

**20th International Conference
on Chemistry**

**XX. Nemzetközi
Vegyészkonferencia**

Cluj-Napoca, November 6-9, 2014

Kolozsvár, 2014. november 6-9.

Publisher / Kiadó

Hungarian Technical Scientific Society of Transylvania
Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT)

Consultant editors / Lektorok

MAJDIK Kornélia
NOVÁK Lajos
KILÁR Ferenc
ZSUGA Miklós
DIBÓ Gábor
HÓRVÖLGYI Zoltán
KÉKEDY-NAGY László

Editor / Szerkesztő

MAJDIK Kornélia

Desktop Publishing / Nyomdai előkészítés

PROKOP Zoltán, Cluj-Napoca / Kolozsvár

Print / Nyomtatás

INCITATO Cluj-Napoca / Kolozsvár

Sponsors / Támogatók



Sușinim
CLUJ-NAPOCA 2021
Capitală Culturală Europeană
oraș candidat

Proiect realizat cu sprijinul Primăriei și Consiliului Local Cluj-Napoca.
Proiectul susține Candidatura orașului Cluj-Napoca la titlul de Capitală Culturală Europeană.

A Kolozsvári Polgármesteri Hivatal és Városi Tanács által támogatott projekt.
Támogatjuk Kolozsvár Európai Kulturális Fővárosa 2021 jelöltségét.



Bethlen Gábor Alapkezelő Zrt. – Budapest
Bethlen Gábor Foundation – Budapest

Organizers / A konferencia szervezői

Hungarian Technical Scientific Society of Transylvania
Chemistry Department
Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság
Kémia Szakosztály

*

Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Hungarian Department of Chemistry and Chemical Engineering
Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet

Chairman / A konferencia elnöke

MAJDIK Kornélia

Scientific committee / A konferencia tudományos bizottsága

MAJDIK Kornélia

Babeş-Bolyai University, Cluj-Napoca, Faculty of Chemistry and Chemical
Engineering / BBTE, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár, RO

NOVÁK Lajos

Budapest University of Technology and Economics, Department of Organic
Chemistry and Technology / BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, HU

KILÁR Ferenc

University of Pécs, Medical School, Institute of Bioanalysis /
PTE ÁOK, Bioanalitikai Intézet, HU

ZSUGA Miklós

University of Debrecen, Department of Applied Chemistry / Debreceni Egyetem,
Alkalmazott Kémia Tanszék, HU

DIBÓ Gábor

Eötvös Loránd University, Department of Organic Chemistry / ELTE, Szerves
Kémiai Tanszék, Budapest, HU

HÓRVÖLGYI Zoltán

Budapest University of Technology and Economics, Department of Physical
Chemistry and Materials Science / BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi
Tanszék, HU

KÉKEDY-NAGY László

Babeş-Bolyai University, Cluj-Napoca, Faculty of Chemistry and Chemical
Engineering / BBTE, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár, RO

Tartalomjegyzék / Content

Plenáris előadások / Plenary Presentations

Szerkezet, dinamika és molekuláris kölcsönhatások a mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia tükrében Structure, Dynamics and Molecular Interactions as Seen by Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy <i>E. KÖVÉR Katalin</i>	14
Dizájner drogok – kiemelkedő veszélyek Designer Drugs – Extreme Danger <i>FÜLÖP Ferenc</i>	15
Könnyen deprotonálható koronaéterek szintézise, molekuláris felismerése és alkalmazása Synthesis, Molecular Recognition and Application of Proton-ionizable Crown Ethers <i>HUSZTHY Péter</i>	16
Alakemlékező polimerek a XXI. században Shape-memory Polymers in the XXI. Century <i>KÉKI Sándor</i>	17
Természetes és biopolimerek: módosítás, keverékek, kompozitok Natural and Biopolymers: Modification, Blends, Composites <i>PUKÁNSZKY Béla</i>	18

Doktorandusz plénum / Ph.D. Students Plenary Presentations

TiO ₂ szol-gél bevonatok antibakteriális hatása Antibacterial Activity of TiO ₂ Sol-gel Coatings <i>ALBERT Emőke, CSÍK Gabriella, FÓNAGY Orsolya, HORVÁTH Ottó, SUHAJDA Ágnes, SZABÓNÉ BÁRDOS Erzsébet, HÓRVÖLGYI Zoltán</i>	19
Kavitandok nemlineáris izotermájának meghatározása különböző fordított fázisú állófázisokon az inverz módszer segítségével Determination of the Nonlinear Isotherm of Cavitands on Different Reversed-phase Packing Materials by the Inverse Method <i>BARTÓ Endre, PRAUDA Ibolya, KILÁR Ferenc, KISS Ibolya, FELINGER Attila</i>	20
Mikroalgák termesztése fotobioreaktorban – energetikai jellemzés Microalgae Cultivation in Photobio-reactor – Energy Balance Analysis <i>BOCSI Róbert, HANÁK László, HORVÁTH Géza, RIPPELNÉ PETHŐ Dóra, HODAI Zoltán</i>	21
Cukoraminosav foldamer prekursorok szintézise és szerkezetvizsgálata Synthesis and Structure Analysis of Precursors of Sugar Amino Acid Foldamers <i>CSORDÁS Barbara, FARKAS Viktor, PERCZEL András</i>	22
Kémiai harmadlagos kőolaj-kitermelés során előállítható kőolaj-víz emulziók reológiai vizsgálata Brookfield rotációs viszkoziméterrel Rheological Investigation of Oil-water Emulsions in Chemical EOR by Brookfield Viscometer <i>ELEKES Andrea, NAGY Roland, BARTHA László, VÁGÓ Árpád</i>	23
Mechanokémia a réteges kettős hidroxidok szintézisében és interkalációjában Mechanochemistry in the Synthesis and Intercalation of Layered Double Hydroxides <i>FERENCZ Zsolt, ÁDOK Mónika, SIPOS Pál, PÁLINKÓ István</i>	24
Piridino-18-korona-6-éter alapú új királis állófázis előállítás és enantiomer-eltávolító-képességének vizsgálata Synthesis of New Pyridino-18-crown-6-ether Based Chiral Stationary Phase and Studies on its Enantiomeric Separation Ability <i>FŐDI Tamás, NÉMETH Tamás, KUPAI József, LÉVAI Sándor, BALOGH György Tibor, HUSZTHY Péter</i>	25
Gyümölcsfeldolgozó üzem szennyvizének tisztítási tapasztalatai Treating Experiences of Fruit Processing Wastewater <i>GULYÁS Gábor, FAZEKAS Bence, KÁRPÁTI Árpád</i>	26

Szennyvizek szulfátmentesítése ettringit kicsapásával Sulphate Removal from Wastewater for Ettringite Precipitation <i>GULYÁS Gábor, VARGA Regina, FAZEKAS Bence, KÁRPÁTI Árpád</i>	27
A 17 β -HSD1 enzimaktivitás in vitro vizsgálata és gátlása 13 α -ösztron származékokkal In Vitro Investigation of 17 β -HSD1 Enzyme Activity and its Inhibition with 13 α -estrone Derivatives <i>HERMAN Bianka Edina, SZABÓ Johanna, KALMÁR László, WÖLFLING János, SCHNEIDER Gyula, JULESZ János, VALKUSZ Zsuzsanna, MERNYÁK Erzsébet, SZÉCSI Mihály</i>	28
Biomassza szeparációja újszerű, energiahatékony megoldással Separation of Biomass with Innovative Energy Efficient Solution <i>HODAI Zoltán, RIPPELNÉ PETHŐ Dóra, HORVÁTH Géza, HANÁK László, BOCSI Róbert</i>	29
Labirintus alakú WO ₃ mikrokrisztályok előállítása, fotokatalitikus és anyagszerkezeti tulajdonságainak vizsgálata Hydrothermal Preparation, In-depth Characterization and Determination of the Photocatalytic Activity of Labyrinth Shaped WO ₃ Microcrystals <i>KARÁCSONYI Éva, PAP Zsolt, KOVÁCS Gábor, Lucian BAIÁ, Virginia DANCIU, DOMBI András, HERNÁDI Klára</i>	30
TiO ₂ mikrokrisztályok alakjának finomhangolása különböző szénfajták segítségével Shape Tailoring of TiO ₂ Microcrystals Using Different Type of Nanocarbons <i>KÁSA Zsolt, VAJDA Krisztina, PAP Zsolt, DOMBI András, HERNÁDI Klára, KOVÁCS Gábor, Lucian BAIÁ, Virginia DANCIU</i>	31
CEOR célú polimeres tenzid oldatok reológiai vizsgálata Rheological Investigation of Surfactant Solutions for CEOR <i>KOTHENCZ Réka, NAGY Roland, BARTHA László, VÁGÓ Árpád</i>	32
Új szintézismódszer kidolgozása peptid-6-amino-D-luciferin konjugátumok előállítására A novel Synthesis Method of Peptide-6-amino-D-luciferin Conjugates <i>KOVÁCS Anita, HEGYES Péter, SZEBENI Gábor János, PUSKÁS G. László, TÓTH Gábor</i>	33
Komplexbérek extrakciós képességének értékelése eltérő fizikai talajféléseggű tim minták vizsgálata alapján Assessment of Complexing Extraction Capacity Based on Analysis of Different Physical Soil Samples With Tim <i>KOVÁCS Katalin, JONÁS Miklós, TAKÁCS Anita, HORVÁTH Márk, GYÓRI Zoltán, HELTAI György</i>	34
ESR vizsgálatok e ⁻ /h ⁺ csapdákkal befolyásolt hidroxilgyök generálásra TiO ₂ alapú heterogén fotokatalízis során ESR Study of the Effect of Different e ⁻ /h ⁺ Traps on Hydroxyl Radical Generation During TiO ₂ Based Heterogeneous Photocatalysis <i>KOZMÉR Zsuzsanna, SIENKIEWICZ Andrzej, FORRÓ László, DOMBI András, HERNÁDI Klára</i>	35
Nagyhatékonyságú eljárás földgázok kénhidrogén tartalmának csökkentésére High Efficient Method for Reducing the Content of Hydrogen Sulfide from Natural Gas <i>MOLNÁR Éva, RIPPELNÉ PETHŐ Dóra, HORVÁTH Géza</i>	36
Akridono-18-korona-6-éter egységet tartalmazó szenzormolekulák szintézise és kationkötő-képességük vizsgálata Synthesis and Cation Binding Studies of Acridono-18-crown-6 Ether Type Sensors <i>NÉMETH Tamás, KORMOS Attila, TÓTH Tünde, BALOGH György Tibor, HUSZTHY Péter</i>	37
A γ -valerolakton előállítása és átalakítása hasznos anyagokká Production and Transformation of γ -valerolactone to Useful Materials <i>NOVODÁRSZKI Gyula, MIHÁLYI R. Magdolna, VALYON József</i>	38
Albumin adszorpció tanulmányozása hidroxipatit alapú kompozitok esetében Albumine Adsorption Study on Hydroxyapatite Based Composites <i>SÁRKÖZI Melinda, CSÁKÁNY Brigitta, BARABÁS Réka, KATONA Gabriel, BOGYA Erzsébet Sára</i>	39
ZnAl-réteges kettős hidroxidok szintézise ultrahangos kevertetés segítségével Synthesis of ZnAl-layered Double Hydroxides, via Ultrasonic Stirring <i>SZABADOS Márton, BÚS Csaba, SIPOS Pál, PÁLINKÓ István</i>	40
Új akirális és királis trifenilfoszfán egységet tartalmazó koronaéterek szintézise Synthesis of Novel Achiral and Chiral Crown Ethers Containing a Triphenylphosphane Unit <i>SZABÓ Tamás, PETRI László, HUSZTHY Péter</i>	41

Fenolok és szulfidok oxidációja enyhe körülmények között bioutánzó nem hem vastartalmú komplexekkel Mild Oxidation of Phenols and Sulfides with Biomimetic Non-heme Iron-containing Complexes <i>SZÁVULY Miklós István, NAGY Emőke, KAIZER József, SPEIER Gábor</i>	42
---	----

Latens hő felszabadulásának hatása a hűtéses kristályosítás termékének minőségére: populáció mérleg modellezés és szimuláció Effects of Latent Heat Production on Product Quality During the Cooling Crystallization: Population Balance Modelling and Simulation <i>SZILÁGYI Botond, AGACHI Şerban, LAKATOS G. Béla</i>	43
--	----

Szekcióelőadások / Section Presentations

Alkalmazott kémia / Applied Chemistry

Az ESI körülmények között képződött noszkapin dimerek fragmentációjának az aktiválási energiájának a becslése tandem tömegspektrometriás módszerrel The Estimation of the Activation Energy of the Fragmentation of the Noscapine Dimers Using Tandem Mass Spectrometry <i>ANTAL Borbála, KUKI Ákos, NAGY Tibor, NAGY Lajos, PURGEL Mihály, SIPOS Attila, NAGY Miklós, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	44
--	----

A modern erőművi víz-gőz körfolyamatokban újlag megjelenő korrózió magyarázata és megelőzésének módja Explanation and Prevention of the New Corrosion Phenomena in the Water-steam-cycles of Modern Power Plants <i>ÁRPÁD István, ARGYELÁN János</i>	45
--	----

A Wacker-oxidáció heterogenizálása palládium és vanádium tartalmú katalizátorokon Heterogenization of Wacker-oxidation Over Palladium and Vanadium Containing Catalysts <i>BARTHOS Róbert, VALYON József</i>	46
--	----

Ülő csepp-párolgás tanulmányozása makropórusos szén nanocső filmekről Sessile Droplet Evaporation Study from Macroporous Carbon Nanotube films <i>BOGYA Erzsébet Sára, HAVASI Viktor, KUKOVECZ Ákos</i>	47
---	----

Diels-Alder addukt alkalmazása alakemlékező poliuretánok szintézisében Applying Diels-Alder Adduct in the Syntheses of Shape-memory Polyurethanes <i>CZIFRÁK Katalin, LAKATOS Csilla, PAPP Rita, KARGER-KOCSIS József, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	48
--	----

Lebomló polietilén kompozitok kifejlesztése csomagolóanyag céljára Development of a Degradable Polyethylene Composites for Wrapping Purpose <i>DEÁK György, DÉKÁNY-ADAMOCZKY Anita, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	49
---	----

Dohányfüst és dohányfüst-maradék analízise valós idejű közvetlen analízis ionizációs (DART) tandem tömegspektrometriával Detection of Tobacco Smoke by Direct Analysis in Real Time (DART) Tandem Mass Spectrometry <i>KUKI Ákos, NAGY Lajos, NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	50
--	----

Tejsavbaktériumok szerepe a takarmányok tartósításában Role of the Lactic Acid Bacteria in Silage Conservation <i>LASLO Éva, MARA Gyöngyvér, FUNKENHAUZER Bernadett, DOBRI Emőke, SALAMON Rozália Veronika, LÁNYI Szabolcs, ÁBRAHÁM Beáta</i>	51
---	----

Fényemittáló maleimid tartalmú polimerek előállítása és vizsgálata Synthesis and Characterization of Fluorescent Maleimide-containing Polymers <i>LÁZÁR László, BORBÁS Anikó, HERCZEGH Pál, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	52
---	----

Strukturális szénhidrátbontás silóból származó baktériumok esetében Structural Polysaccharide Degradation by Silage Bacteria <i>MARA Gyöngyvér, LASLO Éva, BECZE Annamária, SALAMON Rozália Veronika, LÁNYI Szabolcs, ÁBRAHÁM Beáta</i>	53
---	----

Apoláros polimerek karakterizálása atmoszférikus nyomású fotoionizációs körülmények között Characterization of non-polar Polymers Under Atmospheric Pressure Photoionization <i>NAGY Lajos, KUKI Ákos, NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	54
--	----

