°C. The amount of aristolochic acids was assessed in rhizome, basal and apical stems, mature and young leaves and flowers. The highest content of aristolochic acids was found in flowers and young leaves.

[1] Vanherweghem J.-L., Depierreux M., Tielemans C., Abramowicz D., Dratwa M., Jadoul M., Richard C., Vandervelde D., Verbeelen D., Vanhaelen-Fastre R., Vanhaelen M., *Lancet*, 341, 387-391 (1993)

[2] Arlt V.M., Stiborova M., Schmeiser H.H., *Mutagenesis*, 17 (4) 265-277 (2002)

[3] Hranjec T., Kovac A., Kos J., *Croat. Med. J.*, 46, 116-125 (2005)

Grafit szerkezetű szén HPLC -állófázis jellemzése szénhidrát származékokkal

Gulyás Zsanett, III. biológia BSc

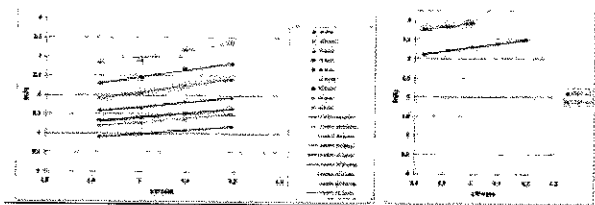
Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Harangi János, egyetemi docens

Debreceni Egyetem Biokémiai Tanszék

Az enzimreakciók termékeként keletkező 4-nitro-fenil és 2-klór-4-nitrofenil glikozidok gyors elemzésére teszteltük a poláris komponensek elválasztására általánosan használt porózus grafitizált szén (PGC) állófázist. Azt tapasztaltuk, hogy a 4-nitro-fenil aglikon esetében ez az állófázis alkalmazható az említett elemzésre, míg a 2-klór-4-nitro-fenil glikozidok esetében nem (ld az eredmények Van't Hoff ábrázolását alább). Ez azt a feltételezést is megerősíti, hogy a PGC oszlopon a retenciót az elektronrendszer és az elektronsűrűség meghatározza, a nagy elektronsűrűségű komponensek erősen kötődnek a PGC oszlophoz

A vizsgált vegyületek retenciós viselkedése a PGC oszlopon jelentősen eltér a fordított fázisú oszlopon tapasztalt retenciós viselkedéstől. A különböző cukorkomponensek retenciós viselkedését nehéz megmagyarázni. Míg a 4-nitro-fenil glikozidáz retenciója pár perces tartományba esik, a hasonló xilopiranozid származéknak lényegesen nagyobb volt a retenciója. Ez valószínűleg a molekula konformációjával magyarázható, az állófázis felületéhez jobban illeszkedik. Habár a grafitizált szén alapú oszlop gyenge fordított fázisú viselkedést mutatott, a polárisabb maltooligomer származékoknak nagyobb volt a retenciós ideje, ami a retenció részbeni abszorpciós mechanizmusával magyarázható.



Koleszterin metabolizmus vizsgálata gázkromatográfiás módszerrel

Hajdú Ivett, III. biológia BSc

Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Harangi János egyetemi docens

Debreceni Egyetem, TEK, TTK, Biokémiai Tanszék

A koleszterin a biológiai szempontból fontos szterán vázas vegyületek bioszintézisének és metabolizmusának központi szereplője. Az orvosi szakirodalomban számos értekezés található a koleszterin szerepéről, abban nagyjából egyetértés van, hogy a vér magas koleszterin szintje elősegíti a keringési rendszerben a lerakódások képződését, hozzájárulhat az erek elzáródásához. A magas koleszterin szint ellenőrzésére és a hatékony kezelés segítésére olyan elemzési módszerre van szükség, amely gyorsan, rutinszerűen alkalmazható, és a bioszintézis valamint a lebontás termékét is ki tudja mutatni. Ezzel a kezelést végző orvos információhoz jut a magas koleszterin kialakulásának okáról, a terápiát az adott beteghez igazítja.

Az elemzéshez szililezést alkalmaztunk a jobb detektálhatóság és a minta hosszabb idejű tárolásának érdekében. Munkám során olyan gázkromatográfiás elemzési módszert dolgoztam ki, amellyel az elemezni kívánt komponenseket megfelelő érzékenységben detektálni tudtam, az elúciónak a pontos helyét és sorrendjét nagyon kis mennyiségű komponensek esetén gázkromatográf-tömegspektrométer alkalmazásával állapítottam meg. A komponensek tömegspektrometriás azonosításához felhasználtuk a rendelkezésre álló tömegspektrum könyvtárakat, illetve az eddig nem ismert tömegspektrumokat saját könyvtárba vittük, és ezt alkalmaztuk az azonosításhoz.

**Természetes forrásokból származó színanyagok és bioaktív hatóanyagok
kinyerése és azonosítása, valamint a növényi extraktumok antioxidáns
aktivitásának vizsgálata**

Juhász Mihály, IV. évfolyam, Földrajz-környezetvédelem szak

Eszterházy Károly Főiskola, Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kiss Attila**, főiskolai tanár

Eszterházy Károly Főiskola, Biokémia és molekuláris biológia tanszék, menedzser-
igazgató, EGERFOOD- Regionális Tudásközpont

Dr. Murányi Zoltán, főiskolai docens

Eszterházy Károly Főiskola, EGERFOOD- Regionális Tudásközpont

Szováti Katalin, tudományos segédmunkatárs

Eszterházy Károly Főiskola, EGERFOOD- Regionális Tudásközpont

Dr. Forgó Péter, tudományos főmunkatárs

Eszterházy Károly Főiskola, EGERFOOD- Regionális Tudásközpont

A szakirodalomban számos, a természetes forrásokból származó antioxidáns hatású komponensek extrakciójára irányuló vizsgálattal találkozunk, a munkánk célja ezen módszerek hatékonyságának vizsgálatán túl az volt, hogy az Ételmiszerkönyv ide vonatkozó szabályozásainak is eleget tevő extrakciós módszert dolgozzunk ki. A legmegfelelőbb növényi mintákból nyert színanyag komponenseket HPLC technikával történő azonosítás és mennyiségi meghatározás után élelmiszeripari célokra kívánjuk felhasználni.

A növényi mintákból homogenizálás után 7 eltérő extrahálószerrel (etanol: ecetsav: víz; etil acetát: víz; aceton; etanol; hexán; etil-acetát; forró víz) kivonatokat készítettünk, a minták antioxidáns aktivitását fotometriás úton FRAP és DPPH módszerrel határoztuk meg. A növényi kivonatok színanyagainak (karotinoid és antocián származékok) azonosítását, és mennyiségi meghatározását HPLC technikával végeztük el. Legjobb extrakciós hatékonysággal az etanolos és forró vizes kivonási módszerek jellemezhetőek, az alkoholos kivonás előnye – kisebb hatékonysága ellenére –, a rövidebb extrakciós idő. Répa, fokhagyma és káposzta minták vizsgálata során megállapítottuk, hogy azok származási helye nem befolyásolja lényegesen az antioxidáns tulajdonságot (<10 %), és az egyes növényi részek között sincs nagy eltérés (kivéve a lilakáposzta, ahol a belső levelek antioxidáns kapacitása kisebb), legjobb antioxidáns hatással pedig a fokhagyma mintákat jellemezhetjük. Lilakáposzta kivonatban nagy mennyiségben azonosítottunk antociánin származékokat (Pg-Glc, Pn-Glc, Cy-Glc-Mal-Mal és Pn-Glc-Mal), amelyek mennyisége alkoholos extrakció esetében jelentősen több volt, mint a vízbázisú kivonatokban.

β -triglicidil-izocianurát immobilizálása folyadékkromatográfiás

szilikagél felületén

Kardos Zsolt, V. évf., vegyészmérnöki szak

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Fekete Jenő** egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dr. Vargha Viktória tudományos főmunkatárs

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A kutatómunka egy új folyadékkromatográfiás állófázis kifejlesztésére irányul, amelyet a szilikagél felület kémiai módosításával kívánunk megvalósítani.

Az állófázis újszerűségét a módosító vegyület szerkezeti sajátosságai biztosítják. A molekula ugyanis minden tekintetben különbözik, a manapság állófázis módosításra rutinszerűen használt klórszilánoktól, valamint ezek egyéb származékaitól. Az általunk kiszemelt molekulát, ugyanis az eddigiek során kizárólag a műanyagipar alkalmazta karboxilfunkciós poliészter- és akrilgyanta alapú, hőre keményedő porbevonatok térhálósító komponenseként. A vegyület kromatográfiás alkalmazását indokolja továbbá, hogy három reaktív epoxi csoportja révén a felületi szilanol csoportokkal könnyűszerrel reakcióba vihető.

Az alábbi munka végigkíséri a szilikagél felületi módosítását a kezdeti lépésektől, egészen a folyadékkromatográfiás kolonna elkészítéséig, teszteléséig, magában foglalva a heterogén fázisú reakció megvalósításának pontos részleteit, illetve lefutásának nyomon követését, a megfelelő analitikai módszerek felhasználásával.

Az alábbi tanulmány alapján levonható tapasztalatok, eredmények egy olyan kutatás stabil alapköveinek tekinthetők, amely a későbbiek folyamán egy olyan kromatográfiás állófázis kifejlesztését tűzte ki célul, amely enantiomerek hatékony elválasztását teszi lehetővé. A királis állófázis megvalósításában fontos szerepet játszhat az általunk alkalmazott módosító molekula nagy optikai aktivitása, amely három, egyenértékű királis centrumának köszönhető.

Úgy vélem a kutatás fontosságát az is alátámasztja, hogy napjainkban az enantiomerek hatékony elválasztásának megvalósítása, az érdeklődés középpontjába került, amely egyértelműen a gyógyszeripar hajtóerejének tudható be.

[1] Dr. Vargha Viktória, *Műanyag és Gumi*, 31 (11), 257-263 (1994)

Zsírsvak mint elhízást jellemző potenciális biomarkerek HPLC-MS vizsgálata

Kiss András, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerzetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Pollreisz Ferenc** tudományos munkatárs
MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet
Vékey Károly MTA doktora, tudományos tanácsadó
MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet

Az obezitás és a diabétesz napjaink népbetegsége; melyek gyakran együtt járnak. Az obezitás legjobb ellenszere természetesen a fogyókúra – de ez nem minden esetben sikeres, és sokak számára nem kellemes foglalatosság. Világszerte komoly erőfeszítések történnek e két betegségsoport megelőzésére és gyógyítására. Ezek részben arra irányulnak, hogy jobban megismerjük ezen betegségek genetikai hátterét, a közrejátszó biokémiai folyamatokat, a szervezetben molekuláris szinten esetleg bekövetkező változásokat. Ez megelőzésükhöz és gyógyításukhoz is hozzásegíthet. Egy hazai kutatási együttműködés (OBEKON) keretében ezeket a molekuláris változásokat kívánjuk felderíteni genetikai, proteomikai és metabolomikai vizsgálatok segítségével. Ennek része annak megállapítása, hogy a vérben és a zsírszövetben előforduló különböző zsírsvak és főleg ezek egymáshoz viszonyított aránya megváltozik-e ezen betegségek esetén.

A zsírsvagyacscere jelentősége jól ismert; köztudott példa az ω -3 típusú zsírsvak („halolaj-kapszula”) kedvező hatása a koleszterin anyagcserére. Az elhízással kapcsolatos nagyszámú közlemény ellenére meglepő, hogy mindeddig nem vizsgálták, mennyire tér el obéz és az egészséges emberek szervezetében az egyes zsírsvak aránya. Mivel elhízott egyénekben gyakran kialakul a diabétesz, kérdés, hogy ennek kialakulása milyen mértékben kapcsolódik a zsír-háztartásban meglévő esetleges különbségekhez.

Kutatásaink során a plazma zsírsvavösszetételét vizsgáltuk HPLC-MS technika segítségével. A humán plazmában levő szabad, valamint (hidrolízist követően) a kötött formában levő zsírsvakakat külön-külön vizsgáltuk. Munkánk során optimaltunk a minta-előkészítést, a kromatográfias módszert, valamint a tömegspektrometriás detektálást. Humán plazmában összesen mintegy 20 különböző zsírsvavat mutattunk ki. Orvosilag jól jellemzett, nemre, korra és súlyra (pontosabban BMI-re) kiegyensúlyozott betegcsoportokat vizsgáltunk, az eredményeket egészséges önkéntesekre kapott értékekhez hasonlítottuk.

Peszticidek meghatározása komplex mintákból az AMDIS program segítségével

Kramarics Áron, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Eke Zsuzsanna egyetemi tanársegéd
ELTE Analitikai Kémiai Tanszék

Napjainkban a mintaelőkészítés és a mintaadagolás egyre nagyobb mértékű automatizáltsága miatt a kromatográfias módszerek analízisidejének egyre jelentősebb hányada fordítódik a kromatogramok kiértékelésére. Különösen igaz ez olyan módszerek esetén, melyeket sok (100-200) komponens mérésére fejlesztettek ki. A kísérleti technika fejlődése és a hagyományos kiértékelési módszerek hátrányai miatt egyre inkább előtérbe kerülnek az olyan módszerek, melyek a teljes tömegspektrumot használják fel azonosításra.

Munkám során az NIST (*National Institute of Standards and Technology*) kutatói által kifejlesztett AMDIS (*Automated Mass Spectral Deconvolution and Identification System*) nevű programot használtam. Modellrendszerül peszticidek vizsgálatát választottam különböző zöldségekben és gyümölcsökben.

A peszticidek azonosítására az *G1672AA Pesticide and Endocrin Disrupter Database*-t használtam fel. Mivel a módszer kifejlesztése során korábban felvett minták kromatogramjait dolgoztam fel, ezért célul tűztem ki olyan módszer felállítását, mely nem igényel retenciós idő zárolt (*retention time locked*) rendszerben felvett adatokat. A spektrumkönyvtár használatához szükség volt a retenciós idő-retenciós index skálák alkalmas megfeleltetésére, mivel azt tapasztaltam, hogy - a kísérleti körülmények azonossága ellenére - a célkomponensek a vártál jóval hamarabb eluálódnak. Erre kezdetben a műanyag eszközökből kioldódó ftalátokat, majd néhány, a standardoldatban előforduló, jól mérhető, tömegspektrumában sok és viszonylag intenzív fragmenst tartalmazó célkomponenst használtam fel.

A kifejlesztett módszer mind a 15 vizsgált standardoldatban helyesen azonosította az izomereket, a megadott egyezési faktoralal nem talált fals pozitív vegyületeket a standardoldatokban, valamint a mintákban minden esetben kimutatta a hagyományos mennyiségi kiértékelés alapján 0,01 mg/kg-nál nagyobb mennyiségben jelen lévő peszticideket.

A spektrumkönyvtár használatával lehetővé vált számos olyan anyag minőségi azonosítása is a mintákban, melyek az eredeti kiértékelő módszerben nem szerepelnek (különböző bomlástermékek, poliaromás szénhidrogének, ftalátok).

A MEPS (microextraction by packed sorbent) alkalmazása PAH – ok meghatározására felszíni vizekből GC-MS technikával

Lezsák Gábor, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Torkos Kornél** egyetemi docens

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémia Tanszék

A többgyűrűs aromás szénhidrogének (PAH-ok) olyan vegyületek amelyek kondenzált gyűrűkből állnak, és nem tartalmaznak heteroatomot, vagy oldalláncot. Széntartalmú vegyületek nem tökéletes égésével keletkeznek. Főként olajban, szenekben és káros lerakódásokban dúsulnak, de kisebb mennyiségben megtalálhatók mindenhol (pl levegő, környezeti vizek). Kimutatásuk és mérésük azért fontos, mert a szóban forgó vegyületek nagy hányada karcinogén, mutagén, genotoxikus.

A PAH - ok megengedhető koncentráció szintjeit nemzeti és nemzetközi előíratok egyaránt szabályozzák. Vízmintha esetén mintaelőkészítési módszerként folyadék-folyadék extrakció (LLE) használatos, melynek több hátránya is van: nem automatizálható, nagy oldószer mennyiséget igényel és sok esetben az extraktum bepárlása szükséges. Ismeretesek szilárdfázisú extrakciós módszerek is, melyeknél az automatizálás és a dúsítás lehetősége adott, de a felhasználandó oldószer mennyisége még mindig jelentős.

A MEPS (Microextraction by Packed Sorbent), egy új mintaelőkészítési technika, mely a szilárdfázisú extrakció elvén alapul. A MEPS hegy 2–3 mg szilárdfázisú töltetet tartalmaz, amely lehet C2, C8, C18, ioncsereelő, vagy módosítatlan szilikagél. Ezt a hegyet egy 10–250 µl-es, esetleg nagyobb térfogatú fecskendőhöz lehet csatlakoztatni. Minta oldatok átpumpálásakor a célvegyület szorbeálódik az állófázison, a pumpálás számának növelése az extrakciós hatásfokot emelheti. A megfelelő oldószeres mosással az interferáló anyagok, és a mátrix egy részét eltávolíthatjuk, ezután közvetlenül eluálhatjuk a célkomponenseket LC vagy nagyterfogatú GC injektorba. A módszer előnye, hogy csatlakoztatható automata mintaadagolóhoz, ezáltal költséghatékonyan lehet automatizálni. További előnye, hogy kevesebb időt, mintát, és oldószert igényel, mint a korábbi módszerek.

A magas hőmérsékletű HPLC elmélete, gyakorlata és alkalmazási lehetőségei

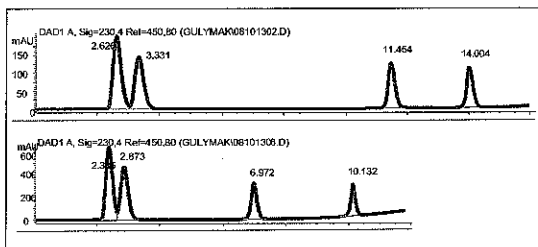
Makuta Mariann, III. biológia BSC
Debreceni Egyetem TEK

Témavezető: Dr. Harangi János, egyetemi docens

TTK Biokémiai Tanszék

A sokkomponensű rendszerek elemzése szükségessé teszi az elemzési paraméterek változtatását a HPLC elemzés során annak érdekében, hogy széles polaritásbeli eltérést mutató komponenseket el tudjunk választani egy elemzésben. Az eddig alkalmazott gradiens elúció helyett kísérleteinkben a hőmérsékletet változtattuk, ennek hatása összemérhető a gradiens elúció hatásával.

Az emelkedő hőmérséklet által okozott viszkozitás csökkenése lehetővé teszi, hogy az elemzés során az áramlást is programozzuk. Ezzel az elválasztóképesség észrevehető változása nélkül az elemzés izokratikus körülmények között rövidebb idő alatt is elvégezhető.



(Standardok elválasztása gradiens elúcióval és programozott hőmérsékletű és áramlású elemzéssel:
dimetil-, dietil-, dibutil- és di-n-pentil-ftalát)

Zsírsavak gázkromatográfiás meghatározására alkalmazható származékképzési eljárások összehasonlítása

Molnár László V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Eke Zsuzsanna tanársegéd

ELTE TTK Elvlasztástechnikai Kutató és Oktató Laboratórium

Számtalan oka lehet annak, hogy növényi és állati eredetű termékek zsírsavösszetételének illetve zsírsavtartalmának meghatározására merül fel igény. Említhetjük például, hogy a zsírsavösszetétel alapján megállapítható, hogy a növényi olaj milyen növényből származik, vagy elvégezhető egyes baktériumtörzsek azonosítása. Ugyancsak közismert, hogy élettani hatásuk miatt fontos az élelmiszerekben előforduló különböző típusú (telített/telítetlen, cisz/transz, $\Omega 3$ $\Omega 6$) zsírsavak aránya, mennyisége is. Érdekes alkalmazási terület, hogy egyes zsírsavak mennyiségei és egymáshoz viszonyított arányai alapján eldönthető, került-e húsipari termékbe központi idegrendszeri szövet, és ha igen, akkor mely fajhoz tartozó és milyen korú állat. Ebben az esetben különös hangsúly kerül a 20-nál több szénatomot tartalmazó, több esetben a telített, vagy telítetlen láncon hidroxil-csoportot is tartalmazó zsírsavak meghatározására. A feladat megoldására a nagy szénatomszám ellenére a zsírsavösszetétel mérésben hagyományosnak tekinthető metilezést követő gázkromatográfiás meghatározás a legalkalmasabb. Felmerül azonban a kérdés, hogy az ismert származékképzési eljárások közül ezen vegyületek esetén melyik metilezési eljárás a legalkalmasabb. Valamint, hogy a hidroxil-csoportot tartalmazó komponensek miatt szükséges-e a metilezést követően szililezési lépést is beiktatni. Vizsgálataim során nervonsavval, mirisztinsavval, 2-OH-tetrkozánsavval és 2,2-D₂-dokozánsavval teszteltem a trimetil-szulfónium-hidroxidos, a metanolos sósavas és metanolos kénsavas metilezést, valamint a szililező szerek közül a trimetil-szilil-imidazolt és a trimetilszilil-N,N-dimetil-karbamátot. Az összehasonlítás során elsősorban olyan fontos jellemzőket vettem figyelembe, mint a reprodukálhatóság, a kimutatási határ, a reakció ill. a mintaelőkészítés időigénye, kivitelezhetőségének egyszerűsége és a származékolt minták eltarthatósága.

Gyulladáscsökkentők meghatározása felszíni vizekből

LC-MS-MS módszerrel

Nász Szilárd, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Eke Zsuzsanna egyetemi tanársegéd
ELTE Analitikai Kémiai Tanszék

A gyulladós betegségek kezelésére kifejlesztett gyógyszerek egyre nagyobb teret hódítanak világszerte. Elsősorban tablettá, kapszula és kenőcs formájában alkalmazott készítmények találhatók meg. Gyógyhatásuk szájon át történő bevétellel, illetve a gyulladt testrészeire való kenéssel érhető el.

Problémát okoz, hogy a tablettaként vagy kapszulaként elérhető gyulladáscsökkentők az emberi, illetve állati szervezetből kiürülés útján, míg kenőcs formában alkalmazottak pedig lemosás után a szennyvizekbe, illetve a felszíni vizekbe kerülhetnek. A problémát fokozza, hogy a nem megfelelő hulladékkezelésnek köszönhetően ugyancsak bekerülhetnek a vizeinkbe. A felszíni vizeink a tisztítási lépéseket követően kerülnek a háztartásokba, de a jelenleg alkalmazott tisztítási technológiák ezeknek a komponenseknek a hatékony eltávolítására nincsenek felkészítve, ebből kifolyólag a háztartásokhoz eljutó vizek is tartalmazhatnak gyulladáscsökkentőket. Mivel jelenlétük a vízi élővilág és az ember számára egyaránt káros, igen fontos, hogy rendelkezésünkre álljanak olyan analitikai módszerek, melyek alkalmasak a szennyeztségek pontos felmérésére.

Kutatásom során kifejlesztettem egy LC-MS-MS módszert felszíni vizekben ng/ml koncentrációban jelenlévő nem-szteroid gyulladáscsökkentők meghatározására.

A nagyfokú szelektivitás eléréséhez a tömegspektrométer MRM módszerét használtam. A módszer további előnye, hogy nem kell származékképzést alkalmazni, ezzel is csökkentve az analízisidőt.

Módszerfejlesztésem során többek között vizsgáltam a megfelelő mintatérfogatot, az elúciós oldószer minőségét és leoldási térfogatát, a bepárlás során az oldószer összetételét. Műszeres oldalról meghatároztam a megfelelő oszloptermosztát hőmérsékletet, vizsgáltam az ionforrás hőmérsékletét és a detektálás paramétereit.

Vizsgáltam a módszer analitikai teljesítményjellemzőit: szelektivitást, linearitást, érzékenységet, torzítatlanságot, pontosságot, kimutatási és meghatározási határt.

A teljes meghatározás mintaelőkészítéssel együtt megközelítőleg 120 percet vesz igénybe.

Apoláros polimerek vizsgálata atmoszférikus nyomású fotoionizációs tömegspektrometriával (APPI-MS)

Nyíri Andrea, V. évf. környezettudomány

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kéki Sándor tanszékvezető egyetemi docens
DE Alkalmazott Kémiai Tanszék

Az apoláros polimerek vizsgálatának analitikai szempontból kitüntetett jelentősége van, hiszen sokoldalú felhasználásuk ellenére ezek lágyonizációs tömegspektrometriás módszerekkel (pl.: MALDI: Matrix Assisted Laser Desorption/Ionization, ESI: Electrospray Ionization) nehezen ionizálhatók. Az eddigi vizsgálataink alapján ezen apoláros makromolekulák vizsgálatára az atmoszférikus nyomású fotoionizációs tömegspektrometria (APPI-MS) alkalmas, így az apoláros polimerek ismétlődő egységei és a végcsoportjai meghatározhatók.

Az általunk vizsgált 12 polimernek változatos tulajdonságai vannak: mind molekulatömegük ($M_n=800-4500$), mind a funkciós csoportjaik változatosak. Ez lehetőséget biztosított számunkra, hogy megvizsgáljuk a szerkezet és az alkalmazható tömegspektrometriás módszerek közötti összefüggést.

Tapasztalataink szerint az apoláros polimerek közül elsősorban az aromás rendszert tartalmazók vizsgálhatóak MALDI tömegspektrometriával ezüstion kationizáló ágens jelenlétében.

Pozitív ion módú APPI méréseink során a polimer fragmentációját tapasztaltuk. A fragmentáció miatt e módszer alkalmas a polimer szerkezetének vizsgálatára, de nem alkalmas a végcsoportok meghatározására.

Negatív ion módú APPI körülmények között a polimer kloridionnal képzett, egyszeres töltésű addukcionjainak megjelenését tapasztaltuk a tömegspektrumokban.

Összefoglalva megállapítható, hogy negatív ion módú APPI körülmények között toluol dopant és szén-tetraklorid segédáram jelenlétében sikerült fragmentáció nélkül ionizálni az apoláros polimereket, ezzel lehetővé vált ezen polimerek tömegspektrometriás vizsgálata.

β -2 és β -3-homoaminosav enantiomerek nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás elválasztása

Pataj Zoltán, I. évfolyam PhD hallgató

Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Péter Antal** egyetemi tanár

SzTE Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

A természetben előforduló biológiailag fontos vegyületek többnyire királisak. Az enantiomerek eltérően reagálnak biológiai rendszerekben, ezért bír nagy jelentőséggel, hogy az enantiomerek tiszta formában álljanak rendelkezésre. A szerves kémiai szintézisek között ritka a sztereospecifikus reakció, így szükségessé válik az enantiomerek szétválasztása. Erre a célra – többek között – elterjedten használják a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás (HPLC- High Performance Liquid Chromatographic) módszereket.

Az elmúlt évtizedben megnövekedett az érdeklődés a β -aminosavak iránt, melyek igen fontos közbenső termékei gyógyszerészetben használatos termékeknek, valamint alkotórészei természetben jelen lévő fontos vegyületeknek, mint alkaloidoknak, peptidnek és β -laktam antibiotikumoknak. A β -aminosavakat a biológiailag aktív peptidok szintézise során a szerkezet rögzítésére használják.

Királis vegyületek elválasztása történhet közvetlen és közvetett módszerrel. Közvetlen formában királis oszlop vagy eluens alkalmazásával, közvetett úton, pedig származékképző alkalmazásával.

Vizsgálataink során a közvetlen módszert részesítettük előnyben és azon belül is az oszlop szolgáltatja az elválasztáshoz szükséges királis körülményeket. Munkám egyik célja a β -aminosav enantiomerek elválasztásának optimalizálása az antibiotikum szelektorral rendelkező Chirobiotic T, T₂ és TAG folyadékkromatográfiás oszlopokon. A kitűzött cél elérésének érdekében a tizenöt modellvegyület enantiomerjeinek elválasztását figyeltük azonos körülmények között. Ezek közül néhány kitüntetett vegyülettel a mozgófázis összetétel és a hőmérsékletváltozás hatását is vizsgáltuk. Az eluens függés során a mozgófázis összetételt 0,1% TEAA/MeOH 90/10-10/90 (v/v) közötti intervallumon belül változtattuk, míg a hőmérséklet hatását az elválasztásra 280-318K hőmérséklettartományban, 10 fokként vizsgáltuk. A van't Hoff egyenlet felhasználásával kiszámítottuk a kromatográfiás megoszlás során létrejövő entalpia, entrópia és szabadentalpia változásokat és ezen mérési eredményekből következtettünk az elválasztás lehetséges mechanizmusára.

Analitikai kémia II. tagozat

Szerves anyagok amperometriás értékelése vizes oldatokból bórral dóppolt gyémánt elektród segítségével

Bartók Melinda, I. évf. MSc hallgató, Grate szak

Temesvári Nyugati Egyetem, Kémia Tanszék

Témavezetők: **Dr. Dan Cinghita**
Dr. Ciprian Radovan egyetemi tanár
Temesvári Nyugati Egyetem, Kémia Tanszék

A dolgozat néhány szerves anyag amperometriás vizsgálatával és kimutatási módszerének kidolgozásával kapcsolatos eredményeinket tartalmazza. A szóbanforgó anyagok lehetnek különböző szennyezők, anyagcsere-folyamatokban résztvevő vegyületek vagy élelmiszerek összetevői.

Elsődleges vizsgálati célunk az amperometriás értékelés valamint az anódos kimutatás és meghatározás volt. Vizsgálataink során sp^3 konfigurációjú szén alapú szilárd, illetve szakécg által elektroanalitikai célokra gyártott, bórral dóppolt, gyémántfilmet használtunk. A klasszikus sp^2 konfigurációjú elektródokkal (GC, grafit), fémelektrodokkal (függő- vagy csepegő higanyelektrod) vagy nemesfém-elektrodokkal (Au, Pt) szemben, a bórral dóppolt gyémántelektrod számos kedvező sajátosságot mutatott az elektrokémiai szempontból anód-aktív szerves anyagok közvetlen meghatározása során (anódos oxidáció révén).

A vizsgált elektród előnyös tulajdonságai közül kiemelt jelentőséggel bír az amperometriás vizsgálat során megvalósítható szélesebb potenciáltartomány – amelynek kedvez az oxigén illetve hidrogén fokozott túlfeszültsége – a viszonylag alacsony kapacitív alapáram, az előnyös mechanikai-, kémiai- és elektrokémiai stabilitás, a gyenge adszorpció és ennek eredményeképpen az eltömődés hiánya, vagy a gyenge eltömődés olyan anyagok jelenlétében is, amelyeknek elektrokémiai átalakulása gyakran okozza az amperometriás szenzor aktív felületének hatástalanítását.

A vizsgált anyagok közvetlen kapcsolatban állnak a bórral dóppolt gyémántelektrod felhasználási lehetőségeivel. Ezek mérgező hatású tioamid típusú összetevőket tartalmaznak, illetve olyan nitrogén tartalmú heterociklusos anyagokat, amelyek az anyagcsere-fluidumokban és élelmiszerekben fordulnak elő. Ezen termékek kémiai komponenseinek elektrokémiai vizsgálata és kimutatási tartományának felmérése első közelítésben az elektrokémiai szempontból aktív anyagok voltametriás kiértékelését, valamint a voltametriás típusú amperometriás vagy kronoamperometriás kimutatás számára elérhető tartomány kijelölését jelentette. E célból Metrohm gyártmányú, háromelektrodos üvegcellát használtunk. Munkaelektrodként egy Windsor Ltd. gyártmányú, teflonburokba rögzített, 3 mm átmérőjű bórral dóppolt gyémánt elektródot működtettünk. Továbbá platina ellenelektrodot és telített kalomel referencia-elektrodot tartalmazott a mérőcella. Az alapelektrolitot, a pH-t és a potenciáltartományt előzetes tanulmány során megállapított kritériumok szerint választottuk meg. Az analitikusként kezelt kémiai komponensek voltametriai adatok alapján megállapított jellemzőinek ismeretében lehetőség nyílt az amperometriás meghatározás feltételeinek pontosítására. Sorozatos mérésekkel meghatároztuk a módszerre jellemző relatív standard deviációt („relative standard deviation” RSD), a kimutatási küszöböt („limit of detection”, LOD) és az érzékenységet („sensitivity”). Ezek figyelembevételével néhány gyakorlati alkalmazást javasoltunk.

Acetilcolinészteráz inhibícióján alapuló bioszenzor fejlesztése peszticidek vizsgálatára

Fűtő Péter, III. évfolyam, Biológia BSc

Eszterházy Károly Főiskola, Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Kiss Attila**, főiskolai tanár

Eszterházy Károly Főiskola, Biokémia és molekuláris biológia tanszék, menedzserigazgató EGERFOOD - Regionális Tudásközpont

Nagy Péter, tudományos segédmunkatárs

Eszterházy Károly Főiskola, EGERFOOD - Regionális Tudásközpont

Az acetilcolinészteráz enzim az állatok szervezetének idegi működése során keletkező egyik neurotranszmitter anyag, az acetilcolin lebontását végzi, annak túlermelődése esetén. Optimális körülmények között az enzim az acetilcolint acetátra és kolinra bontja, ellenben bizonyos peszticidek (pl. rovarölőszerek) jelenléte esetén gátlás jelentkezik a reakcióban, így az acetilcolin felhalmozódik az idegsejtek közelében és blokkolja azok működését.

Kutatásunk során bioszenzorral (vékonyréteg enzimművel) a DDVP és PIRIMIKARB peszticidek és a 2-PAM reaktiváló molekula hatását vizsgáltuk az acetilcolinészteráz enzim aktivitására nézve. A mérések folyamán igyekeztünk fejleszteni a mérőrendszerünket, amely egy FIA (Flow Injection Analysis) rendszerű, amperometriás detektorral felszerelt műszer. Ezen fejlesztéseknek köszönhetően az acetilcolin helyett egy mesterséges szubsztráttal az acetiltiokolinnal végeztünk méréseket, amelyhez optimalizáltuk, és meghatároztuk a szükséges paramétereket (polarizáló feszültség, áramló puffer összetétel és annak pH-ja, áramlási sebesség, szubsztrát koncentráció, a rögzített enzimművel optimális hőmérséklete). Ezen paraméterek beállítását követően kalibrációs méréseket végeztünk az enzimművel FLOW és STOPPED FLOW metódusban. A kutatásuk során megnöveltük a vékonyréteg enzimművel érzékenységét, amely emiatt stabilabb jeleket, így pontosabb kalibrációs egyeneseket adott.

Valamint sikeres inhibíciós kísérleteket is végeztünk a fent említett peszticidek detektálására 10^{-6} - 10^{-7} M nagyságrendben.

Ciklodextrinek alkalmazása szerves szennyezőanyagok biodegradálhatóságának jellemzésére

Kánnai Piroska, okleveles vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Fenyvesi Éva** kutató vegyész

Cyclolab Kft.

Dr. Torkos Kornél egyetemi docens

ELTE TTK Kémiai Intézet

A szennyezett talajok természetes tisztulása a talaj saját mikrobiális tevékenységének köszönhető: elszaporodnak az adott szennyezőanyagot elviselni, sőt anyagcseréjükben felhasználni képes fajok.

A bioremediációs technológia tervezésekor fontos ismerni az adott terület szennyezőanyagainak biodegradálhatóságát.

A biológiai hozzáférhetőség és ezen keresztül a biodegradálhatóság becslésére kőolajszármazékokkal szennyezett talajminták vizsgálatára került sor.

A talajmintákon végzett biológiai tesztek követően a nem kimerítő kémiai extrakció vizes ciklodextrin -oldatokkal történt. Kétfajta ciklodextrin vizes oldatával zajlottak kísérletek: a véletlenszerűen metilézett (RAMEB) és hidroxipropil- β -ciklodextrint (HPBCD) alkalmazva és extrakciós hatékonyságukat összehasonlítva a RAMEB vizes oldata bizonyult hatékonyabbnak minden esetben, viszont a tapasztalat azt mutatta, hogy a HPBCD -oldatos extrakció alapján jobban becsülhető a biológiailag elérhető szennyezőanyag-frakció.

A biológiai kezelések előtt és után kinyert extraktumok analízise gázkromatográfias módszerrel történt.

A modellkísérletek alapján hasznos információkkal szolgáltunk a bioremediációs technológia tervezéséhez a Budapest határában lévő pakuratak szennyezésének felszámolásához.

Növényvédőszer-maradékok vizsgálata felszíni vizekben

Karim Aziz Dávid, III. évf. gimnázium

Magyar Tannyelvű Alapiskola és Gimnázium

Témavezetők: Ing. Krascsenits Zoltán
Pozsonyi Vízgazdálkodási Kutatóintézet

Munkánk során az immunanalitikai (ELISA) vizsgálatok környezetanalitikai célokra való felhasználását tanulmányoztuk, felszíni vizek vizsgálatával. Az „ELISA” mozaikszó, a vizsgálat angol elnevezésének kezdőbetűiből tevődik össze (Enzyme-Linked Immunosorbent Assay, enzimhez kötött immunsorbens vizsgálatok). Ezek olyan, szilárd fázison lejátszódó színreakciók, ahol a reagensek műanyag felülethez vannak kötve, és a reakciót enzimmel kapcsolt antitest segítségével követjük nyomon. A vizsgált felszíni vizek Szlovákia legnagyobb folyóiból és mellékfolyásaiból. A vizsgálandó hatóanyagokat a Víz Keretirányelv mellékletének (2000/60/EC) és az elérhető ELISA szeteknek megfelelően választottuk ki. A mintákat ELISA módszeren kívül nagyhatékonyságú folyadék-kromatográfiával (HPLC) is megvizsgáltuk. A HPLC-s méréseknél a hatóanyagok vízmintákból történő kinyerése szilárd fázisú extrakciós eljárással történt, polisztirol-divinilbenzol alapú töltetet tartalmazó oszlopon. A módszervizsgálati munkával összhangban hazánk különböző vízgyűjtő területéről származó felszíni vízmintákból a növényvédőszer hatóanyagok koncentrációjának meghatározását rendszeresen végeztem, valamint a mérési eredményeket feldolgoztam, hozzájárulva ezzel az érintett térségek környezeti állapotának értékeléséhez. A vizsgálatok során megállapítottam, hogy az ELISA-módszer érzékeny, egyszerű és a reagenseket gazdaságosan lehet tömegvizsgálatokra felhasználni. Megítélesem szerint az ELISA a monitorozások alapmódszerévé válhat, így a HPLC és GC módszereket már csak a pozitívnak bizonyult minták eredményeinek bizonyítására kellene használni. Figyelembe véve, hogy az ELISA egy rendkívül egyszerűen elsajátítható, és anyagilag nem túl megterhelő módszer, elképzelhetőnek tartom, hogy ez a módszer nemcsak a kutatóintézetek és kórházak által alkalmazott módszer lesz, hanem akár a gazdák is kihasználhatják majd a víz, talaj és termés ellenőrzéséhez. Az eredmények alapján megállapítható, hogy a kelet-Szlovákiai vízfolyások a többi vízfolyással összehasonlítva, néhány hatóanyag szempontjából szennyeztebbek. A glifozát-mérések viszont arra mutatnak, hogy a közép- és dél-Szlovákiai folyók szenvedtek nagyobb szennyezést.

Különböző talajtípusok szerves anyagainak és fémtartalmának hatása peszticidek fotolitikus degradációjára és az átalakulás mechanizmusára

Lehotay Terézia, III. évf. környezettan szak

EKF Természettudományi Kar

Témavezetők: Dr. Kiss Attila Péter főiskolai tanár

Igazgató, EKF EGERFOOD Regionális Tudásközpont

Tanszékvezető, EKF Biokémia és Molekuláris Biológia Tanszék

Virág Diána tudományos asszisztens

EKF Biokémia és Molekuláris Biológia Tanszék

A környezetbe kijuttatott peszticidek alapvegyületeire és kémiai átalakulásuk során keletkező bomlástermékeik további sorsára a különböző környezeti tényezők eltérő hatást gyakorolnak. A peszticidek és azok degradációs termékei a talaj komplex rendszerének számos komponensével lépnek kölcsönhatásba, melyek mértékének feltárására kevésbé irányultak további vizsgálatok.

A vizsgálatunk során eltérő talajok (barna erdőtalaj, homoktalaj) releváns paramétereinek különböző karakterű peszticidek (acetoklór, EPTC) fotodegradációjára gyakorolt hatását, valamint a keletkezett bomlás-termékeknek a talaj fémtartalmával való komplexképzési sajátosságait tártuk fel. A talajok fémtartalmát AAS-technika alkalmazásával határoztuk meg, ezt követően felmértük a talajok fémtartalmának hatását a peszticidek perzisztenciájára barna- és homoktalajon, fémeket tartalmazó és azoktól mentes mintákból egyaránt. A fémek és a szervesanyagok hatásának vizsgálata kiterjedt a peszticidek alapvegyületének bomlási intenzitásának mérésére, illetve a bomlástermékek és a talajban előforduló fémek között kialakuló kölcsönhatások tanulmányozására. A fémkomplexek vizsgálatára spektrofotometriát, az alapvegyületek mennyiségi meghatározására és a bomlástermékek azonosítására GC-MS technikát alkalmaztunk.

Eredményeink szerint a talajok összetételének, így fémtartalmának is jelentős hatása van a peszticidek stabilitására és átalakulási folyamataira. Mindkét peszticid esetében a degradáció mértékét, a keletkezett termékek kialakulását, azok egymáshoz viszonyított arányát az eltérő talajtípusok és azok paraméterei jelentős mértékben befolyásolták. Eredményeink hozzájárulnak az agrotechnológiai eljárások optimalizálásához, a peszticidek megfelelő használatához, illetve biztonságosabb élelmiszer alapanyagok előállításához.

Poli(3,4-etilén-dioxi-tiofén)/vas-oxalát kompozit foto-elektrokatalitikus tulajdonságának vizsgálata

Lukács Zsófia, III. évf. Kémia BSc

SzTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Visy Csaba** egyetemi tanár
SzTE Fizikai Kémiai Tanszék
Bencsik Gábor PhD hallgató
SzTE Fizikai Kémiai Tanszék

A vezető polimerek legfontosabb tulajdonsága, hogy elektromos vezetékük széles tartományban változtatható különböző anyagok beépítésével. Ezen vezető polimerek szeretlen anyagokkal alkotott kompozitjaiban a komponensek sajátosságai ötvözödhetnek.

A kutatócsoportunkban korábban előállított és vizsgált polipirrol/vas-oxalát kompozit [1] analógiájára egy másik vezető polimer (politiofén) alapú összetett anyag szintézisét valósítottuk meg. Választásunk a poli(3,4-etilén-dioxi-tiofén)-re (PEDOT) esett, annak olyan kedvező tulajdonságai alapján, mint a nagy stabilitás, valamint az n és p típusú vezetővé tétel lehetősége. Munkánk során a PEDOT/vas-oxalát kompozitot elektrokémiai úton állítottuk elő, majd a kompozit tulajdonságait vizsgáltuk. A kompozit redoxi sajátosságainak feltérképezésére ciklikus voltammetriát használtunk vizsgálati módszerként. A vezető üvegre (FTO) leválasztott réteg redukcióját és oxidációját *in situ* spektrofotometriás módszerrel is követtük. A kompozit film megvilágítása során a megvilágítás nélkül észlelhető képest eltérő ciklikus voltammogramokat kaptunk, ami a film fotokatalitikus tulajdonságaira utalt. Részletes elemző vizsgálataink alapján megállapítottuk, hogy az elektrolitoldatban levő oldott oxigén mennyiségét változtatva jól meghatározható tendencia szerint változnak a ciklikus voltammogramok. Igazoltuk, hogy a katódos áramok különbsége adott potenciálértéknél az oxigénkoncentráció függvénye. A PEDOT/vas-oxalát kompozit elektród ilyen módon foto-elektrokémiai szenzorként alkalmas vizes oldatok oxigéntartalmának detektálására és mérésére.

[1] C. Visy, G. Bencsik, Z. Németh, A. Vértes, *Electrochim. Acta* 53, 3942-3947

Közlekedési eredetű antimonvegyületek elválasztása és meghatározása

Neuróhr Katalin, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Zihné Dr. Perényi Katalin egyetemi adjunktus
ELTE Analitikai Kémiai Tanszék

Az autók fékbetéteiben az azbesztet antimon(III)-szulfiddal helyettesítik, amely fékezéskor porlódik, oxidálódhat és az aeroszol összetevőjeként a levegőbe kerül. Ezért a forgalmas városi csomópontok közelében megnőtt a nem természetes eredetű antimonkoncentráció. Megállapítottuk, hogy az Sb_2S_3 oxidációja során az Sb_2O_3 mellett Sb_2O_4 is keletkezhet.

Munkánk során fő feladatként az antimon(III)-oxid és az antimon(III)-szulfid elválasztását tűztük ki. Ehhez szisztematikusan oldhatósági vizsgálatokat végeztünk. A tiszta antimonvegyületeket (Sb_2O_3 , Sb_2O_4 és Sb_2S_3) ráztuk különböző minőségi összetételű és koncentrációjú kioldóközegekben, a kioldott antimon(III) mennyiségét időről időre bromatometriás titrálással határoztuk meg. Az oldhatósági vizsgálatokból azt a következtetést vontuk le, hogy az Sb_2O_3 szelektíven elválasztható a másik két vegyülettől négy óra ráztatás után borkósav- vagy citromsav-oldat hatására. Az oldódást gyorsítani lehet híg sósav hozzáadásával. Továbbá mind az antimon(III)-oxid, mind az antimon(III)-szulfid oldódik 6 mol/dm^3 töménységű sósavban akár fél óra alatt, ellentétben az Sb_2O_4 -dal, így attól szelektíven elválaszthatók.

Következő lépésben azt vizsgáltuk, hogy az oldhatósági vizsgálatoknál nyert tapasztalatok érvényesek-e természetes mátrix nyomnyi mennyiségű antimonszennyezésének kioldására. Mivel nincs a kereskedelmi forgalomban olyan hitelesített szilárd minta, amely az egyes antimonvegyületekre is hitelesítve lenne, ezért a szelektivitási vizsgálatokhoz azonos antimon tartalmú, adott antimonspeciezeket tartalmazó talaj- és aktív szén mintákat állítottunk elő. A mátrixváltásra azért volt szükség, mert a talaj oxidálta a szulfid komponenst. Itt is bizonyítást nyert, hogy az Sb_2O_3 szelektíven kioldható a másik két vegyület mellől.

Budapest két forgalmas csomópontjából, az Astoriánál és a Várhegyi-alagútból vettünk közlekedésből származó ülepedő pormintát. A minták Sb_2O_3 -tartalma $8-10 \mu\text{g/g}$, Sb_2S_3 -t kb. $30 \mu\text{g/g}$ mennyiségben tartalmaznak. Tekintetbe véve a módszer kimutatási határát ($1,2 \mu\text{g/g}$) és reprodukálhatóságát (7%) a kioldozott eljárás alkalmas a városi ülepedő porminták antimon-trioxid és -trisulfid tartalmának meghatározására.

Karbamiddal interkalált Birdwood kaolinit komplex analitikai vizsgálata

Paor Dávid, III. évf. vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kristóf János** egyetemi tanár
PE Analitikai Kémia Intézeti Tanszék
Dr. Vágvölgyi Veronika ügyvivő szakértő
PE Környezetmérnöki Intézet

A kaolinit agyagásvány szerkezetének, reaktív tulajdonságainak szisztematikus vizsgálatát széleskörű ipari felhasználása, valamint a természetben (pl.: talajban) található agyagásványok és szerves komponensek között lejátszódó kölcsönhatások megismerése indokolja.

A kaolinit belső felületi reaktivitásának vizsgálata interkalációval történik. Interkaláció során kis méretű, szerves molekulák (pl. formamid, acetamid, karbamid vagy dimetil-szulfoxid) építhetők be az ásvány rétegei közé. Ezáltal olyan expandált, nanoméretű delaminált szerkezet alakítható ki, amely a polimeriparban bír nagy jelentőséggel (nanoméretű agyagásvány részecskék a polimer fizikai, szilárdságtani és égésgátló tulajdonságait befolyásolják). Az interkalációs reaktivitást nagy mértékben befolyásolja a kaolinit szerkezeti rendezettsége. A kutatás során vizsgált Birdwood kaolinit nagyfokú rendezettségének ellenére egy nehezen expandálható agyagásvány. A munka célja az interkalációs hatások növelése mechanokémiai aktiválással, azaz száraz őrléssel.

A kísérletek karbamid oldattal interkalált illetve szilárd karbamiddal mechanokémiaileg aktivált és interkalált Birdwood kaolinit minták komplex analitikai vizsgálatára irányultak. Az elemzéshez a következő analitikai módszerek kerültek alkalmazásra: röntgendiffraktometria, szimultán termoanalízis (T-TG-DTG-DTA) és Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia. Röntgendiffraktometria segítségével az expanzió mértéke határozható meg. Termoanalitikai technikákkal az interkalációs komplex termikus viselkedése tanulmányozható. Infravörös spektroszkópia segítségével pedig a felület és a beépülő reagens között kialakuló kötések szerkezetéről kapunk információt, melynek segítségével a nanoszerkezetre vonatkozóan pontosabb modellek állíthatók fel.

Szabad térfogatok kromatográfiás töltetekben: ahogy a pozitronok látják

Sávoły Zoltán, IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: Dr. Süvegh Károly egyetemi docens
ELTE Analitikai Kémia Tanszék

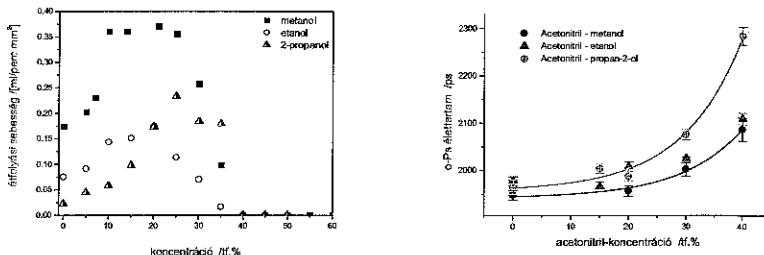
Az elmúlt hónapokban részt vehettem egy kutatásban, mely három kutatóhely közreműködésével jött létre. A munka során *pórusos polimer monolitömböket* állítottunk elő γ -sugárással *iniciált gyökös oldószeres polimerizációval*, majd ezek *szerkezetvizsgálatát* végeztük. A munka preparatív részét Sáfrány Ágnes és Beiler Barbara, az MTA Izotópkutató Intézet kutatói végezték, míg a szerkezetvizsgálatot az ELTE Magkémiai Laboratóriumában végeztem Süvegh Károly témavezetésével, *pozitron-élettartam mérés*sel. A pozitronannihilációs mérések elvégzésénél és a spektrumok kiértékelésénél Marek Tamás volt segítségemre a Kémiai Kutatóközpontból.

A pozitron és az elektron egyik kötött állapotát, az *orto*-pozitroniumot (*o*-Ps) mára széles körben alkalmazzák amorf anyagok szerkezetvizsgálatára. Erre az teszi alkalmassá a Ps-t, hogy rövid, néhány nanoszekundumos élettartamát az anyagok szabadterfogaiban tölti, annihilációjának fizikai jellemzői pedig az őt körülvevő szabadterfogat méretétől függenek. Polimerek esetében ráadásul közvetlen összefüggést találtak az átlagos üregméret és a pozitronium élettartama között.

Mivel a vizsgált monolitömbök egyik fő felhasználási területe a kromatográfia, a pórusok méreteloszlásán kívül egyik legfontosabb tulajdonságuk az átteresztőképességük. Ezért a pozitronos méréseket hagyományos átfolyási sebesség mérésekkel egészítettük ki.

Különböző alkoholo kból és egyéb poláros oldószerekből (aceton, acetonitril, etil-acetát, THF) készült oldószerkegyekben polimerizáltuk a dietilenglikol-dimetaktilát monomert. Az átfolyási sebesség mérésével megállapítható volt, hogy a polimer végső szerkezete minden oldószerkegy esetében függ az elegy összetételétől. Az átfolyási sebesség minden esetben maximumot mutatott, ha az alkoholt 20-30% más oldószerezrel hígítottuk. 40%-os hígítás fölött az átfolyási sebesség nullára csökkent az összes vizsgált oldószerkegy esetében.

Ilyen előzmények után különösen meglepő volt, hogy a pozitronos mérések csak egyetlen esetben, az acetonitril-alkohol keverékeknél mutatták az üregméretek növekedését az acetonitril hatására. Bár ezeknél az elegyeknél a metil-, etil-, propil-alkoholok különbsége is jól látható volt, egyéb oldószerek semmilyen hatással nem voltak a monolitömb pórusainak átlagos méretére. A szabadterfogat üregeinek átlagos mérete és a polimerben kialakuló pórusrendszer átjárhatósága között tehát a legtöbb esetben semmiféle kapcsolat nincs, bár az oldószer összetétele erősen befolyásolja az átjárhatóságot.



1 ábra: Baloldalt az átfolyási sebesség, jobboldalt a pozitronium-élettartam változása látható a különböző alkoholo khoz adagolt egyéb oldószer koncentrációjának függvényében. Az átlagos üregméret és a pórusok átjárhatósága között nincs közvetlen kapcsolat.

Alternatív tüzelőanyag tartalmú mintákból nyert szénhidrogén frakciók szennyezőanyag tartalmának meghatározása ED XRF módszerrel

Szabó Dávid Sándor Vegyészmérnök BSc. III.

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Angyal András** (Phd hallgató)
PE Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék
Miskolczi Norbert dr. (adjunktus)
PE Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

A világ műanyag felhasználásának növekedésével, egyre fontosabbá válik, a műanyagokat is tartalmazó hulladékok feldolgozása, belőlük értékesíthető termék előállítására. A hulladékok újrahasznosításának egyik lehetősége a termikus krakkolásuk, melynek során megfelelő összetétel mellett a szénhidrogén iparban hasznosítható frakciókat lehet nyerni. Az újrahasznosítási eljárások egyik legfőbb nehézsége a műanyag hulladékok változó összetétele, ugyanis a feldolgozandó alapanyag összetétele jelentősen befolyásolja a termékek minőségét. Elsősorban a feldolgozandó hulladékokban levő adalék- és színezőanyagok jelentenek problémát, mert azok fém és egyéb szennyezőanyag tartalma megjelenik a termékekben.

TDK munkám során különböző műanyag hulladékok és úgynevezett alternatív tüzelőanyag (RDF) termikus krakkolása során keletkező termékek szennyezőanyag tartalmának meghatározásához kerestem megfelelő analitikai módszert. Megvizsgáltam, hogy milyen feltételeknek kell megfelelnie egy ilyen célra alkalmazható analitikai módszernek. A termelés során nagyszámú minta és azokban többféle szennyező jelenléte várható. Ennek megfelelően a szennyező komponensek mennyiségi és minőségi meghatározása gyors, illetve olyan analitikai módszert igényel, amely egyszerre több komponens meghatározását teszi lehetővé. A lehetőségeket megvizsgálva választásom az energiadiszperzív röntgen fluoreszcencia elvén működő analitikára (ED XRF) esett.

Az általam vizsgált krakkolási termékekben főként Zn, S, Ca, Fe szennyezés volt jelen, ezért vizsgálataimat e négy elemre szűkítettem. Méréseimmel a módszer és a készülék alkalmasságát vizsgáltam, minőségi meghatározást végeztem egy adott krakkolási mintasorra. A krakkolásból származó folyadék frakciók főbb szennyezőinek koncentrációját mértem, ehhez el kellett végezni a megfelelő elemekre vonatkozó kalibrálást. Úgy találtam, hogy a módszer alkalmazhatóságának a kalibrációk pontossága, standard oldatok hitelessége, a minták mátrixának sokfélesége, a megfelelő oldószer megtalálása szab határt.

Lézerablációs induktív csatolású plazma tömegspektrometriás módszer kidolgozása elemarányok meghatározására perovszkit típusú mátrixban

Tarsoly Gergely, III. évf. Kémia BSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Prof. Dr. Záray Gyula** tanszékvezető egyetemi tanár
ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék
Dr. Óvári Mihály egyetemi adjunktus
ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

A perovszkit típusú kristályrácsba rendeződő egyes fémoxidok tanulmányozása napjainkban egyre népszerűbb témává vált az anyagtudományban. Ezen anyagok ugyanis kolosszális magnetorezisztenciával rendelkeznek. Ez azt jelenti, hogy az elektromos árammal szemben tanúsított ellenállásuk a mágneses tér változásának függvényében alakul. Ez a tulajdonság lehetővé teszi ezen anyagok felhasználását a mágneses adattárolók olvasófejében. Ezen kívül fontos felhasználási területe a perovszkit rácsú ferriteknek a tüzelőanyagcellák, lévén és reverzibilis oxigén szorpciós-deszorpciós tulajdonságokkal rendelkeznek.

Előnyös tulajdonságaik miatt ezekkel a ferritekkel kapcsolatban rengeteg kutatás zajlott a közelmúltban, és zajlik ma is, világszerte. A lantan-stroncium-kobalt-ferritek (LSCF vagy LSCFO) különböző fizikai tulajdonságainak meghatározása az anyagtudomány fontos területe.

Az előállításukkal, és szerkezetük vizsgálatával is rengeteg helyen foglalkoznak. Ezért fontos az analitikájukkal is foglalkozni, hiszen a termék tisztaságát, homogenitását ellenőrizve az előállítási folyamat hibáira is lehet következtetni, illetve fontos az összetétel minél pontosabb ismerete, hogy a fizikai tulajdonságok mérésekor az összetétel függés minél jobb közelítéssel megállapítható legyen.

A mi feladatunk a Pannon Egyetemen előállított, változó lantan-stroncium arányú LSCF minták homogenitásának és tisztaságának ellenőrzése volt. A tisztaság méréséhez megfelelő érzékenységgel rendelkező, lehetőleg multielemes módszert kellett kiválasztani, mely a négy főkomponensre és azok leggyakrabban előforduló szennyezőire egyaránt jól használható, és lehetővé teszi megfelelően kis mennyiségek analízisét a homogenitásvizsgálathoz.

Választásunk az induktív csatolású plazma tömegspektrometriára (ICP-MS) esett, ugyanis ez a multielemes módszer egyaránt alkalmas a mintákban a főkomponensek és a nyomszennyezők meghatározására, igen széles dinamikus tartománya miatt és alacsony meghatározási határai miatt. A homogenitásméréshez az ICP-MS-sel csatolható szilárdminta beviteli eszközként lézerablációs berendezést használtunk, mivel ez a módszer megfelelő térbeli felbontást tesz lehetővé.

Fő célunknak azt tűztük ki, hogy a mintasorozat darabjaiban változó koncentrációban előforduló stroncium mennyiségét, és ennek térbeli eloszlását, valamint a lantan-stroncium arányt jól megadó LA-ICP-MS módszert fejlesszünk ki.

Raman-mikrospektrometria alkalmazása gyógyszer technológiai fejlesztésekben

Vajna Balázs, I. évf. vegyészmérnök doktoráns

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

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

Konzulens: **Szabó András** PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszerkészítmények formálása a gyógyszeripar egyik legfontosabb és legdinamikusabban fejlődő területe. A készítményfejlesztésre azonban – az alapanyaggyártás egyre jobban szabályozott technológiájával ellentétben – a drága berendezések alkalmazása mellett viszonylag alacsony szabályozottsági fok jellemző.

Munkám során a készítménygyártás technológiai láncának számos területén megvizsgáltam, hogy a jelenleg alkalmazott vizsgálati módszereket kiegészítheti, ill. felválthatja-e a Raman-mikrospektrometria alkalmazása, ami jól automatizálható módszer lévén alkalmas lehet folyamatszabályozás megvalósítására is. Az általam vizsgált valamennyi részterületen (polimorfia vizsgálata, granulálás, pelletkészítés, tablettázás, bevonás) sikerült kiválasztani, vagy kidolgozni olyan mikrospektrometriai módszert, amely sikerrel alkalmazható.

Dolgozatomban sorra ismertetem a módszer alkalmazását a technológiai lánc egymás követő lépéseiben. Egy hatóanyag amorf módosulatban történő előállításakor vizsgáltam a termék módosulatát és tisztaságát, és az analízis hatékonyságát az iparban jelenleg elfogadott módszerekkel összehasonlítva. Hatóanyag hordozóanyagra történő felvitele, több segédanyaggal együtt történő granulálása, illetve pellet bevonása esetén kísérletet tettem a komponensek technológiától függő eloszlásának meghatározására. Ezután általam készített modelltablettákon vizsgáltam, hogy a felületről felvett Raman-spektrumokból alkotott térképek alapján milyen eredményességgel határozható meg a kvantitatív összetétel és a gyártási technológia. Végül módszert dolgoztam ki tabletták bevonat-rétegvastagságának meghatározására, és vizsgáltam, hogy a módszer továbbfejleszthető-e gyártásközi in-line ellenőrzéssé.

Munkáimmal igyekeztem hozzájárulni azokhoz a kutatásokhoz, amelyek a gyógyszerformálás köztes-és végtermékeinek ellenőrzési és vizsgálati módszereit hivatottak továbbfejleszteni. Az elért eredmények azt igazolják, hogy a Raman-mikrospektrometria fontos eszköze lehet – a gyógyszeripar egyik legfontosabb célját képező – teljes folyamatszabályozásnak.

Biokémia és biotechnológia tagozat

Opiooid peptidanalógok szintézise szerkezet-hatás összefüggések vizsgálatára

Babos Fruzsina, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Magyar Anna** tudományos főmunkatárs
Szerves Kémia Tanszék, ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport
Dr. Benyhe Sándor tudományos tanácsadó
MTA-SzBK Biokémiai Intézet, Szeged

Az opiooid peptidek szerkezet-hatás összefüggéseit már közel húsz éve intenzíven kutatják, mivel a fájdalomérzet kialakulásában, szabályozásában játszanak fontos szerepet. Az opiooid receptorokat ligandkötő képességük alapján három fő csoportba osztják, ezek a μ , a δ és a κ receptorok. Az opiooid receptorok családjába soroljuk a nociceptin receptort is.

A forgalomban lévő gyógyszerek között egyre több parciális receptor agonista hatóanyag található. A nociceptin parciális agonistája az Ac-RYYRIK-ol [1]. Szerin-proteáz szubsztrát- és enzimgátló peptidek esetében bizonyos Lys \rightarrow Arg szubsztitúciók hatékonyabb származékokat eredményeztek. A biokémiai és farmakológiai vizsgálatok azt mutatták, hogy az általam előállított Ac-RYYRIR-ol nagy hatékonyságú, szelektív parciális agonista peptid a NOP-receptoron. Jelentős hatékonyság-növekedést nem találtunk a lizinolos peptidhez képest, ez utalhat arra, hogy a ligand kötődésében a C-terminális bázikus oldalláncának minősége, illetve annak hidrogén-híd formáló képessége nem perdöntő a hatékonyság szempontjából.

Az opiooid peptidek, így az enkefalinok szerkezete (aminosav szinten) jól konzervált az emlősökön belül [2], de alacsonyabbrendű gerincesek esetén más analógokat is találtak. Azt tapasztaltuk, hogy az általam szintetizált hét természetes, ugyanakkor emlősökben nem található, elongált enkefalin-származék δ opiooid agonista. A szintézis során keletkezett és izolált metionin oldalláncon oxidálódott peptidek *in vitro* hatásvizsgálata során kiderült, hogy a metionin oxidációja csökkentette a peptidek affinitását és effektívitását receptor kötési tesztekben, illetve G-fehérje aktivációs mérésekben is. Ezért ajánlott redukív környezet alkalmazása az *in vitro* kísérletek során, irodalmi adatok nem találhatók erre vonatkozóan.

Munkám során a szilárdfázisú peptidszintézis módszerét alkalmaztam. Az aminosavszármazék és a peptidek tisztaságát RP-HPLC-vel, vékonyréteg-kromatográfiával és tömegspektrometriával ellenőriztem.

[1] L. Kocsis et al. *Regulatory Peptides*, 122, 199-207 (2004)

[2] E. Bojnik et al. *Neuroscience*. 2008 Oct 10; : 18977279

Duchenne betegség újfajta diagnosztikája

Czene Anikó, V. évf. klinikai kémikus

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Gyurcsik Béla, egyetemi adjunktus

SZTE Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Duchenne-féle izomdisztrófia izomsorvadással járó betegség, amelyet anyai ágon örökölnek a fiú gyermekek. A betegség hátterében a disztrófin nevű fehérje hiánya áll, amelynek következtében az izomsejtek fokozatosan elhalnak. Emiatt az izmok nagyobb erő kifejtésre nem alkalmasak. Mivel a csípő- és medencei izmok a legérintettebbek, 10-12 éves korukra ezek a gyerekek járásképtelenné válnak. A szív- és légzőizmok érintettsége miatt nagy többségük a huszas éveiket már nem éli meg.

A betegség egyértelmű kimutatása genetikai vizsgálat alapján történik, amit multiplex PCR (Polymerase Chain Reaction) eljárással végeznek. Az esetek többségében a mutáció egy vagy több exon hiányát jelenti. Bizonyos exonok törlődése a genetikai kód eltolódását eredményezi, korai stop kódok létrejöttével. Az így termelődő fehérje funkcióját nem képes ellátni. A fenti vizsgálat alapján nem dönthető el egyértelműen, hogy az anya hordozó-e, vagy sem. Ma ez csak bonyolult és drága eljárásokkal deríthető ki.

Jelenleg a Duchenne betegség gyógyíthatatlan. Többféle stratégia létezik az állapot fenntartására, vagy a betegség lefolyásának lassítására. Ilyen eljárások az úgynevezett mikrodisztrófin szerkezetbe juttatása, vagy az olvasási keret helyreállítása antiszensz oligonukleotidok (AON) segítségével. Mindkét esetben nem teljes hosszúságú, de funkcióképes disztrófin képes szintetizálni a sejt. Emellett egy disztrófinhoz hasonló fehérje, az utrofin, vagy összejt terápia formájában izomregeneráló szatellit sejtek bejuttatása is lehetséges. E kezelések mindegyike folyamatos beavatkozást igényel, veszélyesek és költségesek is.

Megoldást jelenthetne génterápiás eljárásban az úgynevezett cink-ujj nukleázok alkalmazása. Ezen nukleázok a genomális DNS hibahelyének (töréspont) közelében képesek kettős szálú hasítást végezni a sejt javító mechanizmusát, a homológ rekombinációt aktiválva. Ez a mechanizmus egy ép DNS mintát igényel, melynek két végén a meglévő DNS szekvenciával azonos szakaszok találhatóak. E homológia révén a DNS minta a genomba integrálódva visszaállítja az egészséges állapotot.

Ahhoz, hogy a fenti folyamat megvalósítható legyen ismernünk kell a töréspont körüli bázisszekvenciát az egyes páciensek DNS-ében. Munkánk során eljárást dolgoztunk ki ennek meghatározására. Kísérleteink a töréspont meghatározása mellett egyértelmű diagnosztikai eljárás eredményeztek.

Modellpeptid - víz komplexek vizsgálata mátrixizolációs IR és VCD spektroszkópiával

Góbi Sándor, végzett vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Tarczay György** egyetemi adjunktus

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Dr. Vass Elemér egyetemi docens

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Diákköri munkámban két modellpeptid, az N-acetil-L-prolinamid (Ac-L-Pro-NH₂) és az N-acetil-N'-metil-L-alaninamid (Ac-L-Ala-NHMe) vízzel alkotott komplexeit vizsgáltam.

Kutatócsoportunk korábbi mátrixizolációs infravörös (MI-IR) és mátrixizolációs rezgési cirkuláris dikroizmus (MI-VCD) spektroszkópiás vizsgálatai során már felderítette a két modellvegyület konformációs viszonyait. Ezek alapján az Ac-L-Pro-NH₂ monomernek egyetlen fő konformere van, a γ_L^+ . Az Ac-L-Ala-NHMe monomernek két konformere, a $\beta_{L(D)}$ és a γ_L van jelen számottevő mennyiségben a mátrixban. Ezen konformerek komplexképződését vizsgáltam elméleti, és kísérleti úton.

Az oldatbeli, majd mátrixizolációs VCD vizsgálatok során az Ac-L-Pro-NH₂-nél kétféle térszerkezetű komplexet sikerült azonosítani a spektrumban. Az egyik, B6 α -val jelölt komplexben a vízmolekula két hidrogénkötéssel a modellpeptid C-terminális karbonil- illetve amidcsoportjához kapcsolódva egy hattagú gyűrűs szerkezetet hoz létre. A másik, B9 α -val jelölt komplexben a vízmolekula beékelődik a monomer C- és N- terminális közötti intramolekuláris hidrogénkötésébe és felbontva azt, egy kilenctagú gyűrűs szerkezetet hoz létre.

Az Ac-L-Ala-NHMe-vel történő vizsgálatok arra mutattak rá, hogy a számítások során kapott három komplexből az MI-IR, illetve MI-VCD mérések egybevételével két konformert lehetett kimutatni. Az első, B9-cel jelölt komplexben a vízmolekula két hidrogénkötés kialakításával egy kilenctagú gyűrűs szerkezetet hoz létre. A másik, B7-tel jelölt komplexben a vízmolekula ugyancsak két hidrogénkötést alakít ki a modellpeptid C- és N-terminálisával, egy héttagú gyűrűs szerkezetet eredményezve. A számítások során végeredményként kapott további komplexek jelenlétét nem sikerült minden kétséget kizáróan bizonyítani, továbbá számos jel arra utal, hogy a rendszerben előfordulnak más, a számítások során eddig meg nem határozott komplexek is.

Az MI-VCD vizsgálatok új módszerek számítanak. Az így végzett vizsgálatok közül is az elsőként sikerült hidrogénkötéses komplex MI-VCD spektrumát felvenni. Különösen érdekes, hogy a komplexalódott akirális vízmolekulához tartozó átmenetek is megjelennek a VCD spektrumban. Ez az ún. királitás transzfer jelenség, amikor is az akirális molekula királiként viselkedik, azaz optikailag aktívvá válik királis környezetben. A vizsgálatok során mindkét modellpeptid - víz komplex esetében sikerült a királitás transzfer jelenségét kimutatni.

Tumorelles hatóanyagok irányított célbajuttatása peptidekkel

Hegedüs Rózsa, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Mező Gábor tudományos tanácsadó
ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

A tumoros megbetegedések világszerte a legfőbb halálozási okok között szerepelnek. Sajnos nincs egyetlen általános gyógymód a tumoros megbetegedések kezelésére. Számos terápiás módszer áll az orvosok rendelkezésére és további kezelési lehetőségek vannak még kutatási fázisban.

Az irányított terápia -amivel dolgozatomban foglalkoztam- manapság a kutatások rendkívül aktív részét képezi. A terápia célja, hogy a hatóanyagot specifikusan a rákos sejtekbe juttassák. Ezáltal elkerülhető számos mellékhatás, ami abból adódik, hogy a gyógyszermolekulák az egészséges, gyorsan osztódó sejteket is roncsolják. E célból alkalmazhatunk olyan célbajuttató molekulákat (pl. peptideket), amelyek specifikusan hozzákapszolódnak olyan sejtfelszíni receptorokhoz, amelyek tumoros sejteken túlexpresszálódnak. Ilyen ágens lehet például a gonadotropin releasing hormon (GnRH). A GnRH analógok további előnye, hogy önmagukban is jelentős tumornövekedést gátló hatással rendelkeznek.

Munkám során különböző GnRH analóg-drog konjugátumot állítottam elő. A GnRH peptidek előállítását szilárdfázisú peptidszintézissel végeztem. A molekulák tisztítását (HPLC) és azonosítását (tömegspektrometria) követően többféle citosztatikus szert kapcsoltam hozzájuk oldatban. Ilyen citosztatikumként Vindolin származékot kapcsoltam (Ac-D-Cpa-D-Trp-Ser-D-Lys(Gly-Leu-Phe-Gly-Cys)-Asp-(Leu-Gln-Pro-D-Ala-NH₂)-DEA) amidkötéssel, míg Daunubicint konjugáltam Glp-His-Trp-Ser-His-Asp-Trp-Lys(Aoa-Gly-Phe-Leu-Gly-Cys)-Pro-Gly-NH₂ peptidhez oxim-kötésen keresztül. Mivel korábban azt tapasztaltuk, hogy a GnRH dimerszármazékok nagyobb antiproliferációs hatást mutatnak, mint a monomerek, ezért a konjugátumok dimer származékait is elkészítettem. Az előállított konjugátumokat biológiai teszteknek vettem alá: vizsgáltam azok citosztatikus hatását humán emlő karcinóma, humán vastagbél karcinóma és humán leukémia sejtvonalakon MTT-teszt segítségével. A kapott eredményeket összehasonlítottam a szabad hatóanyagok, illetve korábban előállított analógok tumorelles hatásával.

Permeabilitás vizsgálat a gyógyszerkutatás korai fázisában

Hudecz Diána, IV. évfolyam vegyészmérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Balogh György Tibor**

Richter Gedeon Nyrt.

Belső konzulens: **Dr. Hell Zoltán**

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszerkutatás egyik legköltségesebb és legnagyobb időigényű tevékenysége a gyógyszerjelölt vegyületek *in vivo* kísérletes vizsgálata. Az elmúlt két évtizedben a költségek és a ciklusidő redukálása céljából megjelentek a napjainkban már általánosan alkalmazott nagy áteresztőképességű (HTS) *in vitro* vizsgálatok. A HTS *in vitro* rendszerekből származó adatok rámutatva a szerkezet-hatásbeli összefüggésekre lehetőséget biztosítanak az originális kutatás korai fázisában a gyógyszerjelöltek kiválasztásához.

A korai fázisú gyógyszerkutatás egyik lényeges feladat a potenciális gyógyszerjelöltek felszívódási tulajdonságának az előrejelzése. Erre jó lehetőséget ad a Kansy és munkatársai által 1998-ban kidolgozott HTS alapú lipidmembrán-permeabilitási modellrendszer, a PAMPA (Parallel Artificial Membrane Permeability Assay). A PAMPA modell fejlesztésével és a saját originális gyógyszerkutatásba való integrálásával 2005 óta foglalkoznak a Richter Gedeon Nyrt. kutatásán. Ezzel a módszerrel kapcsolatos kutatásokba kapcsolódtam be 2007 tavaszán.

Vizsgálataink a vegyületek belben történő felszívódásának, illetve a vér-agy gáton való átjutásának modellezését célozták meg. Kísérleteink eredményeképpen beállítottunk egy GI-PAMPA és egy BBB-PAMPA módszert. Az ezekből kapott permeabilitási értékek és *in vivo* farmakokinetikai adatok közötti szigmoidális (orális felszívódás) és lineáris (vér-agy gát (log BB)) illesztések segítségével lehetőség van az *in vitro* PAMPA adatok alapján becstül felszívódási képességek megadására.

Hasonlóan más HTS alapú vezérmolekula keresési utat követő gyógyszergyárhoz nekünk is egyik fő problémánk a kiválasztásra kerülő vegyületcsoportok relatív rossz vízben (pufferben) való oldhatósága. A rossz oldhatóság az általunk beállított GI- és BBB-PAMPA vizsgálatok alkalmazhatóságát is nagyban korlátozta. Ezért kísérletet tettünk a rosszul oldódó vegyületek mérésére is alkalmas BBB-PAMPA rendszer beállítására. Kísérleteinkben különböző segédoldószereket (acetonitril, DMSO) különböző koncentrációban és különböző minta koncentrációkkal teszteltük a BBB-PAMPA rendszerünket. Sikerült beállítanunk egy olyan új BBB-PAMPA módszert, amely képes előrejelezni az *in vivo* agyi penetrációját rossz oldhatóságú gyógyszerjelölt vegyületeknek.

Cellulolitikus enzimrendszer hidrolizáló képességének fokozása kiegészítő enzimekkel

Jaczina Milán, IV. évf. biomérnök
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Réczey Óstvánné egyetemi docens
BME, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulensek: Benkő Zsuzsa doktoráns
BME, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Dr. Dienes Dóra egyetemi adjunktus
BME, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

TDK munkám során kereskedelmi forgalomban lévő, különböző hidrolitikus aktivitásokkal rendelkező enzimkészítmények lignocellulózt hidrolizáló képességét vizsgáltam önállóan, és egymással kombinálva. A téma aktualitását az adja, hogy jelenleg is intenzív kutatások folynak azzal a céllal, hogy kevesebb enzim felhasználásával, hasonló konverziót érjenek el a lignocellulózok enzimes hidrolízisekor. Ez azért is fontos, mert a hazánkban is nagy mennyiségben jelen lévő lignocellulózokból történő bioetanol előállítása költséges folyamat. Ennek egyik fő oka a felhasznált enzimek magas ára. A technológiát az is segítené gazdaságilag hatékonyabbá tenni, ha az enzimes hidrolízist sikerülne tovább javítani.

Kísérleteim során három kereskedelmi enzimet, a Celluclast 1.5 L, a Novozym 188 és a Pulpzyme HC termékeket vizsgáltam. Az adott enzimkészítmény mindegyike jellemezhető egy fő aktivitással, így a Celluclast 1.5 L-t tipikusan celluláz, a Novozym 188 β -glükozidáz, míg a Pulpzyme HC xilánáz enzimnek tekinthető. A vizsgálatok célja az volt, hogy a cellulolitikus enzimrendszerrel rendelkező Celluclast 1.5 L hatékonyságát fokozzam a másik két kiegészítő enzimmel. Az előkísérletek és az enzimadagolást optimalizáló kísérleteim alatt egy fajta szubsztrátot alkalmaztam, mely a Solka Floc 200, xilánt is tartalmazó előkezelt fenyőpép volt. Az ezeket követő, átfogóbb kísérletekben már ettől eltérő összetételű szubsztráton is vizsgáltam az enzimkeverékek hidrolitikus képességét. A Solka Floc 200 mellett alkalmaztam még tiszta cellulóznak tekinthető AVÖCEL és gőzrobbantással előkezelt kukoricaszár mintákat is. A hidrolízis nyomonkövetésére mértem a minták redukáló cukor tartalmát, melyet egyes esetekben HPLC-vel végzett monoszacharid mérésel egészítettem ki. Kísérleteimet a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszéken végeztem el.

Trombin generáció fluorimetriás követésére alkalmas szubsztrátok fejlesztése

Kern Anita, IV. évf. vegyész-mérnök

BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Fekete Jenő** egyetemi tanár
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Antal József fejlesztőmérnök
Diagon Kft.

A klinikai gyakorlatban a véralvadási folyamatok egyensúlyát alvadási tesztekkel jellemzik (pl. protrombinidő), ezek azonban nem adnak teljes képet a véralvadás kulcs enzime, a trombin aktivitásának változásáról a folyamat egésze során. Erre a célra szolgál a trombin generáció (TG) felvétele, mely a trombin felszabadulását követi az idő függvényében. A trombin generációban eddig használatos kromogén és fluorogén szubsztrátok nem rendelkeznek a trombin specificitását döntően meghatározó C-terminális peptid résszel, így a szelektivitásuk nem kielégítő.

A munka célja, hogy RP-HPLC analitika segítségével olyan teljes hosszúságú peptid szekvenciá(ka)t találjunk, mely(ek) a lehető legszelektívebben reagál(nak) a trombinnal. A kapott peptidgerince intramolekuláris fluoreszcenciakioltáshoz szükséges csoportokat kapcsolva szelektív és érzékeny szubsztrátot kaphatunk. A munka első lépése két lehetséges peptid szekvencia kiválasztása többszörös szekvenciaillesztés (multiple alignment) alkalmazásával. A csak az N-terminálisukon különböző (valin, illetve triptofán) peptideket megszintetizáltattuk, majd a peptidok trombin specificitását aktivált protrombin komplex koncentrátummal (aPCC) teszteltük. Számottevő preferencia különbséget nem tapasztaltunk. Így távlati céljainknak (intramolekuláris fluoreszcencia kioltás elvén működő szubsztrát) megfelelően a továbbiakban a triptofános változattal dolgoztunk. Fibrinogén mentes, antikoagulánsokat nem tartalmazó enzim rendszer, a PCC aktiválását követve modelleztük a trombin generáció prokoaguláns szakaszát. A modellrendszerrel kapott eredmények szerint a peptid szubsztrát „lassabb” mint a hasonló kromogén szubsztrát, a lassúbb működés a trombin generáció szempontjából kedvező. A munka következő lépése a szubsztrátok tesztelése konkurens enzimekkel (faktor Xa, faktor VIIa), továbbá humán vérplazmán. A specificitási tesztek utolsó lépéseként pedig egészséges és beteg vérmintákban mérjük a trombin generációt.

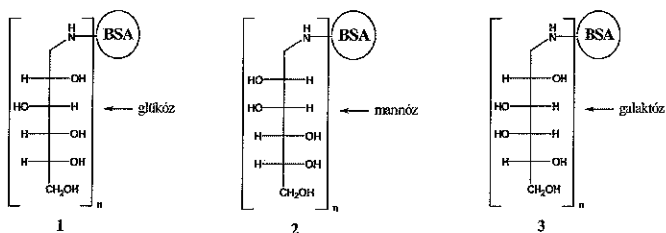
A redukzív aminálás vizsgálata neoglikoproteinek előállítására céljából

Kíth Károly V. biológia-környezettan

Debreceni Egyetem TEK TTK

Témavezető: **Dr. Szurmai Zoltán** tudományos főmunkatárs
DE Biokémiai Tanszék

Az oligoszacharidok haptének, de antigénként viselkednek, ha egy hídmolekula segítségével makromolekuláris hordozóhoz kapcsoljuk őket. Ennek egyik legegyszerűbb módja a redukzív aminálás. Azt vizsgáltam, hogy melyik monoszacharid a legjobb potenciális hídmolekula komplex szintetikus oligoszacharidok fehérjéhez kötésére. D-glükózt, D-mannózt és D-galaktózt reagáltattam BSA-val (1-3) NaCNBH₃ felhasználásával. Az adott körülmények között nem neoglikoprotein képződik, hanem egy poli-hidroxi-alkilezett fehérje. A képződött konjugátum csak a fehérjét és a hídmolekulát (spacer) tartalmazza.



A hexózok mennyiségének növelésével a fehérjéhez kötött hídmolekulák száma is növekszik (MALDI-TOF). Úgy tűnik, hogy oligoszacharidok fehérjéhez kapcsolására redukzív aminálással nem a D-glükóz a legjobb potenciális hídmolekula. A D-mannóz jobb, de a D-galaktóz mindkettőt felülmúlja. A mérési eredmények azt sugallják, hogy maximálisan 60-70 spacer kapcsolható BSA-hoz.

A fajspecifikus és evolúciósan konzervált szerkezeti elemek egyaránt befolyásolják a TBC baktérium dUTPázának katalitikus hatékonyságát

Lopata Anna, III. évf. biomérnöki B.Sc.

BME, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Tóth Judit** tudományos főmunkatárs
Dr. Vértessy G. Beáta tudományos tanácsadó
MTA SZBK Enzimológiai Intézet

A WHO 2006-os adatai szerint a tuberkulózis a világon a leghalálosabb betegség, ami évente közel 2 millió áldozatot szed. A betegség kezelésére eddig használt hatóanyagokra rezisztens törzsek létrejötte újfajta gyógyszerek kifejlesztését teszi szükségessé, amiben a biológiai alap kutatás nélkülözhetetlen.

Kutatócsoportunk által behatóan tanulmányozott dUTPáz enzim alapvető szerepet játszik a DNS integritásának megőrzésében. A dUTP hidrolízisét katalizálja dUMP-vé és pirofoszfáttá, ezzel meghatározza a sejtbeli dUTP:dTTP arányt. A tuberkulózist okozó *Mycobacterium tuberculosis* életben maradásához valószínűleg elengedhetetlen a dUTPáz enzim működése, mivel a baktérium csak a dUTPáz aktivitást igénylő metabolikus útvonalon képes timint szintetizálni. Az irodalmi adatok alapján az enzim hiányában ún. timinmentes sejthalál lép fel, ezért a dUTPáz ígéretes gyógyszer-célpont lehet a jövőbeni antituberkulotikumok kifejlesztéséhez.

A *Mycobacterium tuberculosis* és a humán dUTPáz közötti különbség, illetve a *M. tub.* dUTPázának a dUTP kötésében fontos szerepet játszó aminosavak feltérképezéséhez az enzim C-terminális karján több mutációt hoztam létre. A mutáns fehérjéket *Escherichia coli* sejtekben expresszáltam, és affinitás kromatográfiával tisztítottam meg. Az enzimek aktivitását radioaktív dUTP hidrolízissel és a reakcióban felszabaduló protonok pH-indikátoros követésével spektrofotométerben mértem meg. Az enzim-szubsztrát komplex disszociációs állandóját fluorimetriás titrálással határoztam meg, amit az enzimbe beépített triptofán aminosav tett lehetővé.

Az eredmények azt mutatják, hogy a dUTPáz enzim C-terminális karja alapvető szerepet játszik a dUTP hidrolízisében. A különböző mutánsoknál 3-200-szoros aktivitáscsökkenést detektáltam a vad típushoz képest. A disszociációs állandók egy nagyságrendbeli növekedést mutattak a vad típushoz képest, ami az enzim-szubsztrát kötőerősség csökkenését jelenti. Végül egy, csak a mikobaktériumokra jellemző, és ezért szelektíven megtámadható felszíni hurok enzimaktivitást befolyásoló hatását is sikerült kimutatnom.

A hasadó élesztő növekedési mintázatának statisztikai vizsgálata

Mónus Anna, V. évf. biomérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Sveiczzer Ákos egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az élesztők a huszadik század első felében a sejtbiológia számos területének modell organizmusává váltak. A hasadó élesztőként is ismert *Schizosaccharomyces pombe* egyedi fiziológiai tulajdonságai miatt vonta magára a kutatók figyelmét. A hengeres sejtek növekedése kizárólag a végeken történik, ezért a sejtterfogat arányos a sejt hosszal. A hossz egy könnyedén mérhető paraméter, amelyből az is megállapítható, hogy a sejt a ciklus mely szakaszában tartózkodik éppen. A meghatározott növekedési mintázatok tehát a sejtek terfogatváltozásainak és a sejtciklus egyes eseményeinek kapcsolatát tárják fel. Egy egyedi sejt növekedésének vizsgálatára a klasszikus eljárás a mikrofotográfia, amely során egy termosztált mikroszkópban a vizsgált sejtekről egyenlő időközönként fényképet készítünk. A fényképek elemzése később kivetített diaként lehetséges.

Vitatott, hogy a sejtciklus folyamán hogyan növekednek az egyes sejtek. A szakirodalomban három gyakran használt modell létezik: lineáris, exponenciális és bilineáris. Egy adott sejt típus esetében ki lehet választani azt, amelyik a legjobban alkalmazható. Ennek eldöntésére kvantitatív modell szelekciós kritériumok használata a legjobb megoldás, mivel segítségükkel különböző paraméterszámú modellek is összehasonlíthatók. A közelmúltban két hasadó élesztő sejt növekedési mintázatát újra elemezték, először egy bilineáris modellt illesztettek a mért hossz adatokra, majd azt egy exponenciális modellel hasonlították össze, az említett kvantitatív modell szelekciós kritériumok segítségével. A bilineáris modell mutatkozott jobbnak, de egy statisztikailag is releváns konklúzió levonásához több sejt vizsgálatára van szükség.

Ezért a vizsgálatot további 120 sejtre terjesztettem ki, 60 vad típusúra és 60 *wee1Δ* mutánsra. Az összes sejtnél olyan modell szelekciós kritériumok segítségével határoztam meg a legadekvátabb modellt (a lineáris, exponenciális ill. bilineáris közül), amelyek a paraméterszámot is figyelembe veszik. Általában a bilineáris modell tűnik a legadekvátabbnak, bár a különbségek sok esetben kicsik. Mind a 60 vad típusú, mind a 60 *wee1Δ* mutáns sejtől egy „átlagsejt” is konstruáltam, amelyre szintén elvégeztem a fent említett analízist. Eredményeim szerint az átlagsejt növekedését egyértelműen a bilineáris modell közelíti meg a legjobban.

A TC5b minifehérje szerkezetstabilizáló sóhídjának vizsgálata NMR spektroszkópia segítségével

Rovó Petra, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

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

A minifehérjék olyan makromolekulák, amelyek gyakran 40, vagy még ennél is kevesebb aminosavból épülnek fel. Segítségükkel jobban megérthetőek a fehérje fel- és letekeredésének fontosabb lépései, valamint tanulmányozhatók különböző szerkezetstabilizáló hatások. Ide tartoznak a hidrogén és sóhidak, a hidrofób vagy hidrofil kölcsönhatások, valamint minden olyan interakció, amely a téralkat felvételében fontos lehet. Végeredményben, ezen kölcsönhatások feltérképezése segítheti elő a fehérjék racionális megtervezését.

Munkám során a TC5b, vagy más néven Triptofán-kalitka minifehérje szerkezetstabilizáló sóhídját tanulmányozom. Ez a valaha tervezett legkisebb fehérje – mindössze 20 aminosavból áll (NLYIQ WLKDG GPSSG RPPPS) –, amely kvázi fiziológias körülmények között is harmadlagos térszerkezettel rendelkezik [1]. Felépítésében egy α -hélix, egy 3_{10} -hélix és egy poliprofin II típusú hélix szerveződik a központi triptofán köré. A kialakult szerkezet stabilizálásában emellett jelentős szerep jut a D9 és R16 aminosavak közt létesülő sóhídoknak. A TC5b stabil, jól meghatározott szerkezete egy racionális fehérjetervezés következménye. Kiindulási vegyületeként *Neidigh és ms.* a *Gila monster* viperagyík egyik 39 aminosav hosszú fehérjéjét használták (exendin-4, EX4). A fehérje számos csonkítása és mutációja után is csak a D9-R16 sóhíd beépítésével tudták elérni azt, hogy a minifehérje vízben is több mint 95%-ban legyen feltekeredett.

A sóhíd tanulmányozása során modell vegyületeként a korábban *Hudáky és ms.* által optimált rendszert használom (TC5b_D9E) [2]. Ebben a mutánsban a sóhíd egyik karja egy metilén-csoporttal meg lett hosszabbítva, minek következtében kedvező hidrofób kölcsönhatás alakult ki a glutaminsav oldallánca és a hidrofób mag között. Jelen munkában azt vizsgálom, hogy milyen hatással van a szerkezet stabilitására a beépített metilén-csoport helyének szisztematikus változtatása, illetve a sóhíd egyik karjának eliminálása. A szerkezetben megmutatkozó változások nyomon követését NMR spektroszkópiával végzem.

[1] Neidigh J. W., Fesinmeyer R. M., Andersen N. H., *Nat. Struct. Biol.*, 9, 425-430, (2002)

[2] Hudáky P., Stráner P., Farkas V., Váradi Gy., Tóth G., Perczel A., *Biochemistry*, 47, 1007-1016. (2008)

Izoniazid antituberkulotikumot tartalmazó konjugátumok tervezése, szintézise és *in vitro* biológiai aktivitásuk vizsgálata

Szabados Hajnalka, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Bősze Szilvia** tudományos főmunkatárs

MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Horváti Kata tudományos segédmunkatárs

MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

A tuberkulózist (tbc) okozó baktérium, a *Mycobacterium tuberculosis* intracelluláris kórokozó. A betegség kezelésében alkalmazott antituberkulotikumok bejutása a fertőzött makrofágokba elsősorban diffúzióval történik, korlátozott mértékben. A kezelés során számolni kell mellékhatásaikkal, valamint gyors kiválasztódásukkal. A peptid típusú hordozók alkalmazása csökkentheti a terápiás szerek mellékhatásait és lehetőséget kínál a hatóanyagok szelektív bejuttatására a fertőzött makrofágokba. A dolgozatban összefoglalt munka a terápiásan alkalmazott izoniazid peptid típusú hordozókhoz való kémiai konjugálását, ezen új vegyületek kémiai jellemzését és *in vitro* biológiai aktivitását mutatja be.

Munkánk során hordozóként tuftsinszármazékokat (GTKPKG (T6), [TKPKG]₄ (T20)) és az *M. tuberculosis* immundomináns 16 kDa fehérjének egy T-sejt epitópeptidjét (⁹¹SEFAYGSFVRTVSLPV¹⁰⁶ (91-106)) választottunk. A peptideket szilárdfázisú szintézissel, Fmoc^tBu vagy Boc/Bzl stratégiával állítottuk elő. Előállítottuk és jellemeztük az izoniazid kapcsolásához szükséges „távolságtartó” (linker) egységet tartalmazó izoniazid származékot (2-(izonikotinoil-hidrazino)ecetsav) is, amelyet a peptidekhez konjugáltunk PyBOP/HOBt/DIEA kapcsolóreagensek jelenlétében. A hordozókat és az új izoniazid konjugátumokat kémiaiilag jellemeztük RP-HPLC, aminosavanalízis és tömegspektrometria alkalmazásával. Az új vegyületek antituberkulotikus hatását, minimális inhibíciós koncentráció (MIC) értékének meghatározását *M. tuberculosis* H₃₇Rv törzs szuszpenzió vizsgáltuk Sula felszintetikus, folyékony táptalajon. Meghatároztuk az új vegyületek citosztatikus hatását humán hepatoma sejtvonalon (HepG2) kolorimetriás tetrazólium (MTT) teszt alkalmazásával. Kísérleteink bizonyították, hogy a konjugátumokban az izoniazid megőrizte *in vitro* antituberkulotikus aktivitását és a vizsgált koncentrációkban a hordozók, konjugátumok nem mutattak citosztatikus hatást HepG2 sejteken.

Elméleti kémia tagozat

HIV proteáz inhibitor bioaktív konformációjának számítása

Antal László, V. évf. informatikus vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémia Tanszék

Témavezetők: Dr. Farkas Ödön egyetemi docens

ELTE Szerves Kémia Tanszék

Dr. Kalászi Adrián

ChemAxon Kft.

A gyógyszerkutatás területén az utóbbi években egyre nagyobb jelentősége van a számítógépek által szolgáltatott eredményeknek. Ugyanis az új gyógyszerek kifejlesztésének teljes költsége meghaladja a 800 millió USD-t, amely tartalmazza a kutatási folyamat valamely szakaszában sikertelennek minősített gyógyszerjelölt molekulák kiadásait is. A költségek csökkentése érdekében a gyógyszerárak a fejlesztés lehető legkorábbi szakaszában ki akarják szűrni a nem megfelelő vegyületeket. Jelentős idő- és költségcsökkentés érhető el, ha a kémiai szintézisek előtt virtuális szűrővizsgálatokkal (virtual screening, VS) kiválaszthatók a leghatékonyabb gyógyszermolekulák.

Az elmúlt évben végzett munkám során egy új QSAR eljárást teszteltem. Az IQSAR[1][2] módszer egy köztes lépés lenne a gyógyszerkutatás folyamatában, amely segítené az új gyógyszerek fejlesztésének kezdeti lépéséhez szükséges 3D farmakofor hipotézis felállítását.

A teszt során kerestem a szakirodalomban az eljáráshoz megfelelő molekulakönyvtár. (Flexibilis molekulák, kötődési aktivitásérték ismert, a kötődésben részt vevő atomok, minden molekulában megegyezők). Mivel nagyon speciális tulajdonságokkal rendelkező molekulátart igényel a rendszer, így csak kevés cikk felelt meg a követelményeknek és nagy részük 2-3 molekulát tartalmazott. A tesztalmaz kijelölésénél végül HIV proteáz inhibitor molekulákból álló halmazra esett a választásunk.[3]

Az IQSAR eljárás feltérképezte minden molekula konformációs terét, majd megvizsgáltam, hogy a kísérletileg meghatározott kötődő konformáció adhat-e jó korrelációt. A korrelációk jóságát statisztikai mutatókkal, a Pearson-féle korrelációs együtthatóval és a keresztellenőrzéssel ellenőriztem. A vizsgálatokból kiderült, hogy a keresztellenőrzés nem ad megbízható adatokat, a molekulák alacsony száma miatt. A Pearson-féle korrelációs együttható által szolgáltatott adatok alapján kiderült, hogy a módszer adhat jó eredményeket, viszont a merev szerkezetű molekuláknál, amelyek induló konformereinek száma alacsony, a vártól nagyon eltérő viselkedést mutathatnak.

[1] Kalászi A. Konformációs flexibilitás és 3D QSAR. *ELTE Szerves Kémia Tanszék (doktori értekezés)* 2007

[2] Manea, M.; Kalászi, A.; Mezo, G.; Horvati, K.; Horvath, A.; Farkas, O.; Przybylski, M.; Hudecz, F. Antibody recognition and conformational flexibility of a plaque-specific β -amyloid epitope modulated by non-native peptide flanking regions. *Journal of Medical Chemistry* 2007.

[3] Etmayer, P., Billich, A., Hecht, P., Rosenwirth, B., Gstach, H.: Paracyclophanes: A Novel Class of Water-Soluble Inhibitors of HIV Proteinase. *Journal of Medicinal Chemistry* 39 (17), pp. 3291-3299

Konformációváltás hatása tiakalix[4]arén-tetraszulfonát – fenol komplexek stabilitására

Bakonyi Sándor, III. évf., Kémia BSc
Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar

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

Kitűnő komplexképző sajátságai miatt a kalixarének már hosszú ideje az érdeklődés középpontjában állnak. Képesek kationokkal, anionokkal és semleges molekulákkal is stabilis gazdavendég komplexeket létrehozni. Tanszékünkön a kalixarének mint gazdamolekulák és környezeti-, valamint biokémiai szempontból fontos aromás vendégmolekulák között kialakuló kölcsönhatásokat tanulmányozzák [1]. Ehhez kapcsolódóan a *p*-krezol vázregzéseinek, majd a tiakalix[4]arén-tetraszulfonát fenollal alkotott komplexének vizsgálata történt. E vizsgálatok során a van't Hoff egyenletől eltérések mutatkoztak, ezek felvetették a konformációváltások hőmérsékletfüggésének elméleti kémiai tanulmányozását. Ezért a *p*-krezolnak - mint egyes kalixarének építő szegmense - regzéseinek tanulmányozása után a tiakalix[4]arén-tetraszulfonát különböző protonáltsági fokának hőmérsékletfüggését vizsgáltuk. A konformáció analízis már igen szűk hőmérsékleti tartományban jelentős változásokat mutat a tiakalix[4]arén-tetraszulfonát két-két szemben lévő gyűrűpárjának hajlásszögeiben. Szimulációinkban a molekulát kétszeresen, háromszorosan és négyszeresen protonált állapotban tanulmányoztuk vákuumban és vízben. Arra voltunk kíváncsiak, hogy a szemben lévő, azonos töltést hordozó gyűrűk milyen mértékben távolodnak el egymástól és ennek hatására a molekula milyen konformációváltást szenved. Az erőtér és szemiempirikus AM1 módszerekkel számított eredményeink közül utóbbiak a kísérleti adatokkal összhangban voltak. Vizsgálataink segíthetnek a komplexek stabilitásának mérésében és a kísérleti adatok kiértékelésében.

[1]Kunsági-M.,S.;Csók,Zs.;Tuzi,A.;Kollár,L. *J.Phys.Chem.B* 112,11743-11749 (2008).

Molekulák energiájának particionálása a kiterjesztett viriál tétel alapján

Barna Dóra, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Tasi Gyula egyetemi docens

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A jelen dolgozat egy olyan energia-dekompozíciós módszert mutat be, amelynek segítségével molekulák teljes energiája egzakt módon felbontható egy- és kétatomos energia-hozzájárulások összegére [1]. A teljes energia felbontásának alapját a viriál tétel általános hullámfüggvényre alkalmazható, a Born-Oppenheimer közelítésen belül érvényes kiterjesztett formája képezi [2]. A számításokat néhány kiválasztott molekula potenciális energiafelületének stacionárius pontjára végeztük úgy, hogy az egyelektronos bázisfüggvényeket mindvégig az atomokon centráltuk. Minden molekulára Hartree-Fock és másodrendű Möller-Plesset elméleti szinten is végrehajtottuk az energiaparticionálást. A kiterjesztett viriál tétel segítségével nyert kétatomos energiagagokat részlegesen újrafelosztva az egyedi atomok között olyan új kétatomos energiajárulékokhoz jutottunk, amelyek értéke már a kémiai kötések energiájának nagyságrendjébe esik. A másodrendű Möller-Plesset perturbációs szinten meghatározott transzformált kétatomos energiák már arra is felhasználhatók, hogy velük kémiai kötések erősségét jellemezzük.

A dolgozat elkészítése során analizáltuk az általunk kiválasztott molekulákra kapott egy- és kétatomos energiajárulékokat, illetve, hogy milyen különbségek vannak a kétféle elméleti szinten nyert eredmények között. Ezek a különbségek kapcsolatba voltak hozhatók az általunk használt – és mások által is gyakran alkalmazott – kvantumkémiai bázis paraméterezésének a jóságával. A saját eredményeinket összehasonlítottuk más szerzők által közölt adatokkal, valamint kísérleti kötődisszociációs energiákkal. Az összehasonlítás eredménye is alátámasztotta azt, hogy az energia-dekompozíciós módszerünk alkalmazható kovalens kémiai kötések erősségének a jellemzésére.

A kiterjesztett viriál tétel továbbá arra is felhasználtuk, hogy segítségével jellemezzük az általunk használt kvantumkémiai bázis minőségét: meghatároztuk, hogy melyek azok a bázisfüggvények, amelyeknek nem megfelelően optimalizáltak a paraméterei.

[1] G. Tasi, D. Barna, *Int. J. Quant. Chem.*, megjelenés alatt (2008)[2] G. Tasi, I. Mayer, *Chemical Physics Letters* 449 (2007) 221.

Jahn-Teller aktív trimerek elméleti vizsgálata

Farkas Ádám László, II. évf. fizikus

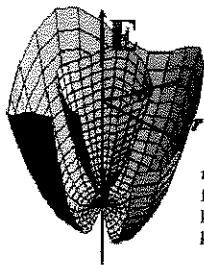
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémia Tanszék

Témavezető: Dr. Tarczay György egyetemi adjunktus
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémia Tanszék

A természetben fontos szerepet játszik a molekulák potenciális energia felületeinek kónikus (kúpos) metszése. Ennek egyik ismert példája az adenosin molekula első néhány felületének metszése. Az adenosin molekula UV gerjesztés után, kónikus metszéseken keresztül kevesebb, mint 1 ps alatt visszaáll az elektron-alapállapotába. Kónikus metszések nélkül ez az érték nagyságrendekkel nagyobb lenne, ami a molekula UV degradációját eredményezné. Elgondolások szerint ennek a folyamatnak elengedhetetlen szerepe volt abban, hogy ez a molekula fennmaradhatott és információt hordozhatott, hiszen a kémiai evolúció során még nem védte ózonréteg a Földet az UV sugárzástól.

A kónikus metszéseket mind kísérleti úton spektroszkópiával, mind elméleti számításokkal tanulmányozhatjuk. Az elméleti modellek pontosságának teszteléséhez azonban érdemes az adozinnál kisebb és egyszerűbb molekulákat választani, melyeknél szintén fellép a kónikus metszés. A kónikus metszések egy speciális esete a „Jahn-Teller felület” (lásd alábbi ábra). Ilyenkor a metszés a molekula szimmetrikus geometriájánál található.

Dolgozatom témája a Li₃ és Na₃ trimerek degenerált elektron-alapállapotához tartozó vibronikus energiaszintek vizsgálata ab initio számításokkal. Az energiaszintek számításakor a vibronikus csatolást (Jahn-Teller torzulást) egy egyszerű modell segítségével vettem figyelembe, amelyben a rezgések anharmonicitását, illetve a nem Jahn-Teller aktív rezgésekkel való csatolást elhanyagoltam. A vibronikus energiaszintek számításához szükséges adatokat különféle szintű elektronszerkezeti számításból nyertem. Vizsgáltam azt, hogy hogyan függnek az energiaszintek az elektronkorreláció figyelembevételének szintjétől, azaz az elektronszerkezeti számítási módszertől (Hartree-Fock (HF,SCF), Many Body Perturbation Theory (MBPT, konkrétan: MP2), és a coupled cluster (CC: CCSD, CCSD(T), CCSDT)), illetve a bázis méretétől (aug-cc-pVDZ, aug-cc-pVTZ, aug-cc-pVQZ). Mindezeket túl számítási eredményeimet irodalomból ismert mérési eredményekkel is összehasonlítottam, hogy lássuk, hogy az egyre pontosabb számításaim valóban tartanak-e a mért értékekhez.



Egy Jahn-Teller aktív molekula potenciális energiájának felületének háromdimenziós képe a kónikus pont közelében.

Jahn-Teller effektus rövid szén nanocsövekben

Kocsis Dorina, IV. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

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

A dolgozatban a szén nanocsövek ionizált és gerjesztett állapotaiban fellépő Jahn-Teller effektust vizsgáljuk. Az effektus szempontjából a ciklcakk és a karosszék nanocsövek az érdekesebbek, így főként ezeket tanulmányozzuk.

Elsőként ab initio szinten végzünk számításokat két rövid, ionizált "nanocsődarabra", majd a kapott torzulási energiákat összehasonlítjuk a fullerének esetében rendelkezésre álló irodalmi adatokkal.

Ezután Hückel-közelítésben, a Longuet-Higgins-Salem modellt használva a torzulási energia hosszfüggését vizsgáljuk, egyre több elemi cellából álló csöveket tanulmányozva. A fullerénnel való további összehasonlítás céljából ez utóbbi módszerrel ciklikus határfeltétel mellett is végzünk számításokat.

LHS-modellben a karosszék nanocsövek ionjait is vizsgáljuk, mind a torzulási energiák nagysága, mind ezek hosszfüggésének szempontjából, majd feltárjuk a ciklcakk csövektől való eltérő viselkedés lehetséges okait.

Mindkét nanocsőtípusnál tanulmányozzuk, hogy az effektus miként nyilvánul meg a kötések torzulásában, ezután igazoljuk a királis csövek Jahn-Teller inaktivitását.

Vizsgálataink kiterjednek a különböző nanocsövek gerjesztett állapotaira is, hasonlóságokat és eltéréseket keresve az ionizációtól. Ebben az esetben is ciklcakk és karosszék csöveket tanulmányozunk, LHS-módszert alkalmazva, egyszeres gerjesztéseket végezve a HOMO és LUMO környéki pályákon.

A dolgozat végén összegezzük az elért eredményeket.

A $\text{CH}_3\text{OOH} + \text{OH}$ reakció kinetikájának elméleti vizsgálata

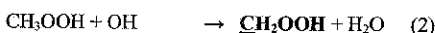
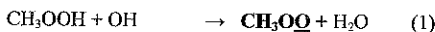
Kosztu Róbert, V. évf. informatikus vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Lendvai György tudományos tanácsadó
MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémiai Intézet, Elméleti Kémiai Osztály

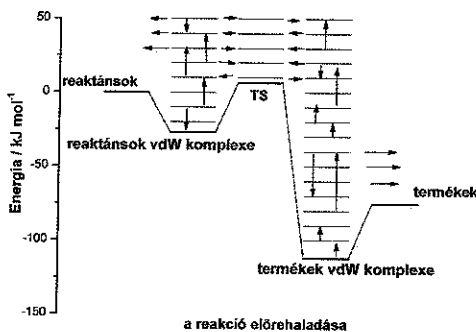
A légkörben jelentős a szerves hidroperoxidok, különösen a CH_3OOH koncentrációja. Mint a többi szerves molekulának, úgy a metil-hidroperoxidnak is, a legfontosabb reakciója a légkörben az OH gyökkel lejátszódó H-atom lehasítása. A dolgozatban bemutatott kutatások célja, hogy elméleti kémiai módszerekkel megvizsgáljam a $\text{CH}_3\text{OOH} + \text{OH}$ reakció sebességi együtthatóját és az azt meghatározó tényezőket.

Ab initio számításokat és részletes kinetikai analízist végeztem a reakció kinetikájának felderítésére. A potenciálfelület vizsgálata alapján megalapítottam, hogy a reakció 2 csatornás, komplexképződéssel járó bimolekulás, exoterm reakció.

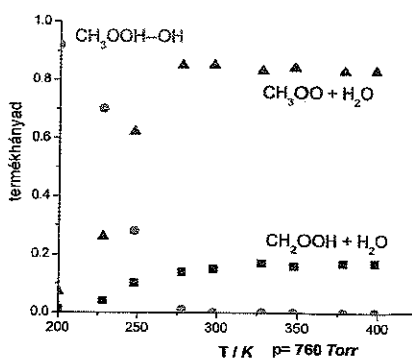


Mind a reaktáns, mind a termék molekulák közötti van der Waals komplexképződés figyelhető meg. A két csatorna potenciálgátjának magassága nagyon közel van a reaktánsok energiaszintjéhez. A két csatorna közül, a teljes bázisra extrapolált legpontosabb ab initio szinten, a CH_3OO gyök képződéséhez vezető csatorna potenciálgátja $\sim 2,8 \text{ kJ/mol}$, mintegy 2 kJ/mol -al alacsonyabb, mint a CH_2OOH gyök képződéséhez vezető csatornáné. Ez a különbség fontos kinetikai eredményt hordoz magába.

A vezér-egyenlet megoldásából megállapítottam, hogy az elágazási arány függ a nyomástól és hőmérséklettől. A jelenlegi ab initio eredmények alapján túlbecsüljük a CH_3OO képződés fontosságát a kísérlethez képest. Előfordulhat, hogy a DFT módszerrel kapott energiák közelebb állnak a valósághoz.



1. ábra A komplexképződéssel járó bimolekulás reakció vázlat



2. ábra A reakció terméknyiadának változása a hőmérséklet növelésével

Az ICNO cikloaddíciós reakcióinak vizsgálata

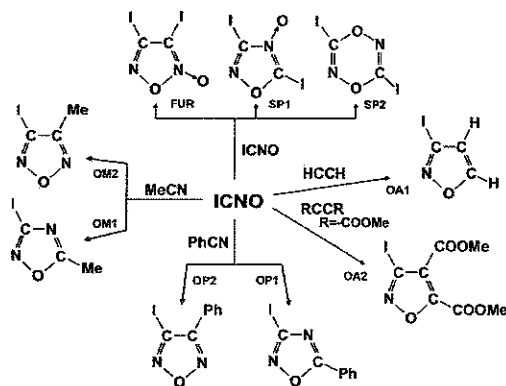
Krebsz Melinda, végzős vegyészmérnök hallgató

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Pasinszki Tibor egyetemi docens

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémia Tanszék

A nitril-oxidok igen fontos vegyületek, melyeket széles körben használnak a szerves kémiában cikloaddíciós reakciókban, különféle heterociklusos vegyületek előállítására. Ezek között számos biológiailag aktív anyag is van. A szervetlen halogén származékok ugyancsak fontos vegyületek ebből a szempontból, de mindeddig csak a ClCNO és BrCNO előállítása és felhasználása ismert. Az FCNO ismeretlen, az ICNO-ról pedig igen keveset tudunk. Munkám során célom az volt, hogy elméleti kémiai módszerek felhasználásával információt szerezzek az ICNO felhasználhatóságáról cikloaddíciós reakciókban. Az ICNO nitril-oxidokkal és etinekkel való reakcióit vizsgáltam, melyek alaptípusai a nitril-oxidok cikloaddíciós reakcióinak. E mellett az ICNO dimerizációjával is foglalkoztam, ami egy tipikus mellékreakció a nitril-oxidok felhasználása során. Célom a reakciók mechanizmusának és energetikájának, valamint izomer vegyületek keletkezése esetén a reakció szelektivitásának vizsgálata volt. A vizsgált reakciókat az alábbi ábrán foglaltam össze. Célom volt továbbá ezen modellreakciók preparatív kémiai vizsgálata, melyek közül a TDK dolgozatban az ICNO dimerizációját ismerttettem.



A formaldehid *ab initio* termokémiája

Nagy Balázs, V. évf. vegyész szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Tasi Gyula egyetemi docens

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A kémiai anyagok termokémiai tulajdonságai kulcsfontosságú szerepet játszanak a technológiai folyamatok tervezésében, illetve az anyagok kémiai viselkedésének megértésében. Laboratóriumban kísérleti eszközökkel sok termokémiai adat meghatározható elegendően nagy pontossággal. A kísérleti eredmények nagy adatbázisokban táblázatosan elérhetőek, bár ezekben gyakran előfordulnak mérési pontatlanságból eredő hibák és hiányosságok egyaránt. Ilyen adatbázisok például a NIST-JANAF Termokémiai Táblázatok vagy a jelenleg is intenzív fejlesztés alatt álló Aktív Termokémiai Táblázatok (ATcT).

Az elmúlt két évtizedben a kísérleti termokémiai módszerek mellett az elméleti kémiai *ab initio* modellek is folyamatosan fejlődtek és nemcsak elérték, de meg is haladták a kitűzött célt: a kémiai pontosságot. A modellekkel egyrészt lehetőségünk van reprodukálni a drága kísérleti méréseket, másrészt tanulmányozhatunk olyan rendszereket, amelyek valamilyen oknál fogva laboratóriumban nehezen vagy egyáltalán nem kezelhetőek. Ilyenek például a szabadgyökök vagy a kémiai reakciók során képződő átmeneti komplexumok.

Munkám során a HEAT (High accuracy extrapolated *ab initio* thermochemistry) termokémiai modellt követve meghatároztam a formaldehid teljes energiáját, beleértve az elektronkorreláció, a relativisztikus effektusok és a diagonális Born-Oppenheimer korrekció hozzájárulását is. A formaldehidet alkotó szén-, oxigén- és hidrogénatom HEAT energiájának ismeretében meghatároztam a rendszer teljes atomizációs energiáját, majd ebből a 0 K-re vonatkoztatott képződési entalpiát kétféle módon a Hess-tétel alapján. A számításokhoz felhasználtam a formaldehid képződési és atomizációs reakcióját. A képződési entalpia meghatározásához szükség volt az alkotó atomok pontos képződési entalpiájának ismeretére. Ezeket az oxigén- és a hidrogénatomok esetén kísérletileg nagy pontossággal meghatározták. A szénatom képződéshőjére vonatkozóan a kísérleti értékekben jelentős különbségek vannak. Ezért a számításokban nem ezeket használtam fel, hanem a korábban általunk meghatározott értéket tovább pontosítva, a legjobb *ab initio* eredménnyel megegyező képződési entalpiával számoltam. A termikus korrekciót elvégezve megkaptam a formaldehid képződési entalpiáját 298.15 K-re vonatkoztatva is. A számított képződési entalpiák kitűnően egyeznek Gurvich által 1989-ben közölt kísérleti eredménnyel.

Geometria-torzulások szén nanocsöveken

Nagy Péter, III. évf. kémia BSc.

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Surján Péter egyetemi tanár

ELTE Fizikai-Kémiai Tanszék

Megjelenésük óta nem csak szigetelőként tekintünk a műanyagokra. A közelmúlt fokozott érdeklődése tulajdonságaik széles skáláját érintette: a vezető polimerek témáját a szintézis nehézségeitől az elektronszerkezeti tárgyalásig kimerítően vizsgálták. Jól ismert a poliacetilén példáján, hogy gerjesztett állapotban mobilis kvázirészecskék – ún. szoliton és antiszoliton pár - jelenhetnek meg. Ez a kvázirészecske pár az alapállapotú poliacetilénhez képest néhány kötéhossznyi alternálási defektusban jelenik meg. Leegyszerűsítve két párosítatlan elektron alkotta gyökpárként felfogható fel.

A szén nanoszerkezetek egyedülálló mechanikai és elektromos tulajdonságaik miatt szintén a tudományos figyelem középpontjában állnak. A szén nanocsövek a poliacetilén szoros analógjaként tekinthetők. Szerkezetük gondolatban előáll poliacetilén szálak keresztirányú szén-szén kapcsolásával. Mindkét rendszer delokalizált π elektronrendszert tartalmaz. A gyakran alkalmazott Hückel-modell keretein belül anyagi összetételük is azonos, hiszen ebben a megközelítésben csak a szénvázat vesszük számításba.

A dolgozatban azt a kérdést vetjük fel, hogy az alapállapotban öröklék-e a nanocsövek a poliacetiléneken kimutatott kötéhossz alternálást. Amennyiben ez a helyzet, a fő kérdés, hogy szoliton típusú alternálási defektusok is létrejöhetnek-e nanocsövekben. A poliacetilén mutatta sajátságok a Hückel-elmélet keretein belül bizonyítottan kiválóan tárgyalhatók. Erre a célra alkalmas például a Longuet-Higginstől és Salem-től származó módszer. A modell kísérleti adatokra illesztett, rendkívül egyszerű összefüggést feltételez a szén-szén kötések rendje és hossza között. Ezen összefüggés alkalmazása teszi a hatalmas nanocsövek geometriájának meghatározására.

A modell, a geometria és az elektronszintek megadásával, képes az alternálási és szoliton-antiszoliton képződési jelenség detektálására. A végesen hosszú csövekre végzett vizsgálataink nem szolitonikus geometria torzulást mutattak. Az eredeti kérdést ezért véges csövek tanulmányozásával nem tudtuk megválaszolni. A nehézségek oka, hogy a szoliton-antiszoliton párképződési jelenséget a kötéhosszakat eltorzító, a csővégeken lokalizált ún. felületi állapotok elfedik. A nyílt végű csövek modelljén ezért fejleszteni kellett.

A zavaró hatások kiküszöbölésére nanocsövek periodikusságát használjuk ki. A nyílt végek eltüntetésére érdekében a csöveket végtelen hosszú, szabályos kristálynak tekintjük. A kristályok elektronrendszerének leírásában használt szilárdtestfizikai módszerrel - a sávelemmel - a felületi állapotokat sikerült kiküszöbölni. Az új megközelítés segítségével megmutattuk, hogy - bár a poliacetilénhez képest sokkal kisebb mértékben - a nanocsövek egy csoportja is szoliton típusú torzulást mutat.

Peptidnukleinsav oligomerek szerkezetének számítógépes modellezése

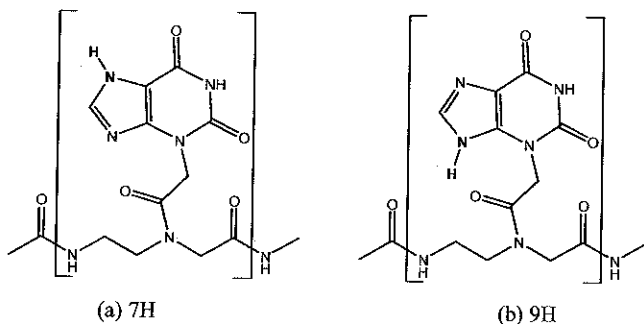
Németh József Lukács IV. évf. biofizikus szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr Paragi Gábor tudományos munkatárs

MTA-SZTE Szupramolekuláris és Nanostruktúrált Anyagok Kutatócsoport

A peptid-nukleinsav (PNS) molekula egy szintetikus nukleotid analóg, melyet az antiszensz génterápiás eljárásokban és a molekuláris diagnosztikában alkalmaznak. A PNS molekulában két funkcionális egységet különítünk el: a cukorfoszfát gerincet kiváltó, peptidkötéseken keresztül kapcsolódó alapláncot, valamint a nukleobázisokat tartalmazó oldalláncokat. Munkám során egy módosított vázhoz kapcsolt mesterséges nukleobázis két tautomerjének (1a és 1b ábra) viselkedését vizsgáltam számítógépes szimuláció keretében.



1. ábra A vizsgált PNS lánc alapegysége a nukleobázis 7H (a) és 9H (b) tautomer változatával

3, 5 és 7 egységet tartalmazó oligomerekből szimulált anelláció segítségével 1000 szerkezetet generáltam molekulamechanikai számolással. Megvizsgáltam a nukleobázisok relatív elhelyezkedését kvaternió együttthatók bevezetésével. A kapott adathalmazon „Quality Treshold” klaszterezést végeztem, melynek segítségével jellemző szerkezeti elemeket kerestem. Megállapítottam, hogy a 9H tautomer esetében kialakul egy jellemző térrálás, amit egy belső hidrogénhid kötés kialakulásával lehet magyarázni.

Megbízható molekulaméreték van der Waals sugarak segítségével?

Németh Eszter, III.évf. Kémia BSc

Kallai Alexandra, V.évf. Környezettudomány

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Tasi Gyula egyetemi docens

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A molekulaalak és –méret alapvető kvantumkémiai tulajdonságok, ismeretük számos folyamat leírásához elengedhetlenül szükséges. Jó példa a naftalin alkilszármazékainak előállításai alak szelektív katalízissel HM és HY típusú zeolitokon [1]. Munkánk során azt vizsgáltuk, hogy a kvantumkémiaiilag számított molekulaméret reprodukálható-e a van der Waals (vdw)-felület méretével az atomi rádiuszok megfelelő választása esetén.

A 0.001 elektron/bohr³ cutoff-érték mellett, MP2(full)/6-31G* szinten számított molekulaalak (nívófelfület) kiterjedését a „köré írható” minimális doboz dimenzióival jellemeztük. A hidrogén vdw-rádiuszát a 2,6-DIPN kvantumkémiai méretére optimalizáltuk, amely továbbvihetőnek bizonyult: a többi vizsgált naftalinszármazék (IPN, DIPN, DTBN...) méretét is jól leírta az MP2(full)/6-31G* egyensúlyi geometriákat alkalmazva. Annak megítélésére, hogy a DIPN-izomerre optimalizált vdw-rádiusz más szerves molekulákra is alkalmazható-e, első lépésben a *n*-hexán-konformerekre is végrehajtottuk a vdw-számításokat. Az eredmények a kvantumkémiai méretekkel [1] jó egyezést mutatnak. A hidrogénradiust több cutoff értékre is optimalizáltuk a 2,6-DIPN-nél.

Nemrégiben kimutatták, hogy sok kvantumkémiai bázis aromás vegyületekre rossz eredményeket szolgáltat: a planáris szerkezet általában elsőfajú nyeregpontra adódik [2]. Ez a probléma több közepes Pople-féle “split valence”-bázis esetén is fennáll, szemben a megfelelő méretű Dunning-féle korreláció-konzisztens bázisokkal [2]. Ennek megfelelően a cc-pVDZ Dunning-bázis segítségével is meghatároztuk a kérdéses molekulák egyensúlyi geometriáját, kvantumkémiai alakját-méretét, továbbá vdw-alakját és méretét is. A számítások alapján megállapítható, hogy a Pople-féle 6-31G* bázis ezen hibája a molekulaméretre, ill. –alakra nincs jelentős hatással a kérdéses molekulák esetén.