Új izocianonaftalin alapú fluoroforok különleges fluoescencia kioltási tulajdonságai The Unique Quenching Properties of Novel Isocyanonaphthalene Based Solvatochromic Fluorophores <i>NAGY Miklós, RÁCZ Dávid, LÁZÁR László, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	55
Kémiai harmadlagos kőolajkitermelés során termelt kőolaj vizsgálata Investigation of Crude Oil Produced by Chemical Enhanced Oil Recovery <i>NAGY Roland, KOTHENCZ Réka, BARTHA László, VÁGÓ Árpád</i>	56
A noszkapin és noszkapin származékok fragmentációjának vizsgálata ESI-MS/MS módszerrel The Fragmentation of the Noscapine and Noscapine Derivatives Using ESI-MS/MS Method <i>NAGY Tibor, NAGY Lajos, KUKI Ákos, SZABÓ Katalin, SIPOS Attila, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	57
Új típusú, izocianid csoportot tartalmazó aromás szolvatokrom fluoroforok előállítása és vizsgálata Synthesis and Investigation of a New Type of Isocyanide-containing Aromatic Solvatochromic Fluorophores <i>RÁCZ Dávid, NAGY Miklós, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	58
A hulladékhasznosítás aktuális kérdései Actual Issues of Waste Utilization <i>RÉDEY Ákos, JUZSAKOVA Tatjana, FRÁTER Tamás, DIOSSY László, UTASI Anett, LAUER János, RADULY István, RADULY Lenke</i>	59
Kaukázusi nehézőlajok kénhidrogén tartalmának eltávolítása és analitikai vizsgálata Removal of Hydrogen Sulfide from Crude Oil and Analytic Examination <i>RIPPELNÉ PETHŐ Dóra, HORVÁTH Géza</i>	60
Politejsav tartalmú alakemlékező poliuretánok előállítása és jellemzése Syntheses and Characterization of Shape-memory Polyurethanes Containing Polylactic Acid <i>VERNER Erika, CZIFRÁK Katalin, KARGER-KOCSIS József, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor</i>	61

Analitikai kémia / Analytical Chemistry

Folyékony mikrominták analízise kapacitívan csatolt mikroplazma felhasználásával Liquid Microsamples Analysis Using a Capacitively Coupled Microplasma Source <i>DARVASI Jenő, FRENȚIU Tiberiu, CADAR Sergiu, PONTA Michaela</i>	62
Direkt invertálás a spektrális (AI)térben Direk Inversion in the Spectral (Sub)Space <i>EŐRI János, VÖRÖS Tamás, KOLOS Zsuzsanna, PONGOR Gábor</i>	63

Biokémia / Biochemistry

FGFR1 gén vizsgálata emlő daganatokban célzott terápia optimalizálásához Examination of FGFR1 Gene in Breast Cancer for Targeted Therapy Optimisation <i>FÉLEGYHÁZI Fruzsina Éva, GURBI Bianka, BRAUSWETTER Diána, KOHÁNKA Andrea, PETÁK István</i>	64
MEK, mint potenciális indirekt célpont vizsgálata hasnyálmirigy daganatok in vitro modelljében MEK as Potential Indirect Target in Pancreatic Cancer in Vitro Model <i>GURBI Bianka, FÉLEGYHÁZI Fruzsina Éva, BRAUSWETTER Diána, PETÁK István</i>	65
Peptidek fotolízisének vizsgálata tiolspecifikus fluoescens jelzővegyületekkel Thiol-specific Fluorescent Labels for Studying the Photolysis of Disulfide Bridges in Peptides <i>KNAPP Krisztina, NEMES Anikó, CSERÉP B. Gergely, KELE Péter, CSÍK Gabriella, MAJER Zsuzsa</i>	66
Hozzájárulások az 1,4-butándiol E. coli-ban megvalósuló bioszintetikus útvonalának tervezéséhez Contributions to Engineering a New Four-step Biosynthetic Pathway for 1,4-Butanediol in E. coli <i>MIKLÓSSY Ildikó, BODOR Zsolt, SINKLER Réka, ORBÁN Kálmán Csongor, ÁBRAHÁM Beáta, LÁNYI Szabolcs</i>	67

Fizikai kémia / Physical Chemistry

Bortezomid, egy fontos rákellenes hatóanyag kvantumkémiaja Quantum Chemistry of Bortezomid, an Important Anticancer Agent <i>BILLES Ferenc, Hans MIKOSCH</i>	68
--	----

Nedvesedési vizsgálatok vízben duzzadó polimerek felületén Wettability Studies on the Surface of Swelling Polymers <i>KISS Bálint, DABÓCZI Mátás, KOTÁN Péter, KOVÁCS Attila, TOKAJI Zsolt, HÓRVÖLGYI Zoltán</i>	69
A felhasznált energiafajták különböző mértékben okoznak globális felmelegedést. Bölcs fejlesztések csökkenthetik a veszélyt The Types of Energy Used Influences the Global Warming in Different Way. Advised Improvements Can Reduce the Danger <i>MUZSNAY Csaba</i>	70
Kolloidkémiai alapokon előállított arany nanoszerkezetek Gold Nanostructures Prepared Based on a Colloid Chemical Approach <i>ZÁMBÓ Dániel, POTHORSZKY Szilárd, GERGELY-FÜLÖP Eszter, NAGY Norbert, DEÁK András</i>	71

Gyógyszerkémia / Medicinal Chemistry

Új típusú, influenza vírus hemagglutinin-gátló önszerveződő teikoplanin antibiotikum származékok Self-assembling Teicoplanin Antibiotic Derivatives as New Influenza Virus Hemagglutinin Inhibitors <i>BERECZKI Ilona, KICSÁK Máté, BORBÁS Anikó, Evelien VANDERLINDEN, Lieve NAESENS, HERCZEGH Pál</i>	72
Antitrombotikus hatású heparin-analóg pentaszacharid-szulfonsavak szintézise Synthesis of Antithrombotic Sulfonic Acid Containing Heparin Analogue Pentasaccharides <i>HERCZEG Mihály, MEZŐ Erika, VARGA Eszter, ESZENYI Dániel, BORBÁS Anikó</i>	73
Új típusú β -laktám származékok előállítása Ugi reakcióval Synthesis of New Type of β -lactams Derivatives Using Ugi Reaction <i>NAGY Zsolt László, HERCZEGH Pál</i>	74
Hogyan befolyásolják az enantiomer-felismerést a királis rendszerekben lejátszódó kölcsönhatások? How is the Enantiomeric Recognition Influenced by the Interactions of Chiral Systems? <i>PÁLOVICS Emese, SZELECZKY Zsolt, FAIGL Ferenc, FOGASSY Elemér</i>	75

Környezeti kémia / Environmental Chemistry

TiO ₂ alapú aerogélek: szintézis, szerkezet, morfológia és fotokatalitikus tulajdonságok TiO ₂ -based aerogels: Synthesis, Morphological, Structural and Photocatalytic Properties <i>KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, Cosmin COTEȚ, Lucian BAIÁ, HERNÁDI Klára, Veronica COȘOVEANU, Virginia DANCIU</i>	76
A vörösiszap PVC-s semlegesítése és hatása a katalitikusan aktív fém tartalomra Red Mud Neutralization by PVC and Its Influence on Content in Catalytically Active Species <i>LOVÁSZ Tamás, CSAVDARI Alexandra, GÁL Emese, BRÉM Balázs, FRENȚIU Tiberiu, BÓDIS Jenő, YUZHAKOVA Tatiana</i>	77
A fotofermentációs hidrogén-előállítás kinetikai jellemzése Kinetic Study of Photofermentative Hydrogen Production <i>MOLNOS Éva</i>	78
A közlekedésből származó légszennyezettség és a légúti megbetegedések kapcsolatának vizsgálata Analysis of the Connection Between Traffic Related Air Pollution and Respiratory Diseases <i>NAGY Georgina, DOMOKOS Endre, Silvia VILČEKOVÁ</i>	79
Nanoszerkezetű fotokatalizátorok és kompozitjaik – alakszobrászat és aktivitás Nano-sized Photocatalysts and their Composites – Shape Tailoring and Activity <i>PAP Zsolt, KOVÁCS Gábor, SZÉKELY István, KEDVES Zsolt, SASZET Kata, HAMPEL Boglárka, FODOR Szilvia, TÓTH Zsejke-Réka, ORBÁN Eszter, KOVÁCS Zoltán, HERNÁDI Klára, DOMBI András, KÁSA Zsolt, VAJDA Krisztina, KARÁCSONYI Éva, Virginia DANCIU, Adriana VULPOI, Veronica COȘOVEANU, Lucian BAIÁ</i>	80
Maros és Hunyad megye szennyezett mellékfolyóinak, nehézfemekkel történő szennyezettség csökkentésének tanulmányozása Studying to Reduce of Contamination with Heavy Metals of River Mures and their Contaminated Tributaries in Hunedoara County <i>SZÖLLÖSI-MOTA Andrei</i>	81

Oktatás–módszertan / Teaching Methodology

A BorsodChem Zrt. és az oktatás kapcsolata BorsodChem and the Education MIHALKÓ Andrea, BÁN Kinga, FARKAS László	82
--	----

Szerves kémia / Organic Chemistry

Stabil szénhidrátmimetikumok szintézise thio-click módszerrel Thio-click Approach to the Synthesis of Stable Glycomimetics BORBÁS Anikó, CSÁVÁS Magdolna, LÁZÁR László, HERCZEG Mihály, ESZENYI Dániel, SZILÁGYI Eszter, BEGE Miklós, HERCZEGH Pál	83
Újtípusú ferrocénszármazékok: előállítás, szerkezet, antitumor aktivitás Novel Ferrocene Derivatives: Synthesis, Structure, Antitumor Activity Antal CSÁMPAI, Zoltán KOVÁCS, Dániel CSÓKÁS, László-Lajos KOCSIS, Kinga-Judit FODOR, Szilvia BŐSZE, Ildikó SZABÓ, Ferenc HUDECZ.....	84
Porfirinek, eredmények és perspektívák Porphyrins, Results and Perspectives GÁL Emese, BRÉM Balázs, GAINA Luiza-Ioana, CRISTEA Castelia, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița.....	85
Aromás magokra épített bivalens kén és szelén tartalmú szénhidrát származékok szintézise és szerkezetvizsgálata Syntheses and NMR Studies of Bivalent S and Se Containing Carbohydrate Derivatives Attached to Aromatic Scaffolds ILLYÉS Tünde Zita, VARGA Viktória, BAKOS Gabriella, E. KÖVÉR Katalin, SZILÁGYI László.....	86
Szénhidrát alapú koronaéterek szintézise és alkalmazása Synthesis and Application of Sugar-based Crown Ethers RAPI Zsolt, BAKÓ Péter, BOTYÁNSZKI Adrienn, DÉMUTH Balázs, NEMCSOK Tamás, SÓTI Péter, SZABÓ Tamás, VIGH Tamás.....	87
Új vegyes azid tartalmú Co-komplexek glioximokkal New Mixed Azide Containing Co-complexes with Glyoximes ifj. VÁRHELYI Csaba, POKOL György, GÖMÖRY Ágnes, SZILÁGYI Imre, GOGA Firuța, NAGY Renáta-Ildikó.....	88

Szervetlen kémia / Inorganic Chemistry

Az EGTA-BBA ligandum néhány fémionnal kialakuló komplexének koordinációs kémiai vizsgálata Physicochemical Investigation of EGTA-BBA Complexes Formed with Several Metal Ions FARKAS Edit, GARDA Zoltán, KÁLMÁN Ferenc Krisztián, TÓTH Imre, TIRCSÓ Gyula	89
Vegyesligandumú Tl(III)-komplexek egyensúlyi és kinetikai vizsgálata Equilibrium and Kinetic Study of Mixed-ligand Tl(III) Complexes FODOR Tamás, ROZINKA Felicia, Carlos PLATAS-IGLESIAS, ZÉKÁNY László, BÉNYEI Attila, PURGEL Mihály, KÁLMÁN Ferenc Krisztián, TIRCSÓ Gyula, TÓTH Imre.....	90
Két pikolinátsoportot tartalmazó ciklén-származékok Mn ²⁺ , Cu ²⁺ és Gd ³⁺ -komplexei: egyensúly és kinetika Equilibrium and Kinetic Characterization of the Mn ²⁺ , Cu ²⁺ - and Gd ³⁺ -complexes Formed with Two Cyclen Dipicolinates GARDA Zoltán, RUSCSÁK Erika, RODRÍGUEZ Aurora, PLATAS-IGLESIAS Carlos, TÓTH Imre, TIRCSÓ Gyula.....	91
Triptofánszármazékok reakciója peroxomonoszulfát ionnal: kinetika és mechanizmus Reaction Between Tryptophan Derivatives and Peroxomonosulfate Ion: Kinetics and Mechanism Melinda GOMBÁR, Gábor LENTE, István BÁNYAI, Attila KISS, István FÁBIÁN.....	92
Transz-DO2A származék ligandumok előállítása és Mn ²⁺ -komplexeik egyensúlyi és kinetikai jellemzése Synthesis, Equilibrium and Kinetic Properties of the Mn ²⁺ Complexes Formed with Trans-DO2A Derivative Ligands NAGY Viktória, GARDA Zoltán, PLATAS-IGLESIAS Carlos, TÓTH Imre, TIRCSÓ Gyula.....	93
Két új triazaciklononán származék rézkomplexeinek egyensúlyi és kinetikai sajátságai Equilibrium and Kinetic Properties of Cu(II)-complexes Formed with Two New Triazacyclononane Derivatives VÁGNER Adrienn, HORVÁTH Dávid, NOTNI Johannes, BRÜCHER Ernő, TÓTH Imre, BARANYAI Zsolt.....	94

Poszterek / Posters

Növény növekedést serkentő baktériumtörzsek tenyésztési körülményeinek meghatározása Determination of the Cultivation Conditions of Plant Growth Promoting Bacteria <i>ABOD Éva, MARA Gyöngyvér, LÁNYI Szabolcs</i>	95
Lágyítóhatás vizsgálata térhálós poliuretán elasztomerekben Investigation of Plasticier Effect in Crosslinked Polyurethane Elastomers <i>BÁNHEGYI András, GULYÁS Réka, TRUJILLO Vilaboy José, KÉKI Sándor, MAROSSY Kálmán</i>	96
Dehalogénezés és hidratálás foszfaurotropinokat tartalmazó félszendvics Ru-komplexekkel Dehalogenation and Hydration Reactions Catalyzed by Half-sandwich Ru-complexes Containing Phosphaurotropines <i>BOLYOG-NAGY Evelin, UDVARDY Antal, FORGÁCS Viktória, HORVÁTH Henrietta, JOÓ Ferenc, KATHÓ Ágnes</i>	97
Cink réteggel bevont acél hordozó oxidációval szembeni ellenállásának növelése szol-gél szilika bevonatok által Improvement in the Oxidation Resistance of Zinc Coated Steel Substrates by Sol-gel Derived Silica Coatings <i>Nicoleta COTOLAN, Emőke ALBERT, Gabriella SZABÓ, Zoltán HÓRVÖLGYI, Liana-Maria MUREȘAN</i>	98
A mátrix effektus kiküszöbölése antipszichotikumok tejből való meghatározása esetében Elimination of Matrix Effect in Case of Antipsychotics' Determination from Milk Samples <i>DONÁTH-NAGY Gabriella, VANCEA Szende, ÓSZ Bianca, FAZAKAS Emőke</i>	99
Iridium(I)-NHC komplexek katalitikus alkalmazása Catalytic Application of Iridium(I)-NHC Complexes <i>ERDEI Anikó, HORVÁTH Henrietta, MAROZSÁN Natália, PAPP Gábor, JOÓ Ferenc</i>	100
Ón kinyerése hulladék nyomtatott áramköri lemezek feldolgozásakor keletkezett másodlagos anyagáramokból Recovery of Tin from Secondary Streams Obtained in the Processing of Waste Printed Circuit Boards <i>FOGARASI Szabolcs, IMRE-LUCACI Florica, IMRE-LUCACI Árpád, ILEA Petru</i>	101
Hg, As és Sb optikai emissziós spektrometriás eljárással történő meghatározásának teljesítményjellemzői, kapacitívan csatolt mikrofáklyás plazmát alkalmazva Figures of Merit in the Hg, As and Sb Determination using Capacitively Coupled Plasma Microtorch Optical Emission Spectrometry <i>FRENȚIU Tiberiu, DARVASI Jenő, CADAR Sergiu, PONTA Michaela</i>	102
A Taguchi módszer alkalmazása a cink klorid komplexek eltávolítására anion típusú ioncserélő gyanták segítségével Design of Experiments for Zinc Removal as Zinc Chloride Complexes on an Anion Exchange Resin Using Taguchi Method <i>Emilia GÎLCĂ, Andrada MÁICĂNEANU, Petru ILEA</i>	103
A molekuláris dokkolás tanulmányozása a rezeveratrol származékoknak az Arachis hypogaea sztilén szintáz kristályszerkezetén Molecular Docking Studies of Resveratrol Derivatives on the Crystal Structure of Stilbene Synthase from Arachis Hypogaea <i>Alexandra M. HARSA, Teodora E. HARSA, Mircea V. DIUDEA</i>	104
A molekuláris dokkolás tanulmányozása a szerotonin származékoknak az emberi PPAR gamma ligandum-kötő doménnek a indometacin és nitro-233 komplexében Molecular Docking Studies of Serotonin Derivatives on the Human PPAR Gamma Ligand-binding Domain in Complex with Indomethacin and Nitro-233 <i>Teodora E. HARSA, Alexandra M. HARSA, Mircea V. DIUDEA</i>	105
A „pozitív gadolinium anomália” vizsgálata a debreceni városi szennyvízben induktív csatolású plazma tömeg spektrometriás módszerrel „Positive Gadolinium Anomaly” in the Waste Water of Debrecen City Studied by ICP MS/MS Spectroscopy <i>JURCA Tünde, BRAUN Mihály, KÁLMÁN Ferencz Krisztián, TÓTH Imre</i>	106
A savas előkezelés hatása a vörösiszap katalitikus tulajdonságaira Influence of Acidic Treatment of Red Mud on Its Catalytic Properties <i>JUZSAKOVA Tatjana, RÉDEY Ákos, FRÁTER Tamás, CSAVDARI Alexandra, KOVÁCS Zsófia, DIOSSY László</i>	107
Funkcionalizált ciszpentacin származékok sztereokontrollált szintézise biciklusos β -aminosavakból gyűrűnyitó metatézissel Stereocontrolled Synthesis of Difunctionalized Cispentacin Derivatives Through Ring-opening Metathesis of Bicyclic β -amino Acids <i>KISS Loránd, KARDOS Márton, FORRÓ Enikő, FÜLÖP Ferenc</i>	108

Hidrogénfejlesztés nemesfémekkel módosított TiO ₂ fotokatalizátorok alkalmazásával látható fényű megvilágítás mellett Hydrogen Production Using Noble Metal Deposited TiO ₂ Photocatalysts Irradiated with Visible Light <i>Ákos KMETYKÓ, András DOMBI, Klára HERNÁDI</i>	109
Nehézfémek eltávolítása elektrokinetikai módszer alkalmazásával Removal of Heavy Metals Using Electrokinetic Remediation Process <i>Carmen MÁNZATU, Boldizsár NAGY, Anamaria TÖRÖK, Ceccarini ALESSIO, Cornelia MAJDIK</i>	110
Módosított grafit/hemin/kitozán elektród: elektrokémiai jellemzés és a sebességállandó meghatározása ciklikus valamint négyszög hullám voltammetriával Modified Graphite/hemin/chitosan Electrode: Electrochemical Characterization and Ks Determination Using Cyclic Voltammetry and Square Wave Voltammetry <i>MARES Georgeta Maria, Graziella Liana TURDEAN, Ionel Cătălin POPESCU</i>	111
Összehasonlító tanulmány az ICP-AES és ATR technikát használva öt <i>Salvia officinalis</i> -ből eredő termékből Comparative Study of Five Herbal Products from <i>Salvia Officinalis</i> using ICP-AES and ATR Techniques <i>MARIAN Eleonora, JURCA Tünde, BRAUN Mihály, GOMBOS Réka, TÓTH Imre</i>	112
Vízoldható Ru(II)-NHC komplex katalizátorok alkalmazása hidrodehalogénezési reakciókban Application of Ru(II)-NHC Complex Catalysts in Hydrodehalogenation Reactions <i>MAROZSÁN Natália, HORVÁTH Henrietta, ERDEI Anikó, PAPP Gábor, JOÓ Ferenc</i>	113
Pirimidin származékok QSAR tanulmányozása QSAR Study on Pyrimidines <i>Raluca F. MÁTIEȘ, Mircea V. DIUDEA</i>	114
Hidrodehalogénezés rögzített nanoméretű vas(0) (NZVI) részecskéekkel Hydrodehalogenation by Supported Zerovalent Iron Nanoparticles <i>MENA-CRUZ Adrián, BARCZA-BERTÓK Ágnes, KATHÓ Ágnes, JOÓ Ferenc</i>	115
A balatoni víztest környezeti kémiai, gazdasági és társadalmi vizsgálata multi-kritériumos döntéshozatal támogató eszközök segítségével Study on the Chemical, Economical and Social Aspects of the Lake Balaton with Multi-criteria Decision Making Method <i>NÉMETH József, SEBESTYÉN Viktor, DOMOKOS Endre, UTASI Anett, RÉDEY Ákos</i>	116
Aziridinek új, szelektív nyitása XtalFluor-E [®] alkalmazásával. Fluorozott diaminokarbonsav származékok szintézisei A novel Selective Fluoride Opening of Aziridines by XtalFluor-E [®] . Synthesis of Fluorinated Diamino Acid derivatives <i>NONN Melinda, KISS Loránd, SILLANPÄÄ Reijo, FÜLÖP Ferenc</i>	117
A mezei zsurló (<i>Equisetum arvense</i> L.) antioxidáns hatóanyagtartalmának meghatározása Determination of Antioxidant Level in <i>Equisetum Arvense</i> L. <i>PALLAG Annamária, JURCA Tünde, VICAS Laura, PASCA Bianca</i>	118
Klorogénsavtartalom vizsgálata <i>Coffea arabica</i> L. egyes részeiben Study of Chlorogenic Acid Content in Various Parts of <i>Coffea Arabica</i> L. <i>PATAY Éva Brigitta, NEMETH Tibor Sebastian, NEMETH Tibor, PAPP Nóra, VLASE Laurian</i>	119
A Balaton kémiai terhelésének elemzése Analysis of Chemical Pollutants of the Lake Balaton <i>SEBESTYÉN Viktor, UTASI Anett, DOMOKOS Endre</i>	120
Endokrin hatású peszticid hatóanyagok lebontása ózonos kezelés és heterogén fotokatalízis kombinációjával Transformation of Endocrine Disrupting Pesticides by the Combination of Ozonation and Heterogeneous Photocatalysis <i>SIMON Gergő, ALAPI Tünde, VERÉB Gábor, DOMBI András, HERNÁDI Klára</i>	121
Poli(N-vinil-imidazol) alapú amfifil kotréhálók előállítása és tulajdonságaik vizsgálata Synthesis and Characterization of Amphiphilic Polymer Conetworks Based on Poly(N-vinylimidazole) <i>STUMPHAUSER Tímea, FODOR Csaba, IVÁN Béla</i>	122
Izomer naftoxazinnal kondenzált heterociklusok szintézise a módosított Mannich-reakció alkalmazásával Synthesis of Isomeric Naphthoxazine-fused Heterocycles via the Modified Mannich Reaction <i>SZATMÁRI István, FÜLÖP Ferenc</i>	123

A heroin hidrolízis kinetikájának vizsgálata mágneses magrezonancia spektroszkópiával Site- and Species-specific Hydrolysis Rates of Heroin <i>SZŐCS Levente, TÓTH Gergő, ORGOVÁN Gábor, URAI Ákos, HOSZTAFI Sándor, GERGŐ Lajos, NOSZÁL Béla</i>	124
Malachit-zöld fitoremediációja <i>Salvinia natans</i> vízinövény alkalmazásával Phytoremediation of Malachite Green by Aquatic Plant <i>Salvinia Natans</i> <i>TÖRÖK Anamaria, NAGY Boldizsár, TONK Szende, MAJDIK Cornelia</i>	125
Vizoldható foszfóniumsók és Ag(I)-ionok kölcsönhatása révén kialakuló önszerveződő rendszerek Water-soluble Phosphonium Salts as Supramolecular Synthons <i>UDVARDY Antal, SZARVAS Tímea, BÉNYEI Attila, JOÓ Ferenc, KATHÓ Ágnes</i>	126
N-szubsztituált normorfin származékok szintézise és szerkezetvizsgálata Synthesis and Analytical Study of N-substituted Normorphine Derivatives <i>URAI Ákos, SZŐCS Levente, HOSZTAFI Sándor, HORVÁTH Péter, NOSZÁL Béla</i>	127
Zirc város vízi környezetállapotának összehasonlító elemzése Comparative Analysis of Water Environment Status of Zirc <i>UTASI Anett, SEBESTYÉN Viktor, RÉDEY Ákos</i>	128
Látható fényrel gerjesztett rutil fázisú titán-dioxidok a fotokatalitikus víz tisztításban Visible Light Activated Rutile-phase Titanium Dioxides in Photocatalytic Water Treatment Processes <i>Gábor VERÉB, Tamás GYULAVÁRI, Zsolt PAP, Lucian BAIA, Teodora RADU, Károly MOGYORÓSI, András DOMBI, Klára HERNÁDI</i>	129
Pd(II)-szulfoszalán komplexek szintézise és katalitikus tulajdonságai Synthesis and Catalytic Properties of Water-soluble Pd(II)-sulfonated Salan Complexes <i>VORONOVA Krisztina, HOMOLYA Levente, BUNDA Szilvia, UDVARDY Antal, BÉNYEI Attila, JOÓ Ferenc</i>	130

Diák-poszterek / Student Posters

Új királis foszfin-amin ligandumok előállítása és alkalmazása palládium-katalizált allilezési reakciókban Novel Chiral Phosphine-amine Ligands and their Application in Palladium-Catalyzed Allylation Reactions <i>CSÁSZÁR Zsófia, FARKAS Gergely, TÓTH Imre, BAKOS József</i>	131
Fenotiazinil-kalkonok és 2,3-dihidrobzeno-[1,4]tiazepinek előállítása Synthesis of Phenothiazinyl-chalcones and 2,3-dihydrobenzo-[1,4]-thiazepines <i>CSEH Edina, GÁL Emese, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița</i>	132
Fenotiazin alapú benzotiazolok szintézise és szerkezet vizsgálata Synthesis and Structural Analysis of Phenotiazinyl-Benzthiazoles <i>DORNER Norbert-Zsolt, BRÉM Balázs, GÁL Emese, LOVÁSZ Tamás, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița</i>	133
Az epinefrin tanulmányozása elektrokémiai módszerek segítségével The Study of Epinephrine by Electrochemical Methods <i>Ileana Elisabeta ELEKES, Graziella Liana TURDEAN</i>	134
Csurgalékvízből származó baktériumok fenolbontó képességének vizsgálata Determining the Phenol-degrading Potential of Bacteria Isolated from a Landfill Leachate-treating Bioreactor <i>FIKÓ Dezső Róbert, JAKAB Ervin, KOVÁCS Erika, FELFÖLDI Tamás, MÁTHÉ István</i>	135
Pd nanorészecske alakjának hatása a szennyezők fotokatalitikus bontására, illetve a H ₂ fejlesztésre The Effect of the Pd Shape on the Photocatalytic Degradation of Organic Pollutants and H ₂ Evolution <i>FODOR Szilvia, PAP Zsolt, KOVÁCS Gábor, Lucian BAIA, Virginia DANCIU, Adriana VULPOI, DOMBI András, HERNÁDI Klára</i>	136
A Z-mátrix és szimmetria alkalmazása a kvantumkémiai modellezésben; esettanulmány The Use of Z-matrices and Symmetry in Quantumchemical Modelling; a Case study <i>GAL Cristian Andrei, KUN Attila-Zsolt</i>	137
Kereskedelmi titán-dioxidok fotokatalitikus aktivitásának és hidrogénfejlesztő képességének finomhangolása arany és platina nanorészecskék együttes alkalmazásával Fine Tuning of the Photocatalytic Activity and Hydrogen Production Capacity of Commercial Titanias with Simultaneous Gold and Platinum Nanoparticle Deposition <i>HAMPEL Boglárka, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, Virginia DANCIU, DOMBI András, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA</i>	138

2-ferrocenilpiridazin-3(2H)-ion származékok szintézise jódferrrocén keresztkapcsolási reakcióival Synthesis of 2-ferrocenylpyridazin-3(2H)-thione Derivatives via Cross-Coupling Reactions of Iodoferrocene <i>Tamás JERNEI, Antal CSÁMPAI</i>	139
Komposzt minták biológiailag hozzáférhető nehézfém tartalmának becslése és vizsgálati módszerének validálására alkalmas referencia minta előállítása Estimation of Bioavailable Heavy Metals Content in Compost Samples and Validation of Analytical Methods for the Reference Material <i>JÓNÁS Miklós, ALEKSZA László, HORVÁTH Márk, HORVÁTH Zoltán, KOVÁCS Katalin, HELTAI György</i>	140
Betti bázisok alkilezése és komplexálási reakciói Alkylation and Complexation Reaction of Betti Bases <i>MIHÁLY Réka, GÁL Emese, LOVÁSZ Tamás</i>	141
β -formil-porfirin származékok Knoevenagel típusú kondenzációs reakciói Knoevenagel Condensation Reactions of β -formyl-porphyrins <i>MOLNÁR Éva Andrea, GÁL Emese, LOVÁSZ Tamás, Luminița SILAGHI-DUMITRESCU</i>	142
Külső hatásokra válaszoló arany(I) komplexek mechanokémiai előállítása Mechanochemical Synthesis of Stimuli-responsive Gold(I) Complexes <i>OLÁH Laura, MOLNÁR Miklós, JOBBÁGY Csaba, MARSJI Gábor, DEÁK Andrea</i>	143
TiO ₂ /WO ₃ kompozit fotokatalizátorok előállítása a félvezetők felületi töltésének módosításával Preparation of TiO ₂ /WO ₃ Composite Photocatalysts by the Adjustment of the Semiconductors' Surface Charge <i>ORBÁN Eszter, KEDVES Zsolt, SASZET Kata, FÓDOR Szilvia, HAMPEL Boglárka, TÓTH Zsejke-Réka, SZÉKELY István, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, Virginia DANCIU, Lucian BAIA</i>	144
A formiát ion és a pH hatása a nem-szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyagok vákuum-ultraibolya fotolízisére The Effects of Formate Ion and pH on Vacuum Ultraviolet Photolysis of NSAIDs <i>RÓZSA Georgina, ARANY Eszter, ALAPI Tünde, KOZMÉR Zsuzsanna, SIMON Gergő, DOMBI András</i>	145
Különböző morfológiájú TiO ₂ nanokristályok előállítása és fotokatalitikus aktivitásuk vizsgálata Synthesis of Differently Shaped TiO ₂ Nanocrystallites and Analysis of their Photocatalytic Activity <i>SASZET Kata, KEDVES Zsolt, VAJDA Kriszta, KÁSA Zsolt, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, Virginia DANCIU, Adriana VULPOI, MAGYARI Klára, DOMBI András, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA</i>	146
Pirazol és pirazolin származékok szintézise és foszfinézési reakciói Synthesis and Phosphination Reactions of Pyrazole and Pyrazoline Derivatives <i>SIMÓ Babette, LOVÁSZ Tamás</i>	147
Nulladik generációjú aromás magú dendrimerek szintézise és jellemzése Synthesis and Characterization of Zero Generation Dendrimers Containing Aromatic Core <i>SIPOS Tímea-Anita, FÜSTÖS Melinda-Emese, KATONA Gabriel</i>	148
Különböző alakú WO ₃ félvezetők és WO ₃ /TiO ₂ kompozitok előállítása, fotokatalitikus aktivitásának vizsgálata The Synthesis of Differently Shaped WO ₃ Semiconductors and WO ₃ /TiO ₂ Composites. Study of Their Activity in Photocatalytic Applications <i>SZÉKELY István, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, Virginia DANCIU, Adriana VULPOI, MAGYARI Klára, DOMBI András, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA</i>	149
Különböző pozícióban brómozott AB típusú porfirinek szintézise Synthesis of Different Position Brominated AB-type porphyrins <i>SZÓKE Orsolya, GÁL Emese, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița</i>	150
Kereskedelmi TiO ₂ és különböző alakú arany nanorészecskék által alkotott kompozitok fotokatalitikus aktivitása modell szennyezők lebontására és a keletkező köztitermékek vizsgálata Commercial TiO ₂ /Au Nanocomposites with Differently Shaped Gold Nanoparticles Photocatalytic Degradation of Model Pollutants and the Analysis of the Degradation Intermediates <i>TÓTH Zsejke Réka, KOVÁCS Gábor, PAP Zsolt, Virginia DANCIU, DOMBI András, HERNÁDI Klára, Lucian BAIA</i>	151

Szerkezet, dinamika és molekuláris kölcsönhatások a mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia tükrében

Structure, Dynamics and Molecular Interactions as Seen by Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy

Dr. E. KÖVÉR Katalin

egyetemi tanár, Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar,
Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
4032 Debrecen, Egyetem tér 1, fax: +36-52-518-660
kover@science.unideb.hu

ABSTRACT

In the last decades several peptide toxins were isolated from animal venoms which are high affinity blockers of different ion channels including the voltage-gated potassium (Kv) channels. Anuroctoxin (AnTx) isolated from scorpion venom (*Anuroctonus phaiodactylus*) is a 35-amino-acid peptide stabilized by four disulfide bridges. AnTx is a high affinity blocker of Kv1.3-channel, but with lower affinity blocks Kv1.2 as well, limiting the potential clinical use of the toxin. Based on our findings and earlier literature data we designed single and double mutants to achieve higher selectivity and affinity. Seleno-Cys (Sec) analog of the AnTx-mutant was also synthesized for unambiguous assignment of the disulfide connectivities. The structure, dynamics and interactions of the most promising mutants were investigated using state-of-the-art NMR techniques in combination with computer-assisted molecular modelling.