[1] G. Tasi, I. Pálkó, Á. Molnár, I. Hannus, THEOCHEM 666-667 (2003) 69.

[2] D. Moran, A.C. Simmonett, F.E. Leach III, W.D. Allen, P.v.R. Schleyer, H.F. Schaefer III, J. Am. Chem. Soc. 128 (2006) 9342.

Hattagú gyűrűs karbének és szililének stabilitása és stabilizálhatósága

Nyíri Kinga, III. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

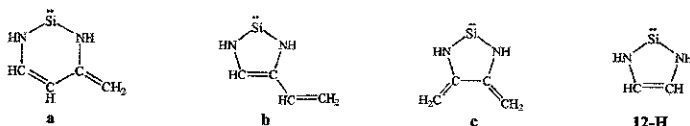
Témavezető: Dr. Veszprémi Tamás egyetemi tanár

BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dolgozatomban a közelmúltban előállított, első stabil hattagú gyűrűs szililén különleges stabilitására kerestem magyarázatot. Vizsgálataim során az előállított szerkezetet modellező a molekulát izomerjeivel és a Denk-szililénnel (**12-H**) hasonlítottam össze. Tanulmányoztam a vegyület kinetikai stabilitását és foglalkoztam a gyűrűi szubsztituenseinek stabilitásra gyakorolt hatásával is. Az analóg karbéneket és germiléneket is hasonlóképpen vizsgáltam.

A molekulák tulajdonságait a sűrűségfunktional-elméleten alapuló B3LYP módszerrel számítottam. Legfontosabb eredményeim a következők.

1) Az előállított a szililénnél stabilabb az öttagú gyűrűs **b** izomer, emellett egy másik izomer (**c**) energiája is közel esik az a-ra kapott értékhez (1.ábra).



1.ábra

2) A molekulapályák szerkezete és energiája alapján a stabilitásának oka, hogy az elektrofil és nukleofil támadásokra még az ellenálló **12-H**-nál is kevésbé érzékeny. **b**-ben a butadién konjugációja nem marad meg, a gyűrűbeli kettőskötés egy aromás rendszer része lesz.

3) Az izodezmikus reakciók energiái alapján, az **a** és **c** molekulák stabilitása a kisebb gyűrűfeszültség miatt közelíti meg az aromás **12-H** stabilitását.

4) Az izodezmikus reakciók energiái, a kötés indexek és a NICS értékek alapján **b**-ben a Denk szililénéhez hasonló mértékű az aromás stabilizáció; **a** viszont nem aromás - ezt igazolja az is, hogy a γ -helyzetű szubsztituensek csekély hatással vannak a stabilitására.

5) Az 1,2H-átrendeződés aktiválási energiái és reakcióhői alapján az **a** szerkezetű karbének helyett valószínűleg a megfelelő négyértékű szerkezetek állíthatók elő.

Potenciálisenergia-felületek számítása π -elektron közelítésben

Zoboki Tamás, IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: Dr. Surján Péter egyetemi tanár
ELTE, Fizikai Kémia Tanszék

A Laboratóriumunkban folyó korábbi kutatások során két különböző modellt fejlesztettek ki, illetve paramétereztek be a konjugált molekulákon belüli és az ilyen molekulák közötti kölcsönhatások leírására. Mindkét modell a Hückel-közelítés kiterjesztésének tekinthető. Az egyik a Longuet-Higgins-Salem modell, mely a rezonanciaintegrálok kötéshosszfüggését tárgyalja. A másik az ún. Intermolekuláris Hückel-modell, mely egymástól távol lévő $2p_z$ -pályák között is értelmez rezonanciaintegrálokat és a $2p_z$ -pályák által bezárt szögeket is figyelembe veszi. A dolgozatban e két különböző modell egységesítésére teszünk kísérletet.

A modell több numerikus paramétert is tartalmaz, ezeket ab initio szinten elvégzett számítások és más fizikai megfontolások alapján állítjuk be. A kapott modell felhasználásával kiszámoljuk különböző molekuláris rendszerek potenciális energiagörbéit. A kapott eredmények jól megegyeznek azzal, amit a kémiai szemléletünk is diktál.

Fizikai kémia és anyagtudomány tagozat

Platina vizsgálata tüzelőanyag-cellák katalitikus folyamatainak modellezéséhez

Berkes Balázs B., IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

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

Mint lehetséges energiaátalakító rendszerek és energiaforrások, a tüzelőanyag-cellák egyre nagyobb érdeklődést váltanak ki napjainkban. Ennek alapvetően két oka van: környezetvédelmi, azaz nem szennyező energiaforrások iránti igény, valamint a hagyományos energiaforrások egyre magasabb ára miatti aggodalom. A tüzelőanyag-cellák közül, a polimer-elektrolit membrános (PEMFC) cellákban lezajló folyamatok jobb megértését tűztük ki célul.

A PEMFC-k gyors ellenőrzésének és szabályozásának egyik kritikus pontja a platinakatalizátor pillanatnyi állapotának illetve stabilitásának ismerete.

A mikro- és nanoméretű katalizátorrészekre végbemenő változások detektálásához azonban nagyon érzékeny módszerekre van szükség. A felületi tömegváltozás mérése például a végbemenő adszorpciós folyamatok felderítésére ad módot. Ilyen kis mértékű tömegváltozás megfigyeléséhez az elektrokémiai kvarc kristály nanoméreg (EQCN) alkalmas és hatékony eszköz. Noha a platinaelektrod/katalizátor egy régóta vizsgált rendszer, az irodalomban sok ellentmondás található, így módon az eddigi ismeretek alapján megbízható modell felállítása és használata nem lehetséges.

Elsőként figyeltünk fel arra, hogy a szulfát-és hidrogénszulfát-ionok is, erősen adszorbeálódnak a platina felületén még negatív potenciálokon is.

A fényes platinára felvitt vékony Nafionréteg esetén nagyobb reakciósebesség (áram) észlelhető a hidrogén oxidációjakor, amit a filmben adszorbeálódott hidrogénnek, illetve annak tulajdoníthatunk, hogy a kationszelektív, protoncserélő membrán meggátolja az anionok adszorpcióját.

A platina még kénsavas közegben is oldódik az oxidréteg redukciója során, minek lehetséges mechanizmusát megadjuk. Ez eltér a kloridtartalmú közegben az oxidáció során leírt platina-klorokomplex képződési módjától. A jelenség felismerése különösen fontos a tüzelőanyag-cellák stabilis üzemelése szempontjából, valamint figyelemmel kell lenni erre a folyamatra a cellát leíró egyenletek, szabályozó algoritmusok megalkotásánál.

Az EQCN frekvenciagörbe különböző szakaszainak deriválásával előállított függvények vizsgálata segítik a folyamatok mibenlétének szemléltetését.

Gyors kalcinálás hatása a nitrogénnel dópolt titán-dioxid fotokatalizátorok aktivitására

Cegléd Zsuzsanna, V. évf. környezettudomány

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Mogyorósi Károly tudományos munkatárs

Pap Zsolt PhD hallgató

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az ipari szennyvizek ártalmatlanítása kémiai oxidációs módszerekkel hatékonyan lehetséges, pl.: oxidáció ózonnal, szuperkritikus vizes oxidáció, elektrokémia eljárás, *fotokatalitikus oxidáció* stb. Az oxidáció hatásfoka nagyban növelhető homogén- vagy heterogén fázisú katalizátorok alkalmazásával. A *heterogén fotokatalízis* lényege, hogy a megfelelő hullámhosszúságú fényel gerjesztett félvezető fotokatalizátor felületén közvetlenül, vagy közvetve szerves vegyületek oxidálódnak. Megfelelő körülmények között a félvezetők a napenergia kémiai energiává való átalakításában, és a szerves szennyezők hatékony lebontásában is alkalmazhatóak.

Kísérleteinkben titán-dioxid alapú, nitrogénnel dópolt fotokatalizátorokat állítottunk elő. Titán(IV)-klorid, sósav, ecetsav és ammónia felhasználásával, szol-gél eljárásban készített mintákból, egy speciális - gyors felfűtéses kalcinálási technikával állítottunk elő fotokatalizátorokat. Tapasztalataink alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy a hagyományos, több órán át tartó kalcinálás szükségtelen, sőt egyenesen hátrányos következményekkel is járhat a minta aktivitására nézve.

Kidolgoztunk egy olyan módszert, amelyben a minta gyors felfűtésével és a kiválasztott hőmérsékleten kivitelezett rövid idejű kalcinálásával igyekszünk megtalálni az optimális kristályosítási viszonyokat. A kalcinálás során az ammónium-sók bomlástermékei nitrogénnel dópolják az amorf titán(IV)-oxid-hidroxidot a kristályosodás alatt. A kalcinálás során egy speciális fűtési programot alkalmaztunk, melyben különböző fűtési sebességű szakaszok követték egymást. A minták hőkezelésének hőmérsékletét és időtartamát optimalizáltuk, majd a fotokatalizátorok aktivitását UV megvilágítás mellett, fenol bomlását mérve határoztuk meg. A fotokatalizátorok aktivitása megközelítette a Degussa P25 fotokatalizátor aktivitását, amely a legtöbb szerves vegyület fotokatalitikus lebontására az egyik leghatékonyabb fotokatalizátor. A fotokatalizátorok jellemzésére röntgen diffrakciós (XRD), elektronmikroszkópiás (TEM, SEM), termoanalitikai (TG-DTA), diffúziós reflexió (DRS) és röntgen-fotoelektron spektroszkópiai (XPS) méréseket is végeztünk.

A további vizsgálatainkban a nitrogén-tartalom növelését és a látható fényel történő hatékonyabb gerjeszthetőség elérését tűztük ki fő célul.

Katalizátor-hordozó szerepe többfalú szén nanocsövek CCVD módszerrel történő előállításában

Csordás Tamás, III. évf. Vegyészmérnök BSc

Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Horváth Géza** Intézet igazgató

Pannon Egyetem Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék

A szén nanocsövek a fullerének családjába tartozó csőszerű nanoszerkezetek, amelyek egy grafit sík feltekeredéséből nyert tökéletes hengerekként képzelhetők el. Lehetnek egy- illetve többfalúak. 1991-ben fedezték fel őket, kiváló mechanikai és elektromos tulajdonságaik alapján számos területen ígéretes új anyagnak bizonyultak. Ennek ellenére ma még csak kevés helyen alkalmazzák, mert még nincs olcsó, ipari kapacitású technológia, ami a különböző felhasználási területeknek megfelelő tisztaságú szén nanocsövet szolgáltatna. Előállításukra használt eddigi módszerek: lézeres elpárolgatás, elektromos ívkisülés vagy szénhidrogének katalitikus bontása (CCVD, Catalytic Chemical Vapour Deposition). Az első két módszer nagy tisztaságú, de a CCVD-hez képest magas hőmérsékletű és kis termelékenységgel.

Dolgozatomban többfalú szén nanocsövek (MWCNTs, Multi-Walled Carbon Nanotubes) CCVD módszerrel történő előállításával foglalkozom. Ez a módszer lehetőleg olcsó szénhidrogének (etilén, acetilén, xilol, toluol) 1000°C alatti dehidrogénezését jelenti olyan speciális katalizátoron, melyen egyszerű korom vagy amorf szén helyett szén nanocsövek keletkeznek. Katalizátorként általában átmeneti fémeket (Fe, Co, Ni stb.) vagy fém párokat alkalmaznak oxid vagy szilikát jellegű hordozó felületére impregnálva.

A heterogén katalízis területéről már jól ismert, hogy a lejátszódó reakciót döntően befolyásolja a fém részecske és a hordozó kölcsönhatása. A szén nanocsövek növekedési mechanizmusának legelfogadottabb elmélete szerint a nanocső növekedése közben maga előtt tolja a fémrészecskét, ezért gyenge kölcsönhatásnak kell lennie a fém és a hordozó között, különben a fémrészecske nem mozdul el a hordozóról.

Vizsgálataink során a Szegedi Tudományegyetem Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszéke által kifejlesztett katalizátort fülüzemi reaktorban teszteltük a laboratóriumi méretű alap kutatások szerint legígéretesebb hordozókon. A termékminőséget transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM) vizsgáltuk, mellyel meghatározható a keletkezett szén nanocsövek átmérője és hossza. Végül megállapítottuk, mely katalizátor-hordozó a legalkalmasabb ipari mennyiségű MWCNT előállítására.

Nagy magnetit tartalmú vezető polimer nanokompozit előállítás és jellemzése

Endrődi Balázs, III. évf. Kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Visy Csaba** egyetemi tanár

Janáky Csaba PhD hallgató

SZTE Fizikai Kémiai Tanszék

Az elmúlt évtizedtől kezdve egyre nagyobb érdeklődést vonzanak az olyan összetett anyagok, melyek valamelyik komponense a nano mérettartományba esik. Az ilyen nanokompozitok rendelkeznek az alkotó anyagok tulajdonságaival, sőt egyes esetekben fellép szinergikus hatás is.

A 90-es évek közepétől kezdték vizsgálni vezető polimerek szerves nanorészecskékkel alkotott kompozitjait, melyek a nagy fajlagos vezetés mellett egyéb előnyös tulajdonságokat is mutatnak. Az irodalomban számos, főként polipirrol- és polianilin alapú mágneses kompozittal találkozunk, azonban a politiofén-, illetve politiofén-származékokat ilyen célra csak néhány esetben használták mátrixként.

Tudományos diákköri munkám során különböző összetételű mágneses nanorészecske – politiofén-ecetsav kompozitokat állítottunk elő. Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiás (FT-IR) mérésekkel igazoltuk, hogy a tiofén-ecetsav monomer kötődik a magnetit részecskék felületén, így egyéb segédanyag használata nélkül tudtuk a magnetit szolt stabilizálni. Ezt követően a polimerizációt vízmentes szerves közegben (nitrobenzol), magnetit nanorészecskék jelenlétében végeztük FeCl_3 oxidálószer segítségével.

A kompozitok szerkezetének és összetételének meghatározására röntgendiffrakciós (XRD)-, fotoakusztikus infravörös spektroszkópiás (PAS-IR)- és termogravimetriás (TGA) méréseket végeztünk. Vizsgálataink nemcsak igazolták a mágneses részecskék beépülését, hanem azt tapasztaltuk, hogy a polimerizáló közeg magnetit tartalmának növekedésével változtatható a beépült szerves anyag mennyisége is. A kapott eredmények lehetőséget nyújtanak mágneses tulajdonságú elektronvezető polimerek kialakítására és esetleges jövőbeli alkalmazására.

Spirális szén nanocsövek CCVD szintézise

Fejes Dóra, V. évf. Környezettudományi

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Hernádi Klára, egyetemi tanár
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Napjainkban a műszaki fejlődés egyik motorja az anyagtudomány. A nanométer méretű részecskék világának egyik fontos szereplője a szén nanocsövek. A fokozott érdeklődést a nanocsövek ígéretes tulajdonságai indokolják. Először is a nanocső mechanikai tulajdonságai azonosak vagy jobbak, mint a drágakő "testvére", a gyémánté. Emellett, elektromos feszültséget kapcsolva a nanocsövekre, ezek kiváló elektron-kibocsátóként viselkednek.

Azonban a szintézis során nemcsak egyenes, Y-szerűen elágazó, hanem spirális szén nanocső szerkezetek is létrejöhetnek. Ezeknél az 5-és 7-szögek beépülése generálja a térbeli görbületet a hatszöges rácsban.

Ma még nem tudjuk úgy irányítani a reakció során a folyamatokat, hogy szelektíven spirális, s a kívánásunk szerint csavarodó - megfelelő helicitású - csöveket alakítsunk ki.

A spirális szén nanocsövek olyan területeken nyerhetnek alkalmazást, mint a nanotépőzár, elektromágneses abszorberek, intelligens tapintó szenzorok [1], vagy rugalmas nanokompozit anyagok kialakítása.

Munkám célja CVD módszerrel történő spirális szén nanocsövek előállítása, az alkalmas katalizátorok kifejlesztésével, és a szintézis feltételeinek optimalizálásával.

Az előállított katalizátorok:

- Co, valamint Fe-Co átmeneti fémekkel együttesen állítottam elő katalizátorokat CaCO_3 , ill. 13X zeolit hordozó alkalmazásával golyósmalomban történő őrléssel
- Impregnálással készítettem CaCO_3 , 13X, ill. szilikagél hordozós Co katalizátorokat

Ezen felül további ammónia atmoszférás kezelést [2] is alkalmaztam egyes kiválasztott katalizátorok esetében.

A kipróbált katalizátorok további fejlesztéssel alkalmasak lehetnek nagyobb mennyiségű spirális szén nanocső előállításra.

[1] S. Motojima, X. Chen, S. Yang, M. Hasegawa, *Diamond & Related Materials* 13, 1989-1992. (2004)

[2] K. Hernádi, A. Fonseca, P. Piedigrosso, J.B. Nagy, D. Bernaerts, J. Riga, A. Lucas, *Catal.Lett.* 48, 229. (1997)

Trimetil-pniktogének (Me_3As , Me_3Sb , Me_3Bi) fotoelektron-fotoion koincidenciaspektroszkópiás vizsgálata

Hornung Balázs, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Sztáray Bálint egyetemi adjunktus

ELTE Szervetlen és Általános Kémiai Tanszék

A tizenötödik csoport – pnikogének – alkil-vegyületei számos nagyjelentőségű ipari folyamatban vesznek részt: a terciér-aminokat mint vegyipari alapanyagokat alkalmazzák, a terciér foszfánokat elterjedten használják ligandumokként fémorganikus katalizátorokban.

A trimetil-arzán, trimetil-stibán és trimetil-bizmán ipari felhasználása az utóbbi években egyre növekszik. Mindhárom elterjedten használt vegyület a kémiai rétegleválasztásban; segítségével változatos tulajdonságú félvezető rétegeket hoznak létre, amelyeket a modern elektronika számos területén használnak. A trimetil-bizmánból emellett szupravezető kerámiát is készítenek. A fenti ipari eljárások alapját adó kémiai reakciók jobb tervezhetősége érdekében fontos e vegyületek kémiai tulajdonságait a lehető legpontosabban megismerni.

A szakirodalomban trimetil-arzán, trimetil-stibán és trimetil-bizmán ion energetikai adataiban rendkívül nagy a bizonytalanság, továbbá számos ionizációs és kötési energiát még nem határoztak meg.

Diákköri munkám során fotoelektron-fotoion incidencia spektroszkópia segítségével felderítettem, és az RPKM-elmélet alapján jellemeztem e három vegyület kis energiájú fotodisszociációs reakcióútjait, és meghatároztam az ionos fém-szén kötési energiákat. A mérési eredmények kiértékeléséhez szükséges adiabatikus ionizációs energiákat ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiával és elméleti számításokkal határoztam meg.

Termodielektromos spektrométer, mint virtuális műszer készítése és alkalmazása

Ludányi András, III. évf. vegyészmérnöki (BSc)

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezetők: dr. Molnár Ferenc, egyetemi adjunktus

Bacsoni András, PhD hallgató

Pannon Egyetem, Fizikai Kémia Intézeti Tanszék

A különböző összetételű és különböző alappolimert (térhálósítót) tartalmazó festékekre egyedi, jellemző termodielektromos spektrumot lehet kimérni. Ugyanakkor a különböző fizikai és kémiai hatásokra a polimerszerkezet károsodhat, ezáltal a mért spektrum is torzulni fog. A károsító hatás észlelhető változást hoz létre a spektrumban.

A hőmérséklet emelésével (adott frekvencián) a relatív permittivitás bizonyos hőmérséklet intervallumban lépcsőszerűen növekszik, ami azzal magyarázható, hogy alacsony hőmérsékleten az adott szerkezetre jellemző poláris csoportok be vannak fagyva csak elektron és atom polarizáció lép fel, majd a hőmérséklet növelésével az intermolekuláris kölcsönhatások csökkennek, és ez megkönnyíti a poláris molekulák, csoportok tér irányába történő orientációját. Egyidejűleg azonban a molekulák hőmozgásának energiája is növekszik, ami csökkenti az orientációt. A relaxációs effektus a két hatás eredőjeként áll elő.

Munkám során vizsgálom a festékek mechanikai és dielektromos tulajdonságai közötti összefüggéseket. A különböző fizikai behatások kimeríhetőségét, úgymint UV sugárzásnak, hőregítésnek és egyéb degradációs hatásoknak kitett mintákat.

A vizsgált minták spektrumait más elektrokémiai módszerekkel értékelve egyedi adatbázist lehet felállítani a festékek kötőanyagának azonosításához.

Szén nanocsőre felvitt ezüst katalizátor készítése és jellemzése

Medgyesi Ágnes, V. évf. környezettudományi szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Kónya Zoltán egyetemi docens

Sápi András Ph.D. hallgató

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A szén nanocsövek több szempontból is megfelelnek katalizátorhordozónak. Kizárólag kovalens kötéssel kapcsolódó szén atomokból állnak, és ennek következtében az elérhető legellenállóbb szálak. Rendkívül rugalmasak, és 90° -ban meghajlíthatóak szerkezeti változás nélkül. Másik fontos jellemzőjük a termikus stabilitásuk. Speciális adszorpciós tulajdonságokat mutatnak, ami főleg sajátos morfológiájuknak köszönhető. Ezek mellett jó elektromos vezetőképességgel rendelkeznek és inertek.

Az ezüst antibakteriális hatása a sajátos tulajdonságaiból adódó specifikus reakciófolyamatoknak köszönhető. Az ezüst 10^{-5} g/l nagyságrendben oldódik vízben, ami már toxikus a baktériumok számára, emellett az ezüst nanorészecskék méretüknek köszönhetően közvetlen kölcsönhatásba tudnak lépni a baktériumokkal, amelyek átmérője leginkább 1 és 10 nm között van. Az ezüst három folyamat révén inaktíválja a mikroorganizmusokat: 1. reakcióba lép a sejtmembránnal, 2. kötést létesít a mikroorganizmus DNS-ével, ami gátolja a lecsavarodást, 3. katalitikus oxidációval. Az ezüst nanorészecskék antibakteriális hatása abban áll, hogy nagy fajlagos felületük miatt megnövekedett kémiai aktivitást mutatnak. Hatásukra a baktérium sejt károsodik, a sejtfal megsérül, és ezüst nanorészecskék halmozódnak fel a sejtmembránban. Emiatt a membrán permeabilitása nagymértékben megnő, ami a sejt halálát eredményezi.

Mind a szén nanocső katalizátorhordozóként történő alkalmazásában, mind az ezüst vízfertőtlenítő szerként történő felhasználásában eredményes vizsgálatok születtek, ezért mi azzal a kérdéssel foglalkoztunk, hogy hogyan lehetne ezek együttes alkalmazását lehetővé tenni.

Kihasználtuk a szén nanocső kedvező tulajdonságait (termikus, mechanikai, elektromos, adszorpciós) és az ezüst antibakteriális hatását.

Munkánk során olyan ezüst/szén nanocső nanokompozitot hoztunk létre, mely a víztisztításban alkalmazható. A mintákat transzmissziós elektronmikroszkópiával (TEM), röntgendiffrakcióval (XRD), illetve fenol lebontási modell reakcióban vizsgáltuk.

Többfalú szén nanocsövek (MWNT) TiCl_4 , TiBr_4 prekursor alkalmazásával előállított kompozitjainak vizsgálata

Németh Zoltán, V. évf. vegyész szakos hallgató

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Hernádi Klára egyetemi tanár

SZTE TTIK Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Az SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszékének laboratóriumában már korábban is kiterjedt kutatások folytak különböző összetételű, szén nanocsövekkel kialakított kompozitok előállítására, és tulajdonságaik vizsgálatára. A kompozitok szálerősítésű rendszerek, melyek jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkeznek, előállításuk azonban nehéz, mert a szén nanocsövek polimer mátrixba való bekeverhetősége rossz. Ehhez kapcsolódik TDK munkám témája, amely többfalú szén nanocsövek (multi-walled carbon nanotubes - MWNT) TiCl_4 , illetve TiBr_4 prekursorokkal, különböző körülmények között alkotott kompozitjainak vizsgálatára terjed ki.

A kompozitokat oldószermentes és oldószeres körülmények között egyaránt előállítottuk, továbbá vizsgáltuk a hidrolízis sebességének, majd a hőkezelés hatását is a kialakuló réteg szerkezetére.

Az elkészített mintákat transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM), pásztázó elektronmikroszkóp (SEM), EELS fejrel felszerelt nagyfelbontású elektronmikroszkóp (HRTEM), EDXS fejrel felszerelt pásztázó elektronmikroszkóp (SEM), termogravimetria, XRD, és BET módszer segítségével vizsgáltuk.

Az eredmények értékelése alapján megállapítható, hogy a TiBr_4 prekuzorral előállított kompozitok felületi tulajdonságai jobbak, mint a TiCl_4 -dal előállítottaké. A hidrolízis sebességének megválasztása alapvető fontosságú a felületi réteg minősége szempontjából. Ezen túl a prekuzor anyagi minősége is jelentősen befolyásolta a keletkező réteg tulajdonságait, melyet különböző mészeres módszerekkel jellemeztünk.

A bizmut-tellurid elektrokémiai leválasztása és tulajdonságai

Roósz Balázs, IV. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Visy Csaba egyetemi tanár
SzTE Fizikai Kémiai Tanszék

A fosszilis energiahordozók kimerülésével egyre nagyobb szerepet kapnak a megújuló energiaforrásokat kihasználó kutatások. Az ipari folyamatok során a környezetbe disszipálódó hulladékhő egyik lehetséges felhasználásának háttérében a már 1821 óta ismert Seebeck-effektus áll. Jelenleg az egyik legalkalmasabbnak ítélt termoelektromos anyagnak, a bizmut-telluridnak (Bi_2Te_3) felhasználására igen szerteágazó próbálkozásokkal találkozhatunk. Egy termoelektromos anyag teljesítő képességét az energiatermelés szempontjából a dimenziómentes ZT jósági tényező értékével jellemezhetjük.

$$ZT = S^2 \cdot \sigma \cdot T / \kappa,$$

ahol S : a Seebeck koefficiens, T : a hőmérséklet, σ : az elektromos vezetés, κ : a hővezetési együttható. Munkánk célja sztöchiometrikus vagy attól eltérő Bi_xTe_y elektrokémiai leválasztása és jellemzése, összetételének meghatározása, valamint termoelektromos tulajdonságának vizsgálata volt. Ennek során potenciosztatikusan választottunk le Bi_2Te_3 -t Pt elektródon, kezdetben az Ag/AgCl referenciaelektrodoz képest -120mV potenciálón. A Bi_2Te_3 leválasztása elektrokémiai sajátosságainak tanulmányozását a mindvégig alkalmazott $7,5\text{mM Bi}^{3+}$, $10,0\text{mM HTeO}_2^+$, $1,0\text{M HNO}_3$ oldattal végeztük. Megállapítottuk, hogy megfelelően nagy pásztázási sebesség esetén a leválasztás kémiaiilag reverzibilis, és a felületen képződő bizmut-tellurid a platinaelektrodon ilyen savas oldatokban jól ismert folyamatokat blokkolja. A réteg elektrokémiai viselkedése alapján kísérletet tettünk a folyamatok mechanizmusának leírására, melyben a leválasztott réteg két lépésben történő oxidációját tételeztük fel.

A későbbiekben az elektrokémiai úton leválasztott bizmut-telluridot a felületről eltávolítottuk, az így nyert fekete port pasztilláztuk, majd Seebeck-koefficiensét mértük.

A Bi_2Te_3 mintákat SEM-el, EDX-el és XRD-vel szintén jellemeztük. A SEM felvételeken kb. $0,9\mu\text{m}$ átmérőjű és $0,1\mu\text{m}$ vastagságú, egymásba nőtt, lapos kristályokat figyeltünk meg. Az előzetes irodalmi adatok alapján p-típusú Bi_xTe_y -t vártunk, hozzávetőlegesen sztöchiometrikus, $1,5 \text{ Te/Bi}$ aránnyal. Jóllehet az EDX $2,0 \pm 0,2 \text{ Te/Bi}$ arányt mutatott, a röntgen diffrakciós mérés egyértelműen a romboéderez, sztöchiometrikus formát igazolta.

Részecskés vékonyrétegek optikai vizsgálata pásztázó szög reflektometriával és spektrofotometriával

Sepsi Örs, V. évf. mérnök-fizikus

BME Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi docens

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Hild Erzsébet** tudományos tanácsadó

A nanostruktúrák előállításának egyre pontosabb és specializáltabb kivitelezése azt az igényt is fölveti, hogy ezeket a rendszereket igen aprólékosan lehessen jellemezni mind elektromos, mind mágneses mind optikai tulajdonság szempontjából. Munkám során az ilyen, nanométer nagyságrendbe eső részecskék szilárd hordozós filmjeinek optikai jellemzőit vizsgáltam. A Langmuir-Blodgett technikával készült minták kiválóak az elméleti optikai modellek megalkotására, illetve a kész modellek ellenőrzését és továbbfejlesztését is elősegítik ezek a pontosan tervezhető és egyszerűen előállítható rétegek.

Homogén, kissé inhomogén és periodikus szerkezetű rétegek spektrumait és reflexiós görbéit szimulálva mutatom meg, hogyan befolyásolja a minták szerkezete az optikai választ.

A mintadarabok egy átlátszó, vastag hordozóból (kb. 1 mm), és a hordozó két oldalára szimmetrikusan felvitt részecskés dielektrikum-filmekből állnak. A ZnO és SiO₂ részecskékből készült egy- és többrétegű mintákat UV-Vis spektrofotometriával és pásztázó szög reflektometriával (Scanning Angle Reflectometry, SAR) vizsgáltam, majd a kapott eredményeket olyan vékonyrétegoptikai módszerrel értékeltem, mely figyelembe veszi a részecskés filmek optikai tulajdonságainak mélységfüggését.

Távlati terveim: a nagyobb részecskékből készült filmek mérete már összemérhető a fény hullámhosszával, így ezekben a mintákban már jelentős a szórás, ezt az effektust szeretném a későbbiekben jellemezni, és az értékelés során figyelembe venni.

VO_x nanoszálak szintézise

Sija Éva Ilona, V. évf., Vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr Kónya Zoltán** egyetemi docens

Kis-Csitári Judit Ph.D. hallgató

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A nanovilágot még csak most kezdjük megismerni, de bizonyosra vehető, hogy a jövő technikai-technológia fejlődésének meghatározó tényezője lesz.

Nanorészecskék előállításához viszonylag ritkán alkalmazzák az akusztikus kavitáció jelenségét, azaz ultrahangos besugárással létrehozott buborékképződést. Ezeket a kavitációs buborékokat mikroreaktorként is szokták emlegetni, ugyanis az összeroppanásuk pillanatában a mikrobuborékok gőzterében lévő molekulákra több ezer Kelvin és több ezer atmoszféra nyomás hat. Ilyen körülmények mellett olyan reakciók is lezajlanak, melyek légköri viszonyok között extrém reakciófeltételeket igényelnének.

Munkánk során ezt a jelenséget igyekeztünk kihasználni. Célunk vanádium-oxid nanoszálalak előállítása volt ultrahangos besugárással, illetve azon tényezők vizsgálata melyek a szálak képződését befolyásolhatják.

A szintézishez desztillált vízben ammónium-metavanadátot oldottunk fel, majd pH-ját salétomsavval állítottuk 2-re. Az így kapott oldatokat különböző időtartamon keresztül UIP 1000 típusú homogenizátorral (1 kW, 20 kHz) más-más amplitúdón homogenizáltuk

Az előállított nanoszerkezeteket transzmissziós elektronmikroszkópiával (TEM) vizsgáltuk. A felvételekhez 100 kV feszültségen üzemelő Philips CM 10 típusú készüléket használtunk.

Röntgendiffrakciós mérések (XRD) segítségével a különböző vanádium-oxid fázisokat tudtuk tanulmányozni. Vizsgálataink során Rigaku Miniflex II típusú diffraktométert használtunk, az elporított mintákról $2\theta = 3^\circ - 80^\circ$ szögterületben vettünk fel a diffraktogramokat.

Átmenetifémekkel dópolt ZnO nanorudak előállítására és ezek fotokatalitikus tulajdonságainak vizsgálata

Szabó Mária, III. évf. kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Kónya Zoltán egyetemi docens

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

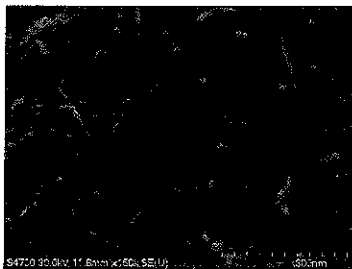
A TDK dolgozatom témája ZnO nanorudak dópolása átmenetifémekkel (Co, Ni, Fe, Mn, Cu, Ag), és annak vizsgálata, hogy ezen fémek beépülése hogyan változtatja meg a ZnO fotokatalitikus tulajdonságait.

A ZnO nanorudakat cink-acetátból állítottuk elő, nedves kémiai eljárással, a dópolt rudak előállításához cink-acetátot és a megfelelő fém acetátját használtuk (kivéve az Ag esetében), úgy hogy a fém és cink arány a mólokot tekintve 1:9 legyen [1].

Az előállított minták szerkezeti jellemzésére TEM, SEM, XRD vizsgálatokat alkalmaztunk.

A rudak fotokatalitikus hatását metil-narancs festék elroncsolásával vizsgáltuk [2].

Több félvezető, pl. ZnO vagy TiO₂, mutat jelentős fotoszenzibilitást, ezek az anyagok nem mérgezők, alacsony az előállítási költségük és környezetbarátok. A szerves szennyezők félvezetőkkal történő roncsolása jelentős lehet a környezetszennyezési problémák megoldásában.



Mangámmal dópolt ZnO nanorudak (SEM kép)

[1] X. Qiu, et al., *Nanotechnology* 19 (2008) 215703

[2] B. Liu et al., *Material Chemistry and Physics* 112 (2008) 35-40

Enzyme entrapment in biocompatible sol-gel materials

Andrea Szöllösi, 3rd year student

West University of Timișoara, Chemistry Department,

Supervisor: Dr. Gabriela Preda associate professor
Chemistry Department, West University of Timișoara, Romania

Following the recent breakthroughs in nanotechnology, various nanostructures have been studied as hosts for enzyme immobilization via approaches including enzyme adsorption, covalent attachment, enzyme encapsulation, and other such methods [1].

Our team has chosen the entrapment of biocatalysts in silica gels obtained using sol-gel methods by polymerization of hybrid organic-inorganic precursors. Hybrid silica glasses are obtained under mild chemical conditions, allowing biomolecules to remain active. Silica matrixes are biocompatible with biomolecules and living cells, allow the free flow of small substrate and product molecules through the pores, are chemically inert, resistant to microbial attack, have a stable structure and exhibit improved mechanical strength [2].

Ionic liquids are molten salts that have a melting point below 100°C due to the charge delocalization within the ions. They may be used as templates during gelation and thus reduce the shrinkage of the gel by pore filling; they can also behave as stabilisers to protect the enzyme from the inactivation caused by the release of alcohol during the sol-gel process [3].

Thus, the immobilization of Alcalase (a *Bacillus licheniformis* subtilisin) with the aid of the sol-gel method and using different hybrid silica xerogels and additives was carried out. First of all, the enzyme was immobilized in hybrid matrixes (using different precursor molar ratios) obtained through a series of entrapment techniques. Afterwards, studies were made concerning the use of ionic liquids both as solvent replacements and as stabilisers.

Results show that hybrid matrixes improve enzyme activity in contrast to simple matrixes. Also, the use of ionic liquids as stabilisers produced an increase in Alcalase activity for most of the ionic liquids in the series that was used. From a structural point of view, results show that the alkyl chain of the cation plays a key role in the enzyme activity increase. The amount of ionic liquid used for stabilisation is also important, as an amount of ionic liquid higher than a certain optimum amount (characteristic for each type of ionic liquid), decreases enzyme activity.

[1] Jungbae, K., Grate, J., Wang, P., *Chem. Eng. Sci.*, 61, 1017–1026 (2006)

[2] Dragomirescu, M., Vintila, T., Dudas, Z., Vlad-Oros, B., Preda, G., *J. Biotech.*, 131S, S98–S121 (2007)

[3] Lee, S.H., Doan, T. T. N. Ha, S. H. Koo Y.-M., *J. Molec. Catal. B: Enzymatic*, 45, 57–61 (2007)

Egyidejű in situ vezetési és spektroelektrokémiai vizsgálatok elektronvezető polimereken

Tóth Péter Sándor, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Peintler-Kriván Emese** egyetemi tanársegéd
SZTE Fizikai Kémiai Tanszék

A polimerek elektromosan vezető fajtái elektrokémiai úton készíthetők, és reverzibilisen oxidálhatók, illetve redukálhatók. Kutatásuk szerteágazó és kiterjedt az elektro-, és a mikrotechnológiák világában egyaránt. Könnyen leválaszthatók üregekben, tetszőleges mikrostruktúrák alakíthatók ki, mikroelektronikai egységek, tranzistorok, érzékelők, memóriák kialakítására alkalmasak.

Az elektronvezető polimereken a konjugált rendszerben elektronhiány, vagy elektrontöbblet mozdulhat el szabadon a lánc mentén vagy a láncok között, ami biztosítja az elektromos vezetést. Oxidációs állapotok módosításával ellenállásuk változtatható.

Vizsgálatainkat kétféle vezető polimerrel végeztük, melyek monomerjeit nátrium-dodecil-szulfát anionos tenziddel szolubilizáltuk vizes oldatban. Az oldat pH-ját a számunkra fontos biológiai rendszereknek megfelelő 6,87 értékre állítottuk be.

Elsősorban poli(3,4-etilén-dioxo-tiofén) (PEDOT) és polipirrol (PPy) rétegek készítésével és tanulmányozásával foglalkoztunk. A PEDOT filmeket állandó potenciál mellett választottuk le Pt elektródon, indium-ón-oxid (ITO) bevonatú üvegelektrodon, illetve az egyidejű in situ vezetési [1] és spektroelektrokémiai [2] mérés technika számára alkalmas vágattal ellátott ITO üvegen, valamint vágott Pt-Pd-Ag elektródon.

Vizsgálatainkat kiegészítettük ITO bevonatú üvegelektrodon leválasztott PPy rétegek spektroelektrokémiai tanulmányozásával.

Munkánk során a kombinált mérés technikát elemeiből állítottuk össze, a mérési paramétereket optimalizáltuk, vizsgálatainkhoz új cellát terveztünk és készítettünk.

Az általunk felépített, a szakirodalomban eddig még nem talált, újszerű, összetett vizsgálati módszer alkalmazásával sikerült egyidejű in situ vezetési és spektroelektrokémiai adatokat nyernünk, e polimerek két legszembetűnőbb tulajdonságáról

[1] Kankare, J., Kupila, E.-L., J. Electroanal. Chem., 322, 167-181 (1992)

[2] Krivan, E., Visy, Cs., Kankare, J., Journal of Physical Chemistry B, 107 (6), 1302-1308, (2003)

Katalízis tagozat



A 4-klórfehol átalakítása ftalocianin katalizátorokkal

Baranyi Judit, V. évf. környezettudományi szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Zsigmond Ágnes egyetemi docens
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

Napjainkban egyre több kémiai kutatás foglalkozik a környezetbe kikerülő szennyező anyagok lebontásával, ártalmatlanításával, hiszen a környezetvédelem egyre fontosabb szerepet kap mindennapi életünkben. A szennyezőanyagok eltávolításának egyik lehetséges módja a szennyezések átalakítása kevésbé káros termékekké. E célra talán a leggyakrabban alkalmazott reakció az oxidáció, amely nemcsak a szennyezések eltávolítása szempontjából nagyon jelentős, de számos ipari eljárás alapját is adja.

Munkánk során a célkitűzésünk a szennyvizek egyik leggyakoribb szennyező komponensének, a 4-klórfeholnak az eltávolítása volt oxidációs reakcióval. Az oxidációs reakciót vizes közegben, különböző fém-ftalocianin katalizátorok segítségével végeztük.

A vizsgálatokat a különböző fém-ftalocianin katalizátorokkal a Prágai Chemical Institute of Technology Kémiai Tanszékén kezdték el. Vízoldható komplexekkel számos eredményt értek el: a reakciót fémentes és különböző központi atomként fémet (Zn, Al, Si, Co, Ni, Cu, Ti) tartalmazó ftalocianin katalizátorok megfelelően katalizálják [1,2]. A fenti katalizátorok azonban számos hátránnyal rendelkeznek - mint pl. dezaktiválódás a reakcióelegyben, rendkívül rossz oldékonyság. Ezen hátrányok kiküszöbölését a katalizátorok heterogenizálásával próbáltuk megoldani.

A heterogenizálást az Augustine professzor által kidolgozott módszer szerint végeztük, majd az előállított katalizátorokat két különböző: egy fényhatásra kiváltott, és egy oxidálószerrel végrehajtott oxidációs reakcióban alkalmaztuk.

A kitűzött célt sikerrel megvalósítottuk, mert mindkét oxidációs eljárásban a 4-klórfehol oxidálódott. Összehasonlítva a homogén katalizátorokkal végzett oxidációs reakciókat a heterogén katalizátorokkal végezettekkel, megállapítható, hogy az aktivitások hasonlók voltak, viszont a heterogén katalizátorok sokkal könnyebben kezelhetők, és könnyen újrafelhasználhatók voltak.

[1] P. Kluson, M. Drobek, T. Strasak, Journal of Molecular Catalysis, Vol. 272, Issues 1-2, 2 July 2007, Pages 213-215

[2] B.V. Romanovskii, Kinetics and Catalysis, Vol. 40, No. 5. 1999, pp.673-674

A glicerín dehidratálása akroleinné

Bata Péter, V. évf. környezettudományi szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Zsigmond Ágnes** egyetemi docens

SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A kőolajalapú motorhajtó anyagok kiváltása olyan anyagokkal, melyek nem növelik a légkör széndioxid tartalmát, egyre fontosabbá válik napjainkban. A növényi olajokból átszerezéssel előállított biodízel alkalmazása motorhajtó anyagként az egyik lehetséges megoldás. A biodízelgyártás mellékterméke a glicerín, amelynek a nagy termelés következtében megjelenő túlzott feleslegét az ipar már nem tudja feldolgozni. A glicerínfelesleg megjelenésével párhuzamosan széleskörű kutatások indultak el a glicerín átalakítására, más az ipar számára értékesebb és felhasználhatóbb kiindulási anyagokká. A kezdeti eredmények ellenére az ipari felhasználás számára alkalmas katalizátor és a megfelelő körülmények vizsgálata még mindig érdeklődésre tart számot.

Munkám során a glicerín akroleinné való átalakítását vizsgáltuk, környezetkímélő heterogén katalizátorok segítségével. Heterogén katalizátort alkalmazott egy amerikai szabadalom is, amely alapján elkezdtük vizsgálatainkat. A katalizátor alumínium-oxidon rögzített ortofoszforsav volt, amelyet magas forráspontú olajjal dörzsöltek össze. Az olajos szuszpenziót fűtőberendezésben kevertették, és ehhez adagolták a glicerint. A keletkező akroleint frakcionáló kolonna és hűtő segítségével gyűjtötték össze.

Kísérleteink során először a szabadalomban leírt eljárást reprodukáltuk, majd egy másik heterogén katalizátort alkalmaztunk, az alumínium-oxidon rögzített foszforvolfrámsavat, reakciókörülményként pedig a szabadalomban leírtakból indultunk ki. Az általunk használt magas forráspontú oldószerek a bifenil, az undekán, a petróleum és a gázolaj voltak. Az átdesztillált elegy összetételét gázkromatográfiás analízissel határoztuk meg.

Vizsgáltuk a hőmérséklet és az oldószer szerepét és megállapítottuk, hogy az akrolein konverziója a várakozásnak megfelelően, a hőmérséklet emelkedésével nő. Az alkalmazott oldószer is befolyásolja a konverziót, de minden esetben 300°C-on a kaptunk maximális konverziót.

Hordozós nemesfém nanorészecskék hidrodeklórozási aktivitásának vizsgálata IR spektroszkópiával

Búza Mihály T., V. évf. vegyész szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Hannus István** egyetemi tanár

Dr. Halász János egyetemi docens,

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Különböző hordozókra felvitt nanoméretű fém részecskék katalitikus aktivitásának vizsgálata ma a katalízis kutatás egyik izgalmas területe. A korábban inaktívnak gondolt aranyról is kiderült, hogy nanoméretben katalitikus aktivitással rendelkezik. A kétfémes katalizátorok vizsgálata egy újabb kihívást jelent a kutatóknak.

A klórozott szénhidrogének az iparban igen széles körben elterjedt és használt vegyületek jó fizikai- és kémiai tulajdonságaik, kémiai ellenálló képességük, stabilitásuk miatt. A környezetre viszont épp ezen tulajdonságaik miatt veszélyesek, mert nem bomlanak le és felhalmozódnak az élő szervezetekben.

Mára az egyik alapvető környezetvédelmi feladat, hogy ezeket az anyagokat a forgalomból kivonják, más ártalmatlan komponenseket alkalmazzanak, vagy a környezetbe való kibocsátásukat csökkentik, ill. lebontsák őket nem káros anyagokká.

A Szegei Tudományegyetem Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszékén évek óta folynak kutatások a klórozott szénhidrogének reduktív lebontásával, hidrodeklórozásával kapcsolatban.

Munkám során a széntetraklorid hidrodeklórozásának modellreakcióját vizsgáltam Pt, Pd és Au nanorészecskéket tartalmazó TiO_2 és mezopórusos szilikát hordozós katalizátorokon, megalapozva ezzel klórozott aromás vegyületek hidrodeklórozási reakciójának későbbi vizsgálatát. A redukciós átalakulást FT-IR spektroszkópiával követtem.

Megállapítottam, hogy a TiO_2 hordozós Pt és Pd katalizátorok aktívak a széntetraklorid hidrodeklórozásában, míg az Au tartalmú nem. A Pt/ TiO_2 katalizátoron HCl és metán a reakció végterméke, míg Pd/ TiO_2 -n a HCl mellett képződő szénhidrogén az etán. A kétfémes Au, Pd katalizátorok a Pd-ra jellemző termékspektrumot adták.

A TiO_2 -dal módosított SBA-15 mezopórusos szilikát hordozóra felvitt Au nanorészecskék viszont aktívak voltak a hidrodeklórozásban. A végtermék HCl és metán mellett köztitermékként kloroformot is kimutattunk, amelynek mennyisége a hőmérséklet emelésével maximum görbe szerint változott.

További vizsgálatok szükségesek annak kiderítésére, hogy milyen Au-hordozó kölcsönhatás felelős az Au nanorészecskék hidrodeklórozási aktivitásáért.

Öttagú kelátgyűrűt képző foszfán ligandumok vizsgálata (*Z*)- α -acetamido-fahéjsav hidrogénezési reakciójában

Farkas Gergely, IV. évf. vegyész

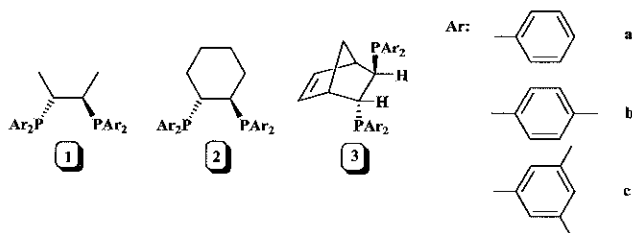
PE Mémöki Kar

Témavezetők: Dr. Takács Eszter tudományos kutató,
Dr. Bakos József egyetemi tanár
PE-MK Szerves Kémia Intézeti tanszék

A természetben előforduló szerves anyagok egy részét optikailag aktív molekulák alkotják. Az enantiomerek egymással tükörképi viszonyban lévő szerkezetek, melyek akirális hatásokkal szemben egyformán, királis hatásokkal szemben viszont eltérő módon viselkednek. Ez utóbbi tény, jelentősen megnehezíti a szintetikusan előállítható racém származékok biológiai felhasználását.

A homogénkatalitikus aszimmetrikus szintézis királis ligandumot tartalmazó katalizátorral oldható meg. A kelátgyűrű konformációs viszonyai meghatározó szerepet játszanak az aszimmetrikus indukcióban. A koordinációs övezetben ugyanis a szubsztrátum koordinációja sztérikus okok miatt az egyik oldal irányában kedvezményezett. Az optikai indukciót azonban, a termodinamikai és kinetikai tényezők együttesen határozzák meg.

Tudományos diákköri munkám során különféle öttagú kelátgyűrűt képző foszfán ligandumokat vizsgáltam a (*Z*)- α -acetamido-fahéjsav hidrogénezési reakciójában. A módosításra felhasznált ligandumok az **1b**, **2a**, **2b**, **2c** és **3a** királis ditercier foszfánok voltak.



A modell reakció során tanulmányoztam a különböző ligandumoknak a reakció optikai hozamára és aktivitására gyakorolt hatását, és a katalitikus eredményeket összehasonlítottam az irodalomban leírt analóg szerkezetű ligandumokkal elért eredményekkel.

Új-típusú Raney-Ni katalizátorok jellemzése és alkalmazása klórtartalmú aromások ártalmatlanításában

Harnos Szabolcs V. évf. környezettudományi szakos hallgató

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Halász János egyetemi docens

Mészáros Szilvia PhD hallgató

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A halogéntartalmú szénhidrogének, mint például a klórbenzolok, széles körben használatosak a mindennapi alkalmazásokban, viszont legtöbbjük környezetkárosító tulajdonságokkal is rendelkezik. A halogéntartalmú szerves hulladékok kezelése jelentős környezeti- és társadalmi problémává nőtte ki magát, mert a legtöbbjük toxikus, viszont stabilisak, ezért a környezetben felhalmozódnak és hosszú időre kifejtik káros hatásukat.

A klórtartalmú aromások ártalmatlanítása célszerűen katalitikus lebontással valósítható meg, de még nincs olyan katalizátor, ami megfelelő stabilitással és élettartammal rendelkezne. Ennek következtében fontos lenne olyan katalitikus aktivitással rendelkező anyagokat találni és alkalmazni, amelyek az ilyen típusú vegyületeket értékes, klórmentes vegyületekké képesek alakítani. Emellett ezek a katalizátorok nagy stabilitással kell rendelkezniük HCl jelenlétében is, amely egy aktív mellékterméke a bomlásnak.

A BMKE Szerves Kémiai és Technológiai Tanszékén kifejlesztett új-típusú, nem pirofóros Raney-Ni katalizátorcsalád [1,2] megfelelő jelölt lehet ezen követelmények teljesítésére, ha sikerül megtalálni az optimális alkalmazási feltételeket.

Munkám során négy katalizátorminta jellemző paramétereit határoztam meg röntgendiffraktometriás (XRD), N₂-adszorpció (BET) és kémiai tesztreakciós módszerrel. Ezt követően vizsgáltam katalitikus aktivitásukat a mono- és diklórbenzolok átalakításában.

A hidrogénes előkezelés nagymértékben növelte az aktivitást, és a 200 – 250 °C-os hőmérséklettartományban a benzol és a ciklohexán szelektív képződését figyeltem meg (magasabb hőmérsékleten a krakktermékek kialakulása csökkenti a szelektivitást).

[1] J. Petró, A. Bóta, K. László, H. Beyer, E. Kálmán, I. Dódony: *Appl. Catal. A: General*, 190 (2000) 73-86.

[2] J. Petró, L. Hegedűs, I. E. Sajó: *Appl. Catal. A: General*, 308 (2006) 50-55.

Hidrogénfejlesztés és szerves vegyületek lebontása nemesfémekkel módosított TiO₂ fotokatalizátorokkal

Kmetykó Ákos, V. évf. környezettudományi
SZTE Természetudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Mogyorósi Károly** tudományos munkatárs

Dr. Sipos Pál egyetemi docens

SZTE, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Napjainkban a szennyvizek rendkívül széles spektrumban tartalmaznak különböző szerves anyagokat, amelyek eltávolításához segítséget nyújthatnak a TiO₂ katalizátorokkal végzett fotokatalitikus eljárások. Számos cikk tesz említést a TiO₂ felületén rögzített nemesfémek katalitikus aktivitást növelő hatásáról. Bár ezeknek a katalizátoroknak az előállítása költségesnek bizonyulhat, gyakorlati alkalmazásukat tekintve reménykeltő, hogy a nemesfémek már kis mennyiségben történő adagolása is eredményezi a kívánt aktivitásnövekedést. Mindemellett megfelelő megvilágítással és optimális körülmények között akár a víz bontása is kivitelezhető ezekkel a katalizátorokkal, így hidrogén termelésére is felhasználhatóak, ezáltal az energiaipar számára is hasznosak lehetnek a jövőben.

Munkám során Degussa P25 alapkatalizátort használva, UV-fotoredukcióval készítettem ezüsttel, arannyal és platínával módosított TiO₂ fotokatalizátorokat, amelyeket XRD és TEM módszerek segítségével is jellemeztem. Az előállított katalizátorok fotokatalitikus aktivitásának vizsgálatára UV-megvilágítás mellett végeztem méréseket hangyasav, oxálsav és fenol modellvegyületekre vonatkozóan. Az első két modellvegyület esetén a minták analíziséhez TOC-mérést, a fenol visszamaradó koncentrációjának megállapítására pedig HPLC-t alkalmaztam. Emellett vizsgáltam az adott katalizátorok H₂-fejlesztő képességét metanol-víz, illetve oxálsav-víz oldatokból gázkromatográfiás analitikai módszerrel.

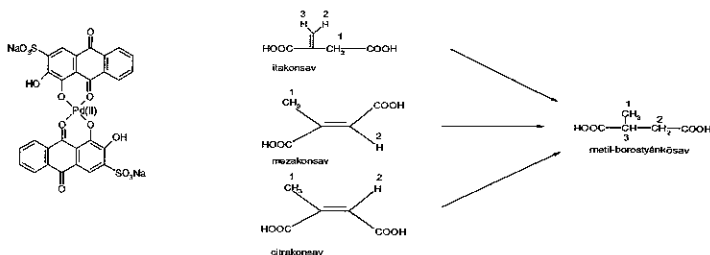
A vizsgált modellvegyületek közül hangyasav és oxálsav esetében jelentős aktivitás növekedést tapasztaltam az alapkatalizátorhoz képest mindhárom nemesfémrel módosított TiO₂ alapú fotokatalizátorral. Ezenkívül összehasonlítottam az általam készített katalizátorok és a Degussa P25 hidrogénfejlesztő képességét azonos körülmények között, amely során a platínával illetve arannyal módosított fotokatalizátoraim figyelemre méltó aktivitást mutattak.

Telítetlen karbonsavak homogén katalitikus hidrogénezésének és deuterálásának NMR spektroszkópiás vizsgálata

Krucsó Antónia, V. évf. vegyész hallgató
DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Horváthné Dr. Csajbók Éva egyetemi tanárségéd
DE Fizikai Kémiai Tanszék

A dolgozat célja az itakonsav, mezakonsav és citrakonsav Pd(QS)₂ jelenlétében történő hidrogénezések, vagy deuterálásakor a kettős kötés telítése mellett fellépő esetleges izomerizációs folyamatok tanulmányozása.



1.ábra A hidrogénezési/deuterálási kísérletekben alkalmazott Pd(QS)₂ katalizátor és telítetlen dikarbonsavak, valamint a telített termék szerkezete.

Gázvolumetriás mérésekkel megmutattuk, hogy adott reakciókörülmények között (37 °C-on (pH ~ 1,5), 0,002 mol/dm³ katalizátor, 0,15mol/dm³ dikarbonsav) az itakonsav és a mezakonsav közel azonos sebességgel, míg a citrakonsav jóval lassabban alakult át metil-borostyánkósavvá.

Pd(QS)₂/H₂/H₂O rendszerben végzett kísérleteink NMR-spektroszkópiás analízise azt mutatta, hogy elsősorban nem cisz-transz izomerizáció, hanem a kettős-kötés áthelyeződése fordulhat elő a reakció kezdeti szakaszában.

Dikarbonsav/(Pd(QS)₂/H₂/D₂O rendszerben végzett kísérleteink D-NMR elemzése azt mutatta, hogy az itakonsavvá való izomerizáció az itakonsav gyors metil-borostyánkósavvá átalakulása miatt a metil-csoporton is jelentős deuterálódással jár mind a citrakonsav, mind a mezakonsav esetében.

Az itakonsav/(Pd(QS)₂/H₂/D₂O katalitikus hidrogénezési reakciójában sikerült igazolnunk az előzetesen feltételezett deuterált itakonsav köztitermék jelenlétét.

Amin adalékok hatása alifás α,β – telítetlen karbonsavak heterogén katalitikus enantioszelektív hidrogénezésére

Makra Zsolt, V.évf. biológia-környezettan szak
SzTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Szőlősi György tudományos főmunkatárs
SzTE, Szerves Kémiai Tanszék, MTA Sztereokémiai Kutatócsoport

Az optikailag tiszta karbonsavak értékes közti termékek a gyógyszer-, aroma-, illetve illatszeripar számára, melyek előállítására lehetséges módszer prokirális vegyületek enantioszelektív hidrogénezése módosított heterogén katalizátoron. Magas, 92 %-ot meghaladó enantioszelektivitás értékeket sikerült elérni (*E*)-2,3-difenilpropénsav dimetoxi származékainak hidrogénezése során cinkonidinnel módosított Pd katalizátoron, nem királis amin adalék jelenlétében. Alifás telítetlen karbonsavak hidrogénezése alacsonyabb optikai tisztaságú termékeket eredményezett, annak ellenére, hogy benzilamin jelenléte ezekben a reakciókban is megnövelte az enantioszelektivitást. Munkám célja az adalékként használt különböző szerkezetű nem királis aminok hatásának vizsgálata volt prokirális alifás α,β -telítetlen karbonsavak hidrogénezésében. Vizsgáltuk (*E*)-2-metil-2-buténsav (tiglinsav) és (*E*)-2-metil-2-hexénsav enantioszelektív hidrogénezését cinkonidinnel módosított 5 % Pd/Al₂O₃ katalizátoron számos nem királis amin adalék használatával.

A karbonsavak enantioszelektív hidrogénezése során cinkonidinnel módosított Pd/Al₂O₃ katalizátoron mindkét sav estében az *S* konfigurációjú enantiomer képződött feleslegben. Meglepetésre, szekunder amin adalékokkal jobb eredményeket értünk el, mint primer aminok használatával, a tercier aminok viszont csökkentették az enantioszelektivitást. A tapasztaltak alapján *N*-metil-benzilamin használatával értük el a legnagyobb enantioszelektivitásokat - alacsony hőmérsékleten - amely értékek meghaladták az eddig alifás kiindulási anyagok hidrogénezésében közölt legjobb eredményeket. Így alifás karbonsavak esetében az eddig elért legnagyobb értékeket sikerült elérnünk: 2-metilbuténsavat ee = 68 % és 2-metilhexénsavat ee = 71 % optikai tisztaságban állítottunk elő. Bár az aminok pontos szerepe ebben az igen bonyolult reakcióban nem ismert, eredményeink kimutatták, hogy az adalék bázis erőssége mellett, a sav-amin só és az adszorbeált módosító kapcsolata szerepet játszik, amely értelmezés részben magyarázatot ad az aminok szerkezetének szterikus okokból adódó hatására.

Naftalin-szulfonátok fotokatalitikus oxidációja

Markovics Otilia, IV. évf. környezetmérnök

PE, Mémőki Kar

Témavezetők: Dr. Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet egyetemi adjunktus

Dr. Zsilák Zoltán egyetemi adjunktus

PE Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Fanzsék

Évek óta gyakran sárgás-barnás hab borítja a Rába folyó felszínét. Kiemelt figyelem követi az ausztriai bányákból kibocsátott szennyező anyagok eltávolítására alkalmas technológiák kutatását. Egyik lehetséges eljárás a heterogén fotokatalízis, ami az ún. nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közé tartozik.

A habzást okozó legfontosabb szennyezőanyagként a szakirodalomban a különböző naftalin-szulfonátokat jelölték meg. Diákköri munkámban modell- vegyületként az 1-naftalin-szulfonsavat ($C_{10}H_8O_2S$), az 1,5-naftalin-diszulfonsavat ($C_{10}H_8O_2S_2$) és az 1,3,6-naftalin-triszulfonsavat ($C_{10}H_8O_3S_3$) választottam, s vizsgáltam meg fotokémiai bonthatóságukat különböző kísérleti körülmények között.

Kísérleteimet 3 dm³ térfogatú reakcióelegy besugárzására alkalmas fotokémiai reaktorban hajtottam végre. Sugárforrásként egy 40 W-os fénycsővet, fotokatalizátorként Degussa P25 titán-dioxidot használtam 1,0 g/dm³ koncentrációban.

A fotokémiai bontás során bekövetkező változásokat a folyadék-elegy pH-jának, fényelnyelési színeképének, emissziós színeképének, TOC - KOI értékének mérésével, illetve folyadékkromatográfiás felvételekkel követtem nyomon.