Financial support from OTKA K 105459, OTKA NN 109671 and TÁMOP-4.2.2/A-11/1/KONV-2012-0025 is gratefully acknowledged.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az elmúlt évtizedben számos állati méregből izolált peptid toxinról kimutatták, hogy azok nagy affinitással gátolják a különböző ion-csatornákat, köztük a feszültség-kapuzott kálium (Kv) csatornákat is. Az általunk tanulmányozott, skorpió (*Anuroctonus phaiodactylus*) méregből izolált Anuroctoxin (AnTx) 35-aminosav egységből álló peptid, melynek szerkezetét négy diszulfid-híd is stabilizálja. A natív AnTx nagy affinitású Kv1.3-csatorna gátló toxin, ugyanakkor – bár kisebb affinitással – a Kv1.2-csatornát is gátolja, ami miatt klinikai alkalmazása korlátozott. Korábbi szerkezet-hatás összefüggések alapján új, nagy affinitású és szelektív egyszeres- illetve kétszeres-peptid mutánsokat terveztünk. A szerkezet és az által biológiai funkció szempontjából fontos diszulfid-kapcsolódások egyértelmű igazolására – a ciszteineket szeleno-ciszteinre (Sec) cserélve – a megfelelő Sec-mutánst is előállítottuk a bizonyítékul szolgáló ⁷⁷Se NMR kísérletekhez. A legígéretesebb mutánsok szerkezetét, dinamikáját és csatornával való kölcsönhatását korszerű NMR technikákkal és számítógépes molekulamodellezéssel vizsgáltuk.

Kulcsszavak: Peptid toxin, diszulfid-híd, Sec-mutáns, K⁺-csatorna, MD, NMR

A kutatást az OTKA K 105459, OTKA NN 109671 és a TÁMOP-4.2.2/A-11/1/KONV-2012-0025 támogatta.

Dizájner drogok – kiemelkedő veszélyek

Designer Drugs – Extreme Danger

FÜLÖP Ferenc

tanszékvezető egyetemi tanár, az MTA rendes tagja
Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerkémiai Intézet és
MTA-SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport H-6720, Szeged, Eötvös u. 6.
E-mail: fulop@pharm.u-szeged.hu

ABSTRACT

The designer drugs are *structural* analogs of a *controlled substance* that has been designed to mimic the pharmacological effects of an original drug or drug candidate. Designer drugs include *psychoactive substances* where with similar strategy, new psychoactive substances are produced. The lecture will focus on historical aspects and the extreme danger of the new designer drugs.

ÖSSZEFOGLALÓ

A gyógyszerkutatás fontos eleme hogy gondosan tervezett szerkezetmódosításokkal egyre hatékonyabb szereket szintetizáljunk és vizsgáljunk. A dizájner drogok ezzel ellentétben rendszerint pszichoaktív szerek módosításával előállított anyagok, melyek még nincsenek a rendőrségi tiltott listákon. Az ilyen vegyületek jellemzője nem a biztonság, hanem a rendkívüli veszély, hiszen ezek a szerek nem, vagy alig tesztelt anyagok, így gyakorlatilag illegális emberkísérletek folynak az utcán. Az előadás a történeti háttér mellett a rendkívüli veszélyekre hívja fel a figyelmet.

Könnyen deprotonálható koronaéterek szintézise, molekuláris felismerése és alkalmazása

Synthesis, Molecular Recognition and Application of Proton-ionizable Crown Ethers

HUSZTHY Péter

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék,
H-1111, Budapest, Szent Gellért tér 4., Magyarország, Tel.: +36 1 463 1071, Fax: +36 1 463 3297,
e-mail: huszthy@mail.bme.hu, www.bme.hu

ABSTRACT

In order for an ion carrier to accomplish a practically useful active transport across the membrane of an aqueous source phase/lipophilic organic membrane/aqueous receiving phase bulk liquid membrane system, it needs to have a high ion-binding ability at the source phase/membrane interface and a low ion-binding ability at the membrane/receiving phase interface. Meeting this seemingly contradictory requirement, it is needed to engineer into the ion carrier a "switch" operated by an external reversible force, which creates a strong and a weak binding state, respectively. Among the ion carriers (ionophores) possessing this "switch", proton-ionizable crown ether type macrocycles have attracted the attention of many researchers, because the binding abilities of these ionophores for cations can be altered by adjusting the pH of the medium. The proton-ionizable crown ethers are needed to be lipophilic enough so that in all forms (as deprotonated, as complexed and as free neutral ligands) should remain in the organic phase, otherwise they can distribute to the aqueous one, and are not available as carriers. During our research we have prepared several types of lipophilic achiral and enantiopure chiral proton-ionizable crown ethers and used them as carriers in the selective (including enantioselective) transport of cations.

ÖSSZEFOGLALÓ

Annak érdekében, hogy egy ionofor aktív transzportra legyen képes egy vizes adófázis/lipofil szerves membrán/vizes szedőfázis folyadéktömb membrán rendszerben, az adófázis/membrán határfelületen nagy, a membrán/szedőfázis határfelületen pedig kis ionmegkötő képességgel kell rendelkeznie. Ezt a látszólag ellentmondó követelményt az ionofor jól, illetve rosszul komplexáló formájává külső reverzibilis hatással működő "kapcsolóval" valósíthatjuk meg. Az ilyen "kapcsolóval" rendelkező ionoforok között a könnyen deprotonálható koronaéterek nagy figyelemre tettek szert, mivel ezek kationmegkötő képessége a környezet pH-jának beállításával változtatható. A deprotonálható koronaétereknek megfelelően lipofileknek kell lenniük ahhoz, hogy minden formájukban (deprotonált, komplexált és szabad semleges ligandumként) a szerves membránban tartózkodjanak, mert a vizes fázisokba kerülve nem állnak rendelkezésre, mint ionoforok. Kutatásaink során különböző típusú lipofil akirális és enantiomertiszta királis könnyen deprotonálható koronaétert állítottunk elő és alkalmaztuk ezeket a makrociklusokat kationok szelektív (valamint enantioszelektív) transzportjára.

Kulcsszavak: deprotonálható koronaéterek, szerves szintézisek, enantiomertiszta vegyületek szintézise, folyadéktömb-membrán cella, aktív kationtranszport

Alakemlékező polimerek a XXI. században

Shape-memory Polymers in the XXI. Century

KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (36)-52-512900, Fax: (36)-52-518662, keki.sandor@science.unideb.hu

ABSTRACT

The properties of smart materials can be changed in a controlled manner upon the effect of external stimuli. Shape-memory materials constitute the largest group within the family of smart materials. The shape-memory materials can be deformed and fixed in temporary shapes but upon the effect of external stimuli such as light, electric field, magnetic field, change of chemical environment and heat they are able to revert back to their original (permanent) shape. In this lecture, I focus on the properties of shape-memory polymers and the physical and chemical backgrounds of their shape-memory "ability". In addition, I summarize the most important application areas of shape-memory polymers and our results concerning the synthesis and characterization of polyurethane based shape-memory polymers.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az „intelligens” anyagok egy, vagy több tulajdonsága külső hatásra jelentős mértékben és irányított módon megváltoztatható. Az intelligens anyagok egyik legnagyobb csoportját az alakemlékező anyagok alkotják. Egy anyagot, akkor nevezünk alakemlékezőnek, ha az anyag deformálható és az anyag ebben a deformált állapotában rögzíthető, azonban valamilyen külső inger hatására pl. fény, hő, elektromos és mágneses tér, vagy a kémiai környezet változására visszanyeri eredeti, állandó alakját. Jelen előadásban elsősorban az alakemlékező polimerek tulajdonságaira, alakemlékező „képességük” fizikai és kémiai hátterére térek ki. Bemutatom továbbá az alakemlékező polimerek felhasználási területeit és a poliuretán alapú alakemlékező polimerek előállítását és karakterizálását során elért eredményeinket is.

Kulcsszavak: intelligens anyag, alakemlékező polimer, poliuretán

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 és a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program” című kiemelt projekt támogatta (KS). A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Természetes és biopolimerek: módosítás, keverékek, kompozitok**Natural and Biopolymers: Modification, Blends, Composites**

PUKÁNSZKY Béla

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék,
Műanyag- és Gumiipari Laboratórium, H-1521 Budapest, Pf. 91, Magyarország,
Tel.: +36-1-463-2015, Fax: +36-1-363-3474, E-mail: bpukanszky@mail.bme.hu
MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, H-1519 Budapest, Pf. 286

ABSTRACT

The environmental impact of plastics increases continuously with the growing production and use of these materials. As a consequence, the interest in natural and biopolymers increased considerably in recent years. Natural polymers have a considerable number of advantages including availability, large amounts, low price, biological degradability, etc., but they have some drawbacks as well. They are difficult to process, their properties are inferior compared to commodity polymers, and they are water and temperature sensitive. Some of these drawbacks can be at least partially overcome by modification, by the preparation of blends and composites. The presentation focuses on the preparation, structure and properties of starch and poly(lactic acid) composites reinforced with wood flour. It calls attention to the importance of interfacial interactions, to the role of micromechanical deformations occurring around the particles during loading and to some application possibilities.

Keywords: biopolymers, wood composites, interfacial interactions, micromechanical deformations, application

ÖSSZEFOGLALÓ

A műanyaggyártás és felhasználás folyamatos növekedésével egyre nagyobb a műanyagok környezetszennyező hatása is. Ennek következtében az elmúlt években előtérbe került a természetes és biopolimerek alkalmazása a műanyagiparban. A természetes polimerek számos előnnyel rendelkeznek, nagy mennyiségben állnak rendelkezésre, olcsók, biológiailag lebonthatók stb., viszont számos hátrányuk is van. Feldolgozhatóságuk nehéz, tulajdonságaik kedvezőtlenek, vízfelvételük nagy, hőstabilitásuk pedig kicsi. Ezek a hátrányok módosítással, keverékek és kompozitok készítésével részben kiküszöbölhetők. Az előadás faliszt erősítésű keményítő és politejsav kompozitok előállításával, szerkezetével és tulajdonságaival foglalkozik. Felhívja a figyelmet a határfelületi kölcsönhatások fontosságára, a kompozitban lejátszó mikromechanikai deformációk jelentőségére és néhány hasznosítási lehetőségre.

Kulcsszavak: biopolimerek, fa kompozitok, határfelületi kölcsönhatások, mikromechanikai deformációs folyamatok, alkalmazás

TiO₂ szol-gél bevonatok antibakteriális hatása

Antibacterial Activity of TiO₂ Sol-gel Coatings

ALBERT Emőke¹, CSÍK Gabriella², FÓNAGY Orsolya³, HORVÁTH Ottó³,
SUHAJDA Ágnes⁴, SZABÓNÉ BÁRDOS Erzsébet³, HÓRVÖLGYI Zoltán¹

¹BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, H-1111 Budapest, Budafoki út 6-8.

²Semmelweis Egyetem, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet, H-1094 Budapest, Tűzoltó u. 37-47.

³Pannon Egyetem, Kémiai Intézet, H-8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

⁴BME, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék,
H-1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.

ABSTRACT

The purpose of this work was to prepare TiO₂ sol-gel coatings with antibacterial property both in dark and visible light. Compact and porous coatings were deposited onto microscope glass substrates by dip-coating technique. The TiO₂ films were doped by silver for ensuring their photocatalytic and antibacterial properties in visible light. Thickness and refractive index of deposited coatings were studied by UV-Vis spectroscopy. Their surface morphology and structure were investigated by scanning electron microscopy (SEM) and by high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM). The silver content of the coatings was determined by Rutherford backscattering spectroscopy (RBS). The bactericidal activity of samples was studied against *E. coli* bacteria in dark and in visible light. The role of coating composition and structure in the bactericidal activity as well as the durability of coatings was investigated. The photocatalytic activity of the samples was investigated against benzenesulfonic acid.

Keywords: TiO₂ sol-gel coating, silver additive, antibacterial effect, photocatalytic activity

Acknowledgements: The financial support of the New Széchenyi Plan (TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KMR-2010-0002) and of the National Development Agency (Hungarian-French Bilateral Co-operation, PHONOSEL, Tét_11-2-2012-0008) is gratefully acknowledged. Emőke Albert's research work was supported by the European Union and the State of Hungary, co-financed by the European Social Fund in the framework of TÁMOP-4.2.4.A/ 2-11/1-2012-0001 "National Excellence Program".

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk célja sötétben és látható fényben egyaránt antibakteriális tulajdonságot mutató TiO₂ bevonatok előállítása és jellemzése. Kompakt és pórusos TiO₂ bevonatokat mártásos szol-gél technikával képeztünk mikroszkóp tárgylemez felületeken. Látható fényben fotoaktív, antibakteriális bevonatok kialakítására a TiO₂ bevonatokat ezüsttel adalékoltuk. A bevonatok vastagságát és törésmutatóját a minták UV-Vis transzmittancia spektrumai alapján határoztuk meg. A felületi morfológiát pásztázó elektronmikroszkópiás (SEM) mérésekkel, a bevonatok pórusrendszerét nagyfelbontású transzmissziós elektronmikroszkópiás (HRTEM) vizsgálatokkal jellemeztük. A bevonatok ezüst tartalmát Rutherford visszaszórás spektroszkópiás (RBS) mérésekkel határoztuk meg. Az antibakteriális hatás tanulmányozására mikrobiológiai vizsgálatokat végeztünk sötétben és látható fényben egyaránt. Vizsgáltuk a bevonatok típusának, az ezüsttartalomnak és az ezüsttel való adalékolás módjának az antibakteriális tulajdonságokra gyakorolt hatását, valamint a bevonatok időtállóságát. A fotokatalitikus aktivitás vizsgálata során benzolszulfonsav modellvegyület fényelnyelési szinképeinek változását követtük nyomon.

Kulcsszavak: TiO₂ szol-gél bevonat, ezüst adalék, antibakteriális hatás, fotokatalitikus aktivitás

Köszönetnyilvánítás: A munkához anyagi támogatást nyújtott az Új Széchenyi Terv (Társadalmi Megújulás Operatív Program, TÁMOP – 4.2.1/B-09/1/KMR- 2010-0002) és a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség (magyar-francia bilaterális TÉT pályázat, PHONOSEL, Tét_11-2-2012-0008). Albert Emőke publikációt megalapozó kutatása a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Kavitandok nemlineáris izotermájának meghatározása különböző fordított fázisú állófázisokon az inverz módszer segítségével

Determination of the Nonlinear Isotherm of Cavitands on Different Reversed-phase Packing Materials by the Inverse Method

BARTÓ Endre¹, Dr. PRAUDA Ibolya^{1,3}, Prof. KILÁR Ferenc^{1,3,4}, Dr. KISS Ibolya^{1,3}, Prof. FELINGER Attila,^{1,2,3}

¹Pécsi Tudományegyetem TTK Kémia Intézet Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék, H-7624 Pécs, Ifjúság útja 6. Tel.: +36 72 503 600, Fax: +36 72 501 518, kemaint@gamma.ttk.pte.hu
<http://www.kemia.ttk.pte.hu/analitika>

²MTA-PTE Molekuláris kölcsönhatások az elválasztástudományban Kutatócsoport H-7624 Pécs, Ifjúság útja 6. Tel.: +36 72 503 600, Fax: +36 72 501 518

³Pécsi Tudományegyetem Szentágotthai Kutatóközpont Analitikai Kémiai és Geoanalitikai kutatócsoport, H-7624 Pécs, Ifjúság útja 20. Tel.: +36 72 501 500, Fax +36 72 501654, info@szkk.pte.hu,
<http://www.szkk.pte.hu>

⁴Pécsi Tudományegyetem Bioanalitika intézet, H-7624 Pécs, Honvéd utca 1., Levelezési cím: H- 7624 Pécs, Szigeti út 12., Tel.: +36 72 536 255, Fax: +36 72 536 254, bioanalitika@aok.pte.hu,
<http://www.aok.pte.hu/bioanalitika/>
szerző e-mail címe: enlileru@yahoo.com

ABSTRACT

In this work, we have studied the nonlinear chromatographic behavior of cavitands as analytes with the help of overloaded separations. The equilibrium isotherm depicts the adsorption or partition of the solute between the stationary and the mobile phases at a given temperature, as a function of solute concentration in the mobile phase. The experiments were performed on two types of reversed stationary phases (C_8 and C_{18}). The nature of the isotherm types and the isotherm parameters revealed the retention mechanism of cavitands in RPLC.

Keywords: Cavitand, RPLC, inverse method of isotherm determination, retention mechanism, Langmuir isotherm

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során az inverz módszerrel meghatároztuk a 2-metil-C-tetra-metil-kavitand adszorpciós izotermáit különböző fordított fázisú állófázisokon (C_8 és C_{18}). Az adszorpciós izoterma meghatározására az inverz módszert korábban gyakran alkalmazzák, elsősorban azokban az esetekben, ha a minta csak kis mennyiségben áll rendelkezésre. Folyadékkromatográfiában a nemlineáris egyensúlyi izotermák ismeretéből következtethetünk a retenciós mechanizmusra.

Kulcsszavak: Kavitand, RPLC, izoterma meghatározás inverz módszerrel, retenciós mechanizmus, Langmuir izoterma

Acknowledgements/ Köszönetnyilvánítás

The work was supported by the grants Collegium Talentum, OTKA K75717, OTKA-K106044 and TÁMOP-4.2.2. A-11/1/KONV-2012-0065

A kutatás a következő támogatók segítségével valósult meg: Collegium Talentum, OTKA K75717, OTKA-K106044 és TÁMOP-4.2.2. A-11/1/KONV-2012-0065

Mikroalgák termesztése fotobioreaktorban – energetikai jellemzés

Microalgae Cultivation in Photobio-reactor – Energy Balance Analysis

BOCSI Róbert, Dr. HANÁK László, Dr. HORVÁTH Géza,
RIPPELNÉ Dr. PETHŐ Dóra, HODAI Zoltán

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki- és Folyamatmérnöki Intézet,
Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.
Tel.: +3688624268, bocsirobert@almos.uni-pannon.hu,
<http://mk.uni-pannon.hu/index.php/vegyeszmernoeki-es-folyamatmernoeki-intezet>

ABSTRACT

Microalgae technology consists of intensively studied biotechnology methods. Depending on the investigation on the properties of species or cultures, these require different cultivation and processing steps.

In our study we analyzed *Chlorella vulgaris* cultures by the energy balance of their growing and processing technology. We determined which operations require further development.

ÖSSZEFOGLALÓ

A mikroalgák termesztése évtizedek óta intenzíven kutatott biotechnológiai módszereket foglal magában. Attól függően, hogy a vizsgált faj vagy kultúra mely tulajdonságai alapján tűnik ki a többi közül, más és más termesztési- és feldolgozási lépéseket igényel.

Vizsgálataink során *Chlorella vulgaris* –ba tartozó kultúrák termesztési és feldolgozási technológiáját elemeztük. Meghatároztuk a kiválasztott műveleti sor azon pontjait, amelyek további fejlesztést kívánnak.

Kulcsszavak: microalgae, photobioreactor, energy balance

Cukoraminosav foldamer prekursorok szintézise és szerkezetvizsgálata

Synthesis and Structure Analysis of Precursors of Sugar Amino Acid Foldamers

CSORDÁS Barbara¹, Dr. FARKAS Viktor², Dr. PERCZEL András^{1,2}

¹ELTE-TTK Kémiai Intézet, Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium,
²MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport;
1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/a; Tel.: +36-1-372-2500 /6429;
Fax: +36 1 372 2620; <http://prot.chem.elte.hu/>

ABSTRACT

In the course of our research I synthesized amino sugar acids like especial units of foldamers as well as I incorporated these β -peptides into protein of Exendin-4 which is peptide-based drug for treatment of diabetes mellitus type II.

One representative of the SAA is 3-amino-3-deoxy-xylofuranuronic acid (AFC), its derivatives and oligomers were synthesized succesfully in a more profitable, optimal pathway from D-glucose. The oligomers were elucidated by chiroptical and NMR spectroscopy and quantumchemical calculations.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásaim során szénhidrát alapú β -aminosavak, mint speciális foldamer építőkövek, valamint ezek oligomerjeinek előállításával, illetve ezek Exendin-4 fehérjébe való beépítésével foglalkozom, amelyet ma már a II. típusú cukorbetegség kezelésére alkalmaznak.

A monomert, a 3-amino-3-dezoxi-xilofuránuronsavat (AFC) és származékait, illetve új származékait, oligomerjeit D-glükózból állítottam elő, illetve szintézisútját sikeresen optimáltam. Az oligomereket kiroptikai és NMR spektroszkópiával vizsgáltam, illetve kvantumkémiai számításokat végeztem.

Kulcsszavak: cukoraminosav, Exendin-4, peptidmimetikum, furánuronsav, szilárd fázisú peptidszintézis

Köszönetnyilvánítás: NK 101072

Kémiai harmadlagos kőolaj-kitermelés során előállítható kőolaj-víz emulziók reológiai vizsgálata Brookfield rotációs viszkoziméterrel

Rheological Investigation of Oil-water Emulsions in Chemical EOR by Brookfield Viscometer

ELEKES Andrea¹, NAGY Roland¹, Dr. BARTHA László¹, VÁGÓ Árpád²

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar,
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.
web: www.uni-pannon.hu

²MOL-Nyrt., ÚT IMA, 1117 Budapest, Október huszonharmadika u. 18.
web: www.mol.hu

ABSTRACT

The crude oil exploration by primary and secondary oil recovery could be achieved only until 30-60% of the reservoir. Enhanced oil recovery method has been developed in order to increase the production efficiency. In the course of enhanced oil recovery surfactant solutions mixed with crude oil compose emulsions with various stability. To modeling of the flow conditions in the reservoir rock and emulsion measuring methods based on Brookfield rotational viscometer has been developed. In this work our purpose was to define the rheological characteristics of a real residual crude oil-water emulsions. For the measurements diverse types of emulsions have been prepared, the effect of the application of different type the emulsion formation of some anionic and nonionic surfactants have been studied.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az elsődleges és másodlagos kőolaj-kitermelési módszerekkel a kőolajtárolók olajtartalmának csupán 30-60%-a hozható a felszínre. A kitermelési hatások további növelése érdekében fejlesztették ki a kémiai kizsorításon alapuló harmadlagos eljárást, mely során a vizes tenzid oldatok és a kőolaj keveredésekor különböző stabilitású emulziók alakulnak ki. Brookfield-típusú rotációs viszkoziméterrel modelleztük tároló közetben jellemző áramlási viszonyokat és kialakuló emulziókat. Vizsgálataink célja az ülepedő kőolaj-víz emulziók reológiai jellemzőinek meghatározása volt. Méréseink során különböző típusú emulziókat állítottunk elő, tanulmányoztuk a különböző anionos és nemionos emulgeátorok hatását az emulzió képződésre.

Kulcsszavak: harmadlagos kőolaj-kitermelés, emulzió, Brookfield-típusú rotációs viszkoziméter, reológia

Mechanokémia a réteges kettős hidroxidok szintézisében és interkalációjában

Mechanochemistry in the Synthesis and Intercalation of Layered Double Hydroxides

FERENCZ Zsolt¹, ÁDOK Mónika², SIPOS Pál², és PÁLINKÓ István¹

¹Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Szerves Kémiai Tanszék
6720 Szeged Dóm tér 8., Magyarország

²Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720 Szeged Dóm tér 7., Magyarország
Tel: +36 62 544 304; <http://www2.sci.u-szeged.hu/masost/>
e-mail: zferencz@chem.u-szeged.hu

ABSTRACT

Due to their unique structure Layered Double Hydroxides (LDHs) are gaining increasing interest and attention among scientists. Their most remarkable feature is the capacity of intercalating various (even large organic) anions between the layers. The main preparation and intercalation methods used for these materials are the co-precipitation and urea method. In this study an alternate preparation method is described, the mechanochemical method. Different methods were used for the intercalation of amino acids between the layers of the various LDHs. The prepared products were studied by X-ray diffractometry (XRD), Scanning Electron Microscopy (SEM), Scanning Electron Microscopy – Energy Dispersive X-Ray Fluorescence (SEM–EDX), and Infrared Spectroscopy (IR). It can be stated that using this preparation method LDHs can indeed be synthesized and amino acids could be intercalated between the layers.

ÖSSZEFOGLALÓ

A réteges kettős hidroxidok (LDH) különleges szerkezetüknek köszönhetően egyre nagyobb érdeklődésnek örvendenek a kémikusok és az anyagtudományokkal foglalkozó kutatók körében. Legkiemelkedőbb tulajdonságuk különböző (akár nagyméretű szerves) anionok interkalálása a rétegek közé. A leginkább alkalmazott előállítási illetve interkalálási eljárások az együttes lecsapás valamint a karbamidos hidrolízis módszere. Ebben a tanulmányban egy alternatív előállítási és interkalálási módszert vizsgáltunk, a mechanokémiai eljárást. Különböző aminosavakat interkaláltunk változatos módszerekkel az LDH rétegei közé. Az előállított mintákat különböző szerkezetvizsgálati módszerek segítségével jellemeztük: röntgendiffrakció (XRD), pásztázó elektronmikroszkópia (SEM) és a hozzácsatolt energiadiszipatív röntgenanalízis (SEM–EDX), valamint infravörös spektroszkópia (IR). Kijelenthető, hogy ezzel az új módszerrel sikerült LDH-t előállítani, valamint az is, hogy a különböző aminosavak rétegek közötti interkalációja is megvalósítható.

Kulcsszavak: mechanokémia, réteges kettős hidroxid, interkaláció, szerkezetvizsgálati módszerek

**Piridino-18-korona-6-éter alapú új királis állófázis előállítás
és enantiomer-elválasztó-képességének vizsgálata**

**Synthesis of New Pyridino-18-crown-6-ether Based Chiral Stationary Phase
and Studies on its Enantiomeric Separation Ability**

FŐDI Tamás^{1,2}, NÉMETH Tamás¹, KUPAI József, PhD¹,
LÉVAI Sándor², BALOGH György Tibor, PhD², HUSZTHY Péter, DSc¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Szerves Kémia Csoport
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4., Magyarország,
tel.: 36-1-4631071, fax: 36-1-4633297,

tamas.fodi@gmail.com, ntomasz007@gmail.com, jkurai@mail.bme.hu, huszthy@mail.bme.hu,
<http://www.och.bme.hu>

²Richter Gedeon Nyrt.

1103 Budapest, Gyömrői út 19-21., Magyarország
Levélcím: 1475 Budapest Pf.: 27., Magyarország
tel.: +36-1-431-4000, fax: +36-1-260-4891
s.levai@richter.hu, gy.balogh@richter.hu

ABSTRACT

Enantiopure pyridino-18-crown-6 ether containing a 4-carboxyphenyl group at position 4 of the pyridine ring was synthesized, which can be immobilized to solid support. Furthermore, enantiomeric separation ability of reported pyridino- and acridino-crown ether based chiral stationary phases were studied with HPLC methods. Using these chiral stationary phases enantiomers of protonated primary amines and amino acid esters were successfully separated.

ÖSSZEFOGLALÓ

A piridingyűrű 4-es helyzetében 4-karboxifenil-csoportot tartalmazó, enantiomertiszta piridino-18-korona-6-étert állítottunk elő, mely alkalmas lehet szilárd hordozóhoz való rögzítésre. Emellett korábban már közölt piridino- és akridino-koronaéter alapú királis állófázisok elválasztási tulajdonságainak vizsgálatát végeztük HPLC módszerekkel, mely során sikeresen választottuk el protonált primer amin- és aminosav-észter vendégmolekulák enantiomerjeit egymástól.

Kulcsszavak: királis koronaéter, királis állófázis, enantiomer-elválasztás, HPLC

A kutatást az OTKA (nyilvántartási szám: PD-108462, K-81127) támogatta.

Gyümölcsfeldolgozó üzem szennyvizének tisztítási tapasztalatai

Treating Experiences of Fruit Processing Wastewater

GULYÁS Gábor, FAZEKAS Bence, Dr. KÁRPÁTI Árpád

Pannon Egyetem, H-8200 Veszprém, Egyetem utca 10; Tel: 003688624296; Fax: 003688624553;
mobil: 0036709456606; e-mail: g.gulyas.up@gmail.com; web:www.km.mk.uni-pannon.hu

ABSTRACT

Fruit processing wastewater is extremely nutrient-poor. Its biological purification is need to nitrogen and phosphorous dosage otherwise sludge bulking will be developed. It generates inefficient sludge settling which results in wrong purified wastewater quality. In our research we determined the minimal nutrient dosage and the additional causes of inefficient clarification. We solved all monitory problems.

Keywords: food processing, activated sludge technology, nutrient-poor wastewater, COD, sludge bulking

ÖSSZEFOGLALÓ

Az almafeldolgozás során keletkező szennyvíz rendkívül tápanyag hiányos. Biológiai tisztításához éppen ezért nitrogén és foszfor adagolására van szükség. Ellenkező esetben iszapduzzadás jelentkezik, amely az ülepedés gátlásán keresztül egyre rosszabb minőségű elfolyó tisztított vizet eredményez. Munkánk során meghatároztuk a tisztításhoz szükséges minimális tápanyag igényt, illetve a tisztítási hatékonyság romlásának okait. Utóbbiakra valamennyi esetben találtunk megoldást.

Kulcsszavak: élelmiszeripar, eleveniszapos szennyvíztisztítás, tápanyaghiányos szennyvíz, KOI, iszapduzzadás

Szennyvizek szulfátmentesítése ettringit kicsapásával

Sulphate Removal from Wastewater for Ettringite Precipitation

GULYÁS Gábor, VARGA Regina, FAZEKAS Bence, Dr. KÁRPÁTI Árpád

Pannon Egyetem, H-8200 Veszprém, Egyetem utca 10; Tel: 003688624296; Fax: 003688624553;
mobil: 0036709456606; e-mail: g.gulyas.up@gmail.com; web:www.km.mk.uni-pannon.hu

ABSTRACT

Sulphate removal from wastewater is a complex problem. Allowing for the cost precipitation is the most useful method. Within physico-chemical treatments ettringite precipitation is the most favourable process. In the interest of ettringite formation calcium and aluminium dosage are needed. Ettringite isn't water soluble hence it is separable from liquid phase easily. In some publication it is possibility to achieve over 90 % efficiency with this method.