A szennyezésben legnagyobb koncentrációban előforduló 1,5-naftalin-diszulfonáttal több vizsgálatot végeztem. A bevilágítás során a reakcióelegy pH-ja fokozatosan csökkent, melyet a bomlás során képződő szulfátion koncentrációjának növekedése kísért.

A fotolízis első szakaszában a KOI érték relatíve gyorsabban csökken, mint a TOC érték, azaz először a vegyület oxidációja játszódik le, majd azt követően történik meg a gyűrűfelhasadás és a lánccarabolódás. A fotokémiai és termikus reakciók során keletkező különböző köztitermékeket HPLC-MS analízissel azonosítottuk.

A levegő-, illetve argon atmoszférában végzett vizsgálatok alapján fontos információt kaptunk a katalizátor gerjesztését követően keletkező aktív gyökök szerepéről a szennyezőanyag bomlásában. A fotolízis kezdeti szakaszában képződő 460 nm-en emittáló köztitermék argon atmoszférában felhalmozódik, míg oxigén jelenlétében tovább oxidálódik, átalakul más vegyületekké.

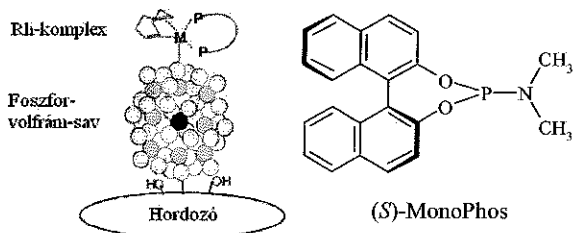
Foszforamidit ligandum alkalmazása enantioszelektív hidrogénezésre H-CUBE™ mikrofluid reaktorban

Nánási Balázs, V. évf. vegyész
Pannon Egyetem Mémóri Kar

Témavezető: Madarász József kut.felj.szakm.hallg.
Dr. Bakos József egyetemi tanár
PE-MK Szerves Kémia Intézeti Tanszék

A biológiailag aktív vegyületek jelentős része optikailag aktív. A biológiai aktivitás gyakran csak az egyik enantiomerhez kötődik, a másik izomer gyakran csak szennyezőanyag, amely feleslegesen terheli a szervezetet és a környezetet, ezért fontos az enantioszelektív szintézisek kifejlesztése. A Thales Nanotechnology H-CUBE™ [1] hidrogénező reaktora lehetővé teszi, hogy rövid idő alatt optimalizálni tudjuk a reakciót. A heterogenizált katalizátor elválasztása könnyen megvalósítható, így a katalizátor ismételt felhasználható, a reakcióelegy feldolgozása pedig egyszerűen megoldható.

Az "in-situ" előállított $[\text{Rh}(\text{COD})(S)\text{-MonoPhos}]\text{Cl}$ és $[\text{Rh}(\text{COD})(S)\text{-MonoPhos}]\text{BF}_4$ komplexeket Al_2O_3 hordozón foszfor-volfrám-sav segítségével rögzítettük.



A heterogenizált katalizátorokkal H-CUBE™ hidrogénező reaktorban α -acetamido-akrilsav-metil-észter enantioszelektív hidrogénezési reakcióját vizsgáltuk. Az optimális reakciókörülményeket a térfogatáram, a hőmérséklet, a nyomás, a szubsztrátum koncentrációja és az oldószer minőségének változtatásával határoztuk meg.

Bizonyítottam, hogy az H-CUBE™ alkalmas a katalitikus rendszerek gyors tesztelésére és optimalizálására.

[1] Jones, R., Gödörházy, L., Szalay, D., Ürge, L., Darvas, F., *QSAR Comb. Sci.*, 4, 722 (2005)

Fenilalanin fotokémiai lebontása gerjesztett TiO₂ félvezető felületén

Somogyi Katalin, III. évf. kémia Bsc

PE Mérnöki kar

Témavezetők: **Dr. Bárdos Erzsébet**, egyetemi adjunktus
Dr. Horváth Attila, egyetemi tanár
Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék

A heterogén fotokatalízis a 20. század vége felé vált népszerű kutatási területté. A máig felhalmozódott kísérleti eredmények azt mutatják, hogy megfelelő körülmények között a heterogén fotokatalitikus folyamatok mind a napenergia kémiai energiává való átalakításában, mind a kémiai szennyező anyagok eltávolításában hatékonyan alkalmazhatók.

A heterogén fotokatalitikus reakciók során katalizátorként félvezetőket alkalmaznak, amelyek a körülményektől függően mind szigetelőként, mind vezetőként viselkedhetnek.

Munkámban a fenilalanin bomlását vizsgáltam UV – fény hatására TiO₂ – on és annak ezüstözött módosulatán különböző kísérleti körülmények között.

A kísérletekhez ipari folyamatok modellezésére is alkalmas, 3 dm³ hasznos térfogatú fotokémiai reaktort használtam. A reaktor tengelyvonalában elhelyezett sugárforrás 40 W teljesítményű, amely kibocsátott energiájának döntő hányadát 300 nm felett adja le.

A reakcióelegy bevilágítása során történt változásokat pH méréssel, elnyelési színek, emissziós színek és gerjesztési színek felvételével követtem nyomon. Meghatároztam a bevilágított oldatokban a fenilalanin aktuális koncentrációját, a mérés során képződő ammóniumion koncentrációját és mértem a reakcióelegy széntartalmának változását.

A kísérleti eredmények alapján megállapítható, hogy a fenilalanin és a bevilágítás során belőle keletkező széntartalmú köztitermékek teljesen lebonthatók, a reakcióelegy szerves széntartalma minimálusra csökkent. A fotokémiai és termikus reakciók során szén-dioxid és víz, illetve a vegyület nitrogéntartalmából ammónia keletkezik, amely az adott körülmények között NH₄⁺ ionként azonosítható az oldatfázisban.

A levegő és az argon atmoszférában végzett kísérletek alapján megállapítottuk, hogy az aminosav fotooxidációját az erélyes oxidáló tulajdonságú hidroxilgyökök indítja el, de az ezt követő lépésekben az oxigénből elektronbefogással képződő szuperoxid-gyökanion is jelentős szerepet játszik.

Etanol gőzreformálása oxidhordozós réz katalizátorokon

Süveg Nikolett, V. évf. környezettudományi szakos hallgató

SZTE Természtudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Erdőhelyi András tanszékvezető egyetemi tanár

Dr. Dömök Márta tudományos segédmunkatárs

SZTE Szilárdtest- és Radiokémiai tanszék

A fosszilis energiahordozók nagyarányú használata miatt elkezdődött egy folyamat, amit globális felmelegedésnek nevezünk. A környezetvédők aggodalmi arra vezettek, hogy új forrásokat keressünk. Nagy figyelmet fordítanak a kutatók a biomassza alapú energiatermelésre, ami a fosszilis tüzelőanyagokat helyettesíti, valamint a környezeti problémák enyhítésére nyújthat megoldást. A bioetanol alapú hidrogéntermelés megfelel ezen elvárásoknak.

Az etanol gőzreformálásával kapcsolatos kutatásaink során a következő katalizátorokat alkalmaztuk: CuO, Cu/ZnO, Cu/CeO₂, Cu/Al₂O₃, Cu/ZnO/CeO₂, Cu/CeO₂/Al₂O₃, Cu/ZnO/Al₂O₃. Célunk az volt, hogy megfigyeljük, mi a hatása a különböző katalizátorok összetételének, előállítási módjának, és a reakció körülményeinek a képződött termékekre. Feladatunk nemcsak az, hogy aktív és szelektív katalizátorokat keressünk, hanem, hogy feltérképezzük a reakció során lejátszódó folyamatokat.

Vizsgálatainkhoz állóágvas, átáramlásos reaktort alkalmaztunk, amelybe 50 mg katalizátort töltöttünk. A reakciót izoterm körülmények között hajtottuk végre különböző hőmérsékleten, vagy 100-ról 900 °C-ra emeltük a katalizátor hőmérsékletét. Reaktánsként etanol és víz 1:3 mólarányú elegyét alkalmaztuk. A termékek összetételét gázkromatográffal vizsgáltuk, mely egy lángionizációs-, egy hővezetőképességi dektorral és egy tömegspektrométerrel volt ellátva.

A katalizátor aktivitása és a termékek eloszlása a fémtartalom, egyéb anyagok hozzáadása, a hordozó típusa, a katalizátor elkészítése, a reakció hőmérséklete, és a reakció körülményei függvényében változott. Az Al₂O₃-ot tartalmazó katalizátorokon jelentős mennyiségű etilént mutattunk ki a termékelegyenben, míg a CeO₂ hordozóson a nagymennyiségű acetaldehid mellett acetone is képződött. A ZnO-tartalmú mintákon kapott termékek között ugyancsak kimutatható volt az acetone. A magasabb hőmérsékleten (650 °C) végzett reakciók során a hidrogén képződése kedvezményezettebb volt, mint alacsonyabb hőmérsékleten (450 °C).

Pd/grafit-oxid nanokompozitok katalitikus vizsgálata

Széchenyi-Eötvös Mónika, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Mastalir Ágnes egyetemi docens
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A grafit szabályozott oxidációjával előállítható grafit-oxid rétegszerkezetű anyag, amely a felületén található poláros funkciók csoportok jelenléte miatt hidrofíll jellegű [1,2]. Ezenkívül jelentős duzzadóképeséssel és kationcsere-kapacitással rendelkezik, ezért katalizátorhordozóként várhatóan kedvezően alkalmazható [3,4]. A jelenlegi munka keretében grafit-oxid hordozón kationos tenziddel stabilizált, szabályozott méretű Pd nanorészecskéket állítottunk elő $\text{Pd}(\text{NH}_3)_4(\text{NO}_3)_2$ és K_2PdCl_4 prekursorokból, tetradecil-trimetilammónium-bromid (C_{14}TAB) tenzid alkalmazásával. Az organofil Pd/grafit-oxid (Pd/GO) nanokompozitok szerkezetét röntgendiffrakcióval és transzmissziós elektronmikroszkóppal jellemeztük.

Megállapítottuk, hogy a Pd részecskék képződése a hordozó rétegszerkezetét nem változtatta meg. A Pd/GO minták monodiszperz Pd nanorészecskéket tartalmaznak, amelyek a hordozó felületén, valamint a grafit-oxid rétegek közötti térben helyezkednek el. Hidrofób jellegük miatt a minták szerves oldószerekben jól diszpergálhatók. Katalitikus tulajdonságaikat terminális és belső alkinek folyadékfázisú hidrogénezési reakcióiban tanulmányoztuk. A katalitikus aktivitást a reakciók kezdeti sebességével, valamint a turnover frekvenciával (TOF) jellemeztük. A Pd/GO nanokompozitok terminális alkinek hidrogénezési reakcióiban nagymértékben aktív és szelektív katalizátoroknak bizonyultak, aktivitásuk a reaktáns méretével szisztematikusan nem változott. Belső alkinek átalakulásában azonban a reaktánsmolekula méretének növekedése a reakciósebesség jelentős csökkenését eredményezte, amelyet a katalizátorok rétegek közötti fémtartalmának hozzáférhetőségével hoztunk összefüggésbe.

- [1] Beckett, R.J., Croft, R.C., *J. Phys. Chem.*, 56(8), 929-934 (1952).
- [2] Dékány, I., Krüger-Grasser, R., Weiss, A., *Colloid Polym. Sci.*, 276, 570-576 (1998).
- [3] Bourlinos, A.B., Gournis, D., Petridis, D., Szabó, T., Szeri, A., Dékány, I., *Langmuir*, 19, 6050-6055 (2003).
- [4] Mastalir, Á., Király, Z., Patzkó, Á., Dékány, I., L'Argentiere, P., *Carbon*, 46, 1631-37 (2008).

1-nitro-ciklohexén szelektív katalitikus hidrogénezésének vizsgálata nagy nyomású áramlásos rendszerben

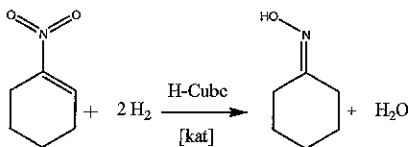
Varga Eszter, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék, ThalesNano Zrt.

Témavezető: **Dr. Wootsch Attila**, laboratórium vezető

ThalesNano Zrt.

A ciklohexanon-oxim iparilag fontos nyersanyag, nagy mennyiségben előállított intermedier, legfontosabb felhasználása az ϵ -kapolaktám szintézise. A ciklohexanon-oxim előállítására a közelmúltban környezetkímélő eljárást javasoltak [1], az 1-nitro-ciklohexén szelektív katalitikus redukcióját arany tartalmú katalizátorokon végezték.



A nitro-ciklohexén katalitikus hidrogénezése; és az H-Cube® fotója

Munkám célja volt a ciklohexanon-oxim laboratóriumi előállítása 1-nitro-ciklohexén szelektív katalitikus hidrogénezésével H-Cube® készüléket használva. Vizsgáltam az Au/TiO₂ viselkedését és összehasonlítottam egyéb arany vagy más aktív fémet tartalmazó katalizátor aktivitásával. A reakciókörülményeket a ThalesNano Zrt. által gyártott mikrofluidikai reaktorok alkalmazásával optimalizáltam. A legjobb eredményt – 98%-os termelést – a következő körülményeknél kaptam: Au/TiO₂ katalizátor, etanol oldószer, p=70 bar, T=70°C, v=0,5 ml/perc. A reakció termelését sikeresen 36-szorosára növeltem az H-Cube MidiTM készülékben [2]. Megállapítottam, hogy Pd és Pt katalizátor alkalmazásával, az arannyal ellentétben, a nitro-ciklohexán a főtermék. A fémeken a ciklohexanon-oxim szelektivitása a következő sorrend szerint alakult: Pd<Rh<RuO₂<PtO₂<Ir<Au. A kapott eredmények alapján feltételeztem, hogy az –C=C–N=O konjugált rendszer redukciója az arany felületén egy lépésben 1,4-mechanizmus szerint játszódik le –CH=C–N–OH-t eredményezve.

Irodalom:

- [1] Corma, A., Serna P., *Science*, 313, 332-334 (2006)
 [2] Varga Es, Varga El, Csajági Cs., Wootsch A., Úrge L., Darvas F. *P0800466* szabadalmi bejelentés (2008)

Kémiai informatika tagozat

Metilezett piridinszármazékok vízzel való elegyedési szabadenergiájának számítása számítógépes szimulációs módszerekkel

Darvas Mária, V. évf. vegyész

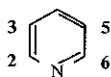
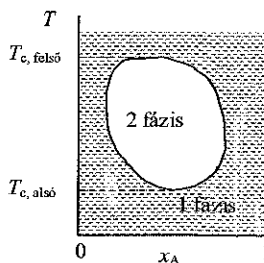
ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék,

Határfelületek és Nanorendszerek Laboratóriuma

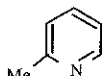
Témavezető: Dr. Jedlovsky Pál tudományos ösztöndíjas
ELTE Fizikai Kémia Tanszék, Határfelületek és Nanorendszerek Laboratóriuma

A klasszikus termodinamikából jól ismert jelenség, hogy bizonyos kétkomponensű folyadékelegyek fázisdiagramján úgynevezett nemelegedési hurok található. Az ilyen rendszerek egyes összetételi arányokban bármely hőmérsékleten korlátlanul elegyednek egymással, létezik azonban egy olyan összetételi tartomány, melyben egy alsó és egy felső kritikus elegyedési hőmérséklet között a rendszer kétfázisúvá válik.

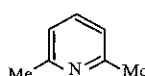
A piridin bizonyos metilezett származékainak vízzel alkotott elegyei is mutatják ezt a jelenséget. Ráadásul a nemelegedési tartomány megléte és szélessége ezen rendszerek esetében nagy mértékben függ a metilcsoportok számától és konstitúciójától. Éppen ezért a piridin és a metilezett piridinszármazékok vízzel alkotott elegyeit mind kísérleti, mind pedig elméleti és szimulációs módszerekkel sokat vizsgálták. A kísérleti tapasztalatok szerint a piridin és az egyszerűen metilezett származékok szobahőmérsékleten, légköri nyomáson korlátlanul elegyednek vízzel, míg a kétszeresen metilezett származékok fázisdiagramján már standard körülmények között is megtalálható a nemelegedési tartomány. Ez ellentmond az összes eddigi spekulatív elméleti [1], kvantumkémiai [2] vagy szimulációs vizsgálatnak [3], melyek szerint a piridinszármazékok vízzel való hidrogénkötéseinek erőssége a metilcsoportok számának növelésével növekszik, és ezzel együtt nő a vízzel való elegyedési készség is.



Py



2-MPy



2,6-DMPy

Munkánk során a piridin, 2-metilpiridin és a 2,6-dimetilpiridin vízzel alkotott különböző koncentrációjú elegyeinek elegyedési szabadenergiáját illetve ezen mennyiség energia és a entrópia jellegű járulékat számítottuk Monte Carlo szimulációs módszerek segítségével, annak érdekében, hogy a kísérleti és az elméleti eredmények között mindaddig halmozódó ellentmondásokat feloldjuk.

[1] I. V. Brovchenko, A. V. Oleinikova, *J. Chem. Phys.* **106**, 7756 (1997).

[2] I. Pápai, G. Jancsó, *J. Phys. Chem. A*, **104**, 2132 (2000).

[3] L. Pártay, G. Jancsó, P. Jedlovsky, *J. Phys. Chem. B*, **109**, 8097 (2005).

Enantioszelektív autokatalízis vizsgálata sztochasztikus kinetikai eszközökkel

Ditrői Tamás, I. évf. kémia BSc. hallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Lente Gábor egyetemi adjunktus

DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A kiralitás jelensége fontos szerepet kap a biokémiában a cukrok és aminosavak területén, mivel a természetben ezen molekulák esetében a két tükörképi pár közül csak az egyik fordul elő nagy mennyiségben. Az emberi szervezet kizárólag a számára megfelelő kiralitású vegyületekkel tud foglalkozni, az ellentétes optikai aktivitásúak bizonyos esetekben nemhogy semlegesek, hanem ártalmasak is lehetnek. A jelenséget elég nehéz tudományos alapossággal értelmezni, mert a két tükörképi pár energiája egy jelentéktelen nagyságú (10^{-15} J/mol) különbséget elhanyagolva éppen megegyezik.

Az első kémiai modellt, amely járható utat írt le az aszimmetria kialakulására, Frank ismertette 1953-ban. [1] A modell enantioszelektív autokatalízist tartalmaz, vagyis egy királis molekula gyorsítja önmaga keletkezését. A modell másik lényeges eleme a kölcsönös antagonizmus, amely során a királis molekula két enantiomerje egymással reagálva nem királis terméké alakul.

Ebben a dolgozatban a királis erősítés jelenségére kidolgozott Frank-modell egy módosítását vizsgáltuk sztochasztikus eszközökkel. [2] A nyílt rendszerben elképzelt kémiai reakciók modellezéséhez kifejlesztettük a CSTR reaktor sztochasztikus kinetikai leírását. Ez a leírás algebrai, lineáris egyenletrendszer megoldását igényli, amelyben a változók az egyes megvalósuló állapotok valószínűségei.

Az így elérhető valószínűségekből kiszámoltuk az enantiomerfelesleg várható értékét, amelyet kitermeléssel korrigált változatban is figyelembe vettünk. Megmutattuk, hogy ha csupán a klasszikus definíciójú enantiomerfeleslegre támaszkodunk a modellszámítások során, az jelentősen félvezethető következtetéseket eredményezhet. Megállapítottuk, hogy az eredeti Frank-modellben szereplő, 'kölcsönös antagonizmus'-nak nevezett lépés nem kedvez a nagy enantiomerfeleslegek kialakulásának. Azt is megfigyeltük, hogy jelentősen aszimmetrikus állapotok csak kicsi átfolyási sebességnél jöhetnek létre, így a királis erősítés jelensége zárt reaktort feltételező modellekben valószínűleg jobban érvényesül.

[1] F. C. Frank *Biochim. Biophys. Acta*, **1953**, *11*, 459-463.

[2] G. Lente *J. Phys. Chem. A*, **2004**, *108*, 9475-9478.

Termékváltás optimalizálás
A lineáris modell prediktív szabályozótól
az összetett nemlineáris on-line optimalizációig

Dobos László, V. évf. Vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mémőki Kar

Témavezető: **Dr. habil. Abonyi János**, egyetemi docens
Pannon Egyetem, Folyamatmérőki Intézeti Tanszék

Napjaink erős gazdasági versenye szükségessé teszi a működő technológiák napról napra történő fejlesztését a piaci igényekhez minél inkább alkalmazkodva. Különösen igaz ez olyan technológiai rendszerek esetén, ahol ugyanazon technológiával eltérő alkalmazási tulajdonságú termékek készülnek (pl. polimer ipar). Az ilyen technológiák fejlesztése különösen bonyolult lehet, hiszen a különböző termékek közti termékváltásnál ún. off-grade termék keletkezik, amely mind tulajdonságaiban, mind értékében nem összemérhető a megfelelő minőségű, ún. on-spec termékekkel. Ezen okok miatt a fejlesztés egyik útja a termékváltási idejének minimalizálása, hiszen ezzel együtt minimalizálható a keletkezett off-grade termék mennyisége. Tehát a cél olyan struktúra és módszertan kialakítása, amely többtermékes technológiák esetén a termékváltás idejét csökkenti, minimalizálja.

A modern, modell alapú szabályozó algoritmusok ideálisak a probléma kezelésére, mert a működésük alapvetően egy célfüggvény minimalizálásán alapszik, hasonlóan az optimalizálási feladatokhoz. A modell prediktív szabályozó (MPC) algoritmusok tervezése és alkalmazása azonban modellt igényel, illetve komoly tervezést, folyamatos modellfejlesztést.

A munka során az volt a célom, hogy egy a szakirodalomban széles körben tanulmányozott polimerizációs technológia példáján keresztül bemutassam ezen algoritmusok alkalmazhatóságát illetve hatékonyságát. A termékváltást támogató eszközök tervezésének első fázisában egy, a technológia bemenet-kimenet adatain alapuló, lineáris modellt identifikáltam, és egy ezen alapuló lineáris MPC algoritmust használtam. Ennek hatékonyságát hasonlítottam össze az ipari gyakorlatban elterjedt PID szabályozók hatékonyságával.

Mivel a polimerizációs folyamatok nemlineáris modellel egyenletekkel írhatóak le, ezért a tervezés második szakaszában a nemlineáris MPC sémák alkalmazhatóságát vizsgáltam. Az optimalizációs feladat megoldásához elengedhetetlen a nemlineáris modell, valamint kvadratikus programozási technika (SQP). Ezek segítségével létrehoztam MATLAB környezetben egy keretrendszert, amelyben a fő alapelem a nemlineáris modell beágyazása az MPC struktúrába.

Bár ez a séma egy esettanumányon alapul, de nagy előnye, hogy az elkészített program struktúrált, ezért könnyen implementálható más technológiák esetén, a termékváltás optimalizálása során.

Kulcsszavak: NLMPC, DMC, model prediktív szabályozás, polimerizációs technológiák, termékváltás

**Desztilláló oszlop-profil gyors becslése összetélfüggő relatív illékonyág
modellel**

Farkas Csaba István, végzett vegyészmérnök hallgató

BME, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Rév Endre, egyetemi docens

Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A vegyipar, a kőolaj – és petrokémiai ipar alapvető és legáltalánosabban alkalmazott művelete a desztilláció, illetve az ismételt desztilláció: a rektifikálás. A megfelelő desztillációs módszerek kiválasztása, a végrehajtásukhoz szükséges berendezések, üzemek kiválasztása, tervezése, méretezése a vegyészmérnöki tudomány szerves része. A számítástechnika fejlődésével mára már lehetővé vált a többkomponensű desztilláló folyamatok modellezése rutin módszerekkel, melyeket két fő csoportba sorolhatunk. Az első csoportba tartoznak a mára már kissé elavultnak számító tervező módszerek, míg a második csoportba sorolhatjuk a legtöbb mai modellező szoftver alapját képező szimulációs módszereket. Az ilyen módszerek alapvetően egy adott oszlopra felírt zárt matematikai összefüggéseket (MESH egyenletrendszer) oldanak meg valamelyik széles körben elterjedt módszer segítségével. A desztilláló oszlopok tervezésekor az állandósult állapot számításának első lépése szinte valamennyi szimulációs módszer esetében az, hogy egy egyszerűsített modell segítségével kezdeti értékeket. A konvergencia szempontjából rendkívül kritikus a kezdeti értékek megadása egy erősen nemideális (pl. azeotrópot képző) elegy esetében. A legtöbb ilyen elegy esetében a gyors konvergálás, illetve sokszor maga a konvergencia nehezen vagy egyáltalán nem biztosítható.

Célkitűzésünk adott nyomáson az adott összetételű folyadékkal egyensúlyt tartó gőzfázis közelítő összetételének meghatározása olyan modellel, ami a hőmérséklet hatását már figyelembe veszi, majd ennek alkalmazása oszlopszámításokra. A közelítéshez olyan modellt használunk, ami folyadék-összetételtől függő relatív illékonyágot feltételez (α - modell). A legtöbb esetben a modell nagyon pontosan illeszkedik a mérési adatsorra, sőt erősen nemideális rendszerek esetében is jól illeszkedik. Azeotróp rendszerek esetében az illeszkedés az azeotróp pont közelében még pontosabb, ami a szétválasztások szempontjából lényeges. Mindemellett a számítás ideje jóval kevesebb, mint egy elegyítési többlet modell vagy egy állapot egyenlet esetében. Az így megadott kezdeti értékek gyors és biztos konvergenciát tudnak biztosítani rektifikáló oszlopok tervezése során.

Spectral-SAR and QSAR Studies on Ecotoxicity of Some Aliphatic Amines and Polyphenols

Marius Lazea, 2nd year MSc, QSAR

West University of Timisoara, Chemistry Department

Supervisors: **Dr. Mihai V. Putz** associate professor
Dr. Ana-Maria Putz research worker
Dr. Adrian Chiriac professor
Chemistry Department, West University of Timisoara, Romania

Amines and their derivatives are compounds which are extensively used as drugs, cosmetics, dyes, in synthesis of pesticides and as synthetic intermediates.

On the other side, flavonoids are natural components of human and animal diet and have been shown to exert different biological effects, such as antiviral, anti-inflammatory, antimutagenic and anticarcinogenic functions. To explain the relationship between their toxicity/activity and the molecular descriptors simple and multiple linear regressions were used for the values of LD50 (lethal dose)/EC50 (effective concentration) and the total energy, logP and polarizability. While in current mathematical formalisms the Algebra is called to systematize, classify and order the various concepts and objects for relating and unifying them in a unitary system of comprehension, the QSAR correlation highly simplifies and clarifies the role, the impact and the way of action of various structural indices and parameters used in modeling. In this context the recent Spectral – and Quantum – specializations of consecrated QSAR analysis provides useful inside in assessing molecular mechanism and quantification of the difference concentrations forecasted between various models/endpoints tested.

Keywords: multivariate analysis, spectral paths, logP, lipophilicity, total energy

- [1] Putz M.V., Lacrămă A.M., *Int. J. Mol. Sci.* 8, 363-391 (2007)
- [2] Lacrămă A.M., Putz M.V., Ostafe V., *Int. J. Mol. Sci.*, 8, 842-863 (2007)
- [3] Putz M.V., Lacrămă A.M., Ostafe V., *Res. Lett. Ecol.* Article ID12813/5 pages (2007)
- [4] Lacrămă A.M., Putz M.V. Ostafe V., in: *Advances in Quantum Chemical Bonding Structures*, M.V. Putz (Ed.), Transworld Research Network, Kerala, India, 389-419 (2008)
- [5] Putz M.V., Duda-Seiman C., Duda-Seiman D.M., Putz A.M., *Int. J. Chem. Model.* 1(1), 45-62 (2008)
- [6] Putz M.V., Lazea M., Chiriac A., Ienciu L. *Annals of West University of Timisoara, Series of Chemistry*, 17 (3), 51-56 (2008)

A 3 Dimenziós molekulatervezés automatizálása egy webes portálrendszeren keresztül

Müller László

SzTE Juhász Gyula Pedagógusképző Kar

Témavezető: **Dr. Viskolcz Béla**

Szegedi Tudományegyetem, Juhász Gyula Pedagógusképző Kar

A portálrendszer képes a Gaussian03 programmal végzett kvantumkémiai számítások során kapott output fájlokból számos hasznos kémiai információ kigyűjtésére, ezek rendszerezett eltárolására ügyelve a redundanciára. Képes online új 2 dimenziós molekula szerkezetek létrehozására, amiket szintén eltárolhatunk különböző témájú topikokban hozzáférési jogok megadása mellett, egészen a végső ellenőrzésig és adatbázisba helyezésig. Ezzel betekintést adhatunk más embereknek is a munkába, illetve akár ki is zárhatjuk őket. Kémiai szerkezeti képleteket rajzolhatunk két dimenzióban. A 2D struktúrából az OpenBabel segítségével ab initio (Gaussian03) inputokat készíthetünk automatikusan, amiket a portál rendszer segítségével egy tetszőleges klaszter feladat kiosztó rendszerébe (SGE) küldhetjük számolásra, melynek eredményét egy Gaussian03 output fájlból kinyert rendszerezett adathalmaz formájában kapjuk vissza. Ez a kommunikációs csatorna teljesen automatizáltan a számítási források teljes kihasználásával működik. Nektünk „csak” a kiértékelt adatokat és a molekula 3D-s képét kell megtekintenünk, elemeznünk, illetve további molekulákat létrehozni. Ezek az adatok megtekinthetők, összevethetők a „Molecule Database” linken belül felsorolt, előzőleg már feltöltött adatok megtekintésével. A molekulamegjelenítő segítségével a molekula vizuális formában is megtekinthető, ennek segítségével a számítások kiértékelése, és áttekintése gyorsabbá válik. A portál a munka meggyorsítását és a kényelmet hivatott szolgálni. Elkészült egy „majd” teljes magyar nyelvű help is a portálhoz, ami leírja, hogy hogyan kell használni a funkciókat. Ez a leírás 2008 első felében készült, amikor a hallgatók egy kurzus keretein belül megtanulták használni, alkalmazni a portál funkcióit. A hallgatók készítették el a magyar nyelvű leírást és a saját tapasztalataikra építve segítették a munkámat, a portálrendszer fejlesztése során. A stabilitási, mentési funkciók és a biztonság tesztelése után a portálrendszerünk elérte a 2.0-ás verziót.

Heterokatalitikus csőreaktor matematikai modelljének fejlesztése

Rádi György, V. évf. vegyészmérnök Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezetők: **Chován Tibor** egyetemi docens
PE Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
Varga Tamás PhD hallgató
PE Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

A vizsgálatom tárgya egy meghatározó magyar vegyipari vállalatnál működő az iparban alkalmazott gáz-szilárd fázisú, állóágas, heterogén- katalitikus, csőköteges reaktor. A reaktornak, ahol a kémiai átalakulás végbe megy, biztosítani kell a reakció számára a megfelelő körülményeket a kellő időben. A célom a reaktor meglévő matematikai modelljének továbbfejlesztése és ezzel egy pontosabb számítást biztosító technológia szimulátor megalkotása.

A szimulátor segítségével lehetőség nyílik a különböző paraméter kombinációk hatásainak előrejelzésére anélkül, hogy a valós berendezést esetleges kockázatoknak tennék ki, így pénz és idő takarítható meg biztonságosan. A szimulátor megvalósítását egy a reaktorban lévő katalizátor szemcse megalkotásával kezdtem. A modellfejlesztés során a kvázihomogén fázisú modellt, kétfázisú modellé alakítottam, amely már alkalmassá válik az áramló gázhalmazállapotú közeg és a katalizátor szemcse között lejátszódó transzportfolyamatok leírására. Ehhez egy CFD szoftvert, a COMSOL Multiphysics programcsomagot használtam. A modellben szereplő ismeretlen paramétereket a valós fizikai rendszeren szolgáltatja.

A megalkotott szemcsemodellt a COMSOL Multiphysics-MATLAB Interface segítségével exportálom a MATLAB programba. A kapott modellt a katalizátor ágy mikroszintű modellje, amely segítségével felépíthető egy katalizátor ágy. Ez a MATLAB beépített függvényei segítségével megoldható.

Az első lépésben a meglévő adatok alapján a szemcse Multiphysics-be történő leképezését, majd a két program kapcsolatának feltárását, és a reaktor szemcsék egydimenziós (kaskád) összekapcsolását tűztem ki célul. A továbbiakban a reaktor szemcsék kölcsönhatásait a tér többi irányába szeretnénk kiterjeszteni, és így létrehozni a valósághű katalizátor ágy matematikai modelljét.

Oszcilláló (bio)kémiai modellek érzékenységének vizsgálata

Sipos Szabó Eszter, VII. évf. matematikus

BME Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Tóth János** egyetemi docens
BME Matematikai Intézet, Analízis Tanszék
Csikász-Nagy Attila tudományos főmunkatárs
Microsoft Research – University of Trento, CoSBI

Munkám során a sejtciklust vizsgáltam. A sejtciklus az eukarióta sejtben két osztódás között lejátszódó folyamat. Szakaszai:

- A G_1 fázis az első növekedési szakasz.
- Az S fázis a DNS-replikáció helye.
- A G_2 fázis a második növekedési szakasz, a sejt felkészítése az osztódásra.
- Az M fázis vagy mitózis és citokinézis, a sejt kettéválása két utódsejtre.

A sejtciklus során a kromoszóma-replikáció (S fázis) és -szegregáció (M fázis) mindig felváltva kell, hogy bekövetkezzen. A kromoszóma-replikáció és -szegregáció ezen szigorú alternálását az eukarióta sejtciklus alatt bonyolult, fehérjékből álló, molekuláris biokémiai szabályozó hálózat, a sejtciklus gépezet irányítja.

A szabályozási hálózat a biokémiai reakciók kinetikai leírásával differenciálegyenletekké alakítható, és az egyenletek megoldása a szabályozási rendszer viselkedését szolgáltatja. Az így felírt differenciálegyenletek tartalmaznak több paramétert, ezeknek a kísérleti meghatározása nehézkes. Számítógépes szimulációval viszont kereshető megfelelő paraméterhalmaz, melyre periodikus megoldásokat kapunk (azaz a sejtciklusgépezetben a különböző anyagok koncentrációja periodikusan változik, így tartva fenn az S és M fázisok alternálását).

Az irodalomban meglévők közül több sejtciklusmodellt vizsgáltunk, keresve, hogy ezek közül melyik a legrobosztusabb a paraméterek megváltozására. A robosztusság egy biológiai rendszernek, de még a kifinomult mérnöki szerkezeteknek is alapvető tulajdonsága. Minél kevésbé érzékeny a rendszer a külső, illetve a belső környezet perturbációjára, minél jobban tud alkalmazkodni, annál életképesebb.

[1] E. Sipos-Szabó, I. Pál, J. Tóth, J. Gy. Zsély, T. Turányi, A. Csikász-Nagy: *Sensitivity analysis of a generic cell-cycle model*, Poster presented at 2nd *FUNCDYN* meeting Rothenburg ob der Tauber, Germany, 15-18 September 2008.

Osztott terű rektifikáló kolonna stacioner és dinamikus vizsgálata

Szabó László, V. évf. vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezetők: dr. Németh Sándor egyetemi docens
PE Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

A rektifikálás művelete az egyik legelterjedtebb elválasztó művelet az iparban. Nagyszámú alkalmazása és a nagy energia felhasználása miatt, intenzíven folyik desztilláló készülékek konstrukciójának, üzemeltetési stratégiájának fejlesztése.

Főként az olajiparban hangsúlyos az oldal elvétel kolonnák alkalmazása, hiszen a feldolgozandó elegyekben sok komponens van. Az ilyen berendezések egyik lehetséges változata, amikor az oszlop terét megosztják, ezáltal kialakítva egy betáplálási és egy elvételi zónát, megakadályozva, hogy a betáplálási áram keveredjen az elvételi árammal. Ez a konstrukció várhatóan nagyobb hatásfokkal működik, vagyis jobb lesz az energia kihasználása. Így a már meglévő műveleti egységek energia kihasználását lehetséges lenne növelni bizonyos beruházási költséggel.

Munkám során megvizsgáltam, hogy az új konstrukciónak hogyan alakul az energia igénye összehasonlítva a hagyományos struktúrákkal. Az üzemeltetés szempontjából elemeztem, hogy a kolonna irányítása, milyen új kihívásokat jelenthet. A vizsgálatokat a rendszer dinamikus szimulációval végeztem el. Így alkalman nyílt a feltételek széleskörű változtatására, az egyes állapotok közötti átmenetek elemzésére, különböző üzemeltetési stratégiák kipróbálására.

Gőzhálózatok modellezése és irányítása

Tóth László Richárd, IV. évf. vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Szeifert Ferenc**, egyetemi docens

PE-MK Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Dr. Nagy Lajos, egyetemi docens

PE-MK Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Munkám célja egy gőzhálózati egység modellezése, és irányítási rendszer megalkotása ehhez az egységhez. Munkám kiindulópontját egy valós ipari probléma szolgáltatja. A feladat egy gőzfejlesztőből érkező túlhevített vízgőz áram nyomásának és hőmérsékletének stabilizálása folyadék állapotú víz befecskendezésével.

Kiindulásként a modellezés általános szabályai szerint meghatároztam az objektumot, majd felírtam a szükséges mérlegegyenleteket és a kiegészítő algebrai egyenleteket. Az objektumot egy tökéletesen kevert egységnek tekintettem, amelynek két bevezetése van, egy víz és egy gőz, valamint egy kivezetése, ami szintén egy gőzárám. Az átáramló közeg mennyiségét szelepek határozzák meg. A két betáplálási áram szelepeit vezérelve kívántam beállítani a belső tét, és ezzel a kimenő áram nyomását és hőmérsékletét.

A modell felírását követte a számolási algoritmus megalkotása és beprogramozása, melyhez Matlab-Simulink programokat használtam. A modell futtatásának eredményeként azt tapasztaltam, hogy irányítás nélküli rendszerem nem lineáris, adott munkapont környezetében elsőrendű rendszerekhez hasonló viselkedést mutat.

Miután a rendszer nyitott körű viselkedését megvizsgáltam, megterveztem az irányítási struktúrát. Először PID szabályozókat próbáltam ki, szimulációs vizsgálatokkal. Azt tapasztaltam, hogy a PID hozzáadásával külön-külön a nyomás és a hőmérséklet jól szabályozható, azonban az együttes szabályozás már kevésbé pontos, illetve több mozgást igényel a szabályozóktól.

További terveim között szerepel, hogy az egyszerű PID szabályozót magasabb szintű modell alapú szabályozóra cserélem. Az így kapott eredményeket ipari adatokkal összehasonlítva megállapítom, hogy milyen szabályozót, illetve milyen szabályozási stratégiát érdemes választani.

Arrhenius-paraméterek bizonytalansága

Varga László, V. évf. alkalmazott matematikus

ELTE TTK Kémiai Intézet

Témavezetők: Dr. Turányi Tamás egyetemi tanár

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

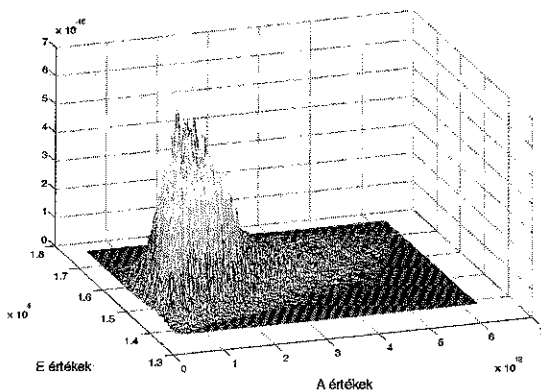
Dr. Zsély István Gyula egyetemi adjunktus

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Dr. Zempléni András egyetemi docens

ELTE TTK Matematikai Intézet, Valószínűségelméleti és Statisztika Tanszék

A reakciókinetikai adatbázisokban a sebességi együtthatók hőmérsékletfüggését Arrhenius-paraméterekkel jellemzik, de ugyanakkor nem az Arrhenius-paraméterek bizonytalanságát adják meg, hanem helyette a sebességi együtthatók bizonytalanságának hőmérsékletfüggését. Megvizsgáltuk, hogy a sebességi együtthatók bizonytalanságára vonatkozó adatok az Arrhenius-paraméterek milyen együttes valószínűségi sűrűségfüggvényének felelnek meg. Megmutattuk, hogy két- és háromparaméteres Arrhenius egyenlet esetén is lehet kielégítő pontossággal megfelelő sűrűségfüggvényt találni. A módszert a következő reakciók példái keresztül mutatjuk be: $\text{H}+\text{H}_2\text{O}_2=\text{HO}_2+\text{H}_2$, $\text{O}+\text{HO}_2=\text{OH}+\text{O}_2$, és $\text{H}+\text{O}_2=\text{O}+\text{OH}$. Az (A, E) , illetve (A, n, E) paraméterek minden esetben erősen korreláltak bizonyultak. Ezt a bonyolult korreláció nem adható meg korrelációs mátrix-szal, hanem a sűrűségfüggvények polinommal illesztett leírására van szükség. Az Arrhenius-paraméterek együttes sűrűségfüggvénye pontosan jellemezheti ezen paraméterek bizonytalanságát minden reakció esetén. Ez a sűrűségfüggvény Monte-Carlo-szimulációkban felhasználható arra, hogy az Arrhenius-paraméterek bizonytalanságának hatását külön-külön vizsgáljuk.



Az Arrhenius-paraméterek kétdimenziós együttes sűrűségfüggvénye a

 $\text{H}+\text{H}_2\text{O}_2=\text{HO}_2+\text{H}_2$ reakció esetén

Komplex mérőrendszer építése, automatizálása és alkalmazása speciális és rutinszerű elektrokémiai mérésekhez

Vesztergom Soma, IV. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

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

Az elektrokémiai jelenségek tanulmányozását szolgáló mérési módszerekkel 2007. tavaszán kezdtem megismerkedni az ELTE Fizikai Kémiai Tanszékének Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratóriumában. Itt Dr. Láng Győző vezetésével, másodéves vegyész hallgatóként kezdtem tudományos diákköri munkába.

Munkám megkezdésekor első feladatomból volt egy analóg elven működő, magyar gyártmányú ket-tős potenciosztát számítógéphez illesztése; a méréshez kapcsolódó vezérlési és adatgyűjtési feladatok teljes automatizálása. Mikor a kezelőfelület elkészült, néhány egyszerűbb fejlesztéssel sikerült megoldani, hogy a szoftver ne csak az említett, hanem más típusú potenciosztátok vezérlésére is képes legyen. Így azóta a program beállításainak kisebb, a felhasználó által könnyen elvégezhető módosítása által mérőrendszerem több, a laboratóriumi gyakorlatban elterjedten alkalmazott szoftvertípusra illeszthető.

Hamar kiderült, hogy a program nyújtotta lehetőségek a felhasználó számára olyan szabadságot adnak, melynek kihasználásával gyakorlatilag bármilyen potenciodynamikus elektrokémiai mérés elvégezhető. Ennek köszönhetően a program segítségével sikerült néhány igen érdekes kísérletet is elvégeznünk, melyek az elektrokémia szakirodalmában eddig nem említettek.

A rendszerhez integráltan elkészítettem egy egyszerű hardvert is, mely az elektrokémiai cella és az elektródok rendszerbe kapcsolását végzi el DIO portokon keresztül, illetőleg lehetőséget ad az éppen nem vezérelt elektródok nyugalmi potenciáljának mérésére.

A szoftver tartalmaz továbbá egy modult, mely egy motor forgatását vezérli, így a szoftver kiválóan alkalmazható forgó elektródos elektrokémiai kísérletekben is.

Sikerült továbbá egy elektrokémiai kvarckristály-nanomérleg (EQCN) integrálását is megoldanom, így mérőrendszerem most már képes egy rezgő kvarcelektrod rezgési frekvenciájának mérésével az elektród felületi tömegváltozását akár nanogrammm pontossággal mérni.

Jelen dolgozatom témája a komplex elektrokémiai mérőrendszer, illetőleg az azt vezérlő DoubleStat Instrument szoftver bemutatása. A dolgozat részleteiben is tárgyalja majd a program felépítését, majd az utolsó fejezetben bemutatok néhány érdekesebb, a szoftver segítségével megvalósítható, új elektrokémiai módszert is.

E dolgozatommal a National Instruments A Virtuális Műszerezésért Alapítvány 2008. évi pályázatán első díjat nyertem.

Kémiai technológia tagozat

Borkósav származékok fémsóinak alkalmazása P-királis vegyületek resolválására

Bagi Péter, IV. évf. vegyészmérnök

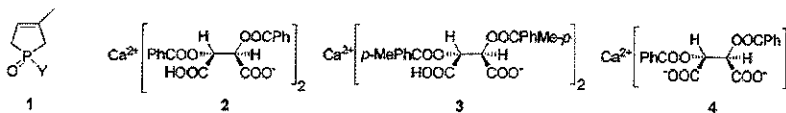
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Ujj Viktória** doktorandusz
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Fogassy Elemér egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A szintetikus szerves kémiában széles körben alkalmaznak P-aszimmetria centrumot tartalmazó foszforvegyületeket, amelyek közül a királis foszfinoknak van a legnagyobb jelentősége, ugyanis ezeknek a vegyületeknek átmenetifém komplexei hatékonyan használhatók katalizátorként enantioszelektív homogén katalitikus reakciókban. A P-királis vegyületek elsődleges forrása a resolválás, valamint az aszimmetrikus szintézis.

A kutatócsoportban már végeztek kísérleteket az 1-szubsztituált-3-metil-3-foszfolén-1-oxidok (1) optikai izomerjeinek elválasztására. Sikerült kidolgozni egy hatékony resolválási eljárást foszfolén-oxidok (1) enantiomerjeinek elválasztására TADDOL-származékok felhasználásával. [1] Szintén jó eredményeket értek el *O,O'*-dibenzoilborkósav (2) és *O,O'*-di-*p*-toluoilborkósav (3) savanyú Ca^{2+} só resolválóágensek alkalmazása során. [2]

Az utóbb említett kísérleteket folytatva TDK munkám során vizsgáltam az *O,O'*-dibenzoilborkósav semleges Ca^{2+} sójának (4) hatékonyságát a foszfolén-oxidok (1) resolválása során, majd később az *O,O'*-dibenzoilborkósav más savanyú és semleges fémsóinak (Mg^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+}) alkalmazhatóságát is tanulmányoztam. Emellett számos más resolválóágens Ca^{2+} sóival is megkísérletem a foszfolén-oxidok resolválását.



Y = aril, alkil, alkoxid

- [1] Novák, T., Ujj, V., Schindler, J., Czugler, M., Kubinyi, M., Mayer, Zs. A., Fogassy, E., Keglevich, Gy., *Tetrahedron: Asymmetry*, 18 (24), 2965-2972 (2007)
[2] Ujj, V., Schindler, J., Novák, T., Czugler, M., Fogassy, E., Keglevich, Gy., *Tetrahedron: Asymmetry*, 19 (16), 1973-1977 (2008)

Triglicerid-gázolaj elegyek katalitikus átalakításának vizsgálata

Baladincz Péter egyetemi hallgató

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,

Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

Témavezető: Dr. Hancsók Jenő egyetemi docens

PE, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,

Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

A modern emberi civilizáció számára fontos a mobilitás megőrzése, amelynek energiaigényét napjainkban többnyire a fosszilis energiahordozókból fedezik. A kőolajkészletek kimerülése, a kőolajtól való függőség, a nagymértékű környezetszennyezés és az importfüggőség csökkentésének igénye a figyelmet az alternatív energiahordozók, azokon belül is a bioeredetű energiahordozók kifejlesztését és alkalmazásba vételétette szükségessé.

Az alternatív motorhajtóanyagok közé tartoznak a biomasszából, mint állandóan megújuló, illetőleg megújítható energiaforrásból előállítható bio-motorhajtóanyagok. A bioeredetű motorhajtóanyagok gyártása, tárolása, szállítása és felhasználása során kisebb a károsanyag kibocsátás, mivel a felhasználás során keletkező CO₂ nem terheli a környezetet, mivel az a növények fotoszintézise során azokba ismét beépül, így, kisebb mértékben terheli a környezetet, mint a fosszilis energiahordozókból előállított motorhajtóanyagok használata. A növényolajokból átészterezéssel előállított biodízelek számos hátrányos tulajdonsággal rendelkeznek (pl. észterkötések hidrolízisérzékenysége, kettőskötések miatt rossz oxidációs- és hőstabilitás, magas ár, stb.). Ezért fontos más kémiai úton való átalakítások kutatása, például a hidrogénezése. Ekkor a trigliceridekből oxigéneltávolítással n-paraffinokban dús termékelegy állítható elő.

Kísérleti munkám során célom volt gázolajpárlat és növényolaj elegyek katalitikus hidrogénezésének vizsgálata. Ennek során a rendelkezésemre bocsátott ipari katalizátoron a műveleti paraméterek termékhozamra és termékminőségre gyakorolt hatásának vizsgálata, ezek alapján pedig a kedvező technológiai paraméterek meghatározása volt.

A vizsgált katalizátoron különböző műveleti paraméterkombinációknál (hőmérséklet: 300-380°C, nyomás: 80 bar, folyadékterhelés: 1,0 h⁻¹, hidrogén/alapanyag arány: 600 Nm³/m³) nyert, biogázolaj tartalmú gázolaj termékek hozamadatai és minőségi jellemzői alapján megállapítottam, hogy a legkedvezőbb termékeket (gyakorlatilag kén-, nitrogén-, aromás-, és olefinmentes, kedvező cetánindex, stb.) 320-340°C esetén nyertem.

Monofluidos hűtő-fűtő rendszer irányítása szakaszos gyártócella esetén

Balaton Miklós Gábor, V. évf. vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezető: dr. Nagy Lajos, egyetemi docens

A szakaszos technológiai rendszert alkalmazó üzemek egyre inkább áttérnek a multipurpose, azaz többcélú üzemek építésére. Ha több reaktor van egymás környezetében, akkor érdemes egy központi hő ellátó rendszert megépíteni. Erre az egyik legalkalmasabb új technológia a monofluidos köpeny hűtés-fűtés, amely egyre jobban elterjed a batch technológiákkal rendelkező üzemek között.

A Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék laboratóriumában működik egy 50 literes zománcozott reaktorra épülő gyártócella, melynek felújítása során új hűtő-fűtő rendszert alakítottak ki. A reaktor köpenyéből visszatérő közeg mennyiségét egy szelep segítségével lehet szabályozni. Majd a folyadék a három gömbcsapon keresztül három tartályba juthat. A három tartály mindegyikében három különböző hőmérséklet állítható elő. A tartályok mindegyike kb. 100 literes, és ezeket egy-egy kiegyenlítő vezeték köti össze. A megfelelő hőmérséklet előállítása a reaktor környezetében történik, tehát nem külső hálózatról érkezik a hőenergia. A megfelelő hőközlő folyadék megválasztása esetén a hőmérséklettartomány: -15°C - 180°C lehet.

A monofluidos rendszer hátránya, hogy a három különböző hőmérsékletű közeg közötti váltást összehangoltan kell működtetni. Ez bonyolultabb, mint a hagyományos split-range szabályozás esetén, ahol csak két szelepet kell összehangolni.

A szakaszos gyártócella reaktorának hőmérséklet szabályozásához kaszkád struktúrájú szabályozót alkalmaznak. A master kör a reaktor hőmérsékletét szabályozza, ami a köpeny hőmérsékletének függvénye. A köpeny hőmérsékletét a slave kör szabályozza, de itt szabályozót ki kell egészíteni egy split-range szabályozóval. Ez utóbbi a monofluidos hűtő-fűtő rendszer működését szabályozza. Vezérli milyen közeg lépjen a reaktor köpenyébe és mekkora térfogat árammal.

A dolgozat célja, hogy létrehozzam a monofluidos hűtő-fűtő rendszer modelljét, majd a master körű szabályozás nélküli modell dinamikáját összehasonlítsam a valós rendszerrel. Az így kapott modell, és a már meglévő reaktormodell összekapcsolásával valós idejű szimulációt lehet végezni, és ez által különböző hőmérsékletekhez tartozó split-range szabályozókat lehet kialakítani.

Fenol-származékok O-alkilezésének vizsgálata mikrohullámú körülmények között

Bálint Erika, V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

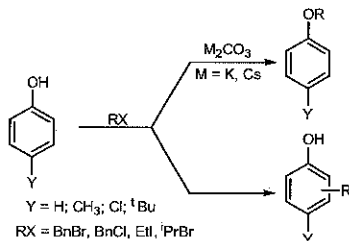
Témavezető: Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A mikrohullámú technika alkalmazása egyre szélesebb körben terjed a különféle reakciók megvalósítása során. Már ma is van ipari léptékben alkalmazott átalakítás, azonban e téren igazi áttörés az elkövetkező években várható. Szintén környezetbarát reakciómegvalósítást tesz lehetővé a fázisztranszfer katalízis, amikor is szilárd hordozóhoz kötött katalizátor a legjobb megoldás.

A kutatócsoportban korábban különböző CH-savas vegyületek alkilezését már tanulmányozták mikrohullámú reaktor alkalmazásával.

Tudományos diákköri munkám során különféle fenol-származékok O-alkilezési reakcióinak mikrohullámú körülmények közötti megvalósíthatóságának tanulmányozását kaptam feladatul. Célunk annak vizsgálata volt, hogy a fázisztranszfer katalizált O-alkilezések körében milyen hatása, illetve befolyása van a mikrohullámú besugárzásnak. Van-e esetleg valamiféle szinergizmus? Összehasonlításképpen a reakciókat elvégeztük termikus körülmények között is. Ezenkívül célunk volt ezen reakciók optimális körülményeinek megtalálása, a termékek azonosítása, illetve jellemzése.



A vizsgált modellvegyületek esetén tisztáztuk, hogy milyen termékekhez vezetnek az alkilezések és megtaláltuk az optimálisnak mondható reakciókörülményeket.

***Transz*-1,2-ciklohexándiol rezolválása szuperkritikus szén-dioxidos extrakcióval**

Bánsághi György, IV. évf. vegyész mérnök

BME Vegyész mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Közelné dr. Székely Edit** adjunktus

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Dr. Simándi Béla egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A modern vegyipar jelentős mennyiségben állít elő királis vegyületeket enantiomertiszta formában. A királis vegyületek felhasználása évről évre folyamatosan nő. A termékre vonatkozó szigorú minőségi előírások biztosítása mellett a zöld kémia fontos feladata, hogy az eljárások környezetterhelését minimalizálja.

A munkám során vizsgált vegyület a *transz*-1,2-ciklohexándiol (CHD). Rezolváló ágensként (előkísérletek alapján) *L*(+)-borkósavat alkalmaztam, amely a *R,R*-CHD-lal stabil diasztereomert képez etanolban. A bepárlás után kapott szilárd keverékből szuperkritikus szén-dioxidos extrakcióval 20 MPa nyomáson, 33 °C hőmérsékleten az *S,S*-CHD-ban dús elegyet nyertem ki. A raffinátum Na_2CO_3 -tal megbontható.

A fenti módszer zöldkémiai szempontból igen előnyös. A szén-dioxid olcsón nagy tisztaságban hozzáférhető, biztonságos, egyszerűen regenerálható és így a termék oldószeranyagoktól mentes. A borkósav könnyen elérhető rezolválószer. A raffinátum megbontás anyagvesztesége és környezetterhelése azonban magas. Munkám egyik célja ezért a raffinátum *in situ* megbontásának kidolgozása volt. Az atmoszférikus körülmények között 132 °C-ig stabil diasztereomert az extrakciós hőmérséklet legalább 73°C-ra emelésével 20 MPa nyomáson bontottam meg. A diasztereomerben megkötött *R,R*-CHD-ban dús elegy így a második extrakciós lépésben kioldható az *S,S*-CHD-ban dús elegy extrakciója után. A visszamaradó borkósav könnyen regenerálható, valamint az új eljárásban használt egyetlen szerves oldószer az etanol.

Munkám másik területe a borkósav : racém CHD molarány hatásának vizsgálata volt 0 - 4 tartományban. Szoktatlan módon az első extrakciós lépés termelése 0,5-ös és annál nagyobb molaránynál is a bemért racém vegyület 50%-a. A molarány növelésével az enantiomer tisztaság (ee) monoton nő, 1,5-nél nagyobb molaránynál az extraktum és raffinátum ee értéke 80% föléti, közel 50-50%-os racémra vonatkoztatott termeléssel. Porröntgen-diffrakciós mérésekkel igazoltam, hogy az *R,R*-CHD erős komplexet képez, míg az *S,S*-CHD nem reagál az *R,R*-borkósavval. Az *S,S*-CHD –*R,R*-borkósav komplexet semmilyen oldószerből sem sikerült előállítani.

Bioetanol/gázolaj Emulziók Előállítás és Vizsgálata

Eller Zoltán, V. évf. vegyész mérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Hancsók Jenő, egyetemi docens

Mérnöki Kar, Vegyész mérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

A bioetanol dízelgázolajokban történő felhasználásának legfontosabb okai a károsanyag-kibocsátás csökkentése, megújítható forrásból származó keverékomponens alkalmazása (üvegházhatást okozó gázok kibocsátásának csökkentése) valamint a fosszilis energiahordozók felhasznált mennyiségének csökkentése. A bioetanol ilyen célú alkalmazásának azonban több korlátja is van. Ezek közül a legfontosabbak az emulzió stabilitása, különösen kis hőmérsékleten és víz jelenlétékor.

TDK dolgozatom irodalmi összefoglalójában tárgyaltam a bioetanol/dízelgázolaj emulziók alapanyagainak (bioetanol, alapgázolaj, felületaktív anyag) jellemzőit, az előállított bioetanol/dízelgázolaj emulziók tulajdonságait és Diesel-motorokban való felhasználásának lehetőségeit.

Kísérleti munkám célja stabil bioetanol/dízelgázolaj emulzió előállítása volt. Ennek keretében emulziókat állítottam elő különböző emulgeátor adalékok, illetőleg adalékkompozíciók felhasználásával. Megfelelő stabilitásvizsgálati módszer kidolgozása után vizsgáltam a különböző adalékokkal, adalékkompozíciókkal előállított emulziók stabilitásának a hőmérséklettől, a bioetanol koncentrációjától és annak víztartalmától való függését. Ezenkívül vizsgáltam a bioetanol/dízelgázolaj emulziók analitikai és alkalmazástechnikai tulajdonságait is összehasonlítva az alapgázolaj és az MSZ EN 590:2004 termékszabvány hasonló értékeivel.

Megállapítottam, hogy az emulziók stabilitását nagymértékben rontja a hőmérséklet csökkentése és a bioetanol víztartalmának növekedése. Sikerült olyan adalékkompozíciót kiválasztanom, amely segítségével 5,0v/v%, 3,0 v/v% víztartalmú bioetanol stabilan emulzióban tartható -2°C hőmérsékleten. Javaslatot tettem a bioetanol okozta cetánszám-csökkenés kompenzálására.

Gamma-valerolakton alapú ionos folyadékok

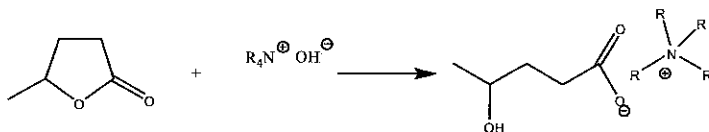
Fegyverneki Dániel, IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Horváth István Tamás

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

A zöld kémia egyik fontos célkitűzése, hogy az illékony szerves oldószereket természetes alapanyagokból előállított, nem illékony vegyületekkel helyettesítsük. A munkám célja az volt, hogy a fenntarthatóság céljából vizsgált vegyület, a γ -valerolakton és a potenciális „zöld” oldószerek, az ionos folyadékok összekapcsolásából minden komponensében környezetbarát oldószert állítsak elő. A kísérleteim során ionos folyadékokat állítottam elő, melyek anionja a γ -valerolakton gyűrű felnyílásával jött létre. A reakció kvaterner ammóniumsók, például tetrabutilammónium-hidroxid, tetrametilammónium-hidroxid és kolin hidroxid vizes oldata és γ -valerolakton között játszódtott le, ez utóbbi esetében mind az anion, mind a kation természetes eredetű.

1. ábra: γ -valerolakton és a kvaterner ammóniumsók reakciójának általános egyenlete

Az ionos folyadékok szerkezetét NMR spektroszkópiával bizonyítottam. Vizsgáltam az ionos folyadékok fajlagos vezetését, viszkozitását és sűrűségét, a vizsgálatok eredményét pedig összehasonlítottam az irodalomban korábban leírt általános tendenciákkal és más ionos folyadékok tulajdonságaival.