Keywords: wastewater, sulphate removal, ettringite, calcium hydrate, aluminate

ÖSSZEFOGLALÓ

A szulfát ionok koncentrációjának csökkentése vízben komplikált feladat. Költségek tekintetében a kicsapás+ülepítés+szűrés kombináció a legkedvezőbb. Ezen belül is a szennyvizek szulfátmentesítésének egyik lehetősége lehet az ettringit előállítása. Ennek során a szulfát tartalmú vízhez kalciumot és alumíniumot adnak. Az ettringit vízben rendkívül rosszul oldódik, ennek megfelelően kitűnően alkalmazható szilárd-folyadék fázisválasztásra. Egyes források szerint ettringit képzéssel bőven elérhető a határérték alatti szulfát koncentráció olyan vizekben is, melyek eredetileg 1,5 g/l koncentrációban tartalmazzak szulfátot.

Kulcsszavak: szennyvíz, ettringit, szulfátmentesítés, mésztej, aluminiát

A 17 β -HSD1 enzimaktivitás in vitro vizsgálata és gátlása 13 α -öszttron származékokkal

In Vitro Investigation of 17 β -HSD1 Enzyme Activity and its Inhibition with 13 α -estrone Derivatives

HERMAN Bianka Edina¹, SZABÓ Johanna², KALMÁR László³, WÖLFLING János²,
SCHNEIDER Gyula², JULESZ János¹, VALKUSZ Zsuzsanna¹, MERNYÁK Erzsébet²,
SZÉCSI Mihály¹

¹Szegedi Tudományegyetem I. sz. Belgyógyászati Klinika, Szeged, Korányi fasor 8-10., H-6720,
E-mail: szecsi.mihaly@med.u-szeged.hu

²Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 8., H-6720

³Szegedi Tudományegyetem Szülészeti és Nőgyógyászati Klinika, Szeged, Semmelweis utca 1., H-6725

ABSTRACT

A radiosubstrate incubation method for the measurement of 17 β -hydroxysteroid dehydrogenase type 1 isozyme (17 β -HSD1) was developed. Human placental cytosol was applied as enzyme source and TLC was used for the isolation of the enzyme product estradiol and the estrone substrate remained. Synthetic 13 α -estrone proved to be an efficient inhibitor of the 17 β -HSD1.

ÖSSZEFOGLALÓ

Radiosubsztrát inkubációs módszert fejlesztettünk ki a 17 β -hidroxiszteroid-dehidrogenáz 1-es típusú izozim (17 β -HSD1) aktivitásának mérésére. Enzimforrásként emberi placenta citoszól preparátumát alkalmaztuk, az enzim termék ösztadiolt, valamint az öszttron szubsztrátum maradékot TLC-val izoláltuk. A szintetikus 13 α -öszttron hatásosan gátolta a 17 β -HSD1-et.

Kulcsszavak: 17 β -HSD1, antiösztrogén hatás, szteroidhormonok, 13 α -öszttron (13-epi-öszttron)

Biomassza szeparációja újszerű, energiahatékony megoldással

Separation of Biomass with Innovative Energy Efficient Solution

HODAI Zoltán*, RIPPELNÉ Dr. PETHŐ Dóra, Dr. HORVÁTH Géza,
Dr. HANÁK László, BOCSI Róbert

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet
Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.
Tel.: +3688-624-132, Fax.: +3688-624-446,
hodaiz@almos.uni-pannon.hu

ABSTRACT

Algae based biofuel production can be a promising alternative of the production of first and second generation biofuels because of the high photosynthetic yield, more readily controllable soil emission, and the fact that algae production does not take up arable land. The critical points of the technology are the concentration of the algae suspension and the extraction because of the high investment and operating costs and high operational time. A new phenomenon was observed during the autoflocculation experiments, which was named CO₂-choking (Flow Choke with Carbon Dioxide – FCCD). The method gives the opportunity of implementing a settling technology with a low-energy demand. A special FCCD settling basin which is capable of analyzing the parameters and correspondences that affect CO₂-choking in two different modes (under pressure, and with gas throughput) was designed and built for the studies. The operational parameters of the method have been determined. The optimal parameters under pressure for FCCD proved to be 20-30 °C, 1.5-3.0 bar and 180 minutes of operation when using a gas (or gas mixture) of 75-100% CO₂. As for flow-through FCCD, the optimal parameters proved to be temperatures between 20 and 35 °C, and 12-24 hours of operation. It was also concluded that suspensions of different quality can be separated with the same efficiency in the examined range.

Keywords: biofuel, algae, biomass, separation, flocculation

ÖSSZEFOGLALÓ

Az első és második generációs bioüzemanyagok ígéretes alternatívája lehet az alga-alapú bioüzemanyag-előállítás, köszönhetően a magas fotoszintetikus hozamnak, a jobban kontrollálható talajemisszióknak, és annak, hogy az algatermesztés nem veszi el az élelmezési célú növénytermesztésre szánt földterületeket. A technológia kritikus pontjai az algaszuszpenzió besűrítése és az extrakció, a magas beruházási és üzemeltetési költségek és a nagy műveleti idők miatt. Autoflokkulációs kísérleteim során egy új jelenséget tapasztaltam, amelyet CO₂-fojtásnak neveztem el (Flow Choke with Carbon Dioxide, FCCD). A módszer lehetőséget ad egy kis energiaigényű ülepítési technológia kialakítására. A vizsgálatokhoz megterveztem és megépítettem egy speciális ülepítő, FCCD készüléket. A készülék alkalmas a CO₂-fojtásra ható paraméterek és azok összefüggéseinek vizsgálatára, kétféle üzemben (nyomás alatt, gáz átáramoltatással) Meghatároztam a módszer műveleti paramétereit. Megállapítottam, hogy a nyomás alatti FCCD optimális paraméterei 20-30 °C és 1,5-3 bar, 180 perces műveleti idővel. Az átáramoltatásos FCCD optimális paramétereinek a 75-100 % CO₂-tartalmú gáz/gázkeverék alkalmazása esetén a 20-35 °C hőmérséklet és 12-24 órás műveleti idő bizonyult. Megállapítottam továbbá, hogy különböző minőségű szuszpenziók azonos teljesítménnyel szeparálhatóak a vizsgált tartományokban.

Kulcsszavak: bioüzemanyag, alga, biomassza, szeparáció, flokkuláció

Labirintus alakú WO₃ mikrokristályok előállítása, fotokatalitikus és anyagszerkezeti tulajdonságainak vizsgálata

Hydrothermal Preparation, In-depth Characterization and Determination of the Photocatalytic Activity of Labyrinth Shaped WO₃ Microcrystals

KARÁCSONYI Éva¹, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. KOVÁCS Gábor^{2,3}, Dr. Lucian BAIA^{2,4},
Dr. Virginia DANCIU³, Dr. DOMBI András¹, Dr. HERNÁDI Klára¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport,
Természettudományi és Informatika Kar, Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,
Kolozsvár, Mihai Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084,
tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

³ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

ABSTRACT

Synthesis of photocatalytic materials such as semiconductor oxides and their composites is a major research field in materials science. To investigate photocatalytic properties of WO₃ crystals, P25/WO₃ composites have been made, which were used successfully for the degradation of organic pollutants in the water. The tungsten oxide catalysts were obtained by hydrothermal crystallization, where the precursors were ammonium metatungstate and sodium tungstate dihydrate. fMWCNTs (functionalized multi walled carbon nanotubes) were used as a crystallization promoter in all the cases. The WO₃ crystals' morphological details (including particle size) were studied by SEM/TEM/HRTEM. To collect the most accurate information about the surface chemistry and structural properties (which are essential to establish the nature of the shown photocatalytic activity) of the photocatalysts, XRD, XPS and DRS were used.

Keywords: tungsten-oxide, hydrothermal crystallization, titanium-dioxide, composite, photocatalysis

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatómunkánk során különböző alakú és nagyságú WO₃ kristályokat állítottunk elő hidrotermális kristályosítással. A volfram-trioxid prekursorai ammónium-metavolframát és nátrium-volframát voltak, valamint többfalú funkcionizált szén nanocsövet alkalmaztunk, mint a kristályosodást elősegítő anyagot. A kristályok anyagszerkezeti tulajdonságait diffúz reflexiós spektrofotometria, röntgen diffraktometria, röntgen fotoelektron spektroszkópia valamint pásztázó elektronmikroszkópia segítségével vizsgáltuk. Az előállított katalizátorok titan-dioxiddal alkotott kompozitjainak fotokatalitikus aktivitását fenol illetve oxálsav vizes oldatain vizsgáltuk.

Kulcsszavak: volfram-trioxid, hidrotermális kristályosítás, titán-dioxid, kompozit, fotokatalízis

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program” című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

TiO₂ mikrokristályok alakjának finomhangolása különböző szénfajták segítségével

Shape Tailoring of TiO₂ Microcrystals Using Different Type of Nanocarbons

KÁSA Zsolt¹, VAJDA Krisztina¹, PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. DOMBI András¹, Dr. HERNÁDI Klára¹,
Dr. KOVÁCS Gábor^{3,4}, Dr. Lucian BAIA^{2,3}, Dr. Virginia DANCIU⁴

¹ Szegedi Tudományegyetem, Környezatkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar,
Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Mihai Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

⁴ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár

Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Titanium dioxide based photocatalysts were synthesized by a one-step hydrothermal method using nanocarbons as a crystallization promoter, such as: carbon nanotubes, activated carbon, graphite and carbon aerogel. Furthermore the crystallization parameters (dwelling time) and the additional calcination's effect was also examined. The crystallized titanium dioxide nanoplates' photocatalytic efficiency was evaluated for phenol decomposition. Finally the crystal shape-photocatalytic activity relationship was successfully established.

Keywords: Hydrothermal synthesis, titanium dioxide, crystal shaping, photocatalytic activity

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkám során titán-dioxid alapú fotokatalizátorokat állítottam elő hidrotermális módszerrel, különböző szénfajták jelenlétében, mint például szén nanocső, aktív szén, grafit és szén aerogél. Továbbá a kristályosítás paramétereit és a kalcinálás hatását is vizsgáltam. A kikristályosított titán-dioxid nanolemezek fotokatalitikus aktivitását fenol bontására vizsgáltam. Végezetül a kristályalak és a fotokatalitikus aktivitás közötti kapcsolatot derítettem fel.

Kulcsszavak: Hidrotermális szintézis, titán-dioxid, kristályalak irányítás, fotokatalitikus aktivitás

CEOR célú polimeres tenzid oldatok reológiai vizsgálata

Rheological Investigation of Surfactant Solutions for CEOR

KOTHENCZ Réka¹, NAGY Roland², Dr. BARTHA László¹, VÁGÓ Árpád³

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyipari Művelettan Intézeti Tanszék,
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., web:www.uni-pannon.hu

²Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék,
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., web:www.uni-pannon.hu

³MOL-Nyrt., ÚT IMA, 1117 Budapest, Október huszonharmadika u. 18., web:www.mol.hu

ABSTRACT

In the oil industry an increasing emphasis has placed on the chemical enhanced oil recovery (EOR), which process is based on the use of high-performance emulsifiers, surfactants which increase the efficiency of oil production.

Our aim was to determine the particle size and particle size distribution of the aqueous solution of fatty acid-based nonionic surfactants by dynamic light scattering analysis. The particle size gives information about the interaction between the surfactants, and between the surfactant and the flow-modifier type polymers; and even about their possible synergistic, antagonistic intermolecular effect. Rheological measurements and other test results were taken to study the correlation between the composition and the surfactant effects. Based on the results the synergic effect was defined between the polymer and the surfactant.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az olajiparban egyre fontosabb szerepet kap a kémiai harmadlagos kőolaj-kitermelés (CEOR), amely során megfelelő hatékonyságú emulgeálószereket, tenzideket alkalmaznak, amely segítségével növelik a kőolaj-kitermelés hatásfokot.

Célunk volt a növényolaj alapú nemionos tenzidelegyek vizes oldatainak részecskeméretének és eloszlásának meghatározása dinamikus fényszóráson alapuló részecskeméret analízissel. A részecskeméret meghatározásával következtetni tudtunk az egyes tenzidek egymás közötti, illetve a polimerrel való kölcsönhatására, szinergikus, antagonisztikus vagy éppen indifferens hatásukra.

A reológiai mérések és egyéb hatásvizsgálati eredmények pedig lehetőséget adtak az összetétel és a tenzidek felületaktív hatásai közötti összefüggések tanulmányozására. A mérések alapján a polimer és a tenzid között szinergikus hatást állapítottunk meg.

Kulcsszavak: nemionos tenzid, részecskeméret, reológia

Új szintézismódszer kidolgozása peptid-6-amino-D-luciferin konjugátumok előállítására

A novel Synthesis Method of Peptide-6-amino-D-luciferin Conjugates

KOVÁCS Anita ^{1,2}, Dr. HEGYES Péter ², Dr. SZEBENI Gábor János ²,
Dr. PUSKÁS G. László ², Prof. Dr. TÓTH Gábor ¹

¹ SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet, H-6720 Szeged, Dóm tér 8.

Tel: +36-62-545-136, Fax: +36-62-545-971, kovacs.anita@med.u-szeged.hu,
<http://www.mdche.u-szeged.hu>

² AVIDIN Biotechnology Kft., H-6726 Szeged, Alsókikötő sor 11.; Tel.: +36-62-202-107
laszlo@avidinbiotech.com, <http://www.avidinbiotech.com>

ABSTRACT

Aminoluciferin (aLuc) is a luciferin with its 6-position hydroxyl group substituted with an amino group. This modification allows aminoluciferin to form amide bond with a peptide, while retaining its transport and bioluminescent properties, resulting in a good substrate for different important proteases, which can be used for the determination of enzymatic activity in different therapeutically highlighted cases. Our aim was to extend the utilization of bioluminescent determination for the fibroblast activation protein (FAP) and prolyl oligopeptidase (POP), which has therapeutic potential for certain cancers. For this purpose a new peptide-aLuc conjugate-synthesis strategy was developed. The appropriately protected amino acid was coupled to 6-amino-2-cyano-benzothiazole and the resulting product was reacted with D-cysteine to get the protected amino acid-6-amino-D-luciferin conjugate, which was used for solid-phase synthesis of peptide-aLuc conjugates. We successfully prepared the derivatives Z-Arg-Arg-Pro-aLuc, Z-Gly-Pro-aLuc, Z-Phe-Phe-Pro-aLuc, used as bioluminescent probes for biochemical studies.

Keywords: peptide-6-amino-D-luciferin conjugates, bioluminescence, protease enzyme activity

ÖSSZEFOGLALÓ

A luciferin 6-os helyzetű hidroxil-csoportjának amino-csoportra történő cseréjével kapjuk az aminoluciferint (aLuc), melyet különböző peptidokkal összekapcsolva a luciferinével megegyező biolumineszcens tulajdonságú konjugátumokat kapunk. Ezen szubsztrátokkal lehetővé válik több, terápiásan fontos proteáz enzim aktivitásának mérése. Célunk biolumineszcens szubsztrátok szintézise volt különböző tumormarkerek: a fibroblaszt aktiváló protein (FAP) és prolil oligopeptidáz (POP) enzim aktivitásának mérése céljából. Ehhez egy új, racionálisabb szintézisutat dolgoztunk ki: a megfelelően védett aminosavat 6-amino-2-ciano-benzotiazolhoz kapcsoltuk, majd ezt D-ciszteinnel reagáltattuk. Az így kapott származékot gyantára kötöttük és szilárdfázisú peptidszintézist végeztünk. Ezzel a módszerrel előállítottunk több konjugátumot: a Z-Arg-Arg-Pro-aLuc-ot, a Z-Gly-Pro-aLuc-ot, valamint a Z-Phe-Phe-Pro-aLuc-ot, melyeket biolumineszcens tesztekben használtunk.