Nagy cetánszámú biogázolajok előállításának vizsgálata

Kasza Tamás, okl. vegyészmérnök

Tóth Csaba, okl. vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Hancsók Jenő egyetemi docens
PE Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
Ásványolaj- és Széntechnológia Intézeti Tanszék

A trigliceridek (pl. növényolajok), de különösen származékaik motorhajtóanyagként való alkalmazása iránti igény a világon egyre nagyobb. Ennek oka – többek között – a fosszilis energia-hordozók végeessége, a kőolajtól való függőség csökkentése és a környezet megóvása. A növényolajok önmagukban való alkalmazása dízelmotorokban csak jelentős mértékű átalakítással lehetséges. Ezért szükséges ezen növényolajok kémiai átalakítása, hogy megfelelő minőségű motorhajtóanyagokat, illetőleg keverőkomponenseket nyerjünk. Jelenleg főként különböző növényolajokból átszterezéssel előállított biodizeleket alkalmaznak gázolajok keverőkomponensként. Ezek azonban számos hátránnyal rendelkeznek (pl. rossz hő- és oxidációs stabilitás, nagyobb bekerülési költség). Ezen hátrányok kiküszöbölésének egyik lehetséges megoldása a növényolajoknak biogázolajjává való heterogén katalitikus átalakítása.

A jelenleg ismert eljárások során azonban a relatív kis hozammal (40-60%) nyert terméket főként n-paraffinok alkotják, ezáltal cetánszáma ugyan nagy (70-90), de hidegszűrhetőségi határhőmérséklete meglehetősen kedvezőtlen (CFPP >20°C), ami korlátozza dízelgázolaj-keverőkomponensként való felhasználásukat.

Kísérleti munkánk célja ezért katalitikus átalakítással olyan növényolaj eredetű, Diesel-motorok hajtására alkalmas motorhajtóanyag nagy hozammal (>75%) való előállítása volt, amely nem csak nagy cetánszámmal, hanem kedvező hidegfolyási tulajdonságokkal (hidegszűrhetőségi határhőmérséklet: -5...-20°C) is rendelkezik.

A kísérletek során napraforgóolajból hidrogénező katalizátoron célirányosan kiválasztott műveleti paraméterek között előállított alapanyagot használtunk. A kísérleteket egy 100 cm³ hasznos térfogatú nagynyomású reaktorrendszerben végeztük el, amely minden olyan műveleti és szabályozó egységet tartalmaz, ami a nagyipari hidrogénező üzemben is megtalálható.

A nyert eredmények alapján megállapítottuk, hogy a kedvezőnek talált műveleti paraméterkombinációk (320-330 °C; P = 50-60 bar; LHSV = 2,0-3,0 h⁻¹, H₂/alapanyag térfogatarány: 300 Nm³/m³) mellett 75-85 cetánszámú és -15...-10 CFPP értékű termékek (biogázolaj) állíthatók elő.

Szilárd sav és szilárd bázis katalizátorok aktivitásának vizsgálata szerves szintézisekben

Kiss Árpád, vegyészmérnök
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Hell Zoltán** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Potor Attila PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az utóbbi évtizedek szerves kémiai kutatásainak egyik fő iránya olyan új katalizátorok, illetve reagensek keresése, amelyek aktívabbak, szelektívebbek, esetenként újra felhasználhatóak, egyszerűbben kezelhetők, és kevésbé terhelik a környezetet, mint egyes hagyományos katalizátorok. Az elmúlt években egyre nagyobb jelentőségűvé vált a különböző ásványi alapú katalizátorok használata.

Tanszéki kutatómunkám során a feladatom az volt, hogy a korábbi eredmények figyelembevételével vizsgáljam az ERSORB (E) zeolitszalad, illetve más agyagásványok (pl. K10 montmorillonit), valamint a bázikus karakterű hidrotalcitok katalizátorként való felhasználhatóságát különböző szerves kémiai reakciókban. Ennek során főként különböző heterociklusos vegyületek előállítási lehetőségeit tanulmányoztam.

Vizsgáltam, hogy megvalósítható-e 1,2-ciklohexándiamin és aromás karbonsavak, illetve aldehidek gyűrűzárása ciklohexánimidazolín-származékokká.

Vizsgáltam a Knorr-féle kinolinszintézis megvalósíthatóságát különböző szilárd sav típusú katalizátorok jelenlétében acetecetészterből és anilinnél kiindulva.

Vizsgáltam más kinolinszintézisek megvalósíthatóságát is különböző savas, illetve bázikus katalizátorok jelenlétében. Megállapítottam, hogy a Combes-reakció aktivált anilinnél (m-anizidin) megvalósítható K10 montmorillonit jelenlétében. Acetilacetonnál kiindulva a várt kinolinszármazék megfelelő termeléssel keletkezett.

Sikeresen valósítottam meg a Friedländer-féle kinolinszintézist o-amino-acetofenonnál kiindulva különböző ketonokkal, K10 katalizátor jelenlétében. Hidrotalcit jelenlétében a várt gyűrűzárás nem ment végbe, csak az intermedier enaminn keletkezett.

Vizsgáltam a Knoevenagel-reakció megvalósítását különböző szilárd sav, illetve szilárd bázis katalizátorok jelenlétében. Az ebben a reakcióban kapott termékeket a későbbiekben különböző gyűrűzárási reakciókban tervezzük felhasználni.

Olefinek oligomerizációjának vizsgálata

Kriván Eszter, V.évfolyam vegyészmérnök

Pannon Egyetem, Mémnöki Kar

Témavezető: **Dr. Hancsók Jenő**, egyetemi docens

Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki- és Folyamatmérnöki Intézet, Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

A motorhajtóanyagok minőségével szemben támasztott követelmények az utóbbi évtizedben nagymértékben szigorodtak, amelyek közül legfontosabb a kén- és az aromástartalom nagymértékű csökkentése volt. 2009-től az Európai Unióban legfeljebb 10 mg/kg kéntartalmú motorhajtóanyagokat lehet forgalmazni. Ezenkívül a motorbenzinek esetén a benzoltartalmat már legfeljebb 1 v/v%-ra csökkentették. A gázolajok esetén pedig a többgyűrűs aromástartalmat 2-4%-ra fogják. A közeljövőben mindkét motorhajtóanyagnál további szigorítások várhatóak a legfeljebb megengedett összes aromástartalom esetén is. A motorhajtóanyagok minőségi előírásainak változása mellett nagymértékben korlátozták az Otto- és Diesel-motoros gépjárművek károsanyag-kibocsátását is. Mindezen hatások szükségessé tették a motorbenzinek és dízelgázolajok esetén is környezetbarát, tisztán égő, gyakorlatilag heteroatom- és aromásmentes, nagy n- és i-paraffin-tartalmú keverőkomponensek minél nagyobb mennyiségben történő felhasználását.

TDK dolgozatomban ilyen motorhajtóanyag-keverőkomponens előállítási lehetőségeit vizsgáltam C₄-C₆ olefinek ionos folyadékokban történő oligomerizálásával. A téma rendkívül nagyjelentőségű egy korszerű kőolajfinomítóban, hiszen a jelenlegi követelményeknek leginkább megfelelő izoparaffindús motorhajtóanyag keverőkomponensek (motorbenzin és dízelgázolaj keverőkomponensek) állíthatók elő, és nagymértékben nő a kőolajfinomító motorbenzin-dízelgázolaj rugalmassága.

Kísérleti tevékenységem során sikerült olyan ionos folyadékokat (katalizátorokat) és reakciókörülményeket (hőmérséklet: 70°C, nyomás: 10bar, reakcióidő: 24óra) kiválasztanom, amelyek alkalmazása mellett dimerek (szelektivitás: 70-90%), trimer (szelektivitás: kb. 40%), illetőleg tetramer (szelektivitás: 8-9%) állítható elő.

Alternatív tüzelőanyagok termikus degradációjának vizsgálata**Ószer András** Vegyészmérnök BSc. III.

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Angyal András**, Phd. hallgató

PE Ásványolaj- és Széntechnológia Intézeti Tanszék

Miskolczi Norbert dr., Egyetemi Adjunktus

PE Ásványolaj- és Széntechnológia Intézeti Tanszék

TDK munkám során műanyag hulladékok és úgynevezett alternatív tüzelőanyag (RDF) termikus krakkolásával foglalkoztam. A téma jelentőségét az a hatalmas mennyiségű műanyag hulladék adja, amely világszerte keletkezik évente. Számos hulladékkezelési módszer létezik, viszont a problémára csak az újrahasznosító eljárások nyújthatnak megoldást. Ilyen megoldás például a műanyag hulladékok termikus krakkolása, melynek során a műanyag hulladékból értékes, a szénhidrogén iparban hasznosítható frakciókat lehet előállítani. A műanyagok főként csomagolóanyag formájában kerülnek felhasználásra, így szelektív gyűjtéssel viszonylag nagy hányadát vissza lehetne forgatni alapanyagként. A szelektív gyűjtés, azonban még a fejlett országokban is problémát jelent, ezért a nem szelektíven gyűjtött műanyag hulladék kezelésére is megoldást kell találni. Egyes országokban (pl. Ausztria, Németország) egyre elterjedtebb a kommunális hulladék részleges válogatása, melynek eredménye műanyag, papír és fa különböző arányú keveréke, melyet úgynevezett alternatív tüzelőanyagként használnak fel cement- és erőművekben.

Kísérleti munkám során ennek az alternatív tüzelőanyagnak a műanyag hulladékok krakkolásához hasonló felhasználási lehetőségét vizsgáltam meg. A termikus krakkolást elektromosan fűtött, keverhető üstreaktorban végeztem. Célom volt az RDF minták különböző fűtési sebességek mellett történő krakkolásának vizsgálata. Továbbá különböző műanyag hulladékokkal kevert alapanyagok krakkolásának vizsgálata. Tanulmányoztam a különböző paraméterek mellett keletkezett termékek hozamának változását, valamint meghatároztam a termékek főbb minőségi jellemzőit. A minőségi vizsgálatokhoz infravörös spektroszkópiát, gázkromatográfiát és röntgen fluoreszcenciás spektroszkópiát alkalmaztam.

Az eredményekből megállapítható volt, hogy az RDF termikus krakkolásakor minden esetben nagy mennyiségű kokszt keletkezett, ez a mennyiség a műanyagokkal együtt végzett krakkolás esetén csökkent. Továbbá az is megállapítható volt, hogy a fűtési sebesség növelésével nőtt a folyadék fázisú termékek mennyisége. A folyadék termékek analitikai vizsgálataiból kiderült, hogy az RDF-ből származó termékek nagy hasonlóságot mutatnak a műanyag hulladékok krakkolásából származókkal, bár az RDF papír és fa részből származó komponensek is kimutathatóak voltak a vizsgálatok során. Az eredmények alapján elmondható, hogy az RDF krakkolással történő újrahasznosítása jelentős gyakorlati problémát nem okoz, azonban nagyrészt csak a műanyag tartalma hasznosul a krakkolás során. Műanyagokkal együtt végzett krakkolás esetén a megnövekedett kocsz és szennyező anyag mennyisége, csökkenti a műanyag hulladékok ilyen irányú újrahasznosításának gazdaságosságát.

Technológiafejlesztés természetes anyagok formulálására

Pataki Hajnalka, V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

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

Konzulens: **Nagy Zsombor Kristóf** doktoráns
BME Szerves Kémia és Technológiai Tanszék

A természetes eredetű gyógyszerek, illetve gyógyhatású készítmények egyre közkedveltebbé válnak napjainkban, melynek háttérében számos indok húzódik. A szintetikus gyógyszerekkel ellentétben számottevően kisebb költségráfordítással hozhatók forgalomba, ugyanakkor társadalmi megítélésük is pozitív tendenciát mutat.

A hagyományosan használt természetgyógyászati készítmények esetében (pl. kamilla-, csalán-, hársfa-, csipkebogyótea, aloe vera) problémaként merül fel azok nem megfelelően kontrollált adagolása. Ezen anyagokból megfelelő formulálási eljárással megoldható a hatóanyag(ok) pontos dozírozása, ezzel biztosítva a kívánt terápiás hatás elérését. Másik akadályt jelent a természetes eredetű anyagok esetében gyakran előforduló feldolgozási nehézség.

Munkám célkitűzése volt, egy olyan gazdaságos gyártási technológia kifejlesztése, mely alkalmas ilyen anyagokból szilárd gyógyszerforma kialakítására. További célom az esetleges negatív hatások kiküszöbölése volt a kedvező terápiás tulajdonságok megtartása mellett. A kifejlesztendő tablettának a betegek számára elfogadhatónak és gyors szétesésűnek kellett lennie, hogy biztosítani tudja a hagyományos készítmény felszívódási sajátságait.

A kísérleti munka két alternatív úton haladt. Egyik esetben egy új nedves granulálási eljárással, másik úton pedig egy egyedi szárítási módszerrel sikerült olyan préskész szemcsehalmozatot kialakítani, mely jól tablettázható, és a tabletták megfelelnek a velük szemben támasztott kritériumoknak.

Labor szinten mindkét esetben pozitív eredményeket kaptunk, a technológiák első méretnövelését sikeresen elvégeztük, reményt adva arra, hogy a kidolgozott új gyógyszer technológiai lépések ipari méretekben is megvalósulnak, ahol egy energiatakarékos, gazdaságos és környezetbarát technológiát nyújthatnak.

Munkám során az extrúziós technológiát is kipróbáltam, melynek jövőbeni kidolgozásával a folyamatos gyárthatóság is biztosítható.

Oxo-vegyületek reakcióinak nyomon követése és optimalizálása *in situ*

Fourier transzformációs IR spektroszkópiával

Szilágyi Nikolett, V. évf. Környezetmérnök szak

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

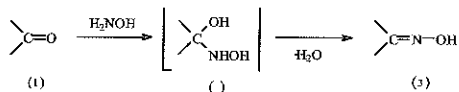
Témavezetők: **Dr. Keglevich György** egyetemi tanár,
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Csontos István egyetemi adjunktus,
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Sallay Péter** egyetemi magántanár,
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Fourier transzformációs IR spektroszkópia egyre jelentősebb szerepet tölt be a szerves vegyipari, a gyógyszeripari és műanyagipari kutatások körében, mert lehetőséget nyújt a reakciók on-line nyomon követésére és az intermedierek megfigyelésére. Ezek az információk nem csak az adott reakció körülmények optimalizálására alkalmasak, hanem a kémiai technológiák módosításával új, környezetbarát megoldások dolgozhatók ki. Kutatásaim célja az *in situ* FTIR spektroszkópiában rejlő lehetőségek vizsgálata volt.

A kísérleti munkám első felében aldehidek és alifás ketonok (1) hidroxilaminnal történő oximképzési reakcióit vizsgáltam. A reakciók intermediereken (2) keresztül játszódnak le és az átalakulás erősen pH függő. Vizsgáltam a pH hatását és optimalizáltam a reakciókat. A heterogén elegyben végbemenő reakciók követése gyakran komoly problémát jelent. A kísérleteket ezekben az esetekben környezetbarát módon, szerves oldószer hozzáadása nélkül, végeztem különböző technológiai paraméterek (hőmérséklet, koncentráció, keverés) beállítása mellett. Jelentős előrelépés, hogy az optimalizált körülmények között sikerült a heterogén közegben végzett reakciókat is nyomon követni, és a spektrumokat megfelelően értelmezni.



A kísérleti munka további részében a mindennapi vegyipari gyakorlatban gyakori egyensúlyi reakciók követését és optimalizálását tűztem ki célul. Az ilyen típusú reakciók esetében kiemelkedően fontos az optimalizálás lehető legegyszerűbb, környezetbarát megoldása. A választott modellreakció benzaldehid és NaHSO_3 addíciós reakciója. A kísérletsorozat eredményes volt, a spektrumok alkalmasak egyensúlyi állandó számítására is.

Kolloid- és Makromolekuláris kémia tagozat



**Dendrimerek szerkezete oldatokban.
Kölcsönhatás kismolekulákkal és fémionokkal.**

Antal Zsuzsanna V. gyógyszerész

Debreceni Egyetem Kolloid- és Környezetkémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Nagy Zoltán** egyetemi adjunktus

Debreceni Egyetem Kolloid- és Környezetkémiai Tanszék

Munkánk során az ötödik generációs dendrimerek szerkezetét vizsgáltuk oldatokban, illetve tanulmányoztuk kölcsönhatásukat kismolekulákkal és fémionnal. A dendrimerek felhasználhatóságukat tekintve sokrétűek, alkalmasak gyógyszeralapanyagként, szállítóközegként illetve jelzőmolekulaként viselkedni diagnosztikus eljárások során.

Potenciometriás titrálás alapján meghatároztuk a molekulában található primer és tercier amino csoportok számát, és azok protonálódási állandóit is. A Cu(II)-ionnal való kapcsolata élettani folyamatok befolyásolása miatt jelentős, így potenciometriás titrálások segítségével megállapítottuk, hogy igen jó komplexképző ligandumnak tekinthető a Cu(II)-ion számára, és a fémion-ligandum arány változtatásával meghatároztuk a molekula által kötött fémionok maximális számát, amely esetünkben 81 db Cu(II)-iont jelent dendrimer molekulánként. A titrálás során extra lúgfogyasztó folyamatot figyeltünk meg, amely a spektrális vizsgálatok alapján az amid nitrogének deprotonálódásához és koordinálódásához rendelhető. Az arányok és az UV-látható spektrum alapján elmondhatjuk, hogy a komplexképződés során többféle szerkezetű, egyes esetekben izomer sztöchiometriájú részecskék jönnek létre, amely megnehezíti a részecskék szerkezetének pontos leírását és a stabilitási állandó számítását.

A dendrimer oldatokon végzett diffúziós NMR mérések azt mutatták, hogy savas közegben a protonálódó csoportok taszítása miatt a molekula feszített szerkezetű és nagy méretű. A pH növelésével az elektrosztatikus taszítás fokozatosan csökken, így a molekula mérete is változik, diffúziós koefficiens értéke növekszik. Ezen eredményünket COSY és NOESY spektroszkópiás módszerekkel is igazoltuk. A savas közegben keletkező nagy pozitív töltésű dendrimer molekulák hidratáltsági foka nagyobb, mint a töltés nélküli lúgos közegben létező részecskéké, amely jól értelmezi azt az eredményünket, mely szerint a dendrimerben vagy dendrimerhez kötött vízmolekulák száma jelentősen lecsökken a pH növelésével.

A Cu(II)-ion – dendrimer kölcsönhatás NMR módszerrel való tanulmányozása során valószínűsítettük, hogy a Cu(II)-ion koordinációja a primer amino csoportokon indul meg, és nagyobb pH-kon a tercier nitrogének és az amid csoportok is részt vesznek a komplexképződésben.

ZnO-alapú filmek előállítása szol-gél technikával és jellemzésük optikai módszerekkel

Baranyai Roland, V. évf. mérnök-fizikus

BME, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi docens

BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Dr. Nemcsics Ákos egyetemi tanár

MFA Mikrotechnológiai Főosztály, Optoelektronikai Eszközök

Laboratórium

A különböző oxid-félvezető vékonyrétegek illetve nanostruktúrák rendkívül fontosak, mint a nanotechnológiai ipar alapanyagai. Az oxid-félvezetők széleskörűen felhasználhatóak az elektronikában, így gázérzékelőkben, napelemekben; vezető, transzparens bevonatokhoz, fotonikus eszközökben, tranzistorokban, akusztó-optikai eszközökben. A cink-oxid különösen fontos anyag, stabilitása, környezetbarát mivolta és kedvező elektronikai tulajdonságai miatt.

Ahhoz, hogy valóban a jövő iparának alapanyagaivá válhassanak, ezen oxid-félvezető nanostruktúrákat nagy tömegben, olcsón kell előállítani, mégpedig a fizikai (optikai, elektromos, morfológiai) tulajdonságaik pontos kézben tartásával. A szol-gél technikával ez megvalósítható.

Kísérleteim során cink-oxid vékonyrétegeket állítottam

elő szol-gél technikával, és vizsgáltam tulajdonságaikat UV-Vis spektroszkópiával, fluorimetriával, valamint pásztázó szögű reflektometriával (SAR). Ez utóbbi módszert eddig csak molekulás filmek, illetve nanorészecskék Langmuir-Blodgett filmjeinek vizsgálatára használták. Tanulmányoztam a szol öregedésének hatását a képződő réteg morfológiájára, valamint a réteghúzás sebességének befolyását a réteg vastagságára. Az előállított ZnO-vékonyrétegek a SAR-vizsgálatok tanulsága szerint porózusak (a porozítás ~37%), törésmutatójuk a 1,5 körüli, a látható tartományban átlátszóak, vastagságuk a 100-600 nm tartományban változik. A vékonyrétegek fotolumineszcenciája az irodalmi adatokkal jól összehasonlítható, és sikerült kimutatni a rétegepítés módjának, valamint a szol öregedésének hatását a lumineszcencia spektrumra.

Elektromosan töltött polimer nanogél részecskék vizsgálata

Borsos Attila, I. évf. doktorandusz hallgató

ELTE-TTK Kémiai Intézet

Témavezető: Dr. Gilányi Tibor egyetemi tanár

ELTE-TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Az ellentétesen töltött polielektrolit/tenzid rendszerek a legfőbb alkotó elemei számos kereskedelmi forgalomban kapható terméknek (pl. sampon, mosogatószer). Ezeknek a termékeknek a hatékonyságában a fázistulajdonságok játsszák a legnagyobb szerepet, ezért számos kutatás irányul ezen rendszerek stabilitásának jellemzésére. A környezeti hatásokra nagymértékű reverzibilis változással válaszolni képes anyagok széles körű érdeklődésre tartanak számot. Ezek az ún. rezponzív anyagok a külső hatások kismértékű változásaira nagymértékű (nemlineáris) méretváltozással reagálnak, ami alkalmassá teszi őket a környezetükből érkező ingerek érzékelésére képes eszközök készítésére. Azok a környezeti paraméterek, melyek változása a polimer gél nemlineáris méretváltozását eredményezhetik, lehetnek például a hőmérséklet, a pH, az oldat- és ionösszetétel (ionerősség), az elektromos- és mágneses tér, a nyomás valamint a fényintenzitás ($h\nu$). Ez a tulajdonságuk ígéretes felhasználásukat teszi lehetővé elválasztástechnikai (állófázis), széles körű ipari, gyógyszeripari (szabályozott hatóanyagleadás) és gyógyászati területeken, például kontaktlencse készítésére.

Munkám célja az egyik leggyakrabban alkalmazott rezponzív gél, a poli(*N*-izopropil-akrilamid) módosítása volt disszociálisan csoportok kopolimerizációval történő beépítése útján. A nanogél modell jellemzését valamint kationos tenziddel való kölcsönhatását statikus- és dinamikus fényszórás, elektroforetikus mozgékonyág és potenciometrikus tenzidion-aktivitás mérésekkel vizsgáltam. Az előállított nanogél részecskék gyakorlatilag monodiszperznek bizonyultak, ideális modellként szolgálva, mind a gél rezponzív tulajdonságainak mind a polielektrolit/tenzid kölcsönhatásnak a vizsgálatához.

A nanogél kationos tenziddel való kölcsönhatása három jellegzetes tenzidkoncentráció - tartományra osztható. Kis tenzidkoncentráció esetében a nanogél diszperzió stabil, a részecskék mérete a felületaktív anyag mennyiségével nagymértékben csökken, az elektroforetikus mobilitás nullához tart. A tenzidmolekulák monomer formában kötődnek a mikrogél részecskéhez. Egy adott tenzidkoncentráció felett a diszperzió koagulál, majd további tenzid hatására az áttöltődés miatt a mikrogél újra stabil állapotba kerül.

Bidiszperz szilika részecskék Langmuir-és Langmuir-Blodgett-filmjei**Detrich Ádám, I. évf. vegyészmérnök doktoráns**

BME, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi docens

BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A szilárd felszíneken kialakított nanostrukturált bevonatok előnyösen befolyásolhatják a hordozó (optikai, elektromos, mágneses etc.) tulajdonságait. A Langmuir-Blodgett- (LB-) technika lehetőséget ad arra, hogy a kialakítandó filmek vastagságát, szerkezetét, valamint összetételét befolyásoljuk. A bevonatok szerkezetét meghatározó körülmények megismerése céljából modellszintű vizsgálatokra van szükség. A nanorészecskés filmek esetében kulcskérdés lehet a részecskék mérete és méreteloszlása. Ebben a munkában céloom az volt, hogy jól definiált – bidiszperz, azaz két különböző részecskeméretű – modellanyag (Stöber-szilika) felhasználásával tanulmányozzam a részecskék LB-filmjeinek kialakítását transzparens hordozókon. Két különböző bidiszperz rendszerrel dolgoztam (átlagos részecskeátmérők: 37 nm és 100 nm; 61 nm és 100 nm, 3-3 különböző összetételben), így a részecskék közötti méretkülönbség hatását is vizsgálhattam.

A közel monodiszperz (szűk méreteloszlású) és a bidiszperz rendszerek vízfelszíni filmjeit Wilhelmy-filmmérlegben állítottam elő. Oldalnyomás-terület izotermák alapján juthattam információhoz a különböző méretű részecskék keveredéséről, együttes teríthetőségéről. A Langmuir- és az LB-filmek szerkezetét transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkópiai (TEM és SEM), optikai tulajdonságaikat pedig UV-Vis spektroszkópiai módszerekkel tanulmányoztam.

Az LB-filmekről felvett transzmittancia spektrumok igazolták, hogy a látható tartományban a szilika rétegek antireflexiós tulajdonsággal rendelkeznek. A transzmittancia spektrumok kiértékelhetők egy inhomogén optikai modell segítségével, amely alapján becsülhető a réteg vastagsága, átlagos törésmutatója és a rétegen belüli törésmutató gradiens. A 37 nm-es és 100 nm-es részecskéket tartalmazó rendszerek esetében arra a következtetésre jutottam, hogy a kisebb részecskék koncentrációjuktól függően a hordozó felületén, illetve a nagyobb részecskék felső részéhez tapadva egyaránt elhelyezkedhetnek. Az oldalnyomás-terület izotermák és a SEM-felvételek is alátámasztották ezt a feltételezést.

Gőzfejlesztő hőátadó csövek primerkörü felületének vizsgálata

Felföldi Viktória

V. évfolyam, környezetmérnök szak

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezető: dr. Németh Zoltán egyetemi docens
Pannon Egyetem Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

A Paksi Atomerőműben a teljesítmény növelés és üzemidő-hosszabbítás műszaki kulscs kérdése az erőmű fő berendezéseinek - köztük a gőzfejlesztők - öregedéskezelése. A primer és szekunder köri vízüzemet értékelve már több éve megfogalmazódott egy olyan "korróziós-térkép" készítésének igénye, amely magában foglalja a gőzfejlesztők ausztenites acél hőátadó csöveinek korróziós és kontaminációs állapotfelmérését.

A Pannon Egyetem Radiokémiai és Radioökológiai Intézet munkatársai a PE Anyagmérnöki Intézet, valamint az ELTE Kémiai Intézet dolgozóival együttműködve, tematikus korróziós vizsgálatokat végeztek, illetve végeznek a Paksi Atomerőmű Zrt. által biztosított ausztenites korrózióálló acélcső mintákon. A vizsgálatokba bekapcsolódva részt vettem a minták lineáris voltametriás, SEM-EDX, valamint a csőminták bórsavas mosása során kioldódott korróziós termékek méréseiben, továbbá a különböző vizsgálati eredmények rendszerezésére létrehozott adatbázis jelenlegi formájának kialakításában, a mérési eredmények alapján a korrózió mértékét befolyásoló fontosabb folyamatok feltárásában, az esetleges tendenciák előrejelzésében.

Vizsgálataim alapján megállapítható, hogy a kapott minták megfelelő korróziós állapotban vannak, a felületükön kialakult oxidréteg vastagsága és összetétele elsősorban a dekontaminációs kezelésektől függ. A dekontaminált minták primerkörü felületén kialakult oxidréteg kémiai összetétele és stabilitása az üzemidő előrehaladtaival kedvezően változik, meg kell jegyezni azonban, hogy egyértelmű tendenciák kimutatására további minták, körülmények vizsgálatára lenne szükség.

Különböző porozitású tömb alumínium-oxid rendszerek szol-gél előállítása

Földesi László, IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Sinkó Katalin egyetemi docens

ELTE TTK Kémia Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Kísérleteink célja alumínium-oxid-hidroxid tömb minták előállítása volt, széles tartományban változtatva a monolit szerkezetek porozitását. A kutatásunk alapjául a tanszéken korábban kifejlesztett szol-gél eljárás szolgált [1-2-3]. A vizsgálatokban arra kerestünk választ, hogy az előállítás paramétereinek változtatásával hogyan lehet a porozitást, a tömb minták mechanikai tulajdonságait befolyásolni.

Az alkalmazott technika legfontosabb előnyei közé tartoznak, hogy általa előre tervezhetően, kontrolláltan, rendkívül olcsón és kevés melléktermék keletkezésével, igen környezetbarát módon lehet a kívánt végtermékeket előállítani. Ugyanazokból a kiindulási anyagokból, kristályvizes alumínium-nitrát és 1-propanol elegyéből, szol-gél technikával, rendkívül változatos, porozitását és mechanikai szilárdságát tekintve széles skálán változó szerkezeteket lehet előállítani.

Két egymástól igen nagymértékben eltérő porozitású és mechanikai szilárdságú alumínium-oxid-hidroxid rendszert készítettünk, aerogéleket és tömb alumínium-oxid kerámiákat. Az előállított aerogélek igen nagy porozitású, kis mechanikai szilárdságú rendszerek, a tömb alumínium-oxid kerámiák kis porozitásúak, és nagy mechanikai szilárdsággal rendelkeznek.

Vizsgálataink alapján megállapítható, hogy a kristályvizes alumínium-nitrát és 1-propanol elegyének 80°C-os kevertései idejével jól szabályozható az előállítható gélszerkezet. A SAXS mérések és ^{27}Al MAS NMR mérések jól szemléltetik a gélek előállítása során lejátszódó jelentős szerkezeti változásokat. Rövid reakcióidő alatt csak kevés számú kötés tud kialakulni, rendezetlen szerkezethez jutunk, aminek köszönhetően jobban préselhető és szinterelhető mintákat kapunk. Ezek nagy szilárdságú tömbkerámiák megfelelő alapanyagai lehetnek, viszont nem duzzaszthatók. A hosszabb reakcióidővel végrehajtott gélesítés 3D-os szerkezet eredményez, mely jól duzzasztható, és nagy porozitású, monolit aerogél termékhez vezet. A SAXS mérésorozatokat bebizonyították, hogy a gélszerkezet 24 óra alatt kialakul, ezután már csak finomodik. A 48 órás reakció után már jelentős számú asszociátum kialakulása detektálható a szerkezetvizsgálatok során. A gélekben az asszociátumokban kötött Al(III)-ionok száma jelentősen megnő, ami alátámasztja az irreverzibilis szerkezeti változást. A Vickers-keménység mérések alapján is kijelenthető, hogy a reakció idejével jól lehet szabályozni a szerkezetet. Kis porozitás, illetve a nagyobb keménység eléréséhez a rövidebb reakcióidők alkalmazása bizonyult megfelelőnek. A mikroszkópos vizsgálatok (SEM és AFM) is alátámasztják a reakcióidő szerkezetet szabályozó hatását.

[1] R. Mezei, K. Sinkó, *J. Mater. Chem.*, 8(9) 2095-2101 (1998)

[2] R. Mezei, K. Sinkó, *Chem. Phys.*, 246 295-305 (1999)

[3] R. Mezei, K. Sinkó, *Colloid Polym. Sci.*, 274 (1996) 1054-1060 (1996)

Nanoemulziók előállítása és stabilizálása tenzidkeverékekkel

Juhász Ádám, IV. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

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

Az emulziók évtizedek óta fontos szerepet töltenek be az ipari termelésben, számos termék előállítása során alkalmaznak emulziókat, és az előállított termékek jelentős része valamilyen emulzió. Fontosnak tartjuk az emulziók előállítására és stabilizálására vonatkozó technológiák egyszerűsítésének és költségcsökkentési lehetőségeinek bemutatását.

A nanométeres mérettartományba eső cseppeket tartalmazó emulziók iránti érdeklődés az 1980-as évektől kezdve vált egyre jelentősebbé. A már ismert mikroemulziókkal szemben a rendkívül kis cseppméretnek köszönhetően ezek a rendszerek kedvezőbb tulajdonságokkal (nagyobb mértékű kinetikai stabilitás, közel 50%-kal kisebb emulgeáló tenzid igény) rendelkeznek. Különösen jelentős felhasználási területet képvisel az olajipar, amely a másodlagos művelés után visszamaradt olajkészletek kiaknázására hosszú ideje alkalmaz tenzid-, vagy polimer-oldatokat és mikroemulziókat.

Munkám első lépése a nanoemulziókkal kapcsolatos szakirodalom feldolgozása, és a tématerületen belüli információk összefoglalása volt. A kísérleti munka során emulziók stabilizálására alkalmas tenzidok és tenzidkeverékek kiválasztása, és azon komponensarányok keresése történt, amelyeknél stabil, a nanométeres mérettartományba eső cseppeket tartalmazó emulzió képződik. A megfelelő anyagok és összetételi határok feltérképezése mellett olyan előállítási módszer kidolgozása is célom volt, amely megfelelően kis cseppméretű és kinetikai állandóságú emulziót képez. Az előállítási módszerek közül az alacsony energiájú – fázis inverziós hőmérséklet (PIT) és fázis inverziós koncentráció (PIC) – módszerek tűnnek rendkívül ígéretesnek. Ezen felül az előállított rendszerek jellemző tulajdonságainak (cseppméret, sűrűség, emulziós szám, viszkozitás, hígíthatóság) vizsgálatát, és az egyes paraméterek (tenzidkoncentráció, hőmérséklet) képződésre és stabilizálására gyakorolt hatásának meghatározását végeztem el.

Dolgozatomban bemutatom a témával kapcsolatos irodalmat, a nanoemulziók előállítására és vizsgálatára alkalmazott módszereket, majd végül ismertetem a kapott eredményeket és az ezekből levonható következtetéseket.

Mycobacterium tuberculosis elleni hatóanyag-jelöltek vizsgálata egyrétegű membrán modell segítségével

Pénzes Csanád Botond, IV. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: Dr. Kiss Éva egyetemi docens

ELTE Fizikai Kémia Tanszék

Hill Katalin PhD hallgató

ELTE Fizikai Kémia Tanszék

A *Mycobacterium tuberculosis* okozta fertőzés eredményeképp leggyakrabban kialakuló tüdőtuberkulózis jelentős népegészségügyi kihívást jelent világszerte. A Föld lakosságának egyharmada fertőzött. Az Egészségügyi Világszervezet előrejelzése alapján 2000 és 2020 között közel 1 milliárd ember válik újonnan fertőzötté és közülük várhatóan 200 millió egyénben ez a fertőzés klinikai megbetegedéshez vezet majd.

Az immunrendszer védekező reakciói következtében a kórokozó baktériumok elpusztulnak a fertőzött makrofágokban, a *Mycobacterium tuberculosis* baktériumok azonban különböző védekező mechanizmusok segítségével képesek a túlélésre. A tuberkulózis terápiájában ma első helyen a gyógyszeres kezelés áll, azonban a gyógyításra használt hatóanyagokkal szemben kialakuló rezisztencia, a hosszú, elnyújtott, mellékhatásokkal terhelt kezelés arra ösztönöz, hogy újabb, hatékonyabb gyógyszerek után kutassunk.

Az egyik lehetséges út, hogy a hagyományosan használt gyógyszereket (izoniazid, pirazinamid) módosítjuk, lehetővé téve ezzel a célsejtbe (közvetlenül a fertőzött makrofágba való) juttatásukat.

A másik fontos út az új hatóanyagok keresése, amelynek egy lehetséges módja, a baktérium makrofágon belüli túléléséhez elengedhetetlen enzime(ke)t gátló molekulák keresése. Mivel a hatóanyagoknak több membránon át kell jutniuk ahhoz, hogy a fertőzött célsejtbe elérjenek, a kutatások egyik fontos eleme az, hogy megvizsgáljuk a membrán-hatóanyag kölcsönhatást, a membránhoz való affinitást. A természetes membrán komplexitása miatt nehéz lenne egy adott kölcsönhatást vizsgálni, ezért érdemes egyrétegű lipid filmmel, mint egyszerűsített membrán modellel dolgozni.

Vizsgálataink során egy régóta használt hatóanyagot, az izoniazidot (INH), illetve ennek egy peptid-származékát (INH-redSer), valamint néhány olyan vegyületet, un. ligandumokat használtunk, amelyek a baktérium túléléséhez nélkülözhetetlen enzimet potenciálisan gátolják.

Langmuir-mérleg segítségével a membránalkotó lipidből, valamint a gyógyszerjelölt molekulából keverékfilmet hoztunk létre víz/levegő felületen. Az oldalnyomás-terület izotermák elemzéséből megállapítottuk, hogy a hatóanyagok beépülnek a lipidrétegbe, kompatibilisek a lipiddel, mivel molekuláris keveréket képeznek. A hatóanyag-konjugátum és gyógyszerjelöltek lipiddel való kedvező kölcsönhatása arra utal, hogy affinitását mutatnak a membránhoz, valószínűsítve a membránon való áthatolást, ami kívánatos a fokozott hatóanyagtranszport szempontjából.

A keverés hatása az ellentétesen töltött lineáris polielektrolit-ionos tenzid rendszerek felületi és tömbfázisbeli tulajdonságaira

Pojják Katalin, I. évf. doktorandusz hallgató

ELTE TTK Kémiai Intézet

Témavezető: **Dr. Mészáros Róbert** egyetemi adjunktus
ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémia Tanszék

Tudományos diákköri munkám során kétféle oldatkészítési eljárás hatását tanulmányoztam egy lineáris, kationos polielektrolitot és anionos tenzidet tartalmazó rendszer oldatbeli és felületi viselkedésére, eltérő körülmények mellett. Az úgynevezett stop flow keverés nagyon gyors keveredést biztosít, az egyszerű összeöntés alkalmazásakor viszont a komponensek kevésbé hatékony keveredése érhető el. A polielektrolit/tenzid komplexek oldatbeli viselkedését elektroforetikus mobilitás és dinamikus fényszóródás mérések segítségével határoztam meg. A rendszerek felületi viselkedésének tanulmányozása céljából felületi feszültség méréseket végeztem.

A kísérleti eredmények alapján a keletkezett polielektrolit/tenzid komplexek töltött jellege nem függ számottevően az oldatkészítés módjától. A mobilitással ellentétben a két különböző keveréssel előállított részecskék méretében jelentős különbségek tapasztalhatók. Az eltérés nagy tenzidkoncentrációnál a legszembevetőbb. Ekkor a hatékony stop flow keverési technikával az egyedi, kompakt polielektrolit/tenzid részecskék kolloid diszperziója keletkezik, melyet a negatív tenzidionok adszorpciója stabilizál. Ezzel szemben a kevésbé hatékony, egyszerű összeöntés azonos körülmények között nagyobb átlagos méretű részecskéket eredményezhet. Ez utóbbi esetben a csapadékos tartomány is jóval kiterjedtebb. Ezek a tapasztalatok a vizsgált lineáris polielektrolit esetében megfelelnek a korábban leírt, hiperelágazó polielektrolitot tartalmazó rendszereknél tapasztaltaknak [1,2].

Érdekes módon a felületi feszültség értéke nem mutat említésre méltó függést az oldatkeverési módtól. Ennek egyik oka az lehet, hogy a kevésbé hatékony keverési eljárás során - a primer polielektrolit/tenzid komplexek mellett keletkező - nagyobb aggregátumok adszorpciója a felületen nagy méretük és az azonos töltésű felületi réteg taszítása miatt gátolt.

Összefoglalóul elmondható, hogy a keverési technika jelentősen befolyásolja azt a tenzid koncentrációtartományt, ahol kinetikailag stabil kolloid diszperzió keletkezik. Ugyanakkor a részecskék töltött jellegére, a kötött tenzid mennyiségére és a felületi tulajdonságokra nincs figyelemreméltó hatása.

[1] Mészáros, R., Thompson, L., Bos, M., Varga, I., Gilányi, T., *Langmuir*, 19, 609-615 (2003)

[2] Mezei, A., Mészáros, R., Varga, I., Gilányi, T., *Langmuir*, 23, 4237-4247 (2007)

Diffúzióállandók meghatározása pulzusgradiens spin echo NMR módszer segítségével

Pó pity-Tóth Éva Szilvia, V. évf. vegyész szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Horváth Dezső** egyetemi docens

Dr. Tóth Ágota egyetemi docens

SZTE Fizikai Kémiai Tanszék

A mágneses magrezonancia spektroszkópia egy igen hatékony és sokoldalú mérési technika. Napjainkban az egyik legelterjedtebb nagyműszeres szerkezetkutatási módszer. Széles körben alkalmazzák a molekulák szerkezetének és dinamikájának tanulmányozására, biológiai folyamatok megismerésére, illetve az egészségügyben diagnosztikai céllal. Az NMR-technika jelentőségét az is bizonyítja, hogy számos Nobel-díjat osztottak ki a mágneses magrezonancia spektroszkópia tárgykörében mind a kémia, mind a fizika, mind pedig az orvostudomány területén.

A munkám során diffúzióállandókat határoztunk meg a PFGSE-NMR (pulsed field gradient spin echo) spektroszkópia segítségével. A módszer alapja, hogy az állandó mágneses tér mellett alkalmazott gradiens tér hatására a molekulák véletlenszerű bolyongása (diffúziója) révén fáziseltolódás alakul ki, amely a mért jelek intenzitásának csökkenéséhez vezet. A méréseket abból a célból végeztük, hogy az autokatalitikus reakciók és a transzportfolyamatok közötti kölcsönhatások korrekt mennyiségi leírását tudja adni a kutatócsoportunk. A diffúzió és a közegmozgás kölcsönhatására ugyanis nemvárt koncentrációeloszlást tapasztaltunk egy autokatalitikus reakcióban. A vizsgált rendszerben egy polielektrolit szolgál az autokatalizátor fluxusának szabályozására, míg egy semleges polimer a konvekció erősségének változtatására az oldatviszkozitás növelésén keresztül.

A dolgozatomban a közvetlen célom az volt, hogy meghatározzam a nátrium-acetát mint modellvegyület, a poliakrilamid és a poli(nátrium-metakrilát) diffúzió-állandójának pontos értékét, hogy ezáltal megismerjük a polimereket tartalmazó közeg diffúziós viszonyait. Az NMR méréseket Debrecenben és Szegeden végeztük. A két dimenziós szabadindukciós jeleket a GIFA nevű programmal értékeltük ki, majd az egyes jelek intenzitásának lecsengéséből határoztuk meg az egyes anyagok diffúzióállandóit. A közeg átfogó jellemzése az oldatok sűrűségét, majd Ostwald-féle viszkoziméterrel a viszkozitását is mértük.

A mérések eredmények fontosak az idő- és térbeli jelenségeket mennyiségileg leíró elméleti modellek számára, amelyekben döntő szerep jut az egyes komponensek diffúzióállandóinak.

A kémiai tulajdonságok szerepe nanopórusos szenek szorpciós kölcsönhatásaiban

Tóth Ajna, környezetmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. László Krisztina**, egyetemi docens
BME VBK Fizikai Kémia és Anyagtudományi Kar

Az aktív szenek „aktivitását” nagy fajlagos felületük és az azt biztosító komplex pórus-szerkezet valamint a felület kémiai heterogenitása okozza. Ennek köszönhetően az aktív szenet régóta igen széleskörűen használják szorpciós elven működő elválasztási folyamatokban. A veszélyes anyagok környezeti terjedésének megakadályozásában a szén-adszorbensek kiemelkedő fontossággal bírnak.

Az aktív szén felhasználás utáni regenerálása csökkentené a szilárd hulladék mennyiségét, az adszorbeált szennyező molekulák nagy része azonban toxikus, ezért az eltávolításukhoz felhasznált aktív szén maga is veszélyes hulladéknak tekinthető. Az aktív szén többszöri felhasználásának köszönhető költségsökkenés gazdaságosabb technológiák kialakítását teheti lehetővé.

Munkám során fenol modellszennyezővel kezelt szeneket vizsgáltam. A fenol és származékai gyakran szerepelnek kiindulási vegyületeként vagy intermedierként, pl. a növényvédő- és rovarölőszerek, festékek, robbanóanyagok, gyógyszerek stb. gyártásánál. Vízben oldva már kis koncentrációban is rendkívül kellemetlen ízt és szagot okoznak, karcinogének. Eltávolításuk leggyakrabban aktív szenes adszorpcióval történik.

Munkám során a nanopórusos szenek hatékonysága ill. regenerálhatósága szempontjából egyaránt fontos szén - vizes fenololdat közti kölcsönhatással foglalkoztam. Szorpciós, termikus és pirolitikus gázkromatográfias módszerrel vizsgáltam, hogy a szorpció körülményei (pH, pH beállítás módja, puffer jelenléte) hogyan befolyásolják a megkötődés módját és mértékét, valamint magas hőmérsékletű termikus kezelés során a szorpció reverzibilitását. Ez utóbbi a regenerálhatóságban meghatározó szerepet játszik.

Környezetbarát mosóporok zeolit tartalmának vizsgálata

Vadász Kristóf, IV. környezettudományi

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Hannus István** egyetemi tanár
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A zeolitok, mint kristályos alumínium-szilikátok az utóbbi évtizedek legsikeresebb szervesetlen anyagai közé tartoznak. Háromdimenziós vázok alapjai szilícium központú SiO_4 tetraéderek, melyeket izomorf módon AlO_4 tetraéderek helyettesíthetnek a rácsban. A három vegyértékű Al-ot tartalmazó tetraédereknek egy negatív töltése van, és ezt semlegesítik a pozitív töltésű, legtöbbször alkáli vagy alkáliföldfém ionok. A kationok mozgékonyak és más kationra cserélhetők. Ez az alapja a zeolitok **ioncserélőként** való hasznosításának.

A tetraéderek térbeli kapcsolódása úgy jön létre, hogy a kristályrács csatornákat és üregeket tartalmaz, és ezekben található a hidratált töltéskompenzáló kationok és vízmolekulák. Utóbbiak a zeolitból melegítéssel folyamatosan és reverzibilisen eltávolíthatók, miáltal szabadabbá válnak a molekuláris méretű üregek és pórusok, lehetővé téve idegen molekulák befogadását, azaz szelektív **adszorbensként** való alkalmazást.

Az előző két tulajdonság kombinálásával változatos összetételű és tulajdonságú **katalizátorok** állíthatók elő.

Ezen sajátosságai alapján a zeolitok széleskörűen alkalmazhatók a környezetvédelem számos területén.

Munkám során kinyertem egy környezetbarát mosópor és a vízlágyító Calgon zeolit tartalmát. Ismert, hogy a „hagyományos” mosóporok polifoszfát komplexképzőt tartalmaznak vízlágyító adalékként, ami a természetes vizekbe jutva algásodást okoz. Ezt váltották fel környezetbarát zeolitok. Vizsgáltam a kapott zeolit fizikai-kémiai tulajdonságait (röntgendiffrakcióval, infravörös spektroszkópiával, termikus analízissel) és meghatároztam ioncsere kapacitását Ca^{2+} és Mg^{2+} ionokra.

Megállapítottam, hogy mindkét mosószer egyféle és ugyanazt a zeolitot, NaA-t tartalmaz. A Ca^{2+} ionokat rövid idő alatt kicseréli, míg a Mg^{2+} ionok cseréje hosszabb ideig tart, a hidratált Mg^{2+} ionok nagyobb mérete miatt diffúziógátolt.

Koordinációs és Szervetlen kémia

tagozat

Kumarin-származékok *Candida albicans* ellen hatásos réz(II)komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálata

Czeglédi Eszter, II. évfolyam, Kémia BSc.

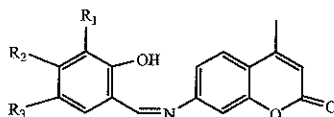
SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Enyedy Éva Anna tudományos munkatárs

Dr. Kiss Tamás tanszékvezető egyetemi tanár

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Napjainkban még mindig problémát jelen a *Candida albicans* nevű gombafaj által okozott megbetegedések kezelése. Ez a gomba normál körülmények között kis mennyiségben ugyan, de előfordul a bőrön és nyálkahártyán, ám elváltozást egészen addig nem okoz, amíg az immunrendszer képes szabályozni a szaporodását; betegség esetén azonban ez a kontroll valamilyen formában sérül. Kezelésére antibiotikumokat használnak, de ezek nem kellően hatásosak a gyorsan kialakuló rezisztencia miatt [1]. A Dublini Egyetemen Dr. B. Creaven kutatócsoportjában olyan új réz(II)komplexeket állítottak elő, melyek potenciális szerek a *Candida albicans* bőr felszínén kialakult fertőzéseivel szemben. A vizsgálatok azt mutatták, hogy a ligandumoknak önmagukban is van anti-candida hatása, de az 1:2 fém-ligandum arányú semleges biszkomplexeik jóval hatásosabbak [2].



Vizsgált ligandumok általános szerkezeti képlete

Munkánk során hat 4-metil-kumarin származék réz(II)ionnal képzett komplexeit tanulmányoztuk oldategyensúlyi vizsgálatokkal 80 % (m/m)-os DMSO-víz elegyben. Meghatároztuk a ligandumok disszociációs állandóit, valamint a képződő réz(II)komplexek összetételét és stabilitási állandóit pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás és spektrofluorimetriás mérésekkel. Együttműködés révén ESR mérésekkel is sikerült az eredményeinket alátámasztani.

[1] Creaven, B. *et al.*, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 101, 1108-1119 (2007)

[2] Krac, D., Creaven, B., Walsh, M., Devereux, M., Noble, A., *XXI. International Conference on Coordination and Bioinorganic Chemistry, Smolenice, Szlovákia, Book of Abstracts*, p. 50. (2007)

Vízoldható ezüst-porfirin komplexek vizsgálata

Harrach Gergely, V. évf. angol-kémia

Pannon Egyetem Bölcsészettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Horváth Ottó** egyetemi tanár

PE-MK Kémia Intézet, Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

Dr. Valicsek Zsolt egyetemi tanársegéd

PE-MK Kémia Intézet, Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A különböző természetes és mesterséges porfirinszármazékok különleges redoxi, koordinációs és fotokémiai tulajdonságaik miatt mind a természetben (klorofill, citokrómok, hemoglobin), mind az iparban (pl. katalizátorokként), és a gyógyászatban is fontos szerepet töltenek be. Elméleti szempontból is nagy jelentőséggel bírnak a metalloporfirinek, a porfirinek fémionokkal alkotott komplexei. Ezek a központi fémion méretétől függően lehetnek normál vagy SAT-típusúak, utóbbiak esetén a fémion az eredetileg sík vázon kívül helyezkedik el, és torzítja azt, a normál porfirinek esetében nem tapasztalt, sajátos egyensúlyi, fotofizikai és fotokémiai tulajdonságokra szert téve (ezért is merült fel többek között a metalloporfirinek alkalmazásának lehetősége a napenergia hasznosításában).

Jelen kutatás az ezüstionok vízoldható, anionos ligandummal (az 5,10,15,20-tetrakisz(4-szulfonátófenil)-porfirimmal, TPPS) képezett komplexei-nek előállításával és fotofizikai, fotokémiai, valamint egyensúlyi vizsgálatával foglalkozik. Az ezüst-porfirin komplexekkel folytatott korábbi tudományos igényű vizsgálatok eredményeinek teljes körű áttekintését, értékelését és ahol szükséges volt reprodukálását követően új kutatási irányok körvonalazódtak. Egyensúlyi megfontolások, mágneses szuszceptibilitási és abszorpciós színképi mérések, valamint a vegyületek kémiai reakciókban mutatott redoxi-tulajdonságainak ismeretében jól megalapozott javaslat született a vizsgált komplexek összetételére és a központi fémionjuk oxidációfokára vonatkozóan. Az alkalmazott oldószertől és a közeg pH-jától függően kinetikailag labilis, torzult vázú kétmagvú ezüst(I)-, vagy a normál körülmények között stabil egymagvú ezüst(II)-komplex képződik. Ezek kémiai és elektrokémiai módszerekkel átalakíthatók egymásba, sőt így még ezüst(III)-porfirin előállítására is mód nyílik. Az abszorpciós és emissziós titrálási színképsorozatok kiértékelésével becslést tehetünk a komplexképződési állandó nagyságára, valamint utóbbiból meghatározhatóvá válik a fluoreszcencia kvantumhatásfokának változása is.

Az Alzheimer-kórért felelős amiloid- β (1-16) fragmenseinek Ni(II)-, Cd(II)- és Co(II)-komplexei

Józsa Éva, V. évf. vegyész-kémia tanár szakos hallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Ősz Katalin egyetemi adjunktus

DE Fizikai Kémiai Tanszék

Munkánk során az amiloid- β fémion kötésért felelős szakaszának, az A β (1-16) peptidnek, valamint ezen szakasz kisebb fragmenseinek a komplexképződését tanulmányoztuk Co(II)-, Ni(II)- és Cd(II)-ionnal. Ezek a vizsgálatok fontosak az Alzheimer-kór kialakulásának, illetve terápiás lehetőségeinek a feltárásában, ugyanis az Alzheimer-kór és egyéb neurodegeneratív betegségek esetében is egyre nyilvánvalóbb különböző fémionok szerepe.

Vizsgálataink során négyféle fragmens, az A β (1-4), Ac-A β (1-6), A β (1-6) és A β (1-16)Y10A esetében végeztünk potenciometriás és spektroszkópiás méréseket.

Az N-terminális véget modellező három peptid esetében célunk volt egyrészt a cink(II)ionnal képződő, és igazoltan a betegség kialakulásában szerepet játszó komplexek szerkezetének az alátámasztása. A Co(II) és Cd(II)-ionnal képződő részecskék kis stabilitásúak, ami megnehezíti a szerkezeti vizsgálatukat. Emellett oldhatósági problémák is felléptek. Ennek ellenére sikerült megerősíteni, hogy a Co(II) esetében megtörténik nagyobb pH-n az amidnitrogének deprotonálódása.

Az N-terminális vég Ni(II)-komplexeinél sikerült igazolni, hogy az amidnitrogén deprotonálódása mind az amino-, mind a 6-os helyzetben lévő His imidazolról kezdődően végbemehet, azonban az előbbi sokkal nagyobb stabilitású.

Az A β (1-16)Y10A peptid, azaz az A β (1-42) teljes, fémmegkötésért felelős szakaszát modellező peptid esetében igazoltuk, hogy akár két fémion megkötésére és oldatban tartására is képes. Az első fémion az amino-terminális véghez kötődik, míg fémfelesleg esetében a második Ni(II) a szomszédos hisztidíneket tartalmazó részhez koordinálódik valamivel gyengébben, de még így is megakadályozva azt, hogy az oldatban szabad Ni(II) aqua-ion maradjon és ez nagyobb pH-nál hidrolizáljon. Mind a modellszámítások, mind a spektroszkópiás mérések azt mutatták, hogy ligandumfelesleg esetében (azaz olyan körülmények között, amelyek jól modellezik az emberi szervezetben lévő koncentrációviszonyokat) a Ni(II) mindössze 22 %-a kötődik a szomszédos hisztidinekhez, a többi (78 %) az amino-véghez.

Ezen eredmények remélhetőleg segítik az Alzheimer-kór biokémiájának mélyebb megértését, és így új gyógymódok és megelőző kezelések kidolgozását.

Kobalt-dikarbonil-nitrozil-(alkil-izonitril) komplexek elektronszerkezete

Károlyi Benedek, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Prof. Dr. Szepes László** egyetemi tanár

ELTE Kémia Intézet, Szervetlen Kémia Tanszék

Gengeliczki Zsolt Ph. D. hallgató

ELTE Kémia Intézet, Szervetlen Kémia Tanszék

Tudományos diákköri kutatómunkám során hét új kobaltorganikus vegyületet ($\text{Co}(\text{CO})_2(\text{NO})\text{CNR}$, $\text{R}=\text{Me}$, Et , ^iPr , ^tBu , ^iPe , ^iPr , CH_2SiMe_3) állítottam elő, felvettem és értelmeztem ultraibolya fotoelektron spektrumaikat.

A vegyületek előállításának célja az izonitril ligandumok tanulmányozása volt, különös tekintettel arra, hogy az alkillánc cseréje milyen hatással van a teljes komplex tulajdonságaira. A kapott spektrumok asszignációját elméleti számítások és más kísérleti spektrumok segítették. Az így nyert eredmények alapján tárgyalom az egyszerű alifás izonitril ligandumok elektronikus és szterikus hatását az alkillánc mérete és elágazásának függvényében.

Imidazol- és piridinyűrűt tartalmazó ligandumok VO(IV)-komplexei

Kiss Dóra, IV. évf. vegyészhallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

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

A vanádiumnak hatást tulajdonítanak a mangán anyagcseréjében, a csontképződés elősegítésében. Egyes vanádiumsóknek inzulinutánzó tulajdonságuk is van, komplexeiket emiatt széles körben vizsgálják.

Munkánk során az oxovanádium(IV) ion komplexképző sajátságait vizsgáltuk egy- vagy kétgyűrűs, aromás piridin- vagy imidazol-nitrogént tartalmazó szerves ligandumokkal. pH-potenciometriás és UV-látható spektroszkópiás módszerek segítségével meghatároztuk a képződött komplexek összetételét és stabilitási állandóit.

Az egy aromás gyűrűt tartalmazó ligandumok minden esetben nitrogén donoratomon keresztül koordinálnak a fémionhoz. pH-potenciometriásan mono- és biszkomplexek képződését lehetett kimutatni. A képződött komplexek kis stabilitásúak.

A vizsgált, bisz(pirid-2-il)-csoportot tartalmazó ligandumok savas tartományban a két aromás nitrogén donoratomon keresztül koordinálnak a fémionhoz, mono- és biszkomplexek képződése közben. A bisz(pirid-2-il)metán esetén kialakuló dimer szerkezeteket hidroxó-hidas asszociátumok kialakulásával írhatjuk le. A bisz(pirid-2-il)keton és bisz(pirid-2-il)metanol rendszerekben (N, O) koordináció valósul meg.

A két aromás gyűrűt tartalmazó ligandumok aminosav származékai közül a Gly-BIMA, Glu-BIMA, His-BIMA, His-BPMA vegyületeket vizsgáltuk. Vizsgálataink során azt tapasztaltuk, hogy savas tartományban kettő, illetve négy aromás nitrogén koordinálódásával mono- és biszkomplexek képződnek. A pH emelésével lejártszódik az amidnitrogén deprotonálódása, (NH₂, N⁻, N(ar)) koordinációjú komplexek képződnek.

Az eredményeket összegezve megállapítható, hogy VO(IV) hard-abb jellege miatt az aromás nitrogén donoratomok gyenge fémionmegkötő tulajdonságúak. A ligandumok egyéb oxigéntartalmú csoportjai is részt vehetnek a kötések kialakításában, ilyen esetekben nő a komplexek stabilitása. A kelátképző helyzetben található két aromás gyűrű kötődése a fémionhoz tovább növeli a kialakuló komplexek stabilitását. Ezzel megakadályozza a fémion hidrolízisét gyengén savas tartományban. Az aminosav származékok esetén a két heteroaromás gyűrű koordinálódása elősegíti az amid nitrogén deprotonálódását és koordinálódását.

Krómcsoportbeli fém–fém kötések vizsgálata fotoelektron- spektroszkópiával

Kiss Péter, IV. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Pongor Csaba István** doktorandusz
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék
Szepes László egyetemi tanár
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

A krómcsoportbeli vegyületek esetén gyakori, hogy a krómvegyület tulajdonságai jelentősen eltérnek a molibdén illetve volfrám analóg vegyület tulajdonságaitól. Ez a jelenség megfigyelhető a $[\text{CpM}(\text{CO})_3]_2$ összetételű komplexeknél is. A $[\text{CpCr}(\text{CO})_3]_2$ zöld színű, levegőre különösen érzékeny kristályos anyag, míg a $[\text{CpMo}(\text{CO})_3]_2$ és a $[\text{CpW}(\text{CO})_3]_2$ biborszíniék és levegőn korlátlan ideig eltartathatók. A különböző tulajdonságok a vegyületek elektronszerkezetének különbségével magyarázhatók. Munkánk célja az elektronszerkezet felderítése és a fém–fém kötések egymáshoz viszonyított erősségének meghatározása volt a vegyületek fotoelektron-spektrumának segítségével.

A fotoelektron-spektroszkópia az egyik leghasznosabb kísérleti módszer a vegyületek elektronszerkezetének vizsgálatában. A Koopmans-elv [1] segítségével az ionizációs energiákat Hartree-Fock pályae energiáknak tudjuk megfeleltetni, ami lehetővé teszi a fotoelektron-spektrumok kvantumkémiai számításokon alapuló asszignációját. Az utóbbi években hasonló összefüggést vezettek le a sűrűségfunkcionál módszerekkel kapott Kohn-Sham pályae energiák és az ionizációs energiák között [2].

TDK munkám a fent említett három vegyület előállításából, fotoelektron-spektrumok felvételéből és kiértékeléséből állt. Nagy molekulák fotoelektron-spektrumában az egyes ionizációs energiákhoz tartozó csúcsok átfednek, sávokat képeznek, ezen sávok dekonvolválása saját készítésű programmal történt. A spektrumokat Hartree-Fock, DFT és EOMIP-CCSD(2) szintű számítások segítségével asszignáltuk. A kísérleti ionizációs energiákból valamint a kvantumkémiai számítások eredményeiből meghatározható a fém–fém kötések egymáshoz viszonyított erőssége, valamint az elektronszerkezet alapján a stabilitásbeli különbség is magyarázható.