Kulcsszavak: peptid-6-amino-D-luciferin konjugátumok, biolumineszcencia, proteáz enzim aktivitás

**Komplekképzők extrakciós képességének értékelése
eltérő fizikai talajféleségű tim minták vizsgálata alapján**

**Assessment of Complexing Extraction Capacity Based on Analysis
of Different Physical Soil Samples Wives Tim**

KOVÁCS Katalin¹, JÓNÁS Miklós^{1,3}, TAKÁCS Anita¹, Dr. HORVÁTH Márk¹,
Dr. GYŐRI Zoltán², Dr. HELTAI György¹

¹ Szent István Egyetem, Kémia és Biokémia Tanszék, HU – 2103 Gödöllő. Páter Károly út. 1.

² Szent István Egyetem, Regionális Gazdaságtani és Vidékfejlesztési Intézet,
HU – 2103 Gödöllő. Páter Károly út. 1.

³ Babes-Bolyai Tudományegyetem Környezettudományi és Környezetmérnöki Tanszék, RO – 400294,
Cluj-Napoca, Cluj, Fantanele út 30.

ABSTRACT

In the present study we examined the potentially toxic element content of soil samples belonging to different soil classes of the Hungarian Soil Information and Monitoring System (TIM) by solvents containing complex sequestering agents. Our aim was to study the effectiveness of a complexing agent in addition to various physical soil parameters. Attention is drawn primarily to solvents recommended in Hungarian and internationally standard. With our studies, we would like to contribute to national and international standardization of soil test results, for better comparability with each other.

Keywords: extraction, heavy metal, soil, EDTA, Lakanen Erviö

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen munkánkban a Magyarországon működő Talajvédelmi Információs és Monitoring Rendszerből (TIM) származó, eltérő talajosztályokba tartozó minták potenciálisan toxikus elemtartalmát vizsgáltuk, komplexképző adalékot tartalmazó kivonószerekkel. Célunk az volt, hogy tanulmányozzuk az egyes komplexképzők hatékonyságát különböző talajfizikai paraméterek mellett. Elsősorban a Magyarországon és a nemzetközi viszonylatban szabványos vagy ajánlott oldószerekre fordítottunk figyelmet. Vizsgálatainkkal szeretnénk hozzájárulni a hazai és nemzetközi talajvizsgálati eredmények egységesítéséhez, egymással való jobb összevethetőségéhez.

Kulcsszavak: extrakció, nehézfém, talaj, EDTA, Lakanen Erviö

ESR vizsgálatok e^-/h^+ csapdákkal befolyásolt hidroxilgyök generálásra TiO_2 alapú heterogén fotokatalízis során

ESR Study of the Effect of Different e^-/h^+ Traps on Hydroxyl Radical Generation During TiO_2 Based Heterogeneous Photocatalysis

KOZMÉR Zsuzsanna¹, Dr. SIENKIEWICZ Andrzej², Dr. FORRÓ László²
Dr. DOMBI András¹, Dr. HERNÁDI Klára¹

¹Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Kémiai Tanszékcsoport, Környezetkémiai Kutatócsoport, Magyarország, HU-6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.
Tel.: +36 62 54 4719, kozmerzs@chem.u-szeged.hu

²École Polytechnique Fédérale de Lausanne, School of Basic Sciences, Institute of Condensed Matter Physics, Laboratory of Physics of Complex Matter, Switzerland, CH-1015 Lausanne, PH D2 445 (Bâtiment PH), Station 3, Tel.: +41 21 69 34337, andrzej.sienkiewicz@epfl.ch

ABSTRACT

Accurate knowledge of the mechanisms is needed for the optimization of the degradation pathways during the heterogeneous photocatalysis based on TiO_2 ($TiO_2 + hv \rightarrow TiO_2^+ (h^+) + e^-$). The aim of this study was to investigate the effect of different types e^- traps (oxygen, Ag^+), and h^+ traps (organic substrates) to the generation process of $\cdot OH$ during TiO_2 based heterogeneous photocatalysis.

In our experiments 1.0 g L^{-1} aqueous TiO_2 (Degussa P25) suspensions were irradiated with UVA ($\lambda=365 \text{ nm}$), in the presence of different e^-/h^+ traps. Electron spin resonance (ESR) in combination with spin-trapping (DMPO) technique was used to follow the formation of the photo-generated reactive oxygen species.

In O_2 saturated solutions the concentration of $\cdot OH$ was found six times higher than in O_2 free conditions. Using Ag^+ as e^- scavenger, the amount of formed $\cdot OH$ was markedly lower as before. The addition of $\cdot OH$ scavenger (methanol or tert-butanol) the $\cdot OH$ concentration markedly decreases. However, in presence of phenol the concentration of $\cdot OH$ was found to be higher than in the solution without any additives. These results show that the molecular oxygen has significant role and point to the importance of the type and the concentration of substrates in generation of $\cdot OH$ in UVA-illuminated aqueous suspensions of TiO_2 .

ÖSSZEFOGLALÓ

A TiO_2 alapú fotokatalízis ($TiO_2 + hv \rightarrow TiO_2^+ (h^+) + e^-$) mechanizmusának mind pontosabb ismerete szükséges az ezen módszereken alapuló tisztítási eljárások fejlesztéséhez. Különböző e^- (oxigén, Ag^+) és h^+ (szerves szubsztrátumok) csapdák $\cdot OH$ -gyökgenerálásban betöltött szerepének feltárása volt a célja ezeknek a vizsgálatoknak. Kísérleteink során $1,0 \text{ g L}^{-1}$ TiO_2 (Degussa P25) szuszpenziókat sugároztunk be UVA ($\lambda=365 \text{ nm}$) fényel, különböző e^-/h^+ csapdák jelenlétében. Az elektron spin rezonancia (ESR) spektroszkópia kombinálva spin-csapdázással (DMPO) egy olyan technika, amellyel nyomon tudjuk követni a fotogenerált reaktív oxigéntartalmú részecskék képződését.

Eredményeink azt mutatják, hogy oxigénnel telített szuszpenzióban hatszor nagyobb koncentrációban képződött $\cdot OH$, mint az oxigénmentes esetben. Ag^+ , mint elektronbefogó jelenlétében jelentősen kevesebb $\cdot OH$ keletkezett, mint oxigénnel telített oldatban. A metanol vagy terc-butanol jelentősen csökkenti az $\cdot OH$ képződést, míg fenol jelenlétében megnő a képződő reaktív gyökök koncentrációja a szubsztrátum nélküli esethez képest.

Eredményeink az oldott oxigén és a jelenlévő szubsztrátumok minőségi és mennyiségi tulajdonságainak fontosságára világítottak rá ezen folyamatokban.

Kulcsszavak: Degussa P25, DMPO, oxigén, alkohol, fenol

Nagyhatékonyságú eljárás földgázok kénhidrogén tartalmának csökkentésére

High Efficient Method for Reducing the Content of Hydrogen Sulfide from Natural Gas

MOLNÁR Éva, RIPPELNÉ Dr. PETHŐ Dóra, Dr. HORVÁTH Géza

Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
H-8200 Veszprém, Egyetem u 10., molnare@almos.uni-pannon.hu

ABSTRACT

Our energy requirements increased enormously in the last decades. We satisfied the needs partly the burning of natural gas. Natural gas consists of flammable mixture of hydrocarbon gases, but it contains polluting components, as well. So we need to clean natural gas before use. The hydrogen sulfide content of natural gases is regulated by strict limitations. Hydrogen sulfide is a toxic gas. It is corrosive presence of water. Upon burning natural gas, hydrogen sulfide is converted into sulfur dioxide (SO₂), which is harmful not only for the environment by causing acid rain, but also it constitutes a danger to human health, because it cause to respiratory diseases. There are procedures for example amine absorption or iron oxide based solid phase adsorption to reducing the content of hydrogen sulfide from natural gas. But usability of these procedures is limited due to environmental reason and there is a difficulty, that we need to regenerating steps doing. In order to substitute solid adsorbents and amine-containing chemicals, we developed a method that can not only be used with natural gases containing hydrogen sulfide, but also with ones containing carbon dioxide and environmentally appropriate as well. The alkaline-based competitive chemisorption method seems a good opportunity. The essence of the method is that a very short contact time (< 1s) has to be used but at the same time intensive contact has to be ensured.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az elmúlt évtizedek során Földünk lakosságának energiaszükséglete rendkívül megnövekedett, melyet részben földgáz égetésével igyekeztünk kielégíteni. A földgáz szénhidrogén tartalmú gázok gyúlékony elegye, de természetes módon szennyező komponenseket is tartalmaz, így felhasználás előtt kezelni kell. A földgázok kénhidrogén tartalmára szigorú előírások vonatkoznak. A kénhidrogén mérgező gáz, mely víz jelenlétében korrozív hatással bír, az égés során pedig kén-dioxiddá alakul át, ami nem csak a környezetet károsítja savas esők okozása révén, hanem az emberi egészségre is veszélyt jelent, légzőszervi megbetegedésekhez vezet. Kénhidrogén-mentesítésre már számos módszert kidolgoztak, jelenleg elsősorban aminos abszorpciók illetve vas-oxid alapú szilárd fázisú adszorbereteket használnak. Ezen eljárások használhatósága azonban egyre korlátozottabb környezetvédelmi okokból kifolyólag, valamint további nehézséget jelent, hogy az eljárások során szükség van regenerációs lépések beiktatására is. Jövőbeli célunk egy olyan új műveletrendszer kidolgozása, amely a kénhidrogén mellett szén-dioxidot tartalmazó földgázoknál is alkalmazható és környezetvédelmi szempontból előnyösebb a fentieknél. Jó lehetőségnek látszik a kompetitív kemisorpcióra alapozott alkáli lúgos eljárás. A tervezésnél fontos tényező, hogy 1 s-nál kisebb kontaktidő biztosítása alatt rendkívül intenzív érintkezést tudjunk megvalósítani.

Kulcsszavak: földgáz, kén-hidrogén, szén-dioxid, környezetvédelem, szorpció

Akridono-18-korona-6-éter egységet tartalmazó szenzormolekulák szintézise és kationkötő-képességük vizsgálata

Synthesis and Cation Binding Studies of Acridono-18-crown-6 Ether Type Sensors

NÉMETH Tamás¹, KORMOS Attila¹, TÓTH Tünde¹,
BALOGH György Tibor², HUSZTHY Péter¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, H-1111, Budapest, Szent Gellért tér 4., Magyarország, Tel.: +36 1 463 2111, Fax: +36 1 463 3297, e-mail: tnemeth@mail.bme.hu, www.bme.hu

²Richter Gedeon Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium
H-1103, Budapest, Gyömrői út 19-21., Magyarország

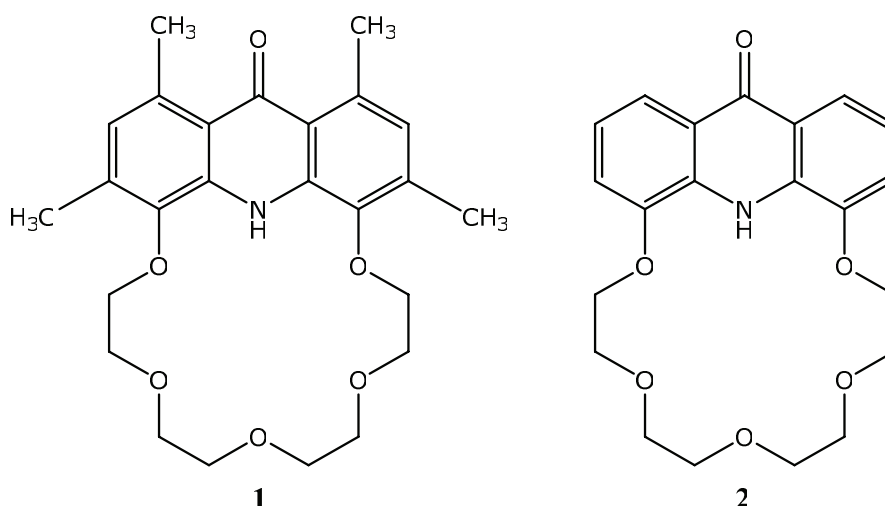
ABSTRACT

The synthesis of new acridono-18-crown-6 ether type sensor **1** (Figure 1) has been performed. The cation recognition ability towards various metal ions of the latter and also its reported parent compound **2** was studied in acetonitrile by UV-vis spectroscopy. Our studies revealed the selective binding of Pb²⁺ ions by achiral acridono-18-crown-6 ligand **2**.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatómunkánk során egy új akridono-18-korona-6-éter egységet tartalmazó szenzormolekula szintézisét valósítottuk meg (**1**) (1. ábra). Tanulmányoztuk az új kationszenzor valamint a publikált alapvegyület akridono-18-korona-6 éter (**2**) kation komplexáló képességét UV-vis spektroszkópiás módszerrel acetonitril oldószerben. Az akirális **2** szenzormolekula Pb²⁺ ionra szelektívnek bizonyult.

Kulcsszavak: koronaéterek, akridon kromofor, szenzormolekulák, kation-szelektivitás, UV-vis spektroszkópia



1. ábra

A γ -valerolakton előállítása és átalakítása hasznos anyagokká

Production and Transformation of γ -valerolactone to Useful Materials

NOVODÁRSZKI Gyula, MIHÁLYI R. Magdolna, VALYON József

Magyar Tudományos Akadémia, Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet,
Környezetkémiai Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.
+36 1 382 6200, ttk@ttk.mta.hu, <http://www.ttk.mta.hu>

ABSTRACT

Cellulose and hemicellulose are carbohydrate polymeric components of lignocellulosic materials. Acid catalysed hydrolysis of the polymer and acid catalysed dehydration of the product hexoses provides levulinic acid (LA) with relatively high yield. In my presentation I will present the results obtained studying the heterogeneous catalytic hydrogenation of LA and hydroconversion of GVL.

ÖSSZEFOGLALÓ

A cellulóz és hemicellulóz a lignocellulóz szénhidrát polimer komponensei. A polimerek savkatalizált hidrolízisével és a kapott hexózok savkatalizált dehidratálásával levulinsav (LA) állítható elő viszonylag magas hozammal. Előadásomban a LA hidrogénezése illetve a keletkezett γ -valerolakton (GVL) heterogén katalitikus átalakítása során kapott eredményeket fogom bemutatni.

Kulcsszavak: lignocellulóz, levulinsav, γ -valerolakton, heterogén katalízis

Albumin adszorpció tanulmányozása hidroxiapatit alapú kompozitok esetében

Albumine Adsorption Study on Hydroxyapatite Based Composites

Drd. SÁRKÖZI Melinda¹, CSÁKÁNY Brigitta¹, Adj. Dr. Eng. BARABÁS Réka¹,
Doc. Dr. KATONA Gabriel¹, Dr. BOGYA Erzsébet Sára²

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar Magyar Tagozat, Arany János Utca, 11.
Tel. 0264 / 59 38 33, Fax 40-264-590.81, czikomeli@gmail.com, cs_brigi@yahoo.com,
break@chem.ubbcluj.ro, gabik@chem.ubbcluj.ro, www.chem.ubbcluj.ro,

²MTA-SZTE "Lendület" Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1,
Magyarország, bogyaes@chem.u-szeged.hu, www.porousnanocomposites.com

ABSTRACT

Hydroxyapatite as biomaterial has excellent bioactivity, unfortunately with poor mechanical properties, that can be improved by addition of carbon nanotube. The biocompatibility of this composite can be enhanced by adding chitosan, which is a biocompatible biopolymer. In the case of implant materials the adhesion of proteins on the surface is important because the contact between the inorganic surface (implant) and the biological environment is created through them. In this study a serum albumin (Bovine Serum Albumin) adsorption has been examined for composites with different chitosan concentrations.