[1] Koopmans, T. *Physica* **1** (1934) 104

[2] Chong, D.P.; Gritsenko, O.V.; Baerends, E.J. *J. Chem. Phys.* **116** (2002) 1760

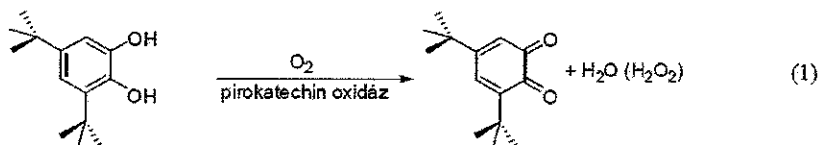
Pirokatechin oxidáz és kataláz enzim modelljének előállítása és vizsgálata

Kripli Balázs

Mérnöki Kar, Kémia Intézet, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

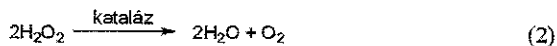
Témavezető: Dr. Speier Gábor

A pirokatechinek lebontását a természetben az oxidáz és oxigenáz enzimek végzik. A pirokatechin oxidáz a multiréz oxidázok csoportjába tartozó metalloenzim, amely a pirokatechinek kinonná történő oxidációjáért felelős (1).



Modellvegyületként egy $[(4\text{-Me-py-ind})_2\text{Cu}^{\text{II}}(\text{MeOH})(\mu\text{-OH})]\text{ClO}_4 \cdot \text{MeOH}$ összetételű, kétmagvú rézkomplexet állítottunk elő. A szerkezetét spektroszkópai módszerekkel (IR, UV-látható) és röntgendiffrakcióval határoztuk meg. Megállapítottuk, hogy az általunk előállított és jellemzett komplex oxidáz aktivitást mutat a 3,5-di-*tert*-butil-pirokatechin (3,5-dtbcatH₂) 3,5-di-*tert*-butil-1,2-benzokinonná (3,5-dtbq) történő oxidációja során, tehát a vizsgált reakció a pirokatechin oxidáz funkcionális modelljének tekinthető.

Az élő szervezetekben felhalmozódó hidrogén-peroxid bomlási folyamatai a sejtfalra nézve káros, reaktív oxigén származékokhoz (szuperoxid, hidroxilgyök stb.) vezethetnek. Ennek kiküszöbölésére az élő szervezetekben ún. kataláz enzimek szolgálnak, amelyek a hidrogén-peroxid vízzé és dioxigénné történő reakcióját katalizálják (2).



Kataláz modellként előállítottunk egy $[\text{MnII}\{(\text{bym})_2\text{-indH}\}\text{Cl}_2]$ -összetételű komplexet. Szerkezetét spektroszkópai (IR, UV-VIS) mérésekkel, illetve röntgendiffrakcióval igazoltuk. Vizsgáltuk az előállított komplex kataláz aktivitását és megállapítottuk, hogy az előállított komplex katalizálja a H₂O₂ vízzé, illetve dioxigénné való dizmutációját, tehát reakciói funkcionális kataláz modellnek tekinthető.

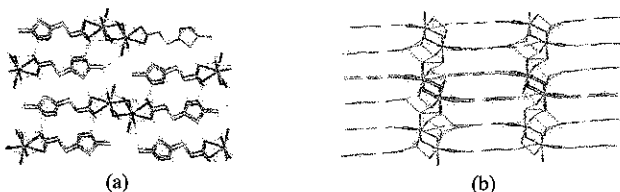
Új alkáliföldfém (3H-2-tioxo-1,3,4-tiadiazol-5-il)- tioacetátok előállítása, spektroszkópiai jellemzése és kristályszerkezete

Pascui Andrea Éva, mesteri képzés, TMSC

“Babeş-Bolyai” Tudományegyetem Kolozsvár, Kémia és Vegyésztechnológiai Kar

Témavezető: **Dr. Ing. Monica M. Venter**, docens
 “Babeş-Bolyai” Tudományegyetem Kolozsvár,
 Kémia és Vegyésztechnológiai Kar, Szervetlen Kémia Tanszék

A kutatócsoportunk célja Bismutiol I származékok, valamint ezek komplex vegyületeinek, koordinációs viselkedésének, illetve szupramolekuláris szerkezetének tanulmányozása. Az egyik ilyen heterociklikus vegyület a (3H-2-tioxo-1,3,4-tiadiazol-5-il)tioecetsav.¹ A komplexeket a ligandum mononátrium-sójának, illetve dinátrium-sójának alkáliföldfémek kloridjaival való reakciója során állítottuk elő, $[M(H_2O)_x(HL)_2]$, HL = $(C_2N_2HS_3CH_2COO)^-$, M = Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} ; $[M(H_2O)_xL]$, L = $(C_2N_2S_3CH_2COO)^{2-}$, M = Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} .² A vegyületek jellemzése fizika-kémiai módszerekkel, IR, Raman, illetve 1H és ^{13}C NMR spektroszkópiával történt. A molekulászerkezeteket egykristályokon végzett Röntgen diffrakcióval határoztuk meg. A Mg vegyület szerkezete só típusú, a Ca komplexben megfigyelhető a dimer szerkezet, a Sr és mind a monodeprotonált, mind a teljesen deprotonált ligandumot tartalmazó Ba komplex polimer szerkezetű. A ligandum minden esetben a karboxil csoportról veszítette el protonját, a Ca, Sr és Ba komplexek esetében mégis csak az egyik karboxil csoport képzett kelátgyűrűt, amíg a Mg esetében egyik sem a szerkezetben jelen levő karboxil csoportok közül. A komplexek szilárd fázisban, a hidrogénkötések, illetve a S...S kölcsönhatásoknak köszönhetően, háromdimenziós szupramolekuláris szerkezetet hoztak létre (pl. 1. ábra).



1. ábra. Háromdimenziós szupramolekuláris szerkezet: (a) frontális nézet, (b) oldalnézet.

- [1] V. Bercean, C. Crainic, I. Haiduc, M.F. Mahon, K. C. Molloy, M.M. Venter si P.J. Wilson, *J. Chem. Soc., Dalton Trans*, 1036, 2002
 [2] M.M. Venter, A. Pascui, V.N. Bercean, S. Cîntă Pînzaru, *Studia Univ. Babeş-Bolyai, Ser. Chem., LI(1)*, 55, 2007

A diimin ligandum konstitúciós szerkezetének hatása a $[\text{Ru}(\text{diimin})(\text{CN})_4]^{2-}$ típusú komplex fotofizikai folyamataira

Szabó Péter, III. évf. kémia BSc.

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kovács Margit**, egyetemi adjunktus

Dr. Horváth Attila, egyetemi tanár

Általános és Szervetlen Kémiai Intézeti Tanszék

A fotokémia az elmúlt harminc évben jelentős fejlődésen ment át, és ez alatt a kutatások egyik jelentős célpontjává váltak a ruténium(II) diimin származékokkal alkotott komplex vegyületei. A kutatók érdeklődése annak köszönhető, hogy e komplexek több alkalmazási terület szempontjából is igen kedvező fotofizikai és fotokémiai tulajdonságokkal rendelkeznek: kitüntetett stabilitás, nagy kvantumhatásfokú emisszió, erős fényelnyelés a látható fény tartományában, a gerjesztett ($^3\text{MLCT}$) állapotnak köszönhető kedvező redoxi sajátság és relatíve hosszú élettartam. Az elnyelési és a kisugárzási színeképük erősen oldószerfüggő, ami a fotofizikai tulajdonságaik finomhangolását teszi lehetővé, hidrogén-vagy cianid-hidak révén beépíthetők szupramolekuláris rendszerekbe is. Ezen sajátságoknak köszönhetően mára már számos gyakorlati alkalmazásuk valósult meg: molekuláris érzékelők, orvosi diagnosztika és terápia, lumineszcenciás szenzorok és a napenergia hasznosító rendszerek.

Munkám során előállítottam $[\text{Ru}(\text{LL})(\text{CN})_4]^{2-}$ vegyületeket, ahol LL= 5,5'-dimetil-2,2'-bipiridil; 6,6'-dimetil-2,2'-bipiridil; 4-metil-1,10'-fenantrolin. Műtán spektroszkópai módszerekkel (NMR, UV-VIS) megbizonyosodtam tisztaságukról, elvégeztem fotofizikai jellemzésüket. Felvettem folytonos bevilágítás mellett a gerjesztési, az emissziós és az elnyelési színeképeiket UV és látható tartományban. Lézer villanófény fotolízis vizsgálatukat elvégeztem, melynek során meghatároztam a gerjesztett állapotok ($^3\text{MLCT}$) élettartamát. Kimértem az élettartamok hőmérsékletfüggését, hogy megállapíthassam az egyes fotofizikai folyamatok sebességi együtthatóit. Végül pedig 77 Kelvinen is felvettem a gerjesztési és kisugárzási színeképeket, hogy ezeknek elvégezhessem a Franck-Condon analízisét.

A mérési eredmények egy része a szakirodalom alapján várt tendenciát mutatja, azonban egyes fotofizikai sajátságok jelentősen eltérnek. Munkám során megpróbálom kimutatni, miként teremt kapcsolatot a ligandum konstitúciós szerkezete az észlelt fotofizikai tulajdonságokkal.

Peptidhidroxámsavak vegyes ligandumú komplexei

Szőcs Béla, V. éves vegyész

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Buglyó Péter egyetemi docens

DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A peptidhidroxámsavak olyan fontos biomolekulák, amelyek hidroxámsavcsoportja erős kölcsönhatásra képes különböző szerkezetbeli fémionokkal - gátolva például metalloenzimek működését - míg peptidláncuk a molekuláris felismerésben játszhat szerepet. Ezen vegyületek biológiai rendszerekben történő fémionmegkötését a jelenlevő egyéb ligandumok is alapvetően befolyásolhatják.

Tudományos diákköri munkám során pH-potenciometriás és UV-látható spektrofotometriás módszerrel megvizsgáltam két peptidhidroxámsav, a HAla-Ala-NHOH és a HAla-Ala-N(Me)OH réz(II)ion-megkötését különböző [N,N], [N,O] és [O,O] koordinációra képes kismolekulák jelenlétében, amelyekkel a szerkezetbeli, eltérő donoratomokat tartalmazó ligandumokat kívántuk modellezni. B ligandumként 2,2'-dipiridilt, glicint, és tiron választottunk. pH-potenciometriás módszerrel meghatároztam az egyes rendszerekben képződő vegyes ligandumú komplexek összetételét és stabilitási szorzat értékeiket és az UV-látható spektrofotometriás mérési eredmények alapján javaslatot tettem azok legvalószínűbb oldatbeli szerkezetére. A HAla-Ala-N(CH₃)OH szekunder peptidhidroxámsavat a hidroxamát nitrogénhez kapcsolódó szubsztituens hatásának tanulmányozására vontuk be vizsgálatainkba.

Megállapítottuk, hogy az [O,O] koordinációra képes tironnal nem képződik vegyes ligandumú komplex. Ezt úgy értelmeztük, hogy a peptidhidroxámsav a Cu(II)-vel képződő stabilis komplexekben [NH₂, N_{amid}, N_{hidroxamát}] kötésmóddal három helyet foglal el a fémion ekvatoriális koordinációs szférájában, így a tiron már csak axiális-ekvatoriális kapcsolódással kötődhet a fémionhoz, ami pedig a merev szerkezetű tiron esetén feltehetően nem kedvezményezett.

Az [N,O] koordinációval kötődő glicinnel [CuABH₁] összetételű részecske képződését detektáltuk. Az elektrongerjesztési spektrum *d-d* átmenethez tartozó sávjának helye alapján [NH₂, N_{amid}, N_{hidroxamát}, NH_{2(glicin)}] kötésmódot valószínűsítettünk a vegyeskomplexben a glicin karboxilátcsoportjának axiális koordinációjával.

Az [N,N] donor 2,2'-dipiridillel tapasztaltuk a legnagyobb mennyiségű vegyes komplex képződését mindkét peptidhidroxámsavval. Eredményeink azt valószínűsítik, hogy a domináns komplexek közül a [CuABH]-ban hidroxamát [O,O] és dipiridil [N,N] koordináció valósul meg, míg a [CuABH₁] a glicinéhez hasonló, [NH₂, N_{amid}, N_{hidroxamát}, N_(bipiridil)] kötésmódú. A [CuABH]-kra számolható ΔlogK értékek a vegyes ligandumú komplexek kedvezményezett képződését támasztják alá.

Egy bakteriális Cu,Zn-SOD enzim N-terminális fémkötő fragmensének kölcsönhatása Cu²⁺- és Zn²⁺ ionokkal

Szunyogh Dániel, III. évf. kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Gajda Tamás egyetemi tanár
 Dr. Janesó Attila egyetemi adjunktus
 SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A Cu,Zn-szuperoxid-dismutáz enzimek (Cu,Zn-SOD) a szuperoxid anion oxigénné és hidrogénperoxiddá történő diszproporcióját katalizálják, s így az élő szervezetek káros oxidatív hatások elleni védekező mechanizmusának fontos eszközei. Néhány Gram-negatív baktériumból izolálható Cu,Zn-SOD N-terminális része erős fémkötő sajátsággal bír, így fontos szerepe van az aktív centrum fémionjainak felvételeiben. Csoportunk korábban részletesen vizsgálta a *H. ducreyi* Cu,Zn-SOD N-terminális szakaszának fémkötő sajátságait, mely potenciális fémkötő-helyként hisztidin- és metionin-gazdag szakaszokat is tartalmaz tartalmaz [1], lehetővé téve a Zn²⁺, Cu²⁺, Cu⁺ fémionok felvételét is. Jelen dolgozat tárgya az *A. pleuropneumoniae*-ből izolálható enzim N-terminális fragmensének tanulmányozása, amely csak egy hisztidinben gazdag szakaszt tartalmaz.

A munka során előállítottuk az *A. pleuropneumoniae* Cu,Zn-SOD N-terminális fragmensén alapuló, C-terminálisan védett HADHDHKK-NH₂ oktapeptidet. Oldategyesúlyi (pH-potenciometria) és szerkezetvizsgáló módszerek (UV-Vis-, CD- és NMR-spektroszkópia) alkalmazásával megvizsgáltuk a ligandum kölcsönhatását Cu²⁺- illetve Zn²⁺ ionokkal. Meghatároztuk a különböző pH-n és fém-ligandum arány mellett képződő részecskék összetételét és kvantitatív módon jellemeztük a fragmens fémkötő-sajátságát (stabilitási állandók ill. K_D értékek meghatározása). A domináns részecskék esetében javaslatot tettünk a komplexek oldatbeli szerkezetére. Fiziológias pH-n (pH = 7.4) mind Cu²⁺-, mind Zn²⁺ ionok esetében az 1:1 fém-ligandum arányú oldatokban egy MH₂L²⁺ (M = fémion) összetételű komplex a domináns részecske, melyben a fémionhoz az N-terminális aminosocsoport mellett kizárólag oldallánci donorcsoportok koordinálódnak. Az említett körülmények mellett számolható K_D értékek (K_{D,Cu} = 4,6×10⁻¹³ M, K_{D,Zn} = 4,8×10⁻⁷ M) alapján a peptid extrém erősen köti a Cu²⁺ iont, s jóval gyengébben a Zn²⁺ iont, így feltételezhető, hogy a vizsgált fragmens elsősorban a Cu²⁺ felvételében játszik szerepet.

[1] Paksi, Z., Jancsó, A., Pacello, F., Nagy, N., Battistoni, A., Gajda, T., *J. Inorg. Biochem.*, 102 (9), 1700-1710 (2008)

A prion protein peptidfragmensei és a nikkell(II)ionok közötti kompleképződési folyamatok vizsgálata

Turi Ildikó, IV. évf. vegyész

DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Sóvágó Imre** egyetemi tanár
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Olyan neurodegeneratív betegségek kialakulásában, mint például a Creutzfeldt-Jakob, a sűrűlvágy a kergemarhakór, a megváltozott szerkezetű prion proteint tartják felelősnek. A normál prion protein (PrP^C) tényleges biológiai szerepe, valamint a megváltozott kóros forma (PrP^{Sc}) kialakulásának mechanizmusa még nem tisztázott, viszont az átmenetifém-ionoknak potenciális szerepet tulajdonítanak ezen a téren.

Munkám során a HuPrP(76-114) és a nikkell(II)ionok közötti komplexképződési folyamatot tanulmányoztam. A ligandum négy hisztidint tartalmaz, kettőt az oktarepeat tartományban kettőt pedig ezen kívül. A vizsgálatok során potenciometrikus titrálást, spektrofotometriát, cirkuláris dikroizmus és ¹H NMR módszereket alkalmaztam. Összehasonlítás céljából két az ismétlődő tartományon kívüli hisztidinek körüli aminosav szekvenciát modellező tetrapeptidet vizsgáltunk.

A [NiAH₄] makrokelát képződése a hisztidin imidazol nitrogénjein keresztül következik be, és kis stabilitása ellenére fiziológiás pH-ra a fémionok ~80%-a komplexben kötött. Ezt követően elkezdődik az amid nitrogének deprotonálódása és koordinációja, amely során mono- és dinukleáris komplexek képződnek. Ekvimoláris oldatban az egymagvú komplexek, 2:1 fém:ligandum arány esetén pedig a kétmagvú komplexek dominálnak. 3:1 és 4:1 arány esetén is megtörténik a komplex képződés, de a ligandum nem képes az összes fémiont komplex formában tartani, így azok hidrolizálnak.

Mivel diamágneses nikkell(II) komplex képződött, lehetőségünk volt a rendszer ¹H NMR spektrumának felvételére, amellyel bizonyítani tudtuk a hisztidin oldalláncok koordinálódását.

A spektrofotometriás vizsgálatok alapján megállapíthatjuk, hogy a [NiAH₄] makrokelát oktaéderez szerkezetű, valamint az amid nitrogének deprotonálódásával párhuzamosan sárga színű síknégyzetes komplex képződik. Az abszorpció maximuma nem változik a pH emelkedésével, tehát a kötőhelyek és a koordinációs geometria nem változik a pH-val, amely a kooperatív deprotonálódás következménye.

A prion proteinfragmens CD spektrumait összevetve a tetrapeptidekével egyértelműen kiderült, hogy a HuPrP(76-114) fragmens nikkell(II) komplexében a 96-os hisztidin a preferált fémkötőhely.

A ColE7 metallonukleáz-enzim HNH motívumának tulajdonságai

Várdai Attila, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi Kar

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

Jelen tudományos diákköri dolgozat az SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékén folytatott bioszervetlen kémiai tárgyú kutatások keretén belül készült. Ezen kutatások egyik célja mesterséges specifikus metallonukleáz-enzimek előállítása. Az alkalmazott stratégia szerint egy ilyen mesterséges enzim előállítható két egymástól jól elkülöníthető doménből: (i) egy szubsztrátfelismerő helyből és egy (ii) nonspecifikus katalitikus helyből.

A mesterséges enzimekben a szubsztrátfelismerő hely lehet egy specifikusan kötő fehérje, de lehet nemfehérje-típusú alkotórész is, mint pl. egy oligonukleotid, vagy egy peptid-nukleinsav oligomer. A fehérje-típusú felismerőhelynek megvan azaz előnye, hogy a molekuláris biológia eszközeivel könnyedén hozzáfűzhető egy szintén fehérje-típusú nonspecifikus aktív központhoz, amely ezáltal specifikussá válik.

A természetes nukleáz-enzimek aktív központjában általában valamilyen fémion (Zn^{2+} , Mg^{2+}) található, mely az enzimefehérje speciális aminosavaihoz kapcsolódik (pl. hisztidin, cisztein). Az általunk kiválasztott enzim katalitikus helye alapján az ún. HNH nukleáz-enzimek közé tartozik, amelyek nevüket a számos vizsgált élőlény enzimeiben fellelhető hisztidin(H)-aszparagin(N)-hisztidin(H) aminosavakat tartalmazó motívumról kapták. Az aktív központjukban Zn^{2+} -ion található.

Munkánk során az *E.coli* baktérium colicin E7 nevű nonspecifikus nukleáz enzimjéből származó HNH motívumot próbáltuk meg előállítani. E motívumot 42 aminosav alkotja amely szerkezetét tekintve kettő β -redőből és egy α -hélixből áll. A kódoló DNS gént PCR-rel sokszorozítottunk, majd *E. coli* baktériumok segítségével fehérjét termeltettünk belőle. A 42 tagú fehérje kifejezése sikertelen volt, ezért egy ubikvitin nevű fehérjével fúzionáltatva próbálkoztunk újra. Ezen kísérlet sikeresnek bizonyult. A kifejezés körülményeit optimalizáltuk, hogy nagy mennyiségben termelhesük a fehérjét. Tisztítását preparatív kromatográfia és gélzsűrés kombinációjával végeztük. A CD-spektroszkópiás konformációs analízis lehetőséget nyújt mind a tiszta fehérje szerkezetének, mind a Zn^{2+} -ionnal történő kötődés hatására lejátszódó szerkezetváltozás követésére különböző körülmények között.

TPEN származékok, mint potenciális Zn(II)- és Cu(II)-kelátorok az Alzheimer-kór gyógyításában

Zsigó Éva, I. évfolyam kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Kiss Tamás tanszékvezető egyetemi tanár

Károlyné Dr. Lakatos Andrea tudományos munkatárs

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A fémionok szerepének vizsgálata az Alzheimer-kór kialakulásában akkor kezdődött, amikor az AD betegek agyának *post-mortem* vizsgálata során kimutatták, hogy a Zn(II), Cu(II), Fe(III) és Al(III) jelentős mennyiségben fordulnak elő az amiloid plakkokban. Számos kísérlet bizonyította, hogy ezek a fémionok képesek indukálni vagy gyorsítani a β -amilod ($A\beta$) aggregációját *in vivo* és az $A\beta$ peptidben specifikusan Zn(II) és Cu(II) kötőhelyeket azonosítottak. Kimutatták továbbá, hogy fémkelátorok lassítják az $A\beta$ aggregációját, így merült fel a kelátterápia, mint lehetőség az Alzheimer-kór gyógyításában. A dezferrioxamin, mint erős Fe(III)-kötő tulajdonságú molekula enyhíti az Alzheimer-kór klinikai tüneteit. Újabbban egy Zn(II) és Cu(II)-kötő tulajdonságú antibiotikumról, a Clioquinolról mutatták ki, hogy javítja a betegek mentális állapotát, viszont számos mellékhatással rendelkezik. Ezért új, jobb tulajdonsággal rendelkező kelátormolekulák felkutatása ma is aktuális feladat.

Munkánk során előállítottunk és vizsgáltunk Zn(II)- valamint Cu(II)-kötő képességük alapján két TPEN {N,N,N',N'-Tetrakis(2-piridilmetil)etiléndiamin} származékot (ENDIP és DMAP), melyek tulajdonképpen a TPEN molekula fél és negyed részei. Az ENDIP négy (2 aromás és 2 amin), míg a DMAP két (1 aromás és 1 amin) N-donorcsoportot tartalmaz. Potenciometria, NMR-spektroszkópia és UV/Vis spektrofotometria alkalmazásával meghatároztuk a fém-ligandum rendszerekben képződő komplexek összetételét, szerkezetét és stabilitását. Az ENDIP fiziológias pH-n 1:1 összetételű komplexet képez mind a cinkkel, mind pedig a rézzel, míg a DMAP-val ligandumfelesleg alkalmazása esetén ML_2 részecskéket is ki tudunk mutatni mindkét rendszerben.

A ligandumoknak az $A\beta$ peptidhez viszonyított Zn(II)- és Cu(II)-kötőképességét floureszcenciás módszerrel határoztuk meg. A mérések azt mutatták, hogy a ligandumok képesek az amiloid aggregátumokból kivonni a fémionokat. A ligandumokon végzett toxicitás vizsgálatok azt mutatták, hogy 50 μ M koncentrációig tolerálhatóak a sejtek számára.

Környezeti kémia és Környezettechnológia tagozat

Biohidrogén előállítása és tisztítása

Bakonyi Péter, V. éves környezetmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Nemestóthy Nándor, tanszéki mérnök

Bélafiné Dr. Bakó Katalin, tudományos főmunkatárs

PE, Műszaki Kémiai Kutató Intézet

Az emberiség manapság folyamatosan növekvő energiaszükségletét legnagyobb részt a nem megújuló, fosszilis energiahordozókból elégíti ki, amelynek hatására ezen készletek nagysága folyamatosan csökken és e mellett nagy környezetszennyezést is von maga után. Ebből kifolyólag egyre inkább teret nyernek az ún. alternatív (megújuló) energiaforrások. Ezek közé tartozik többek között a biohidrogén is, mely a jövő generációk egyik ígéretes energiaforrásának tekinthető.

Munkám első részében fermentációs kísérleteket végeztem biohidrogén előállítása céljából, amihez a Szegedi Tudományegyetem által biztosított *Escherichia coli* baktérium törzset (XL-BLUE) alkalmaztam. Ez a mikroorganizmus a benne található enzimrendszerek segítségével (bio)hidrogén termelésére képes. A kísérletek során változtattuk a körülményeket (táptalaj összetétel, gáztér összetétel, stb.) a minél nagyobb mértékű biohidrogén előállítás érdekében.

A kísérletek második felében célom az volt, hogy a keletkezett gázt, melynek összetételében 3 komponens a meghatározó (hidrogén, nitrogén és szén-dioxid), valamilyen módon elválasszam egymástól. Az elválasztás a hidrogén, mint energiaforrás későbbi felhasználása érdekében fontos. Az elválasztáshoz több lehetőséget vizsgáltam, melyek közül a membrános gázszeparáció tűnt ígéretes megoldásnak. A munka során egy gázszeparációs membrán modul tesztelését végeztem el. A kísérleteket a keletkezett gázelegyre jellemző tiszta gázokkal (N_2 , CO_2 , H_2) végeztem, s meghatároztam az adott gázokra jellemző, a vizsgált membránra vonatkozó fluxus és (elméleti) szelektivitás értékeket. A biohidrogén fermentáció és a membrános gázszeparáció integrálásával a tüzelőanyag-cellákban közvetlenül felhasználható minőségű biohidrogén előállítása a cél.

Kondenzált gyűrűs komponensek oxidatív átalakítása mezopórusos katalizátorokon

Bangó Adrienn V. évf. környezettudományi szakos hallgató

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

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

A „zöldkémia” alapelvei között nagy hangsúllyal szerepel a szelektivitás, ami a szerves kémiai reakciókban katalizátorok alkalmazásával érhető el, de közel ekkora jelentőséggel bír a környezetbarát reagensek használata is. Ezeket az elveket lehet érvényesíteni a nehezen oxidálható szerves komponensek hidrogén-peroxiddal megvalósított katalitikus oxidációjában, mivel a H_2O_2 bomlástermékei: a víz és az oxigén valóban környezetbarátnak tekinthetők.

A kondenzált gyűrűs vegyületek (naftalin, tetralin, dekalin) oxidációjával értékes termékek (naftolok, tetralon, stb.) állíthatók elő, azonban megfelelő pórusméretű katalizátor szükséges a reakció megvalósításához. Az utóbbi évtizedben sikeresen alkalmazzák a mezopórusos katalizátorokat (megfelelő aktív centrum bevitelével) hasonló reakciókban, ezért tartottuk célszerűnek vizsgálni aktivitásukat ezekben a folyamatokban is.

Az izomorf szubsztitúcióval módosított MCM-41 és SBA-15 típusú katalizátorokat (Si-, Ti-, Fe- és Cr-MCM41, illetve Fe- és Ti-SBA15) a szintézist követően röntgendiffraktometriás, nitrogén-adszorpciós és TEM módszerekkel jellemeztem. A három kondenzált gyűrűs vegyület oxidációját ultrahangos keveréssel, 80 °C hőmérsékleten végeztem 1:1 reaktság:H₂O₂ mólarány alkalmazásával, metanol (protikus) és acetonitril (aprotikus) oldószerekben, az előbb felsorolt katalizátorok jelenlétében. A reakcióelegyek analízisét gázkromatográfiás úton végeztem.

A mezopórusos katalizátorok aktívabbak, mint a kis molekulák oxidációjában hatásos Ti-ZSM5, azaz nem lép föl diffúziógtátlás. A reaktságok közül az aromás szerkezetű naftalint lehet a legkisebb konverzióval átalakítani az összes vizsgált katalizátoron. Ebben a reakcióban hidroxilezés lejátszódását is tapasztaltam (termékek 1- és 2-naftol), ami utat jelenthet a direkt hidroxilezés gyakorlati megvalósításához.

Tetralin és dekalin esetén - jelentősen nagyobb konverzió mellett - a termékspektrum szélesebb, de kemoszelektív reakció is lejátszódik, ami az ipari szempontból jelentős 1-tetralon közel 40 %-os szelektivitásában nyilvánult meg. Ez bizonyítja a reakció hatékonyságát, a „zöldkémiai” elvek megvalósulását. Az adott reakciókban legaktívabbnak a Cr-MCM41 mintákat találtam, a további vizsgálatokat erre összpontosítjuk.

Szénsalak okozta sugárterhelés ajkai lakásokban

Dukán Katalin, V. évf. környezetmérnök

PE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Somlai János egyetemi docens

PE Radiokémia és Radioökológiai Intézet

Napjainkban egyre nagyobb figyelem fordul a természetes eredetű radionuklidoktól származó sugárterhelés vizsgálatára, csökkentési lehetőségeinek kidolgozására. Az épület a külső sugárzásokat ugyan részben leárnyékolja, ugyanakkor az építőanyag radionuklid koncentrációja megnöveli azt. Így az épületekben a gamma-dózisteljesítmény általában magasabb (világátlag 84 nGy/h), mint a szabadban (59 nGy/h). Nem megfelelő anyagok felhasználása esetén azonban az átlag akár tízszerese is mérhető. Ennek egyik forrás lehet a magas radionuklid-koncentrációjú szenek eltűzése során keletkezett salak építkezéseken történő felhasználása.

Hazánkban, a Mecsekben, illetve a Balatonfelvidéktől Tatabányáig húzódó területen - különösen Ajka és Tatabánya környékén bányászott szenek természetes eredetű radioaktivitása - ezen belül ^{226}Ra -koncentrációja - többnyire jelentősen (20 - 100 szorosán) meghaladja a világátlagot. A radionuklidok az eltűzés során, a salakban, pernyében dúsulnak, s így a ^{226}Ra -koncentráció az építőanyagokra jellemző 50 Bq/kg-os értéket egy-két nagyságrenddel is meghaladhatja.

Munkám során, Ajkán közel 100 lakásban végeztem sugárméréseket. Valamennyi lakásban megvizsgáltam a gamma dózisteljesítmény a hely, illetve a magasság függvényében. Ahol lehetséges volt ott mértem a beépített salak radionuklid koncentrációját HPGE félvezető detektor segítségével. Egy éven keresztül 80 ajkai lakásban, negyedéves ciklusokban és 20 esetben havi rendszerességgel határoztam meg az átlagos radonkoncentrációt szilárdtest nyomdetektorokkal. A kapott eredményekből a lakosság éves sugárterhelését számoltam.

Az eredmények azt mutatják, hogy számos lakás radonkoncentrációja és gamma dózis értékei meghaladják az EU által javasolt határértéket. Egyes esetekben a mért radon koncentrációja többszöröse az Európa Unió ajánlásnak, a gamma-dózisteljesítmény értékei pedig a világátlag 5-8-szorosa is lehet.

Az itt élő lakosság sugárterhelése megközelítheti a sugárveszélyes munkahelyeken dolgozóakra vonatkozó éves dóziskorlátokat.

A lakosság sugárterhelésének vizsgálata a nádasdladányi épületekben

Geosits Szilvia, V. évf. környezetmérnök
Pannon Egyetem, Mémnöki Kar

Témavezető: **Somlai János dr.** egyetemi docens
Pannon Egyetem, Radiokémia és Radioökológiai Intézet

Az utóbbi évtizedekben a radon egészségügyi hatása a figyelem központjába került, ezzel együtt radon mérési kampányok indultak el szerte a világban, így Magyarországon is.

Munkám során Nádasdladány lakóépületeiben mértem fel a természetes eredetű radontól, illetve az építőanyagok által kibocsátott gamma-sugárzástól származó sugárterhelést. A község 40 lakóépületébe helyeztem ki nyomdetektorokat. Mivel a radon koncentrációt több tényező is jelentős mértékben befolyásolja, az éves átlag minél pontosabb meghatározása céljából egy éven át végeztem a méréseket. Az évszakos változás vizsgálata miatt a detektorokat három havonta cseréltem. Mivel a lakótéri radon koncentráció nagymértékben függ az épület szerkezetétől és az építőanyagtól, ezért 3 különböző épülecsoportra terjed ki a vizsgálatom: 15 db újépítésű, 15 db régi téglából épült és 10 db vályogtéglából épült házat vizsgáltam. Az eredményekből jól látszik, hogy a legmagasabb radon koncentráció a vályogtéglából épült házakban mérhető. Mivel az építkezéseken felhasznált vályog, illetve téglák készítésénél is ugyan arról a helyről származó agyagot használták, ez a különbség valószínű azzal magyarázható, hogy a téglákban a kiegészítés során a pórusok záródnak, ezáltal a radon emanáció kisebb lesz, mint a hőkezelés nélküli vályogtéglák esetében.

A vizsgálatok eredményeként megállapítható, hogy néhány esetben a világlátlagot jelentősen meghaladó radonkoncentráció várható, de az éves radon koncentráció a vizsgált házak egyikében sem haladja meg az EU által javasolt cselekvési szintet (400 Bq/m^3) de több esetben meghaladja az egyes EU országokba bevezetett határértéket (200 Bq/m^3).

Félvezető detektoros gammaspektrometriai módszerrel vizsgáltam az agyag és téglaminták rádium koncentrációját, ami nem mutatott kiugró értékeket.

A lakóépületekben mért gamma-dózisteljesítmény értékek néhány esetben a világlátlag kétszeresét is meghaladták, de az ettől származó sugárterhelés nem jelentős.

Az Iglai Gyógyfürdő radiológiai vizsgálata

Jánoki Nóra, V. évf. környezetmérnök

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Somlai János** egyetemi docens

Pannon Egyetem, Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

Napjainkban a különböző panaszok enyhítésére, az egészség megóvása érdekében, valamint egyszerűen csak relaxációs céllal is egyre népszerűbbé váltak a gyógyfürdők. A mélységi vizek (termálvíz, gyógyvíz) felszínre jutva jelentős mennyiségű radioizotópot hozhatnak magukkal. A termál- és gyógyvizekben való fürdés, valamint a különböző gyógykezelések során ezek a radioizotópok a szervezetbe kerülhetnek, és így belső sugárterhelést okozhatnak. Ez nem is inkább a fürdőzők esetében, hanem az ott dolgozóknál jelenthet komolyabb sugárterhelést.

A vizsgálataim elsősorban a ^{222}Rn , és a ^{226}Ra mérésére terjedtek ki. A radon a vízből kiáramlik, és a zárt terekben feldúsul. A fürdővízben oldott állapotban lévő radon a bőrön, a levegőben lévő a belégzés útján kerül a szervezetbe. A szervezetben viszonylag rövid ideig tartózkodik, kb. 50%-a 15-30 perc alatt kilégzés és izzadás során eltávozik. A rövid életű bomlástermékei főleg a bőrben és tüdőben lerakódnak. Mivel a radon és bomlástermékei nagymértékben hozzájárulnak a tüdőrák kialakulásához, valamint a rádium egy csontkereső izotóp és így a csontdaganatos megbetegedések számát növeli, ezért fontos szerepet kap ennek a két radioizotópnak a mérése.

Munkám során az Iglai Gyógyfürdő különböző medencéiből, forrásaiból származó vízminták radon és rádium tartalmát mértem, szcintillációs detektorral. A levegőben lévő radon koncentrációjának mérését szilárdtest nyomdetektoros módszerrel végeztem. Meghatároztam a vizek összes alfa és béta aktivitását is. Az eredmények azt mutatják, hogy míg a vízminták radon tartalma nem haladja meg a rá vonatkozó megengedett határértéket, addig több vízminta rádium tartalma az ivóvizekre vonatkozó megengedett határérték felett van, ide tartozik az a gyógyvíz is, amelyet ivókúráként alkalmaznak.

Az Ér forrásvidékének hidrokémiai vizsgálata

Kalmár József, V. évf. vegyészhallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: Dr. Braun Mihály egyetemi adjunktus
Dr. Fábíán István egyetemi tanár
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az Ér forrásvidéke a rendkívül változatos természetföldrajzú erdélyi kistérségben, az Érmelléken található. A terület fő vízgyűjtője az Ér-patak, amit nagyon sok kis vízhozamú patak táplál. Mivel az itt található települések nagy részén nincs kiépített szennyvízgyűjtő hálózat, sőt valahol még ivóvízhálózat sem, a lakosok gyakran közvetlenül a felszíni vizekbe kötik emésztőiket, más esetekben a patakokból nyerneket vizet. Ezért fontos a kistérségben található felszíni vizek minőségének vizsgálata.

A kis vízhozamú patakok vízösszetételét főként a források geológia környezete határozza meg; üledékük elemösszetétele pedig a mintavételi területre jellemző alapkőzet függvénye. Mindazonáltal kis vízhozamú patakok esetén mind a vízminták, mind a felszíni üledékminták összetételére jelentős hatással lehetnek antropogén tényezők. [1] A környezetanalitikai vizsgálat során kapott összetételi eredményeket a mintavételi terület földrajzi jellemzőivel vetettük össze.

22 helyszínen gyűjtöttünk a felszíni vízfolyásokból víz- és 0 – 10 cm mélységből üledékmintát. A minták kémiai analízisét a hatályos magyar szabványoknak megfelelően hajtottuk végre. A kapott összetételi adatok kiértékelése főkomponens-analízis és klaszteranalízis segítségével történt.

A vízminták egy részének összetétele nagymértékű antropogén szennyezésről tanúskodik. Ezeknek a vízmintáknak a tárgyalása során ismertettük a szennyezések lehetséges forrásait. A mintavételi terület patakjainak nagyobb része tiszta vizű. A térség geológiai felépítésével magyarázható a vízminták összetételének analízise során kapott klaszterstruktúra.

A felszíni üledékminták elemösszetétele egységesebb a vízmintáknál. Ez azt jelenti, hogy az antropogén szennyezők akkumulációja a mintavételi helyeken csekély. Szembetűnő a kapcsolat az üledékminták elemösszetétele és a mintavételi helyek alapkőzetének fajtája között. Ezt figyelembe véve magyarázható az üledékminták összetételére kapott klaszterstruktúra.

[1] Enguix Gonzalez, A.; Ternero Rodriguez, M.; Jiménez Sánchez, J. C.; Fernández Espinosa, A. J.; Barragán de la Rosa, F. J. *Water, Air, and Soil Pollution* **2000**, *121*, 11–29.

Toxikus fémekkel szennyezett talajok stabilizációja kisméretű szabadföldi kísérletek

Klebercz Orsolya, V. évf.

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: Feigl Viktória Ph.D. hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszertudományi Tanszék

Dr. Gruiz Katalin egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszertudományi Tanszék

Világszerte problémát jelent a bányászati tevékenységből származó nagy mennyiségű, a környezetre komoly kockázatot jelentő salak- és meddőanyag megfelelő elhelyezése. Bár manapság erre már szigorú előírások vonatkoznak, a múltból rengeteg olyan toxikus fémekkel szennyezett, rekultiválatlan terület maradt ránk, amelyek folyamatos veszélyforrást jelentenek az élő környezetre, azon belül az emberre is. Ezeknek a felszámolása a mi felelősségünk.

A kémiaival kombinált fitostabilizáció egy jelenleg még kevésbé ismert, olcsó és környezetkímélő remediációs technológia, amely megoldást nyújthat a környezeti kockázat csökkentésére. Az Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék és a TAKI Gyöngyösoroszi-ban végzett kísérleteinek célja egy olyan, ipari méretekben is alkalmazható módszer kifejlesztése, mely stabilizálószerként erdművi pernyét alkalmaz a toxikus fémekkel szennyezett bányászati meddőanyag in situ remediációjára.

A munkám során a Tanszék korábbi kutatásaihoz kapcsolódva a gyöngyösoroszi bányaterületen folyó kisméretű szabadföldi kísérletek egy éven keresztül tartó monitorozásával vizsgáltam a módszer hatását a kezelni kívánt meddőanyagra. A területről vett növény- és talajminták kémiai vizsgálata, és a talajon végzett ökotoxikológiai tesztek eredményeinek összehasonlító elemzésével a toxikus fémek koncentrációjának, biológiai hozzáférhetőségének és toxikus hatásának változását követtem nyomon, amiből az alkalmazott technológia hatékonyságára lehet következtetni. Az eredmények azt mutatják, hogy a módszer hatékony: a vizsgált mintákban a mobilis fémtartalom jelentősen lecsökkent, és ennek köszönhetően csökkent a talajok növényi és bakteriális toxicitása is.

Rádium izotópok aktivitás-koncentrációjának meghatározása vízmintákban

Máté Borbála, V. évf. környezetmérnök

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Kovács Tibor, egyetemi adjunktus
PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

A felszíni, felszín alatti vizekben található, természetes eredetű 223-as, 224-es, 226-os és 228-as tömegszámú rádium izotópok koncentrációjának ismerete hasznos geokémiai, hidrogeológiai ismereteket tartalmaz, mint természetes eredetű nyomjelzők alkalmazhatók. Mérésük azonban bonyolult nukleáris mérés technikát igényel.

A 226Ra aktivitás-koncentrációjának meghatározására több laboratórium is felkészült, de a többi (elsősorban 228Ra) izotópra kevés hazai laboratóriumban állnak rendelkezésre a kívánt követelmények.

A dolgozatban a PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézetében megvalósítható 226Ra és 228Ra mérési módszereket tanulmányoztam, melynek során a Nemzetközi Radiológiai Mérésügyi Intézet által szervezett összemérésben vettünk részt.

A pontos, reprodukálható mérések elengedhetetlenek, fontos részét képezik a NIRS-el folytatott közös kutatásnak, melynek része néhány honsz. szigeti folyó vizének keveredési modellezése és hidrogeológiai információk szerzése.

Munkám során a ^{226}Ra koncentráció meghatározásánál összehasonlítottam a félvezető detektoros α -spektrometriai módszer eredményeit a radon emanációs módszerrel, a ^{228}Ra esetében pedig a folyadékszcintillációt alkalmazó detektor és a szcintillációs NDI detektoros meghatározási módszereket vizsgáltam.

A ^{226}Ra esetében a mérések pontossága és reprodukálhatósága mind az α -spektrometriai, mind a radonemanációs mérések tekintetében az α -részecskék detektálásán alapuló méréseket figyelembe véve jónak számítanak, viszont a további munkához még pontosításokat igényelnek, a célkitűzés az, hogy a referencia értéktől való eltérés megközelítse a 10%-ot.

A ^{228}Ra meghatározásánál azonban további mérés technikai módosítások szükségesek, ugyanis a mintakészítés (forráskészítés) nem reprodukálható, az LSC tesztelését nem megfelelő vegyszer nehezítette, illetve az NDI rendszer esetében a minimális detektálható aktivitás nem érte el a további modellszámításokhoz szükséges értéket.

Az általam vizsgált 7 japán ivóvíz minta ^{226}Ra koncentrációja $1,08 \pm 0,24 - 4,72 \pm 1,39 \text{ mBq.l}^{-1}$ közé esett, ezen ivóvizek fogyasztása során kapott sugárterhelés mértéke elhanyagolható.

A rothasztott szennyvíziszap fém- és víztartalmának csökkentése

Németh Gergely, V. évf. környezetmérnök

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Thury Péter** PhD. hallgató
PE Környezetmérnöki Intézet

A szennyvíztisztítás melléktermékeként keletkező nagy szervesanyag tartalmú iszap a nagyobb telepeken alkalmazott anaerob rothasztás után tovább kezelhető/kezelendő. A hazai és a nemzetközi kutatóhelyeken számos kísérlet zajlik a jelenlegi iszapvíztelenítő megoldások hatékonyságának javítására. A kisebb víztartalmú (nagyobb szárazanyag tartalmú) iszap ekkor kisebb helyet foglal tárolás során, továbbá szállításkor is gazdaságosabb az egységnyi mennyiségű szárazanyag elvitele. Mindezzel a tisztító üzemeltetési költségei csökkenthetők. A víztartalom mellett egyes esetekben a fémtartalom is döntő szerepet játszik abban, hogy a szennyvíziszapból készített komposztok (egyéb termékek) értékesítése során mekkora hasznon realizálható. A mezőgazdaság, valamint a kisipari felhasználók számára jó minőségű tápanyag állítható elő, ha az az adott határérték alatti fémtartalommal rendelkezik.

A gyakorlati munkám során vizsgált Fenton-oxidáció hatása véleményem szerint kettős. A kizárólag külföldi referenciák csak az iszapvízteleníthetőség javítására fókuszálnak. Kiterjesztve a megoldás lehetséges alkalmazási területeit, vizsgáltam az eljárással eltávolítható fémkoncentrációt is (réz és cink esetében).

Az eljárás lényege, hogy pH 3-as értéken a vas(II)-ion reakcióba lép a hidrogénperoxiddal, mely a sejtmembránt feloldva felszabadítja a bennük rejlő vizet, az alacsony pH, pedig mobilizálja az iszapban feldúsult nehézfémeket. A hidrogénperoxid az iszap eredeti vastartalmával reagál (foszforeltávolításhoz adagolt), így nincs is szükség további vas bevitelére, mely nem von maga után plusz költségeket.

Dolgozatomban a Fenton-eljárás hatékonyságát hasonlítottam össze az „egyszerű savas kezelés” fémkioldódásra illetve vízteleníthetőségre gyakorolt hatásával. Az általam kiválasztott paraméterkombinációval a fémtartalom közel 50 %-át sikerült eltávolítani (Zn esetében), így a nem kívánt fémtartalom az iszapvíztelenítés során az iszapvízbe került. Az iszapvízből történő fémtávolítás hatékonyságát egy lúgosítást követő csapadékképzéssel vizsgáltam. A kezelés iszapszárazanyag-tartalom növelésére gyakorolt hatása az eddig elvégzett kísérletek alapján kedvezőnek mondható, azonban a komplex hatékonyság megállapítása érdekében további laboratóriumi és fűlüzemi vizsgálatok elvégzését tartom indokoltnak.

Az úrkúti mangánérc bányászatból származó dolgozói és lakossági sugárterhelés becslése

Sas Zoltán, V. évf. környezetmérnök

PE, Mérnöki Kar

Témavezetők: dr. Somlai János, egyetemi docens
PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

A természetben előforduló radioaktív anyagok mindig is jelen voltak. folyamatosan kapcsolatban álltunk velük. Az emberi tevékenységekből eredően azonban kialakultak olyan helyzetek, melyek során intenzifikált hatások jöhetnek létre a természeteshez képest. Napjainkra fontossá vált vizsgálni a különböző dolgozói, illetve lakossági sugárterheléseket.

Magyarországon mangánércet már csak az úrkúti bányában termelnek ki. Ez az érc oxidos és karbonátos formában található.

A bánya alapközetében levő Ra-226 tartalomából keletkező Rn-222 aktivitáskonzentrációja földalatti, rosszul szellőztetett terek esetében igen magas lehet, amely a dolgozók sugárterheléséhez jelentős mértékben hozzájárul. A Magyarországon 1996-ban hatályba lépett atomenergiáról szóló CXVI. törvény szerinti egyensúlyi faktorról számolva 6,3 mSv/év sugárterhelést jelent a dolgozók számára.

Dolgozatomban vizsgáltam a bányában levő egyensúlyi faktor pontos értékét is. Ennek eredményeként kiderült, hogy 42%-os eltérés van az ajánlott és a tényleges faktor között. A bánya periodikus szellőztetésének következtében a munkaidő alatt jelentősen csökken a radonkoncentráció. Az általánosan alkalmazott nyomdetektoros mérések nem tudják nyomon követni ezt az ingadozást, ezért személyi radonmérés alkalmaztam, hogy a pontos radonexpozíció kiderülhessen. Munkám során megállapítottam, hogy jelentős eltérés van a személyi, illetve az általános radonmérési eljárás eredményei között.

Az oxidos mangánérc dúsítása során nagy mennyiségű (2,8 Mt) maradék, mangános agyag halmozódott fel, melynek előtérbe került a másodlagos nyersanyagként, építőanyagként való hasznosítása.

A téglaiipari felhasználásra vonatkozó előrehaladott kísérletek miatt szükséges a mangános agyag radionuklid tartalmának ellenőrző vizsgálata, és az Európai Unió által elfogadott, építőanyagok radiológiai minősítésre használt I index meghatározása.

A kapott I index értékek alapján kijelenthető, hogy a mangános agyag átfogó mintavétellel érintett része alkalmazható nagy mennyiségben használt anyagok (válaszfal, téglá, stb.) gyártására, vagyis beépítés után várható éves sugárterhelés nem haladja meg az 1 mSv/év lakossági dóziskorlátot.

Az AUDI HUNGARIA MOTOR Kft. lehetőségei a Győr városában keletkező szennyvíziszap hasznosításában

Serfőző Nikoletta, V. évf. környezettudományi szak

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: ¹Dr. Kárpáti Árpád egyetemi docens
²Dr. Szakácsné Dr. Földényi Rita egyetemi docens
¹PE Környezetmérnöki és Kémiai Technológia Intézeti Tanszék
²PE Föld- és Környezettudományi Intézeti Tanszék

A különböző hulladékkezelési technológiák alkalmazását nemcsak a környezet fokozott védelme, hanem a fenntartható fejlődés igénye is sürgeti.

Munkám során az ipari szektor egyik magyarországi nagyvállalatának, az AUDI HUNGARIA MOTOR Kft.-nek (Audi Hungaria) azon környezetvédelmi célkitűzését vizsgáltam meg, ami a biológiai szennyvíztisztítás során keletkező melléktermékek minél nagyobb mennyiségű hasznosítására irányul a rendszeres talajerő-utánpótlás érdekében.

Az Audi Hungaria szerepének bemutatása céljából számításokat végeztem, hogy a cég mindennapi működése során keletkező szennyvíz éves mennyiségével milyen mértékben járul hozzá a szennyvíztisztító telep-terheléséhez.

Eredményeim alapján az Audi Hungaria kommunális szennyvizével naponta 134 kg iszaphozamnak megfelelő szennyezőanyag távozik (szárazanyagban tekintve) a szennyvíztisztító telepre, ami ott 49,64 t iszaphozamnak felel meg a kezelés során. Ez az iszapmennyiség 1,6 %-os éves többletet jelent a kezelői oldalon. További összefüggések segítségével meghatároztam a szerves tápanyagból kihelyezendő mennyiséget és az ily módon hektáronként bevitt tápelem mértékét az Audi Hungaria zöldterületén.

Számszerűsítettem, hogy az Audi Hungaria által kibocsátott szennyezőanyagokból keletkező 49,64 t iszap szárazanyag/év mennyiségből komposzt esetén 16,5, míg granulátumból mintegy 13,35 t szárazanyag/év mennyiség helyezhető el a 15 ha-os kezelt zöldfelületen, amely a kiinduló mennyiség 33 %, illetve 27 % - át képezi.

Az optimális mennyiségi és minőségi dózisok meghatározásával párhuzamosan az Audi Hungaria kiegészítő környezetvédelmi vizsgálatokat végeztetett az Észak-dunántúli Környezetvédelmi, Természetvédelmi és Vízügyi Felügyelőség Mérőállomásának (ÉDU-KTVF) segítségével. Az elvégzett vizsgálatok mérési eredményei az EPH és a réz tekintetében a fent említett rendeletben rögzített határértékeket meghaladják. Ezen indok alapján nem javaslom a komposzt felhasználását az Audi Hungaria telephelyén a jelenleg alkalmazott LINZI NPK műtrágya helyettesítésére. A mostani körülmények között tehát a kibocsátott szerves anyag a bemutatott módon nem juttatható vissza a körforgásba.

Talaj, üledék és víz nehézfém koncentrációjának vizsgálata a Rétközi víztározóban I.

Szaniszló Albert, IV. évf. környezetmérnök
SZIE Mezőgazdaság és Környezettudományi Kar

Témavezető: Dr. Mészárosné Dr. habil. Bálint Ágnes egyetemi docens,
SZIE Környezettudományi Intézet, Kémia és Biokémia Tanszék

Rohamosan fejlődő világunkban az ipari és mezőgazdasági tevékenységekből származó veszélyes, mérgező anyagok globálisan is egyre nagyobb koncentrációban jelennek meg. Sajnos ezzel előidézték, azt hogy a nehézfémek koncentráltan visszajussanak a környezetbe. Ezzel párhuzamosan a mindennapokban is hangsúlyt kap az egészséges élet, a tiszta környezetre való igény. Egyre több törekvés és program indul azért, hogy megelőzzük környezetünk elszennyeződését vagy helyreállításuk a már szennyezett területeket. Az egyik ilyen terület a vizeinkben és a talajainkban megjelenő nehézfémek, amik ezeken a bekerülési utakon megjelennek és felhalmozódnak a táplálékláncban.

Kutatásunk célja egy monitoring rendszer felállítása, ami segítségével később más területeken alkalmazva hasonló minőségű feltárást eredményezzen. Esetünkben ez a Szabolcs-Szatmár-Bereg-megyei Rétközi víztározó és a közeli vízellátást biztosító Tisza, ahol víz, talaj és üledékmintákban nehézfémeket vizsgáltunk. Méréseinkkel azt akarjuk bemutatni, hogy a nagy valószínűséggel a Tiszából érkező szennyezések hogyan jelennek meg a tározó növény és állatvilágában. Ezt a Szent István Egyetem, Környezettudományi Intézet Környezetvédelmi Analitikai laboratóriumában egy AAS Spektrométeren végeztük. A műszerrel Cd, Cu, Fe, Mn, Pb, és Zn koncentrációt mértünk. Eredményeink értékelése során megállapítottuk, hogy a nehézfémek jelen vannak a tó területén, de nem érik el a szennyezettségi határértéket és csak helyenként mutatnak magasabb értéket. A magas koncentráció a tározó Tisza felőli befolyónál, a tó mélyebb középső szakaszán és a leeresztő műtárgynál koncentrálódt. Ebből egyértelműen látható, hogy a Tisza felől érkeznek a nehézfémek. Azon kívül kimutatható még, hogy a Tiszából már a tó építése (1990) előtt is érkeztek szennyezések. Ezt azzal igazoltuk, hogy a Tisza melletti holtágból vett minták is kiugróan magas értéket mutattak, de a szennyezettségi határértéket itt sem éri el.

A feltáró vizsgálatokon kívül fontosnak tartom egy olyan megoldás kialakítását, amely egy környezetbarát rendszeren alapulna, és a kijelölt terület megtisztítására törekedik.

A rehabilitációt a fitoremediáció segítségével, ülepítő és víztisztító eljárások kombinálásával kialakított rendszerrel javaslom, amihez akváriumi kísérleteket is végeztünk, melynek lényege a növények vízből és üledékből történő nehézfém akkumuláció vizsgálata.

Talaj, üledék és víz nehézfém koncentrációjának vizsgálata a Rétközi víztározóban II.

Törő Balázs, IV. évf. környezetmérnök

SZIE Mezőgazdaság és Környezettudományi Kar

Témavezető: Dr. Mészárosné Dr. habil. Bálint Ágnes egyetemi docens,
SZIE Környezettudományi Intézet, Kémia és Biokémia Tanszék

Napjaink egyik meghatározó problémaköre a környezetvédelemben a nehézfém szennyezés. A nehézfémek koncentrált visszajutása a környezetbe igen jelentős veszélyeket rejt. A nehézfémek a környezetben felhalmozódnak, így lehetséges élettani problémákat okozva. Ezen problémák megelőzése okán szükségesnek tartom a veszélyeztetettnek vélt területek részletes elemzését.

Szabolcs Szatmár Bereg Megyében, Szabolcsveresmart település mellett található „Rétközi” tó üledék, talaj és vízmintáit vizsgálva szeretnénk megtudni a jelenlévő nehézfémek koncentrációját. Mivel a Rétközi tó (veresmarti víztározó) a Tisza folyó tározójaként is funkcionál és vízmennyiségének jelentős része a folyóból származik, ezért a folyóban található nehézfémek itt leülepedhetnek, felhalmozódhatnak. Mivel a tavat mezőgazdasági célra is használják (pl.: öntözés) ezért nagyon fontosnak tartjuk megállapítani a lehetséges nehézfém szennyezőket, mert a mezőgazdaság által bekerülhetnek a táplálékba.

A talaj, üledék és víz mintavételt és a vizsgálatokat az MSZ 21470-1:1998 és MSZ 1484-3:1998-as szabványok szerint végeztük. A mintavételt a mintavételi háló elkészítése után megfelelő talaj, üledék és víz mintavevővel vettük. A mintákat mikrohullámú roncsolással tártuk fel az elemanalízishez.

Egyidejűleg meghatároztuk a minták kémhatását és a talaj és üledékminták szárazanyagtartalmát.

Előzetes vizsgálatokat végeztünk 2006-ban, melynek eredményeit felhasználtuk a mintavételi háló megtervezéséhez. A 2007-ben végzett vizsgálatok FAAS műszerrel kapott eredményeit és a 2008-ban GFAAS és IPC-OES műszerekkel végzett analízis eredményeit összevetettük és kiértékeljük.

Az eredmények kiértékeléséhez az SPSS 14 for Windows programcsomagot használtam mellyel egy és több tényezős variancia analízist végeztem. Az eredmények kiértékelését követően megállapítható hogy a Rétközi tó környezetében nem beszélhetünk nehézfém szennyezésről.

Biodízel előállítása használt éttermi olajokból

Varga Diána, V. évf. környezettudományi szakos hallgató

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

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

A kőolajkészletek rohamos csökkenése, valamint az energiatemmeléssel jelentkező környezetszennyezés az emberiség figyelmét az alternatív energiaforrások felé irányítja. A ma használt motorhajtóanyagok helyettesítésére a környezetkímélőbb, a biomasszából nyert „*bioüzemanyagok*” alkalmazhatók. A biodízel, a biogázolaj 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 során ehhez a témához kapcsolódóan, használt étkezési olajat etanollal illetve metanollal történő átészteressítéssel alakítottunk át motorhajtóanyaggá, új technológiai eljárást alkalmazva.

A biodízel előállításához szükséges használt olaj viszkozitása, magas lobbánáspontja illetve többi tulajdonsága hajtóanyagként való felhasználást korlátozza, ezért átészterezést igényelnek, amire etanolt vagy metanolt használtak különféle katalizátor alkalmazásával. A reakciót - a használt olaj megfelelő előkezelését követően - fordított fázisban hajtottuk végre, azaz a katalizátort tartalmazó alkoholhoz adagoljuk az olajat. Savas katalizátorként $\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4$ -at, H-ZSM5 és H-Y(FAU) zeolitokat, míg bázikus katalizátorként NaOH-ot, KOH-ot, és Na-etilátot alkalmaztunk.

Az etanollal végbemenő reakció kritikus pontjai egyrészt a katalizátor oldhatósága és reakciókészsége, ami bázikus katalizátor alkalmazásakor az elszappanosításban jelentkeznek. Ez utóbbi reakció eredményeként ugyanis olyan emulgeáló tulajdonságú szappanok képződnek, melyek emulzióként stabilizálják a reakcióban kialakuló zsírsav-etilészter/glicerinnel 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 lépések alkalmazását teszi szükségessé. A feleslegben lévő alkohol visszanyerésére valamint a fázisszétválás megkönnyítésére a termékeim egy részéből az alkoholt ledesztilláltam, ezáltal a fázisszétválás megtörtént.

A metil- és etil-észterek sűrűségi, viszkozitási, gyulladási illetve gázkromatográfiás értékeiből az átészterezések hatékonyságát, a biodízel jellegű termékek tulajdonságait határoztuk meg, és ezek alapján tettünk javaslatot az optimális módszerre.

Kerámiapapíron rögzített titán-dioxid fotokatalizátor alkalmazása víztisztításra

Veréb Gábor V. évf. környezettudományi szak

SZTE – Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Mogyorósi Károly**, tudományos munkatárs

Dr. Dombi András, egyetemi docens

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Napjaink egyre növekvő mértékű problémája az élővizek szennyezése, bizonyos területek megfelelő minőségű ivóvízzel történő ellátása. Szükségszerűvé vált új technológiák kidolgozása, a nehezen kezelhető, főleg ipari eredetű szennyezőanyagok eltávolítására. Egyik lehetséges megoldás a heterogén fotokatalízis, mely módszer alkalmazása során a fény hatására gerjesztődő félvezető (pl.: titán-dioxid) felületén szerves szennyező anyagok széles köre oxidálható, és szervetlen végtermékek (CO₂, víz, szervetlen ionok) alakítható. A módszer előnye, hogy nem alkalmaz vegyszereket.

Napjaink kutatásaiban a titán-dioxidot főleg szuszpenziós körülmények között alkalmazzák, a gyakorlati felhasználás során azonban problémás a részecskék eltávolítása a megtisztított vízből. Ezért célul tűztem ki, hogy a titán-dioxidot tartósan rögzítem valamilyen felületen, úgy hogy az megőrizze fotokatalitikus aktivitását. Az elkészített fotokatalitikusan aktív felület alkalmas lehet arra, hogy ún. rögzíteti ágyas áramlásos reaktorokban alkalmazzuk.

Munkám során egy inert anyagból álló (alumínium-oxid alapú) kerámiapapíron rögzítettem a titán-dioxidot úgy, hogy a részecskék tartósan rögzültek, valamint a fotokatalizátor megőrizte fotokatalitikus aktivitását. Optimalizáltam a felvitt fotokatalizátor mennyiségét, vizsgálatokat végeztem különböző saját készítésű titán-dioxidokkal, valamint nemesfémekkel módosított fotokatalizátorokkal is fenol, valamint oxálsav bontására. A kidolgozott rögzítési módszert egy nagylaboratóriumi méretű áramlásos berendezésben is alkalmaztam. Ebben a reaktorban is vizsgálatokat végeztem fenol, szalicilsav valamint oxálsav bontására egyaránt, valamint optimalizáltam a berendezés működési paramétereit. Ezek után mérésekkel igazoltam a kidolgozott víztisztítási módszer működőképességét napfényen végzett kísérletekkel.

Az általam tervezett, készített, és tesztelt reaktor és fotokatalizátorral bevont kerámiapapír a jövőben hozzájárulhat egy olyan környezetbarát víztisztító technológia kidolgozásához, mely a napfény energiáját felhasználva képes eltávolítani a nehezen kezelhető szerves szennyezőanyagokat. Ez az új technológia modern, környezetbarát módon járulhat hozzá a vizek szennyezésének elkerüléséhez, valamint az ivóvízhiányos területek vízellátásához.

Polimer- és Műanyagkémia tagozat

Fenantrolin funkcionizált polimerek szintézise

Farkas Krisztina Nikolett, V. évf. környezettudomány

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Nagy Miklós egyetemi adjunktus
Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

A mágneses nanostruktúrák kutatása és előállítása világszerte a legjobban kutatott területek közé tartozik a gyógyászatban az utóbbi években. A mágneses nanorészecskék egyik legfontosabb képviselője a magnetit nanopor, mely főleg vas-oxidból áll. Alapvető probléma a különböző módon előállított magnetit nanorészecskék oldatbeli stabilitásának fenntartása a kedvezőtlen felület-oldószer kölcsönhatások következtében. A nanorészecskék stabilizálásának egyik módja a részecske felületének módosítása. Ez többféleképpen megoldható: vagy a felület ellátása olyan funkciós csoportokkal, amelyek az adott oldószerrel erős kölcsönhatást alakítanak ki, vagy nagy molekulájú anyagok, különböző polimerszármazékok felületi adszorpciójával oldható meg, melyek a felületet mintegy leárnyékolják az oldószer molekulái elől.

Munkánk során új típusú funkcionizált polimerek szintézisét hajtottuk végre sikeresen. Polietilén-glikol (PEG) és polizobutilén (PIB) polimerláncokhoz sikeresen kapcsolunk fenantrolin funkciós csoportot. A polimerszármazékokat, a mPEG-Br-ot és PIB-Br-ot, egy már ismert, de mindeddig ezen polimerekre nem alkalmazott Appel-reakcióval állítottuk elő. A képződött termékek jelentősége nagy, mivel egész sor polimeralapú termék kiindulási anyagai lehetnek. A reakció további előnye, hogy egy igen egyszerű szubsztitúciós reakcióson keresztül megy végbe, amely mind poláros, mind apoláros közegben is alkalmazható. A már szintetizált kiindulási anyagokat fenantrolinnal kapcsolunk. A reakciók eredményességét, mind a kiindulási anyagokra nézve, mind a már összekapcsolt termékekre, MALDI-TOF MS és NMR-spektrometriával ellenőriztük. A polizobutilén apoláros jellege miatt, mind a polimer kiindulási anyagként, mind a belőle képződő termékek vizsgálatához NMR spektroszkópiát kell alkalmazni. A poláros polietilén-glikol és származékai MALDI-TOF MS technikával egyszerűbben meghatározhatók. A kapcsolási reakciókon túl sikeresen elvégeztük a polizobutilén-fenantrolin elválasztását. A termék előkísérletek alapján fázistranszfer katalizátorként is alkalmazható. Polietilén-glikol-fenantrolin előállítására is kiterjesztettük a módszert, a termék tisztítása folyamatban van. További céljaink között szerepel ezen funkcionizált polimerek további vizsgálata, önszerveződő jellegének és az esetleges nanoszerkezetének felderítése és a magnetit részecskével képzett konjugátumok vizsgálata.

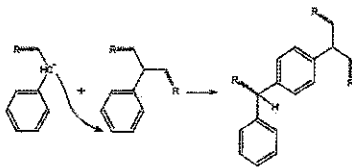
Hiperelágazásos polisztirol előállítása karbokationos polimerizációval

Kasza György, V. évf. vegyészmérnök

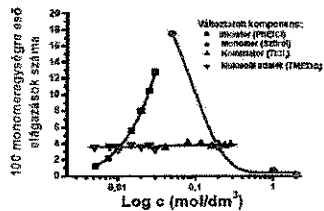
ELTE Természettudományi kar

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

Napjainkban egyre inkább előtérbe kerülnek a sok elágazást tartalmazó polimerek előállítására irányuló kutatások. Munkám során kváziélő karbokationos polimerizációval előállított polisztirol önojtásos reakcióját tanulmányoztam. A kapott eredmények alapján kijelenthető, hogy a sztírol karbokationos polimerizációját követően az 1. ábrán bemutatott reakció játszódik le, melynek hatására hiperelágazásos szerkezetű polimer képződik.



1. ábra: Elágazások képződése a láncvégi karbokationok Friedel-Crafts alkilezési reakciójával



2. ábra: A 100 monomeregységre eső elágazások száma a reakciók koncentrációjának függvényében

Részletes vizsgálatokat folytattam az alkalmazott reakciók koncentrációjának az elágazások kialakulására gyakorolt hatásának felderítésére (2. ábra). Eredményeim alapján megállapítható, hogy az iniciátor koncentrációjának növelésével nő a láncok összekapcsolódásának mértéke. A monomer koncentrációjának növelése esetén szterikus gátlás lép fel, így a reaktív láncvégek kevésbé hozzáférhetőek a többi polimer lánc számára. Az is igazolást nyert, hogy a nukleofil adalék és a koiniciátor nincs jelentős hatással az elágazások képződésére.

Elmondható tehát, hogy olyan új eredményekhez jutottunk, amelyek alapján a sztírol karbokationos polimerizációja alkalmas hiperelágazásos szerkezetű polisztirol előállítására, és a különböző reakciók koncentrációjával szabályozható az elágazások mértéke.

Természetes töltőanyagokkal módosított PVC kompozitok: határfelületi kölcsönhatások és mikromechanikai deformációs folyamatok

Kenyó Csaba, 6. évf. vegyészmérnöki szak

Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Móczó János**
tudományos munkatárs
MTA KK AKI

Az utóbbi időkben rendkívül megnőtt a megújuló nyersanyagforrásból származó alapanyagok iránti érdeklődés. A kukoricacsutka őrlemény és a többi természetes eredetű töltő- és erősítőanyag számos előnyös tulajdonsággal rendelkezik, mint pl. kitűnő mechanikai tulajdonságok, könnyű hozzáférhetőség és elfogadható ár. A hátrányuk azonban, hogy a tulajdonságok a nyersanyagforrás eredetétől függően, valamint évről évre is széles tartományban változnak. A szálak rendkívül érzékenyek a nedvességre továbbá a hőmérsékletre és keresztirányú szilárdságuk is kicsi. Amennyiben nagy töltőanyagtartalmú kompozitot készítünk, a megfelelő adhéziót és a feldolgozhatóságot is biztosítani kell. A töltőanyag nagy szemcseméretének és kis felületi szabadenergiájának köszönhetően a komponensek között gyenge adhézió alakul ki. Ez külső terhelés hatására a határfelületek elválásához és a kompozit idő előtti tönkremeneteléhez vezet.

A munka célja, hogy megismerjük a PVC/kukoricacsutka valamint a PVC/faliszt kompozitok szakítási és törési jellemzőit, valamint a legfontosabb tönkremeneteli folyamatokat. Akusztikus emisszió (AE) és térfogati deformáció (VOLS) módszerrel megpróbáltuk azonosítani ezeket a folyamatokat. A kompozitok szerkezetének tanulmányozására a törési felületekről elektronmikroszkópos (SEM) felvételeket is készítettünk.

A mechanikai tulajdonságok vizsgálata alapján megállapítottuk, hogy a kompozitok merevsége növekszik a töltőanyagtartalommal. A töltőanyag nagy szemcsemérete miatt a töltőanyag részecskék könnyen elválnak a PVC mátrixtól, ami már kis deformációknál jelentős térfogatnövekedéshez, és a kompozit gyors tönkremeneteléhez vezet. Nagy kukoricacsutka őrlemény tartalomnál a részecskék könnyen aggregálódnak, ami a szilárdság csökkenését eredményezheti.

Reciklált poli(butilén-tereftalát) újrafeldolgozhatóságának és a belőle gyártott termékek mechanikai tulajdonságainak javítása

Lengyel András, IV. évf. vegyészmérnök

Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Témavezetők: Varga Csilla PhD hallgató

PE MK Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet/

Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

Dr. Miskolczi Norbert tudományos munkatárs

University of Leeds

TDK dolgozatom célja nagy mennyiségben hozzáférhető poli(butilén-tereftalát) hulladék újrahasznosíthatóságának vizsgálata volt. A kutatást egyrészt indokolta, hogy a PBT termékek fröccsöntése során keletkező selejt csak korlátozott mértékben dolgozható vissza az alapanyagba, másrészt felmerült a már elhasználódott PBT újrafelhasználási területeinek bővítési lehetősége is.

Kiváló mechanikai tulajdonságai és a környezet hatásaival szembeni kiváló ellenálló képessége révén a PBT a vízcatorna-hálózat elemeinek potenciális alapanyaga lehet. A problémát ezen a felhasználási területen a PBT dinamikus terheléssel szembeni gyenge ellenállása jelenti. Kísérleteinkben különböző kereskedelmi forgalomban kapható adalékanyagokat kevertünk PBT-be, és a fröccsöntött termékek mechanikai tulajdonságait (húzó, hajlító és ütvehajlító) és reológiai viselkedését vizsgáltuk.

A húzószilárdság legnagyobb mértékben (17%) a PBT-4 jelű minta esetében nőtt. A keverék hajlító jellemzői, mind a hajlítószilárdság, mind a hajlító rugalmassági modulusz 20%-kal javultak a PBT-1 mintához képest, az ütéssel szembeni ellenállás azonban romlott. A Charpy-szilárdság a PBT-2 és PBT-3 minták esetében javult, ezeknek a keverékeknek azonban nagymértékben romlott a húzó és hajlító igénybevétellel szembeni ellenálló képessége.

Kulcsszavak: poli(butilén-tereftalát), kompatibilizáló adalék, szilárdsági jellemzők, reológiai tulajdonságok

FÉNYEMITTÁLÓ POLIMEREK

Majtényi Eszter, II. évf. vegyészmérnök hallgató

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: **Dr. Nagy Miklós** egyetemi adjunktus
Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék

A polimeralapú anyagok elektronikai termékekben történő felhasználása robbanásszerűen növekszik. A szerves fénykibocsátó diódákkal való megjelenítés folyamatos fejlődésben van, és ez a fejlődés még jó pár éven keresztül folytatódik. Új típusú fényemittáló polimerek előállítására kétféleképpen valósítható meg. Vagy a megfelelő monomerből kiindulva az egész polimerláncot kialakítjuk a konjugált pi-elektronrendszerrel, vagy már létező polimerláncot látunk el fényemittáló végcsoporttal kvantitatív végfunkcionalizálással. A kutatások másik iránya a pontosan definiált felületek létrehozása vagy már létező vagy az általunk előállított új fényemittáló polimerek felhasználásával. Pontosán definiált felületek létrehozására az egyik legegyszerűbb módszer az úgynevezett mikrofázis szeparáció.

Munkám során új típusú, kék fényt emittáló polimerek makromonomerjeinek előállítására sikeresen terjesztettem ki már ismert, de ezen vegyületekre mindeddig még nem alkalmazott kapcsolási reakciókat. Már létező fényemittáló polimerlánc alapjául szolgáló monomereket kapcsoltam össze különböző polaritású polimerláncokkal. Így első lépésként elasztomerként viselkedő, apoláros, hidrofób poliizobutilén láncot kapcsoltam 2-bróm-5-metilfenol molekulára egyszerű Williamson-féle éterszintézissel, melynek eredményeként stabil kémiai szerkezetet kaptam. A poliizobutilén apoláris jellege miatt a reakciókörülmények precíz beállítására volt szükség a teljes konverzió eléréséhez. Az így kapott termékből alakítottam ki a leendő, konjugált bifenil egységeket tartalmazó fényemittáló polimer monomeregységének alapjául szolgáló 2-PIBoxi-4,4'-dimetil-bifenilt. Kutatásom során a másik vizsgált vegyület a poli(etilén-glikol) volt. A poláros vegyületek, így elsősorban a poli(etilén-glikol)-származékok vizsgálatára a MALDI-TOF tömegspektrométert használtam. Az apoláros vegyületek előállítását vagy átalakulását ^1H és ^{13}C NMR segítségével tudtam ellenőrizni. A spektrumok elemzése alapján kijelenthetem, hogy a reakciók jó hozammal végbementek.

A tapasztalt eredmények alapján megállapítható, hogy a gyakorlatban más vegyületekre elterjedten alkalmazott kapcsolási reakciókat a PIB-re és PEG-re sikeresen kiterjesztettem. A hidrofíll és hidrofób oldallánccal rendelkező egységek létrehozásával megváltoztattam a fényemittáló alaplánc mind szilárd, mind oldat fázisban való viselkedését.

Modell kísérletek a polietilén stabilizálásához alkalmazott antioxidánsok reakciómechanizmusának megismerésére

Pénzes Gábor V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki kar

Témavezető: Dr. Földes Enikő tudományos csoportvezető

MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet; BME FKAT Műanyag- és Gumiipari Laboratórium

A polietilén az egyik legnagyobb mennyiségben gyártott és felhasznált műanyag. Széleskörű elterjedését az tette lehetővé, hogy olcsón előállítható, tulajdonságai tág határok között változtathatók. A polimert feldolgozás és alkalmazás során számos káros hatás éri, amely a termék korai tönkremenetelét eredményezi. A polietilént magas hőmérsékleten kismennyiségű oxigén jelenlétében nyíró-igénybevétellel dolgozzák fel. A polimer gyenge helyeinél (telítetlen kötések, tercier szénatomokon) hidrogén szakad le, vagy elszakad a lánc. A képződő makrogyökök reagálnak a rendszerben jelen lévő oxigénnel és peroxi gyökök képződnek, amelyek további hidrogént hasítanak le a polimer láncról. A keletkező polimer hidroperoxid instabilis a feldolgozási körülmények között, gyorsan reaktív hidroxil és alkoxi gyökökre bomlik, amelyek tovább reagálva autooxidációs folyamatot indítanak. Ezeket a degradációs folyamatokat stabilizátorok adagolásával akadályozhatjuk meg.

A polietilén feldolgozási stabilitását a leggyakrabban egy fenolos és egy foszfortartalmú antioxidáns keverékével biztosítják. Az FKAT MGL-ben folytatott kutatások azt bizonyították, hogy a foszfortartalmú stabilizátorok kémiai szerkezete jelentősen befolyásolja a polietilén feldolgozása során lejátszódó kémiai folyamatokat és így az előállított termék tulajdonságait is. Az eltérések oka nem tisztázott, a foszfortartalmú antioxidánsok reakciómechanizmusa nem ismert teljesen. A folyamatok megismerésére modell reakciókat végzünk, amelyekben elkülönítve tanulmányozzuk az antioxidánsok reagálását a polietilén feldolgozása során fellépő hatásokra.

A dolgozatomban egy, az iparban alkalmazott foszfonit stabilizátorral (Sandostab P-EPQ, *Clariant*) végzett kísérletek eredményeit mutatom be. Termikus analízissel tanulmányoztuk az antioxidáns termikus és termooxidatív stabilitását. Vizsgáltuk a stabilizátor reakcióját oxigénnel, kumol-hidroperoxiddal és dikumil-peroxidból képződő oxi gyökökkel. A képződő vegyületeket FT-IR spektroszkópiával és HPLC-MS módszerekkel analizáltuk. Meghatároztuk a különböző reakciókban képződő fő termékeket. Összehasonlítottuk a modell kísérletek eredményeiből levonható következtetéseket a szakirodalomban található feltételezésekkel. A dolgozatban bemutatom a vizsgált antioxidáns lehetséges reakcióit a polietilén feldolgozása során.

Multifunkciós hiperelágazásos polimerek mint fogtömő anyag prekursorok

Soltész Amália, I. évf. doktorandusz hallgató

ELTE TTK Kémiai Intézet

Témavezető: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető
ELTE TTK Kémiai Intézet, 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. A polimerizációkor zsugorodik az anyag, de ennek jelentős része immár nem a fogban fog megtörténni. 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 monomerből állítják elő a térhálót.

Monofunkciós iniciátorral végezve a reakciókat sikerült olyan polimereket előállítani, melyek mindkét kritériumnak megfelelnek. Tudományos diákköri kutatásaim fő célja elsősorban az volt, hogy bifunkciós és trifunkciós iniciátor alkalmazásakor előállíthatók-e kedvező adottságú polimerek, és ezek tulajdonságait hogyan befolyásolja az iniciátor funkcionalitása. Mivel ismert, hogy a hagyományos gyökös polimerizáció ilyen esetekben már igen kis konverzióknál is gélesedést eredményez, kváziélő atomátadásos gyökös polimerizációs (ATRP) körülmények alkalmazásával kíséreltem meg hiperelágazásos polimerek előállítását. A termékeket $^1\text{H-NMR}$ -spektroszkópiával és gélpermeációs kromatográfiával analizáltam.

Kísérleteim eredményei alapján elmondható, hogy a bifunkciós monomerre vonatkoztatva ekvivalens mennyiségben mono-, di- és trifunkciós iniciátort tartalmazó polimerizációs rendszerek hasonló szerkezeti paraméterekkel rendelkező hiperelágazásos polimereket eredményeznek. A trifunkciós iniciátor különös előnye, hogy nemcsak a bifunkciós monomerek, de maguk az iniciátorok is elágazást eredményeznek a polimer láncban. Mindezen túlmenően pedig minden esetben olyan hiperelágazásos polimereket sikerült előállítani, amelyek a bifunkciós monomerből származó, elreagálatlan - további reakciókra, így polimerizációra képes - kettős kötéseket tartalmaznak.

Különleges hatású adalékanyagok poliizobutilén láncvégen kiváltott reakciói kváziélő karbokationos polimerizációs körülmények között

Szabó Ákos, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

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

Munkám során poliizobutilén láncvégi reakcióit vizsgáltam kváziélő karbokationos polimerizációs körülmények között két adalékanyag, a 2,6-di-*tert*-butilpiridin (DtBP) protoncsapda és a 2,5-dimetilpirrol (DMPy) jelenlétében.

Korábbi eredmények [1] arra utaltak, hogy DtBP adalékanyag jelenléte poliizobutilén láncok összekapcsolódását eredményezi. Kutatásaim egyik célja az volt, hogy kiegészítve korábbi vizsgálataimat [2], tanulmányozzam a $TiCl_4$ Lewis-sav koiniciátor koncentrációjának hatását a láncösszekapcsolódásra vonatkozóan. Eredményeim azt mutatják, hogy nincs egyértelmű összefüggés a $TiCl_4$ koncentráció és a láncösszekapcsolódás mértéke között.

A DMPy irodalmi adatok szerint [3] képes poliizobutilén láncokon nagymértékű láncvégi kettős kötés kialakítására. Kísérleteimben én is jelentős láncvégi kettős kötés képződést tapasztaltam, de a láncösszekapcsolódás csupán kis mértékű volt, vagyis a maradék karbokationok addíciója a képződött kettős kötésekre gátoltnak bizonyult.

A két adalékanyag együttes jelenlétének hatását is tanulmányoztam. A kapott eredmények azt mutatják, hogy egyrészt DtBP jelenlétében is nagy hatékonysággal végbemegy a DMPy által kiváltott láncvégi β -proton elimináció, emellett a DMPy megnöveli a DtBP bruttó protonálódási sebességét ebben a reakcióban. Viszont a karbokationos láncvégek addíciója a keletkezett láncvégi kettős kötésekre ebben az esetben is gátolt. Meglepő módon DtBP jelenlétében a láncvég koncentrációnál kisebb mennyiségű DMPy is kvantitatív exo-olefin képződést eredményez. Ez az új eredmény egy teljesen új módszerként alkalmazható exo-olefin végű poliizobutilén előállítására.

[1] Held D., Iván, B., Müller, A. H. E., de Jong, F., Graafland, T., *Adv. Chem. Ser.*, 665, 63-74 (1997)

[2] Szabó Ákos, *OTDK dolgozat*, XXVIII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia, Kémiai és Vegyipari Szekció (2007)

[3] Simison, K. B., Stokes, C. D., Harrison, J. J., Storey, R. F. *Macromolecules* 39, 2481-2487 (2006)

Poliizobutilén-poli(etilén-oxid) blokk-kopolimerek szintézise kváziélő karbokationos és atomátadásos gyökös polimerizáció összekapcsolásával

Szabó Ákos, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

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

Napjainkban a szintetikus makromolekulák területén az egyik legjelentősebb kutatási irány az amfilil (hidrofil és hidrofób részből álló) blokk-kopolimerek és térhálók előállítása és tulajdonságaik vizsgálata [1]. Ezek az anyagok különösen a gyógyászati felhasználás számára kínálnak új megoldásokat, mivel viselkedésük sok esetben kielégíti az „intelligens gyógyászat” által támasztott követelményeket.

Munkám célja poliizobutilén (PIB) és poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát) (P(PEO-MA) láncszegmensekből felépülő ABA blokk-kopolimer (P(PEO-MA)-*b*-PIB-*b*-P(PEO-MA)) előállítása volt, amely új szerkezete és biokompatibilis szegmensei révén új felhasználási lehetőségekkel kecsegtet [2].

A szintézis során először szűk molekulatömeg-eloszlású, két funkciós láncvéggel rendelkező, azaz telekelikus poliizobutilént állítottam elő kváziélő karbokationos polimerizációval, majd a láncvégek módosításával egy kétágú, 2-bróm-izobutirát láncvégű atomátadásos gyökös polimerizációs (ATRP) makroiniciátort kaptam.

Ezután a telekelikus poliizobutilén makroiniciátorral poli(etilén-oxid)-metakrilát ATRP-jét [3] végeztem el különböző kísérleti körülmények között. ¹H-NMR spektroszkópiai vizsgálatok alapján 95%-nál nagyobb konverziót sikerült elérni abban az esetben, amikor a reakciót 40, ill. 70 °C-on CuCl katalizátorral, aszkorbinsav jelenlétében végeztem. Ekkor a gélpermeációs kromatogramok alapján keletkezett blokk-kopolimer, de maradt a rendszerben elreagálatlan makroiniciátor is.

Jövőbeni kutatásaink célja a hatékony iniciálást biztosító ATRP-s reakciókörülmények felderítése és a képződő blokk-kopolimerek alkalmazási lehetőségeinek a vizsgálata.

[1] Erdődi, G., Kennedy, J. P. *Prog. Polym. Sci.* 31, 1-18 (2006)

[2] Lutz, J-F. *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* 46, 3459-3470 (2008)

[3] Hansen, N. M. L., Haddleton, D. M., Hvilsted, S. J. *Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* 45, 5770-5780 (2007)

Hőre keményedő polimer kompozitok égésgátlása reaktív foszforszármazékokkal

Szolnoki Beáta, IV. évf. vegyészmérnök
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Marosi György**, egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Toldy Andrea, egyetemi tanársegéd
BME Polimertechnika Tanszék

Napjainkban erőteljesen nő a kompozitokból gyártott, fémek helyettesítésére is alkalmas, nagy mechanikai terhelésnek kitett alkatrészek alkalmazása a repülőgépiparban. A fémes szerkezeti anyagokhoz képest a kompozitok jelentős előnye a kis sűrűség és a megnövelt szilárdság és merevség a teherviselés kitüntetett irányában. Hátrányuk a fémekkel szemben a gyúlékony szerves mátrix. Az egyre szigorodó biztonsági követelmények miatt felmerült az igény olyan égésgátolt kompozitok előállítására, amelyek a repüléstechnika mechanikai és égésgátlási követelményeit egyaránt kielégítik.

Korábbi tanszéki kísérletek eredményeként kifejlesztettek egy reaktív foszfortartalmú égésgátló hatású térhálósító komponenst (TEDAP) az epoxigyantákhoz. Munkám során egy alifás és egy aromás referencia epoxigyanta éghetőségi tulajdonságainak javítását tűztük ki célul TEDAP alkalmazásával. A szabványos LOI, UL-94 és mass loss kaloriméteres éghetőségi vizsgálatok, valamint a lézerpirolízis-FTIR kapcsolt módszer eredményei alapján sikerült a gyanták és a szénszálerősítésű kompozitok éghetőségét jelentős mértékben lecsökkenteni. A szénszál már önmagában is csökkentette a gyanta éghetőséget, de az égésgátlási szabványok teljesítéséhez emellett feltétlenül szükség volt égésgátló alkalmazására is.

Az égésgátolt kompozitok mechanikai tulajdonságait is megvizsgáltuk; méréseink során a szakító szilárdsági jellemzőket határoztuk meg. Mivel a referencia kompozitok jobb értékeket mutatott az égésgátoltnál, ezért bevonatolt kompozitot készítettünk, ahol a terhelések nagyobb részét viselő belső fázis módosítatlan, míg a külső fázis égésgátolt gyantából készült.

Ily módon sikerült egy jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkező, égésgátolt kompozitot készítenünk, amelyre nagy igény mutatkozik, főleg a repüléstechnikában.

Összefüggés az adaléksomag összetétele és a nagysűrűségű polietilén cső hidrolitikus stabilitása között

Tátraaljai Dóra V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Földes Enikő tudományos csoportvezető, c. egyetemi tanár

MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet, BME FKAT Műanyag- és Gumiipari Laboratórium

A polietilén csöveknek különböző hatásoknak kell ellenállniuk: hőhatás, oxigén, UV sugárzás, vizes közeg hatása és egyéb környezeti tényezők. Ahhoz, hogy a PE csövek elérjék a tőlük megkívánt, akár 50 éves élettartamot, megfelelően kell stabilizálni őket. Az antioxidánsok hatékonysága mellett figyelembe kell venni a stabilizátorok kölcsönhatását, migrációját és vízben való kioldódását is.

Kutatómunkám során különböző primer (fenolszármazékok) és szekunder (kéntartalmú és gátolt amin) antioxidánsok kombinációival stabilizált polietilén csövek tulajdonságait tanulmányozom. A kutatás célja meghatározni az összefüggést a stabilizátor csomag összetétele és hatékonysága között a polimer feldolgozása és hidrolitikus körülmények között történő alkalmazása során. A csövek alapanyaga Tipelin PS 380 jelű, Phillips típusú polietilén. A polimert az adaléksomagokkal a TVK-ban homogenizálták és granulálták, majd a Pannopipe-nál 32 mm névleges külső átmérőjű csöveket gyártottak belőle. A csöveket 0, 3, 5, 7 és 12 hónapig 80 °C hőmérsékletű vízben áztatták a TVK-nál.

A polimer kémiai szerkezetét infravörös spektroszkópiával, a színét a sárgasági indexszel (YI) és az optikai L paraméterrel jellemzem. A reológiai tulajdonságok meghatározásához a folyásindexet (MFI), a maradék termooxidatív stabilitásához az oxidációs indexet (OIT) mérem. A csövek fizikai állapotát a sűrűséggel és az olvadási tulajdonságokkal jellemzem. A polimer mechanikai szilárdságát húzóvizsgálatokkal mérem. A csövek szilárdságának meghatározására az ISO 13480:1997 szabvány szerint vizsgálom a repedésterjedési sebességet (Cone-teszt).

A dolgozatban két fenolos és öt szekunder antioxidáns kombinációjával stabilizált csövek tulajdonságainak változását mutatom be. Az eredmények azt mutatják, hogy a különböző adaléksomagok eltérően befolyásolják a polimer feldolgozási és hidrolitikus stabilitását. A polimer tulajdonságait elsősorban a feldolgozás során lejátszódó kémiai reakciók határozzák meg, míg a cső elszíneződését és termooxidatív stabilitásának csökkenését a stabilizátorok reakciói és kioldódása eredményezi az áztatás során. Összefüggés állapítható meg a polimer kémiai szerkezete és reológiai jellemzői, valamint a cső szilárdsága között.

Reakciókinetika tagozat

Peroxomonoszulfát-ion reakciója jodid- és bromidionokkal

Bajusz Dávid, I. évf. kémia BSc. hallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

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

A peroxomonoszulfát-ionok és bromid-, illetve jodidionok között végbemenő reakciók kinetikáját vizsgáltuk. A folyamat során elemi halogének keletkeznek, melyek számottevő veszélyforrást jelenthetnek az utóbbi időben környezetbarát reagensként egyre népszerűbbé váló peroxomonoszulfát-ionok felhasználása során. Vizsgálataink során az anyagokat jelentős oxidálószerfelesleg mellett reagáltattuk, mellyel a peroxomonoszulfát-ion (Oxone[®]) fő felhasználási területein jelen lévő körülményeket kívántuk reprodukálni.

Kísérleteink során vizsgáltuk a folyamat egyes reagensekre vonatkoztatott koncentrációfüggését, hőmérsékletfüggését, valamint a halogenidionok vizes oldataiban beálló gyors egyensúlyok hatását a reakcióra. Végül a kapott eredmények segítségével kinetikai modellt javasoltunk a reakció értelmezésére, melynek segítségével felírtuk a sebességi egyenleteket és meghatároztuk a sebességi állandókat. A reakciósebesség hőmérsékletfüggését az Eyring-egyenlettel értelmeztük, a kapott adatok segítségével pedig meghatároztuk az aktiválási paramétereket.

A reakció megfigyelésére irányuló korábbi kísérletek eredményei [1,2] jó összehasonlítási alapot szolgálnak a reakció kinetikai tulajdonságaira eltérő körülmények között.

Eddigi kutatások során a reakciót még soha nem tanulmányozták oxidálószerfelesleg mellett. Kísérleteink kimutatták, hogy bár a reakció mechanizmusa nem változik a nagy halogenidionfeleslegnél tapasztalható képest, számos részlet jelentősen különbözik ebben az esetben. Míg halogenidfelesleg mellett a reakció végtermékei legnagyobb részben trihalogenidionok, addig oxidálószerfelesleg mellett halogének. Ezeket a halogéneket aztán az oxidálószer továbboxidálja halogenátionokká.

[1] Fortnum, D. H.; Battaglia, C. J.; Cohen, C. R.; Edwards, J. O. *J. Am. Chem. Soc.* **1960**, *82*, 778.

[2] Secco, F.; Venturini, M. *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **1976**, 1410.

A ferroin/ferrin rendszer reakciója peroxomonoszulfát-ionnal

Bellér Gábor, IV. évf. vegyészhallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

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

A ferroin-ferrin-rendszer egy jól ismert redoxiindikátor-pár: a redukált alak (ferroin, a vas(II) fenantrolinnal képzett trisz-komplexe) színe élénkpiros, az oxidált forma (ferrin, vas(III) komplex) halványkék. Ezt a tulajdonságát használták már a kémiai hullámok könnyebb követése céljából is, mikor ferroint adtak a Belousov-Zhabotinszkij-reakciórendszerhez. Ezen munkában – korábbi TDK munkám [1] közvetlen folytatásaként – spektrofotometriás módszerrel tanulmányoztuk a peroxomonoszulfát-ion (HSO_5^-) reakcióit a ferroin/ferrin rendszerben.

A ferroinnal lejátszódó reakció vizsgálatakor összetett kinetikai jelenséget tapasztaltunk, mely során a ferroin koncentrációja nem monoton módon változott: kezdetben csökkent, majd lokális minimumot elérve növekedett, végül ismét csökkent. Több módszerrel is sikerült kimutatnunk a ligandum oxidációs termékét (1,10-fenantrolin-mono-N-oxidot) a reakcióelegyből és azt találtuk, hogy jelentős hatással van a reakcióra: a kiindulási elegyhez hozzáadva lassabban csökken a ferroin abszorbanciája. A mérési eredmények alapján modellt javasoltunk a reakció értelmezére, melynek lépéseit bizonyítandó független kísérletekben vizsgáltuk a ferroin primer oxidációs termékét, a ferrint.

A ferrinnel végzett kísérletek során a modell megerősítést nyert és azt a meglepőnek tűnő jelenséget tapasztaltuk, hogy oxidálószer (HSO_5^-) hozzáadásának hatására a ferroin, vagyis a komplex redukált formája keletkezik. Ez az odat színének változásán szabad szemmel is látható volt. A reakció részletes vizsgálata igazolta, hogy a reakció további termékei a fenantrolin oxidált formája, a fenantrolin-N-oxid és szabad vas(III)-ion. A reakció kinetikájának értelmezésekor figyelembe kell venni, hogy a keletkező oxidált ligandum szintén reagál a ferrinnel, és ez a reakció is a redukált komplex, a ferroin képződését eredményezi. Így azonban a ferrin- HSO_5^- bruttó folyamat sztöchiometriája időfüggő.

[1] G. Bellér: *A peroxomonoszulfát-ion reakciója trisz-1,10-fenantrolin-ato-ferrát(II) komplexszel*, TDK dolgozat, Debreceni Egyetem, 2007.

A Landolt- és a Dushman-reakció szimultán kinetikai vizsgálata

Csekő György, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Nagypál István** egyetemi tanár
 SZTE Fizikai Kémiai Tanszék
Dr. Horváth Áttila
 PTE Kémia Intézet Szeretlen Kémiai Tanszék

Munkám során felhasználva az elmúlt néhány évtized számítástechnikai és mérés technikai fejlődését, újra vizsgáltam a Landolt-, valamint a Dushman-reakció kinetikáját puffereit körülmények között. A reakciót spektrofotometriásan követtem legalább a Landolt-idő kétszereséig. Ezen a módon nemcsak a Landolt-idő koncentrációfüggését, hanem a reakciók kinetikáját is megvizsgáltam. A Dushman-reakciót a Landolt-reakció alrendszeréként kezeltem, az összes kísérleti görbét együtt értékeltem.

Ebben a dolgozatban tisztáztam a Landolt-reakció indukciós periódusának jodid-, jodát-, hidrogénszulfid- és hidrogénion koncentráció függését. Első alkalommal mutattam be, hogy a Landolt-idő (t_i) egy minimum görbén megy keresztül a hidrogénszulfid koncentráció függvényében. Bemutattam, hogy egy elég tág koncentráció tartományban a Landolt-idő független a $[\text{HSO}_3^-]_0$ koncentrációtól a kísérleti hibákon belül.

Azt is igazoltam, hogy a Landolt-idő indukciós periódusának reciproka a hidrogén- és a jodidion koncentrációjától mind első, mind második hatványon függ.

Kimutattam azt is, hogy az $1/t_i$ egyenesen arányos a kiindulási jodát koncentrációval. Megmutattam a hidrogénion szuperkatalitikus hatását a Landolt-reakcióban. A Dushman-reakció sebességi egyenletét módosítottam, alacsony jodidion koncentrációknál elsődrendű jodid- és hidrogénfüggés hozzájárulását javasoltam, ami fontos szerepet játszik a Landolt-reakció indukciós periódusának meghatározásában.

A dolgozatomban megadtam egy pontos formulát, amely segítségével puffereit körülmények között ellanyagolás nélkül meg lehet határozni a Landolt-időt.

A kén(IV) autooxidációja ezüst(I) és peroxidiszulfát-ion jelenlétében

Dóka Éva, II. évf. kémia BSc. hallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

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

Az emberi tevékenység és a természetes folyamatok során a légkörbe kerülő kén-dioxid döntő szerepet játszik a savas esők kialakulásában. Ezért fontos a kén(IV) oxigénnel való reakciójának vizsgálata vizes közegben. [1-3]

Munkám során a kén(IV) autooxidációját vizsgáltuk spektrofotometriás kísérletekben, peroxidiszulfát-ionok mint oxidálószer és ezüstion-katalizátor jelenlétében, erősen savas közegben.

Megállapítottuk, hogy bár a peroxidiszulfát-ion erős oxidálószer, katalizátor távollétében nem reagál a kén(IV)-gyel. Katalizátor (AgNO_3) hozzáadása után a kinetikai görbékben jól meghatározható töréspont jelent meg, az abszorbanciaváltozás időben lineáris volt a töréspont előtti és az azt követő szakaszokon is. A töréspont előtt játszódik le a kén(IV) autooxidációja, itt a kén(IV) az oldott oxigénnel reagál mindaddig, amíg az O_2 el nem fogy a rendszerből. Ezután megy végbe a kén(IV) katalitikus oxidációja, a peroxidiszulfát-ion és a kén(IV) közötti reakció.

Az egyenesek meredeksége a töréspont előtti szakaszokon számottevően nagyobbak bizonyult, mint a töréspont után, tehát az autooxidáció sebessége jelentősen meghaladja a katalitikus oxidáció sebességét. Az abszorbanciaváltozás sebességéből az adott pH-n mért moláris abszorpciós koefficiens segítségével számítottuk ki a tényleges reakciósebességet.

A reakció vizsgálatához részletes kinetikai kísérleteket végeztünk, amelyek során megvizsgáltuk a sebesség függését az egyes komponensek (S(IV) , O_2 , Ag^+ , $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$) koncentrációjától, valamint a pH-tól. A reakció értelmezésére kinetikai modellt állítottunk fel, amely megmutatta, hogy a reakció sebessége független az oxigén koncentrációjától és összetett módon függ a többi komponens koncentrációjától.

[1] Kerecsi, I.; Lente, G.; Fábíán, I. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 4785-4793.

[2] Kerecsi, I.; Lente, G.; Fábíán, I. *Dalton Trans.* **2006**, 955-960.

[3] Kerecsi, I.; Lente, G.; Fábíán, I. *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 4230-4238.

Diuron vizes oldatának ultraibolya fotolízise, ózonos, valamint kombinált kezelése

Farkas János, IV. évfolyam, környezettudományi szak

SzTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Alapi Tünde** egyetemi tanársegéd,
Dr. Dombi András, egyetemi docens,
 SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Sajnálatos módon a nagy mennyiségben és elterjedten alkalmazott növényvédő szerek ma már kimutathatók nemcsak a mezőgazdasági szennyvizekben, hanem természetes vizeinkben, számos mezőgazdasági terményben és bizonyos ivóvizekben is. A hagyományos biológiai, kémiai vízisztítási módszerek sok esetben nem elegendően hatékonyak mineralizációjukhoz, minek következtében szükségessé vált az új követelményeknek megfelelő módszerek kidolgozása. Az általam vizsgált diuron egy általános fenil-urea peszticid, melyet igen elterjedten alkalmaznak Európában. Többek között a vasúti pályatestek melletti területek gyomtalanítására, illetve szőlőültetvények, lucernások kezelésére. Vízben való oldhatósága kicsi (42 ppm), azonban igen rezisztens. Bizonyos területeken a diuront annak alkalmazása után 2 évvel is ki tudták mutatni.

Munkám során azonos energiabefektetés mellett hasonlítottam össze az UV fotolízis, ózonos kezelés, valamint az UV fotolízissel kombinált ózonos kezelés hatékonyságát a diuron átalakulása és mineralizációja szempontjából.

A diuron átalakulása során képződött köztitermékeket HPLC-MS-sel analizáltam. Az eredmények egyértelműen arra utalnak, hogy első lépésében az aromás gyűrűhöz kapcsolódó alifás lánc alakul át. Ultraibolya fény jelenlétében minden esetben megtörténik a részleges, vagy teljes dehalogenizáció is.

Az UV fotolízis meglehetősen hatékonynak bizonyult a diuron bontásában annak 254 nm-re vonatkozó, meglehetősen nagy ($17040 \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ cm}^{-1}$) moláris abszorbanáciája miatt. Az oldott oxigén számottevően nem befolyásolta a bomlás sebességét, ami arra utal, hogy a fotoionizáció jelentősége elhanyagolható. Az ózonos kezelés kisebb hatékonyságúnak bizonyult, mint az UV fotolízis, a diuron bomlási sebességét erőteljesen befolyásolta, hogy oxigént, vagy levegőt használtam. Az átalakulási sebesség a két módszer kombinációjának alkalmazásakor volt a legnagyobb, feltehetően az ózon UV fény által indukált bomlása következtében képződött hidroxilgyökök miatt.

A ketoprofen bontása ózonozással

Illés Erzsébet, V. évf. környezettudomány

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Gajdáné Dr. Schrantz Krisztina** egyetemi adjunktus

Dr. Dombi András egyetemi docens

SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Napjainkban a legáltalánosabban használt gyógyszerek a fájdalomcsillapítók és gyulladásgátlók. Az elmúlt 10 évben az új, nem-szteroid típusú gyulladásgátlók (Non Steroid Antiinflammatory Drugs = NSAID) mind számukat, mind felhasznált mennyiségüket illetően egyre emelkedőbb tendenciát mutatnak és az orvosok által alkalmazott gyógykezelésben ma már ezek az élenjárók. Közéjük tartozik a munkám során vizsgált vegyület, a ketoprofen is, melyet azért választottunk, mert Magyarországon ez az egyik leggyakrabban alkalmazott gyógyszerhatóanyag. Manapság nagy probléma, hogy a szennyvízben, és már a természetes vizeinkben is gyógyszermaradványokat találnak, s a gond ezekkel az, a szennyvíztisztítás során csak rendkívül kis mértékben tudják őket eltávolítani. Lebontásukban a legmegfelelőbbnek a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások bizonyultak.

Munkám során a ketoprofen ozonizálásával foglalkoztam, majd a bomlás hatékonyságát összehasonlítottam a kutatócsoportban már vizsgált UV és UV/VUV fotolízis eredményeivel.

Először a készülékünket optimalizáltuk. Az oxigén optimális áramlási sebességének meghatározása érdekében megnéztük, hogyan függ a képződő ózon koncentrációja az oxigén áramlásától. Megállapítottuk az optimális áramlási sebesség esetén képződött oldott ózon mennyiségét.

Az ozonizálás során meghatároztuk a ketoprofen bomlásának sebességét, a bomlás sebességének függését a kiindulási koncentrációtól és a bomlással párhuzamosan képződő melléktermékek egy részének koncentrációváltozását HPLC segítségével. Az eredményeinket a korábbi UV és UV/VUV fotolízis eredményeivel összehasonlítva megállapítható, hogy a fotolízisek hatékonysága jóval nagyobb az ozonizálásnál. A képződött kis molekulatömegű szerves savak, valamint a köztitermékek megegyeznek mindhárom módszernél. A teljes szerves széntartalom vizsgálatának eredményei szerint az 1 órás reakcióidő nem elegendő a teljes mineralizáció eléréséhez egyik módszernél sem.

Gyökfokok hatása a ketoprofen fotolitikus bomlására

Lénárt Zsófia, IV. évf. környezettudományi szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Gajdnáné Schrantz Krisztina egyetemi adjunktus
Dombi András egyetemi docens
SZTE Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

A gyógyszermaradványok előfordulása környezetünkben nem tekinthető új jelenségnek, azonban ennek felismerése annál inkább. Biodegradációs vizsgálatok kimutatták, hogy bizonyos antibiotikumok, rákellenes szerek és fájdalomcsillapítók nem bomlanak el és nem is távolíthatók el a szennyvízből vagy annak iszapjából, így teljes mértékű kivonásuk nem lehetséges hagyományos szennyvíztisztító telepeken [1-2].

Annak lehetőségét, hogy a biológiailag nehezen lebontható gyógyszermolekulákat fotolitikus úton ill. nagyhatékonyságú oxidációs eljárásokkal (elterjedt angol nevük: Advanced Oxidation Processes, AOP) távolítsák el a szennyvizekből, több kutatócsoport is vizsgálta az elmúlt években [3-4].

Csoportunk egyik célja az, hogy azonos kísérleti berendezés és körülmények alkalmazásával összehasonlíthatóvá tegye a különböző módszerekkel végzett, és különböző gyógyszercsaládok képviselőinek lebontása során meghatározott kinetikai paramétereket és megkísérelje megállapítani a célvegyületek bomlásmechанизmusát.

Munkám során három gyökfokó, a metanol, nátrium-azid és az 5,5-dimethyl-1-pyrroline N-oxide (DMPO) hatását vizsgáltuk a nem-szteroid típusú gyulladásgátlók egyik képviselőjének, a ketoprofennek az ultraibolya (UV) és a vákuum-ultraibolya fényvel kombinált ultraibolya (UV/VUV) fotolízisére. A hidroxil-gyökök a vártnál kisebb mértékben befolyásolják a bomlás sebességét. A reakcióhoz egyéb gyökök is hozzájárulnak, mint pl. a $O_2^{\cdot-}$, $CO_2^{\cdot-}$ és H^{\cdot} . Az utóbbi kettőnek képződését elektron-spin rezonancia spektroszkópiával (ESR) igazoltuk.

- [1] Jones O. A. H., Voulvoulis N., Lester J. N., *Crit. Rev. Environ. Sci. And Tech.*, 35, 401-427 (2005)
- [2] Kümmerer, K.(Ed.), *Pharmaceut. in the Environ.:Sources, Effects, Fate and Risks*, 2nd ed, Heidelberg (2004)
- [3] Vogna, D., Marotta, R., Napolitano, A., Andreozzi, R., d'Ischia, M., *Wat. Res.*, 38, 414-422 (2004)
- [4] Vogna, D., Marotta, R., Andreozzi, R., Napolitano, A., d'Ischia, M., *Chemosphere*, 54, 497-505 (2004)

Oldószer összetétel és oldott oxigén hatása a fenol ultraibolya fotolízisére acetonitril-víz elegyekben

Pallagi Attila, IV. évf. vegyész szak

SzTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Alapi Tünde** egyetemi tanársegéd,
Dr. Dombi András egyetemi docens
SZTE, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A környezetünkbe került szerves anyagok jelentős része biodegradáció során bomlik le, emellett azonban fontos szereppel bírnak a látható, vagy ultraibolya fény hatására végbemenő folyamatok is. A szerves szennyezőanyagok ultraibolya fotolízisének vizsgálata több évtizedes múltra tekint vissza, azonban a reakciókörülményeknek a fotooxidáció során lejátszódó fizikai és kémiai folyamatokra gyakorolt hatására vonatkozó ismeretek még hiányosak. A molekuláris oldott oxigén jelentős mértékben befolyásolhatja a fotolízis során lejátszódó reakciók mechanizmusát és az átalakulás kinetikáját. Fotoionizáció lejátszódásakor elektronbefogóként szerepelhet, valamint oxigéntartalmú reaktív részecskék létrejöttén keresztül számottevően növelheti az oxidáció hatékonyságát. Bizonyos esetekben azonban az alapállapotú oxigénmolekula képes energiatranszfer folyamatokon keresztül kioltani egy másik molekula gerjesztett állapotát, ezáltal csökkentve annak átalakulására vonatkozó kvantumhasznosítási tényező értékét.

Munkám során összefüggést kerestem a 254 nm hullámhosszúságú fényvel gerjesztett fenol által kibocsátott fluoreszcens fény intenzitása, az oldott oxigén koncentrációja, az oldószer összetétel, valamint a fenol bomlási sebessége között acetonitril és víz különböző összetételű elegyeiben. Az oldott oxigén jelentősen csökkenti a fluoreszcens fény intenzitását acetonitriles oldatban, azonban vizes oldatokban nem befolyásolja azt. A fenol bomlási sebességét acetonitrilben csökkenteti, vízben viszont növeli az oldott oxigén. A kísérleti eredményeket részben azzal értelmeztem, hogy az oldószer minősége, ezáltal az oldószer és a fenolmolekulák közt kialakuló kölcsönhatás jellege és erőssége befolyásolja az oldatban lejátszódó fotofizikai folyamatokat. Acetonitrilben a gerjesztett állapotú fenol élettartama hosszabb, ezáltal a fenol és oxigén közti energiatranszfer folyamat jelentős szerephez jut a fenol relaxációja szempontjából. Vizes oldatokban a gerjesztett állapotú fenol élettartama rövidebb, minek következtében a fenol oxigénnel való ütközés útján történő relaxációja elhanyagolható.

Perklorátionok elektrokatalitikus redukciója ródiumon

Sas Norbert, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet

Témavezető: Dr. Láng Győző egyetemi tanár

Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratórium

Napjainkban igen nagy érdeklődés övezi a perklorátionok redukciójával foglalkozó munkákat. Ennek fő oka, hogy a világ számos helyén a talaj- és ivóvizekben szennyezőként perklorátionok találhatóak. Ez jelentős egészségügyi kockázatot jelent, mivel a perklorátionok gátolják a pajzsmirigyben történő jódfelvételt, valamint roncsolják a csontvelőt is [1].

A perklorátionok vizes közegbeni redukciója termodinamikailag kedvezményezett, a nyolc elektron átmenetével járó redukció $\text{ClO}_4^- + 8e^- + 8\text{H}^+ = \text{Cl}^- + 4\text{H}_2\text{O}$ standard elektródreakciópotenciálja $E_0^* = 1.388 \text{ V}$, a reakció azonban kinetikailag erősen gátolt. Ezen kinetikai gátlásra alapozva elektrokémiai kísérletek eredményeinek értelmezésekor gyakran figyelmen kívül hagyták a perklorátionok redukcióját, annak ellenére, hogy néhány fémrel (Co, Zn, Al, Fe) reagálva a ClO_4^- ion redukálódik már szobahőmérsékleten is [1]. Ismert, hogy a ClO_4^- -ionok bizonyos fémeken pl. Pt, Rh, stb. megfelelő körülmények között elektrokémiailag is redukálhatóak [1], ám a szakirodalomban nincs egyetértés a redukció mechanizmusát illetően.

A homogén fázisban végbemenő perklorátredukcióhoz hasonlóan, az elektród felületén végbemenő redukció is oxigéntranszferet feltételez. Az irodalomban leírtak, és saját méréseink alapján feltételezhetjük, hogy ródium elektród esetében a redukciós folyamat egyik elemi lépése a ClO_4^- -ionok adszorpciója az elektród felületén [2].

Jelen munka célja a ródiumon végbemenő perklorátredukció kinetikájának és mechanizmusának vizsgálata volt. A vizsgálatokhoz voltametriás és impedanciaspektroszkópiás módszereket alkalmaztunk. A ClO_3^- és ClO_4^- ionok redukciós sebességének összehasonlítása alapján arra a következtettünk, hogy a teljes perklorátredukciós folyamat sebességmeghatározó lépése a $\text{ClO}_4^- \rightarrow \text{ClO}_3^-$ átalakulás lehet. A kidolgozott kinetikai modell alapján levezettünk egy, az elektród impedanciáját leíró matematikai kifejezést. A rendszerre jellemző fontosabb fizikai-kémiai paramétereket közvetlen méréssel, vagy az impedanciaspektroszkópiás adatokból komplex nemlineáris paraméterbecslés alapján határoztuk meg.

[1] G.G. Láng, G. Horányi, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 552, 197-211 (2003)

[2] G.G. Láng, N.S. Sas, M. Ujvari, *Electrochimica Acta* 53, 7436-7444 (2008)

Közegmozgás hatásának vizsgálata vízszintesen haladó reakciófrontokban

Schusztér Gábor IV.évf. Környezettudományi szak,

Sinkó Zita V. évf. Környezettudományi szak

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Tóth Ágota egyetemi docens

Tóth Tamara PhD hallgató

SZTE Fizikai Kémiai Tanszék

Munkánk során vízszintes edényekben haladó reakciófrontokban tanulmányoztuk kísérletileg a konvekció jelenségét, amelyet alapvetően az áramló közegek közötti sűrűségkülönbség indukál. A sűrűségbeli eltérés kétféleképpen jöhet létre: okozhatja a kémiai reakcióban bekövetkező összetételváltozásból adódó sűrűségváltozás, illetve a közegek közt fennálló hőmérsékletkülönbség. Ha a kisebb sűrűségű közeget rétegezzük a nagyobb sűrűségűre, akkor anyagáramlást nem tapasztalunk; ellenkező esetben viszont a két közeg helycseréje figyelhető meg, ami maga a konvekció jelensége. Vízszintesen haladó front esetén ez a függőleges frontalak torzulását eredményezi. Az autokatalitikus reakció térbeli lejárásódása kémiai frontot eredményez, amelyben a sűrűségváltozás a front két oldalán állandó. Korábban elméleti számításokkal bemutatták, hogy vízszintesen haladó frontoknál állandó alak jön létre. Az alakzatot jellemző keveredési hossz, amely a front legelőrehaladottabb és leglemaradottabb pontjai közötti távolság, négyzetesen nő a reakcióedény magasságának növelésekor [1]. Célunk, hogy az elméleti számítások során kapott eredményeket kísérletileg igazoljuk.

Vizsgálataink tárgya a tetratiónion kloridionnal történő autokatalitikus oxidációja volt, amelyben az általunk alkalmazott kísérleti körülmények között a termékoldat sűrűsége a nagyobb a reaktánsénál. A kísérleteket Hele-Shaw reakció-edényben végeztük, amelyben kellő mértékben keskeny, hosszú, és 1-4 cm között változtatható magasságú folyadék réteget kaptunk.

Megfigyeltük, hogy 1 és 2 mm vastag edény alkalmazásakor stabil frontalak alakul ki, míg 3 mm vastagnál egy intenzíven keveredő rendszer jön létre, amelyben a reaktánsoldat sűrűsége lokálisan nagyobb a termékénél. Feltételeztük, hogy ez a reakció során termelődő hő okozta lokális sűrűségcsökkenés következménye, ezért a kísérleteket 3 °C -ra termosztálva is elvégeztük. Ekkor a korábbiakhoz hasonló állandó mintázatokat kaptunk. A keveredési hosszt az edénymagasság függvényében ábrázolva és a görbékre hatványfüggvényt illesztve a kitevők értékei az edényvastagságtól és a reaktánskoncentrációtól függően 1,2 -1,5 között változtak, tehát az elméleti számításoknál alkalmazott modell mindenképpen módosításra szorul.

[1] Rongy, L., Goyal, N., Meiburg, E., De Wit, A., *J. Chem. Phys.*, 127 , 114710 (2007)

Dopamin oxidálása peroxomonoszulfát-ionnal vas(III) katalizátor jelenlétében

Simon Adrienn, V. évf. vegyészhallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Fábrián István egyetemi tanár

DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A dopamin a testben termelődő vegyület, mely biológiai szempontból nagyon fontos, túlermelődése és hiánya is jelentős problémát okoz. Élő rendszerekben lebontása gyakran oxidatív úton történik, ezért alapkutatási szempontból igen fontos a dopamin különböző reakciókkal történő oxidációjának kinetikai vizsgálata.

Jelen munkában a dopamin (DA) katalitikus oxidációját tanulmányoztuk vas(III) katalizátor és peroxomonoszulfát-ion oxidálószer használatával. Függetlenül ismert, hogy a Fe^{3+} közvetlenül oxidálja a dopamint. [1] Szintén korábbi kísérleti információ, hogy a képződött Fe^{2+} -t a peroxomonoszulfát-ion gyors reakcióban visszaoxidálja Fe^{3+} -má, [2] ezért katalitikus ciklus kialakulása várható.

A reakciókat spektrofotometriás műszerekkel követtük, a kinetikai méréseket a termék elnyelésének egy jól követhető hullámhosszán végeztük.

A kísérleteink során megállapítottuk, hogy savas körülmények között nem történik katalitikus autooxidáció, így a méréseink nem igényeltek oxigénmentes körülményeket. A kezdeti reakciósebesség koncentrációfüggését megvizsgáltuk valamennyi reaktsánsra nézve. Azt tapasztaltuk, hogy a várakozásainkkal ellentétben a peroxomonoszulfát-ion nem nullad-, hanem elsőrendű függést mutat, de nulladrendű tag is megjelent a sebességi egyenletben. A kezdeti sebesség Fe^{3+} koncentrációfüggésének vizsgálata pedig kevert első- és másodrendre utal. A reakciósebesség dopaminkoncentráció-függése elsőrendű. Így a kísérletileg meghatározott sebességi egyenlet a következő:

$$v = (k_a [\text{Fe}^{3+}]^2 + k_b [\text{Fe}^{3+}][\text{HSO}_5^-])[\text{DA}]$$

Eredményeink alapján a reakció kezdeti szakaszának értelmezésére részletes kinetikai modellt javasoltunk, amelyben a vas(III) és dopamin közti 1:1 komplexképződést követően a sebességmeghatározó lépésben ezt a komplexet vagy vas(III)ion vagy peroxomonoszulfát-ion oxidálja.

[1] El-Ayaan, U.; Herlinger, E.; Jameson, R. F.; Linert, W. *Dalton Trans.* **1997**, 2813–2818.

[2] Lente, G.; Kalmár, J.; Baranyai, Zs.; Kun, A.; Kék, I.; Bajusz, D.; Takács, M.; Veres, L.; Fábrián, I. *közlésre beküldve*.

A pH hatása fenol vizes oldatának ultraibolya fotolízisére, valamint ózonos és kombinált kezelésére

Szakács Eszter, III. évf. vegyész szak

SzTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Alapi Tünde** egyetemi tanársegéd
Dr. Dombi András egyetemi docens
SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az elmúlt évtizedekben az ipar és a mezőgazdaság jelentős mennyiségű, gyakran erősen toxikus és biológiailag nehezen lebontható szennyezőanyagokat bocsátott ki környezetünkbe. Bizonyos szennyezőanyagok eltávolításához, mineralizációjához a hagyományos biológiai, kémiai víz tisztítási módszerek nem elegendően hatékonyak, minek következtében szükségessé vált az új követelményeknek megfelelő módszerek kidolgozása.

Munkám során olyan laboratóriumi méretű reaktort használtam, melynek segítségével azonos energiabefektetés mellett, az UV fotolízis, ózonos kezelés, valamint az UV fotolízissel kombinált ózonos kezelés hatékonyságát hasonlítottam össze a fenol, mint modellvegyület átalakulása és mineralizációja szempontjából. Fényforrásként 254 nm hullámhosszúságú UV, valamint 185 nm hullámhosszúságú VUV fényt egyaránt kibocsátó kisnyomású higanygőzlámpát használtam. A kis intenzitású VUV fény alkalmas az ózon fotokémiai generálására. A képződött ózon UV fotolízise során vizes közegben igen reaktív hidroxilgyökök képződnek. Ugyanakkor a fenol is elnyeli a 254 nm hullámhosszúságú UV fényt, így a reakciókörülményektől és a lámpát körülvevő búra anyagától és felépítésétől függött, hogy milyen úton alakult át.

Mindhárom kombinációban tanulmányoztam a fenol kiindulási koncentrációjának, az oxigén, illetve levegő áramlási sebességének, a metanolnak, mint hidroxilgyökfogónak hatását a fenol átalakulásának és teljes mineralizációjának sebességére. Szerves szennyezők oxidatív bontása során a kezelt oldat pH-ja változik, ami befolyásolhatja az alkalmazott módszer hatékonyságát. Ennek megfelelően különös figyelmet fordítottam a pH hatásának vizsgálatára.

Puffert nem tartalmazó oldatok kezelése során a fenol átalakulásának és mineralizációjának sebessége a kombinált kezelés során volt a legnagyobb. A pH növelése az UV fotolízis során csökkentette, ózonos kezelés során nagymértékben növelte, míg a két módszer kombinációját alkalmazva csak kismértékben befolyásolta a bomlási sebességet. Szinergizmus azonban nem volt tapasztalható.

Jodidion oxidációja ozmium-tetroxid és perjodátion elegyével

Timári István, II. évf. kémia BSc. hallgató

DE Természettudományi és Technológiai Kar

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

A jelenleg ismert földgázkészletek nagyobbak, mint a kőolajtartalékaink, ezért várható, hogy az elkövetkező évtizedekben a földgáz jelentősége és szerepe tovább fog nőni. Azonban a gáz halmazállapotú metán szállítása veszélyes és költséges feladat, nehéz kezelhetősége pedig gátolja az új területeken való felhasználását is (például gépjárművek üzemanyagaként). Ezzel szemben a folyékony halmazállapotú metanol biztonságosabban hasznosítható széles körben. Ezért az alkánok, ezen belül a metán szelektív oxidációja alkoholokká nagy jelentőségű folyamat. A közelmúltban James Mayer és kutatócsoportja a metánt egy új módszerrel, az ozmium-tetroxid (OsO_4) és nátrium-perjodát (NaIO_4) együttes használatával oxidálták metanollá. Ezen folyamatnak az az érdekessége, hogy az elért hatást a két anyag különálló használatával nem tudták produkálni. [1]

Vizsgálataink során a metánoxidáció mechanizmusának megértése céljából a jodidion és az ozmium-tetroxid/perjodátion elegy közötti reakciót tanulmányoztuk. Kísérleteink során azt tapasztaltuk, hogy az ozmium-tetroxid/perjodátion elegy széles pH-tartományban gyorsabban oxidálja a jodidiont, mint ha a két oxidálószer önmagában alkalmazzuk.

Az ozmium-tetroxidot és perjodátiont is tartalmazó reakcióelegyben sem spektrofotometriás, sem pH-potenciometriás módszerrel nem tudunk semmiféle komplex részecskét kimutatni. A kinetikai effektusok tanulmányozása során stopped flow módszerrel – a képződő jód keletkezését követve – semlegeshez közeli pH-n több kísérlet-sorozatban megvizsgáltuk a reakciósebesség koncentrációfüggését. A koncentrációfüggések az esetek egy részében elsőrendű, más körülmények között pedig telítési görbét követtek. Ezek kinetikai magyarázata lehetne egy kis stabilitású adduktum képződése, azonban ezt az értelmezést a metán oxidációja [1] során tapasztaltak kizárják. Magyarázatként felvethető az is, hogy az ozmium-tetroxid a jodidion-perjodátion reakcióban keletkező egyik közttermékkel reagálva fejt ki katalitikus hatását. Ennek azonban ellentmond az, hogy a szinergikus hatás két nagyon különböző rendszerben is tapasztalható.

[1] Osaka, T.; Watson, E. J.; Dehestani, A.; Bales, B. C.; Mayer, J. M. *Angew. Chem.*, **2006**, *118*, 7593-7596.

Szerves kémia I. tagozat

Heterociklusos glükóz származékok, mint potenciális glikogén foszforiláz inhibitorok

Czece Laura, VII. évf. vegyész

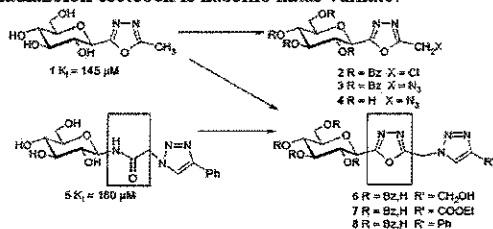
DE TEK Természettudományi Kar

Témavezető: Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta egyetemi adjunktus

DE TEK Szerves Kémiai Tanszék

Munkám célja olyan új glükózszármazékok előállítása volt, melyek a glikogén foszforiláz enzim új inhibitorai lehetnek, és ezáltal szerepet kaphatnak a II. típusú cukorbetegség gyógyításában. Ennek keretén belül 1,3,4-oxadiazol és 1,2,3-triazol gyűrűt tartalmazó glükózszármazékok szintézisét vizsgáltam.

Olyan új vegyületek (2- β -D-glükopiranozil-5-szubsztituált-1,3,4-oxadiazolok) előállítását terveztük, amelyekből az 1 oxadiazol metilcsoportján végzett helyettesítések révén az enzim β -csatornájába való jobb illeszkedés, ezáltal pedig erősebb gátló hatás várható. Az oxadiazol, valamint a triazol egység felfogható az amid (NHCO) részlet bioizosztérikus helyettesítőjeként is. Mivel az 1 metil-oxadiazol és a 5 fenil-triazol származék jó gátlást mutatott, ezért az általam előállított szubsztituált-oxadiazolok esetében is hasonló hatás várható.



A 2 klórmethyl-oxadiazolból előállított 3 5-azidometil-1,3,4-oxadiazolot acétilén származékokkal Cu(I) katalizátor jelenlétében reagáltatva a 6-8 triazolilmetil-oxadiazol származékokat szintetizáltam. A 6 és 8 cukorszámazékok védőcsoportjait a Zemplén-féle módszerrel (NaOMe/MeOH) távolítottam el, míg a 7 vegyület Zemplén körülmények között a megfelelő metilésztert (R' : COOMe), nátrium-hidroxid jelenlétében a karbonsavat (R' : COOH), míg ammóniás metanolos közegben a savamidot (R' : CONH₂) adta. Az új vegyületek enzimgátló hatásának meghatározására a közeljövőben kerül sor.

Rézkatalizátorok szintézise és alkalmazása cikloaddíciós reakcióban

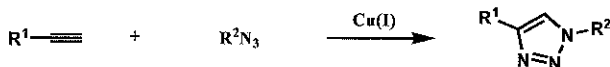
Gonda Zsombor, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Novák Zoltán egyetemi adjunktus

ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Az elmúlt években egyik igen alaposan vizsgált és széles körben alkalmazott reakció a terminális acetilének és azidok között lejátszódó réz-katalizált 1,3 dipoláris cikloaddíció, közkezdvelt nevén „klikk-reakció”.¹⁻⁶ Katalizátorként leggyakrabban CuSO₄-ot alkalmaznak, amit Na-aszkorbáttal *in situ* redukálnak a katalízishez szükséges Cu(I) ionokká. A reakció általában 1-5 mol% katalizátort igényel, azonban sokszor nagy mennyiségű redukálószer és 10 mol%-nál is több katalizátor jelenléte, továbbá magas hőmérséklet szükséges a sikeres átalakítás eléréséhez.



Kutatásaink során olyan katalizátorrendszereket próbáltunk kidolgozni, amelynek segítségével akár 0.001 - 0,05 mol% Cu(I) katalizátor jelenlétében, szobahőmérsékleten néhány óra alatt is elvégezhető a reakció. Ezeket az eredményeket foglaltuk össze a dolgozatban.

- [1] Chassaing, Stefan; Kumarraja, Mayilvasagam; Sido, Abdelkarim Sani Souna; Pale, Patrick; Sommer, Jean. *Org. Lett.* **2007**, *9*(5), 883-886.
- [2] Beckmann, Henning S. G.; Wittmann, Valentin. *Org. Lett.* **2007**, *9*(1), 1-4.
- [3] Zhang, Li; Chen, Xinguo; Xue, Peng; Sun, Herman H. Y.; Williams, Ian D.; Sharpless, K. Barry; Fokin, Valery V.; Jia, Guochen. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*(46), 15998-15999.
- [4] Rodionov, Valentin O.; Fokin, Valery V.; Finn, M. G. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2005**, *44*(15), 2210-2215.
- [5] Chan, Timothy R.; Hilgraf, Robert; Sharpless, K. Barry; Fokin, Valery V. *Org. Lett.* **2004**, *6*(17), 2853-2855.
- [6] Lewis, Warren G.; Magallon, Fernando G.; Fokin, Valery V.; Finn, M. G. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*(30), 9152-9153.

Biológiai fontosságú alapvázak új funkciós csoportjainak kiépítése palládiumkomplexek által katalizált aminokarbonilezési reakciókban

Horváth László, V. évf. kémia-környezettan

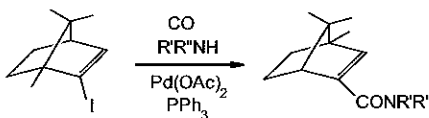
PTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kollár László egyetemi tanár

PTE Szervetlen Kémiai Tanszék

A ketonokból a megfelelő hidrazon-származékokon keresztül kialakított jódkének a különböző palládium-katalizált kapcsolási és karbonilezési reakciók fontos szubsztátumai [1]. Az elmúlt évek során tropánvázás vegyületek homogénkatalitikus aminokarbonilezése területén végzett tudományos diákköri munkámat [2,3] kiterjesztettem a kámforból, illetve kinuklidinonból előállítható jód-alkénekre.

Könnyen elérhető kiindulási anyagokból, kámforból és kinuklidinonból előállítottam a 2-jódbornént és az 1-jód-kámfént, valamint a 3-jód-2-kinuklidént. Palládium-foszfin *in situ* katalizátorok jelenlétében vizsgáltam a fenti jódkének mint szubsztátumok aminokarbonilezési reakcióit.



2-Jódbornén palládium-katalizált aminokarbonilezése

[1] Skoda-Földes, R.; Kollár, L. *Curr. Org. Chem.* 6, 1097-1119 (2002).

[2] Horváth, L.; Berente, Z.; Kollár, L. *Lett. Org. Chem.* 2, 124-127 (2005).

[3] Horváth, L.; Berente, Z.; Kollár, L. *Lett. Org. Chem.* 4, 236-238 (2007).

ÖSZTRÁNVÁZAS GYŰRŰS NITRON DIPÓLUSOK DIPOLÁRIS CIKLOADDÍCIÓS REAKCIÓI C=N DIPOLAROFILEKSEL

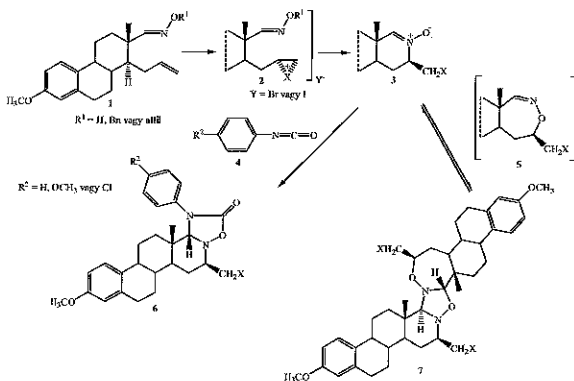
Huber Judit, IV. évf. gyógyszerész

SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Mernyák Erzsébet tudományos munkatárs

SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék

Ösztránvázás D-szekoosimokból vagy oximéterekből (1) kiindulva, elektrofil reagensek hatására gyűrűs nitronokat (2) képeztünk, majd elvégeztük az utóbbi dipólusok 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakcióit C=N dipolarofilekkel (4, 5). A fenilizocianátokkal (4) végrehajtott reakciók jó termeléssel és sztereoselektíven szolgáltatják a kívánt kondenzált vázas heterociklusos szteroidokat (6). Szteroid C=N dipolarofilek (5) hatására, egyensúlyi reakciókban, nem szimmetrikus szteroid-dimerek (7) képződtek. Az újonnan előállított vegyületek szerkezetének bizonyítását egy- és kétdimenziós NMR-spektroszkópiai módszerekkel és MALDI TOF tömegspektrometriával végeztük, ez utóbbinál C70 fullieréneket alkalmazva mátrixként.



Glikopeptid antibiotikumok lipofil difoszfónát származékainak szintézise

Hutyra-Grám Nóra, IV. évf. vegyész-mérnök

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: **Dr. Sztaricskai Ferenc** emeritus tudományos tanácsadó
DE OEC GYTK Gyógyszerészi Kémiai Tanszék

Napjainkban az antibiotikum terápia leghatásosabb fegyvere a glikopeptid szerkezetű vankomicin és teikoplanin. Ezen antibiotikumok csontokhoz való kötődésének képessége azonban gyenge, ugyanakkor az osteoporosis kezelésére használatos difoszfónátok [1] jelentős kelátképzők és erősen kötődnek a csontokhoz [2]. Ez adta az ötletet, hogy ezen molekulákat kovalens kötéssel kombináljuk remélve, hogy előnyös tulajdonságaikat az utódokba is „átörökítik”.

Munkánk során a vankomicinre és risztocetinre kidolgozott (HF/anizol) deglikozilezési módszert elsőként sikeresen alkalmaztuk az A₂-teikoplanin antibiotikumra.

Az antibiotikum aglikonokból és egy több lépéses szintézisben módosított, részlegesen védett alendronsavból tiokrabamid kötésen keresztül difoszfónát észter származékokat állítottunk elő, és tanulmányoztuk ezek antibiotikus aktivitását.

Vegyületeink közül a teikoplanin-pszéudo-aglikon tioureido származékának in vitro aktivitása több teszt mikroorganizmus esetében felülmúlta a forgalomban levő vankomicint és A₂-teikoplanint.

Kísérleteket végeztünk az alkalmazott etil-észter-csoportok eltávolítására.

Eredményeink azt mutatták, hogy a jövőben is érdemes lesz ezeket a kísérleteket folytatni más típusú kovalens kötések kialakításával és védőcsoportok alkalmazásával.

[1] Lin, J.H., *Bone*, 18, 75-85 (1995)

[2] Herczegh, P., Buxton, Th.B., McPherson, J.C., Kovács-Kulyassa, Á., Brewer, P.D., Sztaricskai, F., Strober, G.G., Plowmann, K.M., Farcasiu, D., Hartmann, J.F., *J. Med. Chem.*, 45, 2338-2341 (2002)

Jód-dién funkciós csoportot tartalmazó androsztán-származékok palládium-katalizált aminokarbonilezése

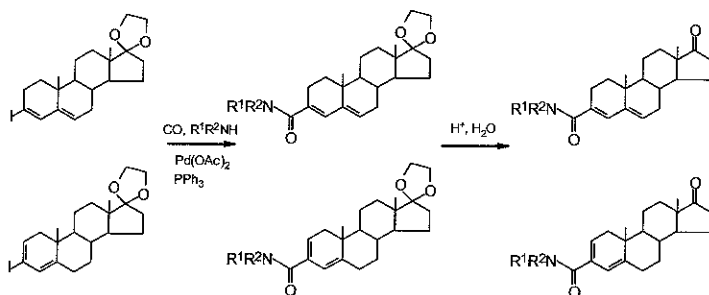
Kiss Mercédesz, IV. évf. biológia-kémia

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kollár László** egyetemi tanár

PTE Szeretlen Kémiai Tanszék

Tudományos diákköri munkám során a szteránváz homogénkatalitikus funkcionálizálási lehetőségeit vizsgáltam [1]. Dolgozatomban egy alapvegyületnek tekinthető ketoszteroidból (androszta-4-én-3,17-dion) előállított, jód-dién szerkezeti részletet tartalmazó származékok palládium-katalizált aminokarbonilezési reakcióit foglalom össze. A farmakológiai fontosságú szteroidok esetében kulcsfontosságú 3-as és 17-es pozíció aminokarbonilezését — a keto-csoportok szelektív védésén keresztül előállított — 3-jód-3,5-dién és 3-jód-2,4-dién-származékokon keresztül valósítottam meg.



3-Jód-diének palládium-komplexek jelenlétében végzett aminokarbonilezése

A védőcsoport eltávolításával a karbonsamid származékok további átalakítását lehetővé tevő értékes 17-keto intermediereket nyertünk. Nagynyomású aminokarbonilezési reakcióban — a karbonsamidok mellett — kettős szén-monoxid beáramlással keletkező 2-ketokarbonsamid típusú termékek jelenlétét mutattuk ki.

[1] Skoda-Földes, R.; Kollár, L., *Chem. Rev.* 103 (10), 4095-4129 (2003)

2-Benzilidén-6-metoxi-1-tetralonok szintézise

Kovács Dóra Irén, III. évf. kémia BSc.

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

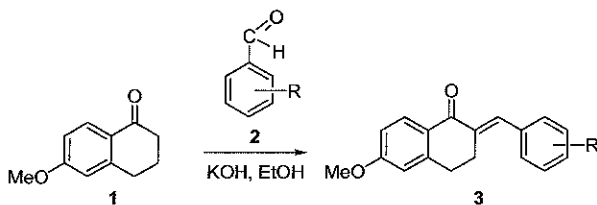
Témavezető: Dr. Wöfling János tanszékvezető egyetemi docens

SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A 2-benzilidén-6-metoxi-1-tetralonok előállítására, szintetikus potenciálja és több területen mutatott biológiai hatása ismeretes az irodalomban [1,2].

Munkánk során célul tűztük ki a fenilcsoporton monoszubsztituált 2-benzilidén-6-metoxi-1-tetralonok szintézisét.

A 6-metoxi-1-tetralont (1) kálium-hidroxid jelenlétében, etanolban, aldol-kondenzációs folyamatban benzaldehiddel, vagy 2-, 3-, vagy 4-monoszubsztituált benzaldehiddel (2) reagáltattuk. Az átalakítások eredményeként jó hozammal jutottunk a megfelelő (*E*)-2-benzilidén-6-metoxi-1-tetralonokhoz (3). A 19 előállított vegyületből több eddig ismeretlen az irodalomban. Az új származékok szerkezetét NMR-spektroszkópiás módszerekkel igazoltuk. Valamennyi vegyület *in vitro* citosztatikus hatásvizsgálatra került. A biológiai tesztek azt mutatták, hogy a *meta*-szubsztituált származékok hatékonyan gátolják három humán ráksejtvonal esetén a sejtek proliferációját.



[1] Yee, S.W., Jarno, L., Gomaa, M.S., Elford, C., Ooi, L.-L., Coogan, M.P. McClelland, R., Nicholson, R.I., Evans, B.A.J., Brancale, A., Simons, C.

J. Med. Chem. 48 (23), 7123-7131 (2005)

[2] El-Baihi, F.E.M., Al-Rasheed, H.H., Al-Hazimi, H.M. *J. Saudi Chem. Soc.* 9 (3), 575-596 (2005)

ÖSZTRÁNVÁZAS α,β -TELÍTETLEN KETON DIPOLAROFILEK SZINTÉZISE ÉS DIPOLÁRIS CIKLOADDÍCIÓS REAKCIÓI

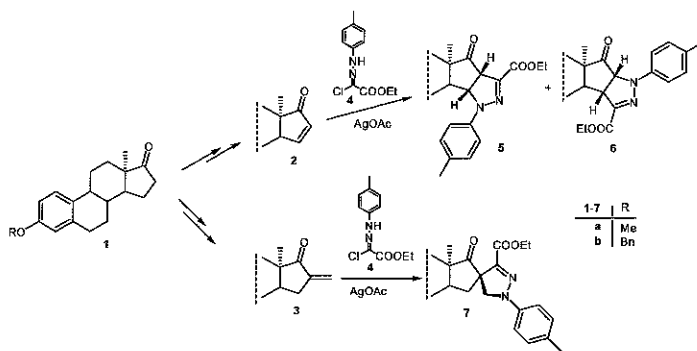
Kozma Eszter Erika, IV. évf. gyógyszerész

SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Mernyák Erzsébet tudományos munkatárs

SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék

A 13-*epi*-ösztron 3-metil- és 3-benziléteréből (**1**) kiindulva endo- (**2**) és exociklusos (**3**) kettős kötésű származékokat állítottunk elő, amelyeket dipolarofilként alkalmaztunk 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakciókban. A nitrilimin dipólus kialakítását az általunk előállított hidrazonoil-kloridból (**4**) *in situ*, ezüstacetáttal végeztük. Az α,β -telítetlen ketonokból (**2**, **3**) a kettős kötés helyzetétől függően kondenzált vázas (**5**, **6**), illetve spirociklusos (**7**) pirazolinokat képeztünk. Az endociklusos kettős kötésű dipolarofilek (**2**) sztereoszelektív reakcióban szolgáltatták a két-két regioizomer végterméket (**5+6**), 2:1 arányban, míg az exociklusos kettős kötésű ketonok (**3**) sztereo- és regioselektíven egy izomer spiropirazolint (**7**) képezték.



Biológiailag aktív vindolinszármazékok szintézise

Lengyel Miklós, V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

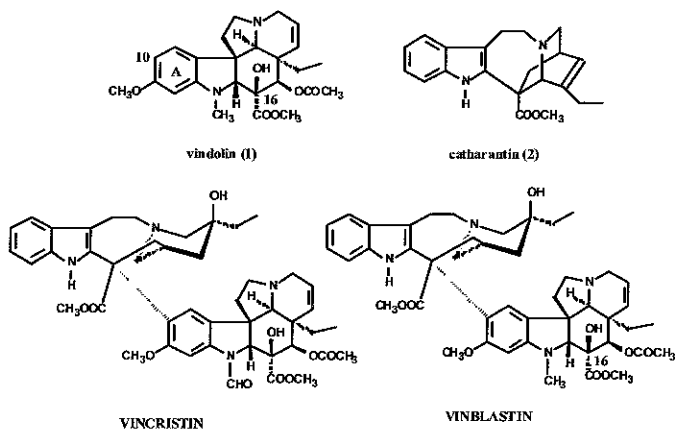
Témavezető: Dr. Hazai László egyetemi magántanár

MTA-BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport

Konzulens: Szántay Csaba akadémikus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az indolvázas alkaloidok egyik jelentős képviselője a vindolin (1), mely a catharantinnal (2) együtt a kiemelkedő citosztatikus hatású dimer alkaloidok, a rákellenes terápiában alkalmazott vincristin és vinblastin egyik komponense.



Annak ellenére, hogy a vincristin és vinblastin az alkaloidkémiai kutatások legjobban vizsgált vegyületei közé tartoznak, mégis a vindolin vagy rokon származékai reakcióinak vizsgálataival kapcsolatban kevés irodalmi adat található.

Munkánk során beszámolunk a vindolin aromás gyűrűjén és a 16-os észtercsoporton végrehajtott olyan átalakításokról, melyek segítségével új, citosztatikus hatású származékok állítható elő.

2,5-Diszubsztituált-1,3,4-oxadiazolok előállítása és átalakításai

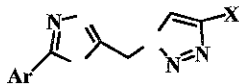
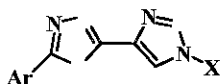
Nagy Gergő Zoltán, V. évf. vegyész

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Patonay Tamás tanszékvezető egyetemi tanár

DE Szerves Kémiai Tanszék

Az 1,3,4-oxadiazolok természetben nem előforduló aromás heterociklusok, melyek számos biológiai hatással rendelkeznek. Ezek közül az egyik legfontosabb hipoglikémiás hatásuk, mivel a II. típusú cukorbetegség egyik lehetséges gyógymódja a máj glikogénlebontását katalizáló glikogénfoszforiláz enzim szelektív gátlása. Az eddig felfedezett inhibitorok szerkezetének elemzése azt mutatja, hogy a (szubsztituált) fenil és a naftil csoportok, valamint az egy-három heteroatomot tartalmazó, öt vagy hattagú aromás gyűrűk kedvezően befolyásolják az inhibíciós hatást. Ezért célul tűztük ki az alábbi két vegyülettípus előállítását és inhibitor hatásának vizsgálatát.



Ar = Ph, 2-Np

X = Ph, C OEt, Si(Me)₃, CH₂OH, C(CH₃)₂OH

Munkám során megvalósítottam a megfelelő kiindulási 5-szubsztituált-1*H*-tetrazolok szintézisét, melyeket a megfelelő 2,5-diszubsztituált-1,3,4-oxadiazolokká (2-(klórmetil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazol és 2-etinil-5-aryl-1,3,4-oxadiazol) alakítottam. Optimáltam a 2-(klórmetil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazol 2-(azidometil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazohoz vezető nukleofil szubsztitúciót. A 2-(azidometil)-5-fenil-1,3,4-oxadiazol és a szubsztituált acetilénvegyületek közötti 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakcióikra sikeresen kiterjesztettem a *Sharpless*-féle "Click Chemistry" metodikát. Sikeres előkísérleteket végeztem a 2-etinil-5-fenil-1,3,4-oxadiazol és fenil-azid 1,3-dipoláris cikloaddíciójánál.

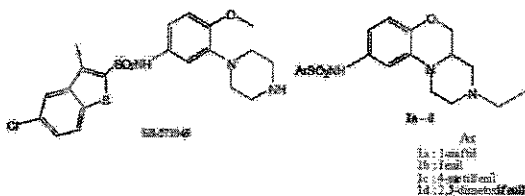
5-HT₂ receptoron ható új vegyületek szintézise

Siklós Márton V. évf. vegyészmérnök

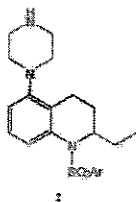
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Témavezetők: Dr. Novák Lajos tudományos tanácsadó
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Hornyánszky Gábor egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kutatásom során egy klinikai fizisban is tesztelt femipiperazin 5-HT₂ antagonistá, az SB-271045 jelű vegyület (GlaxoSmithKline) triciklusos analogonjai közül négyet állítottam elő (1a-d).



Kutatásom második részében a 2-es jelzésű várhatóan 5-HT₂ antagonistá 2-etil-tetrahydrokinolin-vázis vegyületek előállításai lehetőségeit vizsgáltam. A vegyületek alapvázához több különböző szintézisúton is hozzájutottam, illetve sikerült az első analogon szintézisét befejezni.



Ösztránvázis 16-spiro-dioxafoszforinánok szintézise és konformációvizsgálata

Sipos László, IV. évf. vegyész

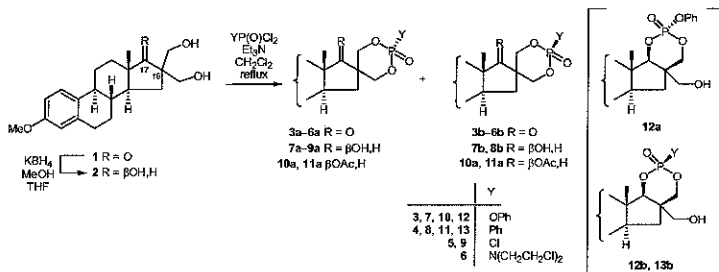
SzTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Frank Éva** egyetemi adjunktus

SzTE Szerves Kémia Tanszék

A dioxafoszforinánok iránti intenzív kutatást elsősorban ezen vegyületek oldatban tanúsított sajátos konformációs viselkedése motiválja. A konformációs flexibilitást korlátozó bizonyos szerkezeti feltételek megléte esetén szétől eltérő konformerek válhatnak dominánssá, illetve szélsőséges esetben kizárólagossá. A dioxafoszforinán gyűrű viszonylag merev szteránvázhoz történő kapcsolása jó lehetőséget kínál a heterogyűrű konformációs egyensúlyának befolyásolására.

A 16,16-biszhidroximetil-ösztron-3-metilérből (**1**) négy különböző P(V) reagenssel előállítottuk a megfelelő P-heterociklusokat (**3–6**), melyek oszlopkromatográfiával elválasztható a **a** és **b** epimerek elegyeként képződtek. Az **1**-es vegyületből redukciónal nyert 17-hidroxi származék (**2**) hasonló típusú gyűrűzárási reakciói kisebb konverzióval, valamint a megfelelő 16-spiro vegyületek mellett (**7–9**) D-gyűrűhöz kondenzált melléktermékek (**12,13**) keletkezése közben játszódtak le.



Az előállított 16-spiro-heterociklusok (**3–11**) szerkezetét (P-konfiguráció, konformáció) egyes kétdimenziós NMR mérések segítségével igazoltuk.

Heterogyűrűvel anellált tebainszarmazékok cikloaddíciós reakcióinak vizsgálata

Skaliczki Timea, IV. évf. gyógyszerészhallgató

DE Természettudományi Kar és OEC Gyógyszerésztudományi Kar

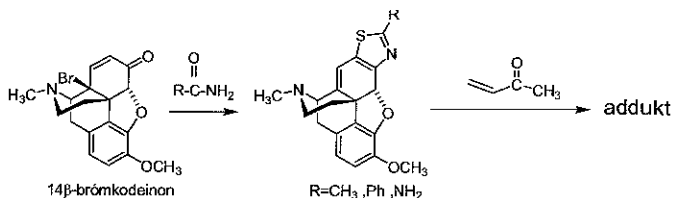
Témavezető: **Dr. Berényi Sándor** egyetemi docens

DE Szerves Kémiai Tanszék

A 80-as évektől kezdődően számos heterogyűrűvel anellált morfinszarmazékot állítottak elő, melyek szelektíven kötődnek a különböző opiátreceptor altípusokhoz és ezzel új receptorkötődési teória, illetve új típusú fájdalomcsillapító molekulák kifejlesztése vált lehetővé [1]. Ugyanakkor az áthidalt oripavinszarmazékok (orvinolok) esetében a heterogyűrű kiépítése csökkentette a molekulák flexibilitását és ezzel befolyásolható a receptorkötődés.

A Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszékén az elmúlt években több heterogyűrűvel anellált morfinszarmazékot állítottak elő, melyek közül a diénstruktúrával rendelkező vegyületek alkalmas kiindulási anyagnak bizonyultak cikloaddíciós reakciók révén orvinszarmazékok szintézisére [2].

Dolgozatomban bemutatom a 2'-szubsztituált tiazolgyűrűvel anellált tebainszarmazékok előállítását és metil-vinil-ketonnal megvalósított cikloaddíciós reakcióit.



A terméként kapott adduktok szerkezetazonosítását korszerű spektroszkópai módszerekkel (HRMS, 2D-NMR mérések) kapott adatokra alapoztam.

A létrehozott adduktokat orvinon-típusú vegyületekké alakítottam, melyek farmakológiai vizsgálata folyamatban van. Terveink között szerepel továbbá az cikloaddíciós termékek orvinolokká alakítása és további szerkezet-hatás összefüggések feltárása.

[1] Portoghese, P. S. *J. Med. Chem.*, **2001**, *44*, 2259.

[2] Tóth, M.; Gyulai, Zs.; Berényi, S.; Sipos, A. *Lett. Org. Chem.* **2007**, *4*, 444.

Szteroid-oxazolinok szintézise

Szabó Nikoletta, III. évf. kémia Bsc.

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Wölfling János tanszékvezető egyetemi docens

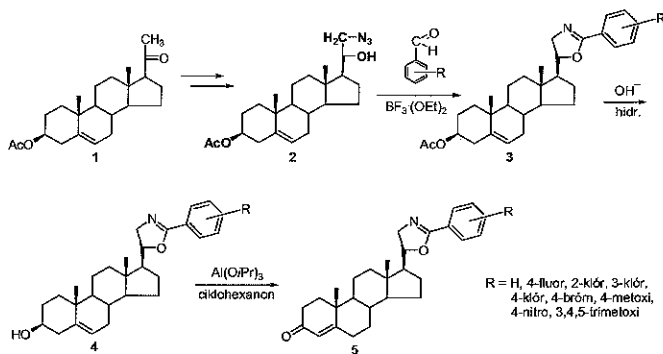
Ondré Dóra III. évf. PhD. hallgató

SZTE Szerves Kémiai Tanszék

Az *exo*-heterociklusos szteroidok az androgén anyagcserében résztvevő enzimek gátlására képesek. A C-17-es helyzetű nitrogéntartalmú heterociklusos szteroidok a 17α -hidroxiláz/ $C_{17,20}$ -liáz, míg az A gyűrűben telítetlen ketofunkciót tartalmazók az 5α -reduktáz enzim potenciális inhibitorai. Mindkét szerkezeti elem jelenléte egy együttes enzimhatás következtében terápiát jelenthet a nemi hormonok túlprodukciónak fakadó megbetegedésekben.

Munkánk során célul tűztük ki olyan új szteroidok előállítását, amelyek a fent említett szerkezeti elemeket tartalmazzák.

A 3β -acetoxipregn-5-én-20-onból (1) kiindulva többlépcsős reakcióút során előállítottuk a 21-azidoszteroidot (2), melyet a *Schmidt* reakció kísérleti körülményei között különbözőképpen szubsztituált aldehidekkel reagáltattunk. A folyamat eredményeként C-3-as pozícióban védett, C-17-es helyzetben oxazolin-gyűrűt tartalmazó szteroidokat (3) kaptunk. Ezután lúgos körülmények közt végzett hidrolízissel eltávolítottuk az acetil védőcsoportot (4), majd a termékeket *Oppenauer* oxidációnak vetettük alá, amely átalakítás a kívánt Δ^4 -3-ketoszteroidokat (5) szolgáltatja. 4 és 5 biológiai hatásvizsgálata folyamatban van.



Szerves kémia II. tagozat



Paramágneses szelenofén intermedierek szintézise

Bagi Nárcisz Mária, III. évfolyam, kémia BSc.

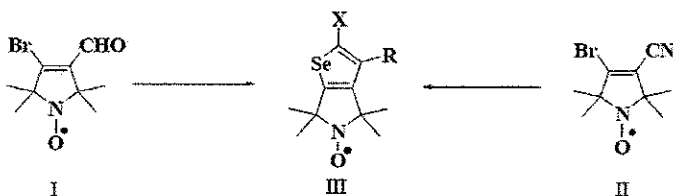
PTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kálai Tamás egyetemi docens

PTE ÁOK Szerves és Gyógyszerkémiai Intézet

Összefoglalás:

Paramágneses β -halogén- α,β -telítetlen-aldehid [I] és - nitril [II] vegyületekből kiindulva új, szelenofénnel kondenzált, többszörösen szubsztituált nitroxidokat állítottunk elő Fiesselmann- szintézissel, a korábban leírt tiofén származékok analógiájára.¹ A 2-karboxiszelenoféneket tovább alakítottuk 2-hidroxi- és 2-klórmetilszelenofén származékká, valamint a fehérjék -SH csoportjának reverzibilis jelölésére alkalmas metántioszulfonát spinjelzővé.² A többszörösen szubsztituált szelenofénekből, gyűrűzárási reakciókkal policiklusos vegyületeket, illetve biológiailag aktív szelenoféneket kívánunk előállítani.

X: -NO₂; -CO₂Et; CHO; -CH₂OH; -CN; -CH₂Cl; -CH₂SSO₂CH₃; -COOHR: -NH₂; -H;[1] Kálai, T., Balog, M., Jekő, J., Hideg, K., *Synthesis*, 1476 (1998)[2] Columbus, L., Kálai, T., Jekő, J., Hideg, K., Hubbell, W., *Biochemistry*, 40, 3828 (2001)

Acetilén-származékok előállítása keresztkapcsolási reakciókkal

Daru János, III. évf. Kémia, BSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Novák Zoltán egyetemi adjunktus
ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Egy általánosan alkalmazható eljárás kifejlesztését tűztük célul diaril-acetilének szintézisére, aril-kloridok és aril-etinil-trimetilszilánok deszililáltv, palládium-katalizált Sonogashira kapcsolásával¹.

Az aril-etinil-trimetilszilánok szintézisét sikeresen optimalizáltuk a jód-benzol és trimetilszilil-acetilén Sonogashira kapcsolását palládium katalizátor jelenlétében, illetve réz-katalizálta kapcsoláshoz terc-butil-metiléter jelenlétében, enyhe reakciókörülmények között kivitelezhető reakciót fejlesztettünk ki.

Előkísérleteket végeztünk a fenil-etinil-trimetilszilán klórbenzollal történő kapcsolásának hatékony megvalósításához, és megmutattuk, hogy az aril-acetilénekre alkalmazott eljárás a trimetilszilil-csoporttal védett acetilének esetén is alkalmazható

[1] Sonogashira, K.; Tohda, Y.; Hagihara, N.; *Tetrahedron Lett.* **1975**, 4467.

[2] Doucet, H.; Hierso, J.-C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 834.

[3] Chinchilla, R.; Najera, C. *Chem. Rev.* **2007**, 107, 874.

Ferrocén tartalmú heterociklusos vegyületek előállítás

Fehér Csaba, V. évf. vegyész-mérnök

PE Mérnöki Kar

Témavezető: Skodáné Dr. Földes Rita egyetemi docens

PE Kémia Intézet, Szerves Kémia Intézeti Tanszék

A karbonilezési körülmények között lejátszódó Sonogashira-kapcsolás (aril-halogenid és alkinil-palládium-katalizált reakciója) alkinil-kezonok képződéséhez vezet. E vegyületek rendkívül hasznos intermedierek, hiszen különböző nitrogéntartalmú reagensek vagy palládium-katalizátor jelenlétében az alapvázhoz kapcsolt heterociklusok kialakítását teszik lehetővé.

Céлом új ferrocénvázis heterociklusos vegyületek szintézise volt, melyek a prosztata megnagyobbodás és a prosztatarák kezelésében alkalmazott enziminhibitorok, vagy más érdekes biológiai hatással (pl. antibakteriális, maláriaellenes, antitumorális hatással) rendelkező vegyületek analógjai.

A vegyületekhez két lépésben jutottam el. Az első reakció a jódferrocén-szén-monoxid jelenlétében lejátszódó Sonogashira-kapcsolása volt.

Meghatároztam az alkinil-kezonok előállításához szükséges optimális reakciókörülményeket. Vizsgáltam a hőmérsékletnek, nyomásnak, katalizátor-előkezelésnek a kapcsolási reakció sebességére és szelektivitására gyakorolt hatását. Megállapítottam, hogy mellékreakcióként az alkinil-glaser-típusú homokapcsolása, valamint a halogenid és az alkinil-direkt kapcsolása is lejátszódhat.

Ezt követően a ferrocénvázis alkinil-kezon szubsztituált hidrazinok jelenlétében pirazolokká, guanidin-származékokkal lejátszódó reakcióban pedig pirimidin-vegyületekké alakítottam.

Az alkinil-kezon, valamint a ferrocén tartalmú heterociklusos vegyületeket GC-MS mérések, valamint ¹H-NMR és IR spektrumok alapján azonosítottam.

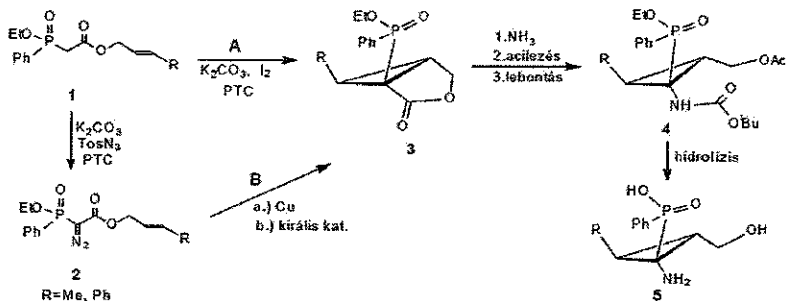
Amino-ciklopropán-foszfinsav származékok szintézise

Gönczi Katalin, V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Jászay Zsuzsa ny. tudományos főmunkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az amino-ciklopropán-foszfonsavak és foszfinsavak a különböző biológia hatású amino-ciklopropán-karbonsavak szerkezetei analogonjai. A foszfonsavak szintézisére már kidolgoztak eljárásokat, foszfinsavak azonban még nem ismeretesek az irodalomban.



Munkám során a ciklopropán gyűrűvel anellált laktonon (3) keresztül foszfinsav származékot (5) próbáltam előállítani. A 3-as kulcsintermedier szintézisét A és B úton valósítottam meg. Az A módszer a kutatócsoport által kidolgozott eljárás: foszfinocetsavas- allilészterből (1) fázistransfer katalitikus körülmények között jó jelenlétében történ a ciklizáció. Ez a gyűrűzárási reakció $\text{R} = \text{Ph}$ esetén diasztereoselektív. A B reakció diazo-vegyületekből (2) indul ki ($\text{R} = \text{Me, Ph}$). Az a. esetben rézporral végeztem a ciklopropán-lakon gyűrű kialakítását, a b. úton királis katalizátorokkal próbálkoztam. Az a. reakció diasztereoselektív, a b. esetben az egyik királis katalizátorral 30% enantiomer felesleget értem el.

A 3 ($\text{R} = \text{Ph}$ származék) továbbalakítását tiszta diasztereomerekkel végeztem. A gyűrűt először ammóniával felnyitottam, a primer hidroxilcsoportot acilezéssel védtem, majd a savamidcsoportot lebontottam ólom-tetraacetáttal. A t-butoxi-karbonil- és az acilcsoportot sósavval eltávolítottam, a foszfinsav-észtert jégeces hidrogén-bromiddal hidrolizáltam. Végül sikerült izolálni az amino-ciklopropán-foszfinsavat (5).

2-Alkil-3-azidokromanonok szintézise és átalakításuk 2-alkil-3-aminokromanonokká

Jakab Alexandra, V. évf. vegyész

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Patonay Tamás tanszékvezető, egyetemi tanár

DE Szerves Kémiai Tanszék

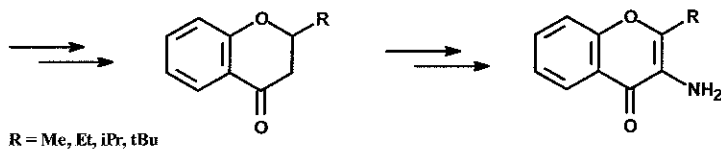
A kromanok körében gyakran találhatunk különböző farmakológiai hatással rendelkező, esetenként tumorelleses¹ vagy HIV-ellenes² vegyületeket.

Kutatómunkám során az irodalomban eddig ismeretlen, 2-helyzetben alkil-szubsztituenst tartalmazó 3-aminokromanonok szintézisével foglalkoztam.

Egyszerű és hatékony módszert dolgoztam ki a kiindulási 2-alkil-kromanonok előállítására. Megállapítottam, hogy ezen vegyületek brómozásával jó hozammal nyerhetők a megfelelő 2-alkil-3-brómkromanonok.

Tanulmányoztam a brómkromanonok azid-ionokkal történő nukleofil szubsztitúcióját és kimutattam, hogy az azidképződés gyenge hozamát a konkurens β -elimináció okozza. A azidokromanonok képződésének sem az oldószer, illetve a katalizátor cseréje, sem az alacsony hőmérséklet alkalmazása nem kedvezett. A konkurens reakció részesedése az R csoport térigényének növekedésével nő. Előbbi reakciók sztereokémiáját vizsgálva megállapítottam, hogy a 2-alkil-kromanonok brómozása során termodinamikai okok miatt a *cisz*-2-alkil-3-brómkromanonok keletkeznek nagyobb mennyiségben, a bróm-azid csere során keletkező termékben pedig a *transz*-forma dominál.

Kimutattam, hogy a 2-alkil-3-aminokromanonok jó hozammal nyerhetők a megfelelő azidokromanonok bázisindukált reakciójával.



[1] Hara, M., Yoshida, M., Nakano, H., *Biochemistry*, 29, 10449 (1990)

[2] Flavin, M.T., *J. Med. Chem.*, 39, 1303 (1996)

Akridon fluorofor egységet tartalmazó új 18-korona-6 éter típusú deprotonálható makrociklusok szintézise

Kormos Attila, okleveles vegyészmérnök
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Huszthy Péter** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kertész Júlia tudományos segédmunkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

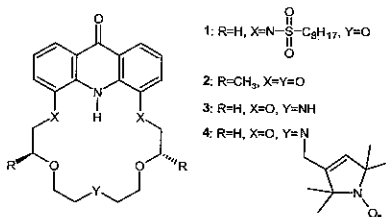
Az akridon egységet tartalmazó koronaétereknek számos előnyük van. Egyrészt fluoro- és kromogének, így komplexképződésük UV/VIS és lumineszcencia spektroszkópiával is vizsgálható, másrészt a triciklusos heteroaromás gyűrűrendszer merevvé teszi a makrociklus konformációját, így növeli a szelektivitást.

Munkám célja különböző feladatokra alkalmas, akridon egységet tartalmazó makrociklusok szintézise volt:

Az **1** két szulfonamidcsoportot tartalmazó makrociklust 4,5-diaminoakridon kulcsintermediereken keresztül állítottam elő. Az apoláris oktilláncokat tartalmazó molekulát fémionok ún. anion nélküli transzportjának tanulmányozása céljából szintetizáltam.

A **2** koronaétert 4,5-dihidroxiakridon és enantiomertiszta, két metilcsoportot tartalmazó primer tetraetilénlikol-ditozilát kulcsintermedierek reakciójával kaptam. Mivel az aszimmetriacentrum a reakcióban nem érintett, racemizáció veszélye nem áll fenn, ellentétben a szekunder tetraetilénlikol-ditozilát származékkal végzett analóg reakcióval.

A **3** makrociklust 4,5-dihidroxiakridon és *N*-tritol-azatetraetilénlikol-ditozilát intermedierek ciklizációjával, majd a védőcsoport eltávolításával állítottam elő. A ligandum szekunder aminocsoportjához ún. szabad gyökös reagenst kötvé a 4 kettősen jelölő (fluoreszcencia és spin) koronaéterhez jutottam.



Új, királis oxigén és nitrogén tartalmú heterociklusos vegyületek enantioszelektív szintézise

Kovács Ervin, vegyész-mérnök

BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

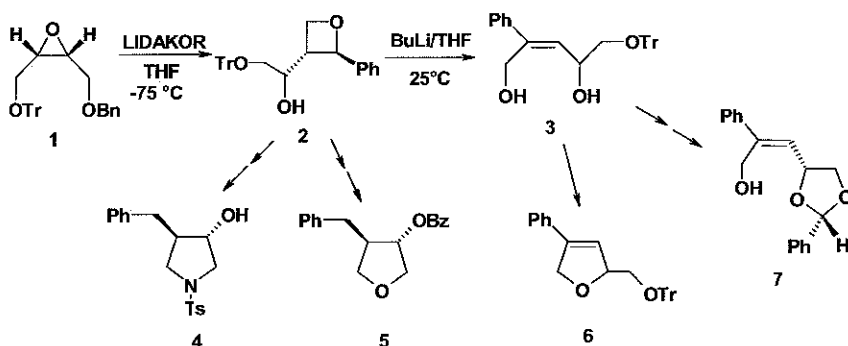
Témavezető: Dr. Faigl Ferenc egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Farkas Ferenc PhD. hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Tudományos diákköri munkám során feladatomban volt a kutatócsoportban korábban előállított optikailag aktív oxirán származékok (1) LIDAKOR szuperbázissal készített enantioszelektív intramolekuláris átrendeződésekor kapott optikailag aktív oxetán (2), és diol (3) vegyületek további reakcióinak vizsgálata.



Az optikailag aktív oxetán (2) négytagú gyűrűjét a hidroxil csoport benzoilezése után katalitikus hidrogénezéssel felnyitottam, és ezzel egy időben megtörtént a tritil csoport eltávolítása is. Az így nyert diolt tionil-kloriddal a megfelelő diklór-származékká alakítottam, és azon tozil-amiddal sikeres gyűrűzárást hajtottam végre (4). A diolból sikeresen előállítottam egy tetrahydrofuran-származékot (5) is Mitsunobu-reakcióval.

A (3) vegyületből gyűrűzárással előállítottuk a (6) dihydrofuran-származékot, és diasztereoszzelektív módon a (7) acetált. Ez utóbbit úgy, hogy először eltávolítottam a tritil-csoportot, majd az így kapott triolt benzaldehyddel reagáltattam.

Az így előállított optikailag aktív vegyületek értékes intermedierek lehetnek a gyógyszeripar számára.

P-heterociklusok előállítása és hasznosítása komplexképzésekben

Kovács Viktória, V. évf. vegyészmérnök

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

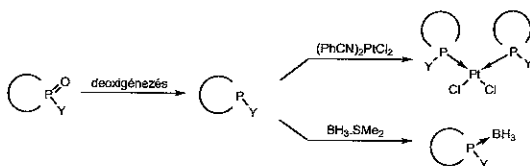
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: Kerényi Andrea doktoráns

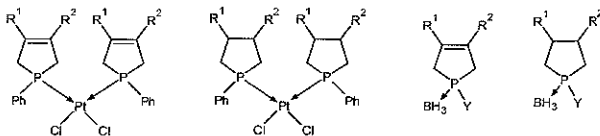
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az elmúlt néhány tíz évben nagy mértékben megnőtt a fontossága az átmenetifém-komplexek által katalizált aszimmetrikus átalakításoknak, ami magával vonta a királis ligandok szintézisének egyre növekvő igényét. A foszfínok alkil- vagy ari-származékai fontos ligandumok az átmenetifémek (Rh, Ru, Pd, Pt) komplexéiben, mivel ezek a komplexek számos homogén katalitikus reakciót képesek katalizálni (pl. hidrogénezés, hidroformilezés).

Kutatási feladatom 5- és 6-tagú gyűrűs foszfor-heterociklusok, valamint a megfelelő borán- és átmenetifém-komplexek előállítása volt az alábbi reakcióséma alapján.



A 3-metil- és 3,4-dimetil-1-fenil-3-foszfólen-1-oxid valamint telített származékainak deoxygenázását követően diklórdibenzonitril-platinával illetve borándimetil-szulfiddal elvégezve a komplexképzést az alábbi származékokhoz jutottam.



Későbbi terveink között szerepel, hogy az előállított Pt(II)-komplexeket katalitikus reakciókban teszteljük.

Az 1-(2,6-diszubsztituált-fenil)pirrolok regio szelektív metallálási reakciói

Nyulasi Bálint, V. évf. vegyészmérnök
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Kémia Tanszék

Konzulens: **Feldhoffer né Vas Bernadett** doktoráns
BME Szerves Kémia és Technológia Kémia Tanszék

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő kutatócsoportban már több éve folynak új arilpirrol származékok szintézisét és tulajdonságaik vizsgálatát célzó kutatások. Feladatomban optikailag aktív 1-(2,6-diszubsztituált-fenil)pirrolok előállítására, regio szelektív metallálási lehetőségeik felkutatására és a kapott új termékek további funkcionálisítására volt. Modellvegyületeimben a fenilcsoport C(2) és C(6) helyzetébe, valamint a pirrol gyűrű α -helyzetébe egymástól különböző csoportokat szándékoztunk beépíteni.

Kísérleteim kiinduló molekulája az 1-(2-etil-6-metilfenil)pirrol volt, melynek regio szelektív metallálásával, és a fémorganikus vegyület elektrofilekkel (dimetilformamid, paraformaldehid, széndioxid) való reakciójával foglalkoztam elsőként, így alkohol és karbonsav származékokat sikerült előállítanom. A metallálási reakciókban előállított vegyületekből további metallálással hidroxisavat és annak laktonját képeztem, ill. egyéb kémiai átalakításokkal dietilaminoetil és vinil csoportot alakítottam ki. Részletesen vizsgáltam a sztírol származék butil-lítiummal való reakcióját különböző körülmények között. Az alapvegyületemből Vilsmeier-formilezéssel a pirrol β -helyzetében szubsztituált aldehidet állítottam elő.

Megkísérletem az előállított gátolt rotációjú hidroxisav rezolválását, valamint új, vizes közegű rezolválás kidolgozását egy, a tanszéken már korábban előállított dikarbonsav származékra.

Hosszú távon a szintetizált vegyületek további átalakításával, új funkció csoportok bevitelével, ill. optikailag aktív származékok előállításával C_1 -szimmetriájú vegyületek hozhatók létre, melyek aszimmetrikus szintézisekben organokatalizátor vagy katalizátor ligandum szerepet tölthetnek be.

Áthidalt tetrahydro-1-benzoxocin származékok szintézise és szerkezetvizsgálata

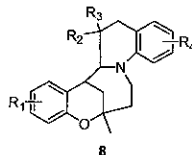
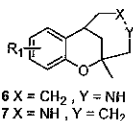
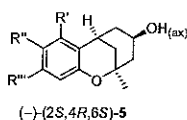
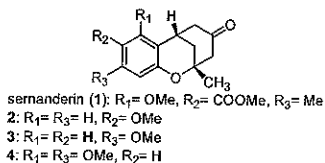
Papp Tamás VI. vegyész

Debreceni Egyetem, TEK, Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kurtán Tibor

Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék

A 2*H*-3,4,5,6-tetrahydro-2-metil-2,6-metanobenzoxocin váz egy triciklusos áthidalt heterociklus, ami számos farmakológiailag aktív természetes anyagban megtalálható.^[1]



A tetrahydrobenzoxocinon vázat tartalmazó (*rac*)-sernanderin 1^[2] természetes anyag előállítására kísérleteket végeztünk a megfelelően szubsztituált triciklus előállítására. A szintézis sorból már csak a C-8 metoxikarbonil csoport bevitelle hiányzik a triciklusra.

Az aromás gyűrűben különböző módon szubsztituált (*rac*)-2,6-metano-benzoxocinonokat (2-4) dominó reakcióban állítottuk elő, melyek enantiomerjeit királis HPLC-n sikeresen elválasztottuk. Kinetikus rezolválással az 5-hidroxi-2,6-metanobenzoxocin származékot (5) állítottuk elő optikailag aktív formában, melynek az abszolút konfigurációját CD spektroszkópiával vizsgáltuk.

Schmidt gyűrűbővítési reakcióval a 6 és 7 regioizomer O,N-heterociklusokat állítottuk elő, melyeket *tercier*-amino effektus révén tovább alakítottunk tetrahidrokinolin és kromán kromofort tartalmazó pentaciklusokká (8). 2D-NMR-rel és röntgendiffrakcióval vizsgáltuk a gyűrűzárás regio- és sztereoselektivitását.

[1] Asano, J., Chiba, K., Tada, M., Yoshii, T., *Phytochemistry*, 41, 815-820 (1996).

[2] Kinoshita, K., Takatori, K., Nauri, T., Culberson, C.F., Hasumi, M., Nishino, Y., Koyama, K., Takahashi, K., *Heterocycles*, 63 (5), 1023-1026 (2004).

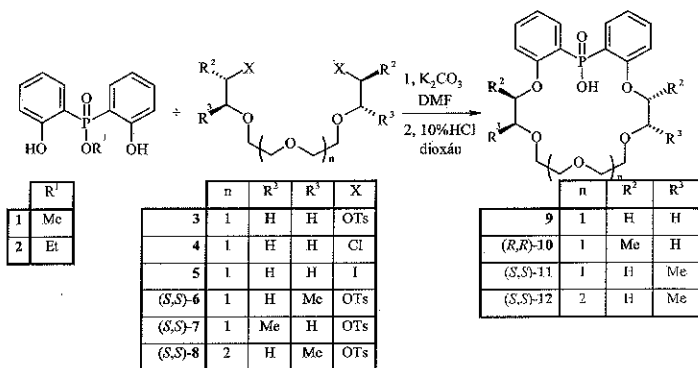
Diarilfoszfinsav egységet tartalmazó optikailag aktív könnyen deprotonálható koronaéterek és akirális analogonjaik szintézise

Székely György, V. évf. vegyészmérnök

Témavezető: Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Tóth Tünde tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Ahhoz, hogy egy ionfor optimálisan transzportáljon fémionokat egy vizes adófázis – folyékony lipofil membrán – vizes szedőfázis rendszerben, viszonylag nagy ionmegkötő-képességgel kell rendelkeznie az adófázis/membrán határfelületen és relatíve kicsivel a membrán/szedőfázis határon. Deprotonálható koronaéter, mint ionfor alkalmazása esetén a határfelületen szükséges különböző két állapotot reverzibilisen elő lehet idézni pH-gradiens biztosításával.

A szakirodalomban közölt dialkylhidrogén-foszfát egységet tartalmazó, deprotonálható makrociklusoknál a diarilfoszfinsav egységet tartalmazó koronaétereket kedvezőbb tulajdonságai miatt állítottam elő.



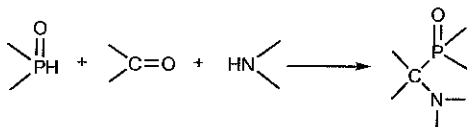
A diarilfoszfinsav egységet tartalmazó makrociklusokat [9 – (S,S)-12] a megfelelő alkilészterek hidrolízisével állítottam elő. A makrociklizációkat Williamson-féle éterszintézissel valósítottam meg bisz(2-hidroxi-fenil)foszfinsav-alkilészterekkel [1,2] és különböző oligoéter-származékokkal [3 – (S,S)-8]. A gyűrűzárashoz szükséges közvetlen prekursorokat irodalmi eljárások alapján állítottam elő.

A foszfa-Mannich reakció megvalósítása mikrohullámú körülmények között

Székrenyi Anna V. évf. gyógyszeripari szakirányos hallgató

Foszfa-Mannich reakció, aminoszfónát, mikrohullámú szintézis, zöldkémia

A dolgozatban $>P(O)H$ speciosek, oxovegyületek és primer vagy szekunder aminok mikrohullámú körülmények között megvalósított foszfa-Mannich kondenzációját tárgyaljuk. A reakciókban potenciálisan biológiai aktivitással rendelkező α -aminofoszfonátok képződnek.



Hangsúlyt kapott a heterociklusos vegyületek alkalmazása is. Vizsgáltuk a reakciókörülmények változtatásának a reakció kimenetelére gyakorolt hatását, valamint az oldószermentes megvalósíthatóságot is. Az optimális reakciókörülmények felderítése érdekében a reakció mechanizmusát is tanulmányoztuk. Összességében 19 új vegyületet állítottunk elő, amelyek szerkezetét spektroszkópiás módszerekkel azonosítottuk. A fenti eredmények egy része a Heteroatom Chemistry c. folyóiratban kerül publikálásra. A cikk megjelenés alatt áll.

1,4-Diszubsztituált kubánvegyületek ezüstionok hatására lejátszódó átrendeződési reakciói

Szönyegi Zoltán, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Jalsovszky István egyetemi docens
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

A kalitkavázis vegyületek közül kiemelkedő jelentősége van a kubánnak és származékainak. Számos területen (haditechnika, gyógyászat) merült fel a kubánvázis vegyületek alkalmazásának lehetősége, bár a gyakorlatban való széles körű elterjedésükhöz a jelenleginél olcsóbban kivitelezhető szintézisre lenne szükség.

A kubánt és a belőle ezüstion-katalizált vázátrendeződéssel előállítható kuneánvegyületeket az ELTE Szerves Kémiai Tanszékén már régóta vizsgálják. A 2,6-diszubsztituált kuneánszármazékok szelektív szintéziséét is megoldották, és egyes képviselőiknél folyadék-kristályos tulajdonságokat is észleltek. Később felmerült az igény az 1,3-diszubsztituált kuneánvegyületek szelektív szintézisére is, amelyre szintén kidolgoztak egy eljárást. Az előállítani kívánt vegyület az 1,3-bisz(hidroximetil)-kuneán volt, mivel ez alkalmas további származékok előállítására. A szintézis során 1,4-bisz(hidroximetil)-kubánból indultak ki. Első lépésben a hidroxilcsoportokat acetilézéssel megvédték, majd átrendezték a vázát ezüstion-katalizálással, ezután a védőcsoportot lúgos hidrolízissel eltávolították.

Ennek a módszernek azonban hátránya, hogy a szintézis utolsó lépésében jelentős kátrányosodás lépett fel, ami nehezítette a tisztítást, és rontotta a termelést.

Ebbe a kutatásba kapcsolódtam be azzal a feladattal, hogy más módszert találjak az 1,3-bisz(hidroximetil)-kuneán előállítására, ahol az említett problémák nem lépnek fel. A megoldást az eddigi szintézis módosítása jelentette, észter-típusú védőcsoport helyett szililezést alkalmaztam. Ennek köszönhetően az átrendeződés szelektivitása alig változott, és a védőcsoport eltávolítása nemkívánatos mellékreakciók nélkül megoldható. Az így kapott 1,3-bisz(hidroximetil)-kuneán további származékok szintéziséhez alkalmas kiindulási anyag, ugyanis jó termeléssel, nagy tisztaságban áll rendelkezésre. Egyik cél a származékképzésben a hidroximetil-csoportok átalakítása.

A másik lehetséges típusa az általam előállítani kívánt származékoknak az 1,3-bisz(hidroximetil)-kuneán *p*-(*n*-alkoxi)-benzoesavakkal alkotott észterei, amelyek a folyadék-kristályos 2,6-diszubsztituált kuneánszármazékok izomerei. Elképzelhető ugyanis, hogy ezek között is van folyadék-kristályos vegyület. Ezért kidolgoztam az észteresítési reakciót az ilyen típusú vegyületek előállítására a *p*-(*n*-oktiloxi)-benzoesav felhasználásával, a termék fizikai vizsgálata folyamatban van.

Sonogashira kapcsolási reakció fejlesztése és alkalmazása természetes vegyületek szintézisében

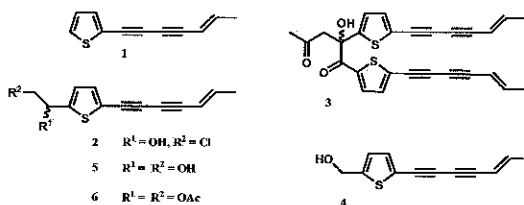
Tolnai Gergely László, V. évf. vegyész-mérnök

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyész és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Novák Zoltán egyetemi adjunktus
ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

A palládium-katalizált Sonogashira reakciót aril-halogenidek és terminális acetilének kapcsolására széles körben alkalmazzák a szerves szintézisek során. A reakcióhoz szükséges réz segédkatalizátor jelentősen gyorsítja a kapcsolási reakciót, azonban jelenlétében mellékreakciók is lejátszódhatnak. Munkánk során megfelelő körülményeket kerestünk hatékony, rézmentes körülmények között kivitelezett Sonogashira kapcsolás megvalósításához. [1,2]

A szerves kémiai kutatásokban a totálszintézisek kiemelkedő jelentőségűek és stratégiaileg fontos hajtóerőként szolgálnak a szintetikus eljárások kidolgozásához és fejlesztéséhez. Figyelembe véve a célmolekulák biológiai aktivitását, szerkezetét és az előállításukhoz tervezett szintetikus módszerek elérhetőségét, célpontként a Xanthopappin molekulacsaláddhoz tartozó vegyületek kerültek kiválasztásra.



A választott célmolekulák szintézisét, szén-szén kötés kialakítására alkalmas palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókra építjük [3-5].

A két témakörben elért eredményeinket a tudományos diákköri dolgozatban mutatjuk be.

[1] Ljungdahl, T.; Bennur, T.; Dallas, A.; Emtenas, H.; Martensson, J. *Organometallics*, **2008**, *27*, 2490-2498.

[2] Liang, B.; Dai, M.; Chen, J.; Yang, Z. *J. Org. Chem.* **2005**, *70*, 391-393

[3] Tian, Y.; Wei, X.; Xu, H.; *J. Nat. Prod.* **2006**, *69*(8) 1241 – 1244.

[4] Szendrei, K., Reisch, J., Varga, E. *Phytochemistry* **1984**, *23*, 901-902.

[5] Berenbaum, M. *Science* **1978**, *201*, 532-534.