ÖSSZEFOGLALÓ

A hidroxiapatit kiváló bioaktivitással rendelkező bioanyag, mely azonban gyenge mechanikai tulajdonságokkal rendelkezik, melyek szén nanocső hozzáadásával javíthatók. Az így létrehozott kompozit biokompatibilitása egy biokompatibilis biopolimer, kitozán, hozzáadásával fokozható. Az implantátum alapanyagok esetében kulcsfontosságú a fehérjék tapadása a bioanyagok felületére, mert a fehérje által jön létre a kapcsolat a szerves felület (implantátum) és a biológiai környezet között. E kompozitok esetében vizsgáltuk egy szérum albumin (Bovine Serum Albumin) adszorpcióját, különböző kitozán tartalmú kompozitok esetében.

Kulcsszavak: hidroxiapatit, szén nanocső, kitozán, kompozit, adszorpció

ZnAl-réteges kettős hidroxidok szintézise ultrahangos kevertetés segítségével

Synthesise of ZnAl-layered Double Hydroxides, via Ultrasonic Stirring

SZABADOS Márton¹, BÚS Csaba¹, SIPOS Pál², és PÁLINKÓ István¹

¹Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Szerves Kémiai Tanszék
6720 Szeged Dóm tér 8., Magyarország

²Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai
Tanszék, 6720 Szeged Dóm tér 7., Magyarország

Tel: +36 62 544 304; <http://www2.sci.u-szeged.hu/masost/>

e-mail: szabados.marton@chem.u-szeged.hu

ABSTRACT

As anionic lamellar clays, the LDHs have a rising reputation in the recent decades. There is more and more research in the field of their preparation and application. They can be used as anion-exchangers, catalysts, polymer additives or even precursors in preparation of nanomaterials or supramolecular systems. Furthermore it is important to mention that by intercalation of some special anions, the physical and chemical properties of LDHs can be modified. In preparation of LDHs there is also a lot of significant search in which different compounds are used to prepare LDHs, with different particle size and crystallinity. The most common methods are the co-precipitation, the urea method and the sol-gel technique. In our research we used a new technique to prepare pristine and modified ZnAl-LDHs, from metal-hydroxides and water at room temperature. Before the ultrasound-assisted hydro-treatment we applied mechanochemical pre-treating for the reagents. Finally the samples was investigated by X-ray diffractometry (XRD), Scanning Electron Microscopy (SEM), Thermal analysis (TG) and Infrared spectroscopy (IR) which signed the success of preparation in case of pristine and cystine anion modified ZnAl-LDHs.

ÖSSZEFOGLALÓ

Anioncserélő ásványokként régóta ismeretes réteges kettős hidroxidok (LDH-ák) az elmúlt évtizedekben egyre nagyobb népszerűsége tettek szert, mind az előállításuk és mind a felhasználásukat szélesítő kutatások területén. Alkalmazásukat tekintve az egyszerű anioncserélőkben való felhasználásukon kívül, számos más helyszínen is hasznosíthatóak, katalizátorként betöltött szerepük mellett, polimer adalékanyagként, vagy éppen nano- és szupramolekuláris rendszerek kiépítésében is. Rétegeik közé különböző anionokat beépítve széles körben módosíthatóak fizikai és kémiai tulajdonságaik is, így felhasználhatóakká válhatnak, akár gyógyszermolekulák szállítására is vagy UV-fény elnyelő rétegek képzésére. Szintézisüket tekintve is számos kutatás folyik, több módszer is ismeretes, melyekkel egyszerűen lehet előállítani különböző összetétellel, részecske mérettel, és kristályossági fokkal rendelkező LDH-ákat, ilyen például az együtt lecsapásos, a karbamid szintézises és szol-gél technika. Kísérleteink során egy új szerű módszerrel állítottunk elő tiszta és módosított ZnAl-réteges kettős hidroxidot. Ultrahangos kevertetéssel és mechanokémiai előkezeléssel segített szobahőmérsékletű szintézist hajtottunk végre, vizes közeg mellett, csak a megfelelő fém-hidroxidokat használva kiindulási anyagokként. Az előállított mintákról röntgendiffrakciós (XRD), pásztázó elektronmikroszkópos (SEM), termogravimetriás (TG) és infravörös spektroszkópiás mérések készültek, melyek a tiszta és a cisztin anionnal módosított ZnAl-LDH-ák sikeres létrejöttét jelezték.

Kulcsszavak: ZnAl-réteges kettős hidroxidok, ultrahang, mechanokémiai előkezelés

Új akirális és királis trifenilfoszfán egységet tartalmazó koronaéterek szintézise

Synthesis of Novel Achiral and Chiral Crown Ethers Containing a Triphenylphosphane Unit

SZABÓ Tamás, PETRI László, HUSZTHY Péter

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, H-1111, Budapest, Szent Gellért tér 4., Magyarország, Tel.: +36 1 463 2111, Fax: +36 1 463 3297, e-mail: taszabo@mail.bme.hu, www.bme.hu

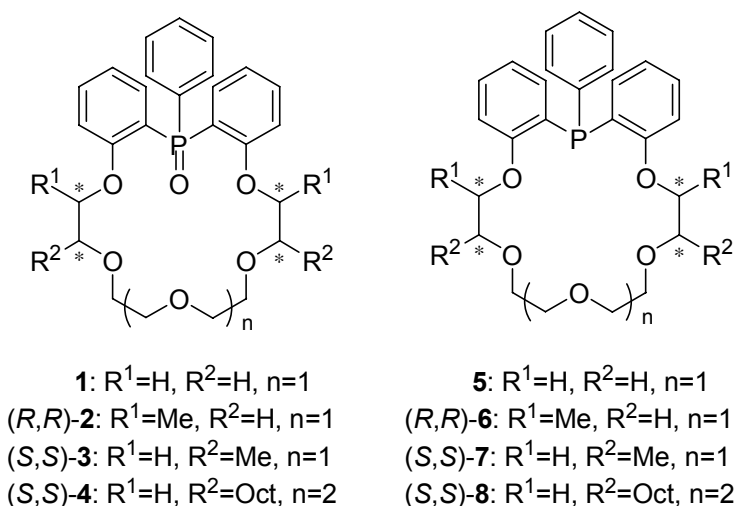
ABSTRACT

Synthesis and characterization of novel achiral and chiral macrocycles **1**, (R,R)-**2**, (S,S)-**3** and (S,S)-**4** containing a triphenylphosphane unit have been carried out. A new method for the phosphanone-phosphane transformation has been investigated. Using this new method potential catalysts **5**, (R,R)-**6**, (S,S)-**7** and (S,S)-**8** containing a triphenylphosphane moiety were synthesized and characterized.

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során előállítottunk több új akirális és királis trifenilfoszfán egységet tartalmazó koronaétert [**1**, (R,R)-**2**, (S,S)-**3** és (S,S)-**4**]. Vizsgáltunk egy új módszert a foszfán-foszfán átalakítás megvalósítására. Ezzel a módszerrel előállítottuk az **5**, (R,R)-**6**, (S,S)-**7** és (S,S)-**8** trifenilfoszfán egységet tartalmazó potenciális katalizátorokat.

Kulcsszavak: foszfor heteroatomot tartalmazó koronaéterek, katalizátor ligandumok, trifenilfoszfán származékok, trifenilfoszfán származékok, trifenilfoszfán redukció



1. ábra

Fenolok és szulfidok oxidációja enyhe körülmények között bioutánczó nem hem vastartalmú komplexekkel

Mild Oxidation of Phenols and Sulfides with Biomimetic Non-heme Iron-containing Complexes

SZÁVULY Miklós István, NAGY Emőke, Dr. KAIZER József, Dr. SPEIER Gábor

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék
8200, Veszprém, Hungary, Wartha V. u. 1., Tel.: +36-(88)-624-720, Fax.: +36-(88)-624-469
honlap: www.uni-pannon.hu, e-mail: miklos_szavuly@yahoo.com

ABSTRACT

One of the most important goals of bioinorganic chemical research is the development of metal complexes which catalytic activity and selectivity similar to native enzymes. The active sites of the RNR and sMMO metalloenzymes contain two iron atoms. In our research new mononuclear iron(II) complexes were isolated from the reaction of different nitrogen-containing heterocyclic ligands, and Fe(II) salts. The precursor complexes are able to form stable peroxidodiiron(III) intermediates with H₂O₂ oxidant. The complexes have been characterized by X-ray crystallography and other spectroscopic techniques and used as structural models of the enzymes. Their catalytic activity has been investigated in the oxidation reactions of phenols and sulfides. To clarify the elementary steps and the reaction mechanism stoichiometric reactions have been studied as well. The complexes have shown significant activity therefore they can be considered as functional models of RNR and sMMO.

Keywords: non-heme iron complex, enzyme models, peroxidodiiron(III) intermediates

ÖSSZEFOGLALÓ

A bioszervetlen kémiai kutatások egyik legfontosabb célja olyan fémkomplexek kidolgozása, amelyeknek katalitikus aktivitása és szelektivitása megegyezik az eredeti enzimmel. Az RNR és sMMO metalloenzimek, aktív centrumukban két vasat tartalmaznak. Kutatásainkban egymagvú vas(II) komplexeket állítottunk elő különböző nitrogén tartalmú heterociklusos ligandumok és Fe(II) sók reakciójával. Ezen prekursor komplexek hidrogén-peroxiddal stabilis peroxidivas(III) intermediereket képeznek[1]. Karakterizálásuk után a fent említett enzimek szerkezeti modelljeként alkalmaztuk őket, valamint vizsgáltuk katalitikus aktivitásukat fenolok és szulfidok oxidációs reakcióiban. Az elemi lépések és a reakciómechanizmus tisztázása érdekében sztöchiometrikus reakciókat is tanulmányoztuk. A komplexek a katalitikus aktivitásuk alapján az RNR és sMMO enzimek funkcionális modelljeinek is tekinthetők.

Köszönetnyilvánítás: OTKA K108489, a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071, a TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0025

- [1] J. S. Pap, A. Draksharapu, M. Giorgi, -W. R. Browne, J. Kaizer, G. Speier, Chem. Commun., **2014**, 50, 326-1329.

Latens hő felszabadulásának hatása a hűtéses kristályosítás termékének minőségére: populáció mérleg modellezés és szimuláció

Effects of Latent Heat Production on Product Quality During the Cooling Crystallization: Population Balance Modelling and Simulation

Drd. Eng. SZILÁGYI Botond¹, Dr. Eng. Prof. AGACHI Șerban¹,
Dr. Eng. Doc. LAKATOS G. Béla²

¹ Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Vegyészmérnöki Intézet, 400028 Kolozsvár, Arany János Utca 11, tel: 40-264-593833, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro, fax: 40-264-590818, web: www.chem.ubbcluj.ro

² Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, 8200 Veszprém, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, Egyetem utca 10, tel: +3688/524-000, e-mail: pr@uni-pannon.hu, web: www.mk.uni-pannon.hu

ABSTRACT

The crystallization is a widely used unit operation for separation, purification and particle formation purposes in chemical and fine chemical industry. Predicting and controlling the size distribution of particles is one of major challenges in modern particulate science as affects significantly the product quality and the downstream processing. When modelling a solution crystallization process, the heat transfer between the particles and the solution is usually considered instant which, in essence, is an approximation. The current study presents a detailed bivariate population balance model to describe the particle–solution heat transfer during the solution crystallization. Based on the detailed numerical experimentation is evident that in case of materials with high crystallization heat and having higher sizes the heat production on growing particles has significant effect on the product size distribution especially in batch crystallizers.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kristályosítás széles körben alkalmazott elválasztó, tisztító és szemcseképző művelet a kémiai és finomkémiai iparokban. A kristályszemcseméret eloszlás megőrzése és befolyásolása a modern szemcsetudomány fő kihívásainak egyike mivel az jelentősen befolyásolja a termék minőségét és a további gyártási lépéseket. A kristályosítás modellezésekor a leggyakrabban szemcse-folyadék hőcserét pillanatszerűnek tekintik ami lényegében egy egyszerűsítés. A jelen tanulmány egy kétvéltozós populáció mérleg modellt mutat be amely magába foglalja a szemcse-oldat hőcsere alakulásának részletes leírását a hűtéses kristályosítás közben. A numerikus kísérletek eredményei alapján egyértelmű, hogy a nagy latens hő felszabadulásával járó anyagok kristályosításakor nagyobb szemcseméretknél a szemcsék felületén felszabaduló hő jelentős hatással bír a szemcseméret eloszlásra kiváltképpen szakaszos üzemmódban.

Kulcsszavak: latens hő, kristályosítás, populáció mérleg, kvadratúra momentum módszer, szimuláció

Köszönetnyilvánítás: A kutatás nem jöhetett volna létre a Collegium Talentum és az OTKA K77955 projekt anyagi támogatása nélkül. A kutatás az Európai Unió és Magyarország támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése országos program” című kiemelt projekt keretei között valósult meg”

Az ESI körülmények között képződött noszkapin dimerek fragmentációjának az aktiválási energiájának a becslése tandem tömegspektrometriás módszerrel

The Estimation of the Activation Energy of the Fragmentation of the Noscapine Dimers Using Tandem Mass Spectrometry

ANTAL Borbála¹, KUKI Ákos¹, NAGY Tibor¹, NAGY Lajos¹, PURGEL Mihály²,
SIPOS Attila³, NAGY Miklós¹, ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

³Debreceni Egyetem Gyógyszerészi Kémia Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

The energy resolved mass spectrometry methods are able to discriminate isobars and isomers or stereoisomers. The noscapine have two chirality centers so there are four possible stereo isomers. These stereoisomers were differentiated based on the tandem mass spectrometric study of the dimers generated under electrospray condition. The activation energy of the fragmentation of the homodimers $[2M+Cat]^+$ and the noscapine, chiral selector dimers $[M+chiral\ selector+Cat]^+$ were determined. Furthermore the Gibbs free energy of the dissociation of the dimers was calculated applying DFT calculations. The estimated activation energies are in good agreement with the DFT calculations. Based on the difference of the stability of the generated dimers the stereoisomers can be differentiated.

ÖSSZEFOGLALÓ

A fragmentáció energiatartományának tanulmányozásával tandem tömegspektrométerek lehetőségét nyújtanak az izobárok és izomerek, akár a sztereoizomerek megkülönböztetésére. A noszkapin két kiralitás centrumot tartalmazó alkaloid, ezért négy lehetséges sztereoizomere van. Ezek a sztereoizomerek megkülönböztethetők a elektroporlasztásos körülmények között képződött dimereiknek a fragmentációjának az energiatartományának alapján. A homodimerek $[2M+Kat]^+$ és királis reagenssel képzett dimerek $[M+királis\ reagens+Kat]^+$ fragmentációjának aktiválási energiáját megbecsültük. Ezenfelül a dimerek disszociációjához tartozó szabadentalpiát is meghatároztuk kvantumkémiai számításokkal. Az aktiválási energiák becslése jó egyezést mutatott a kvantumkémiai számításokkal. Továbbá a sztereoizomerek a képződött dimerek stabilitása alapján megkülönböztethetők.

Kulcsszavak: elektroporlasztásos ionizáció, dimer, tandem tömegspektrometria, fragmentáció aktiválási energiája

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: OTKA K-101850 és TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036, amely az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

A modern erőművi víz-gőz körfolyamatokban újjól megjelenő korrózió magyarázata és megelőzésének módja

Explanation and Prevention of the New Corrosion Phenomena in the Water-steam-cycles of Modern Power Plants

ÁRPÁD István¹, ARGYELÁN János²

¹ Debreceni Egyetem TTK, Kémiai Intézet, Alkalmazott Kémiai Tanszék
4032 Debrecen, Egyetem tér 1., e-mail: arpad.istvan@science.unideb.hu

² Pannon Egyetem MK, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., e-mail: gyela@almos.vein.hu

ABSTRACT

The modern power plants are different in many respects from the older one. They have a much more compact systems (less leakage), better structural material integrity and the output power is mainly higher than earlier. This causes the chemical and physical environment in the technological systems of water-steam-cycle becomes slightly different. Application of the old practise of corrosion protection is not good enough in this new chemical and physical environment. The protective oxide layer on the internal surfaces of the equipment and pipes is very important. The formation of that protective oxide layer takes place by the Schikorr reaction in oxygen free water or through by oxygen corrosion when the equipment walls contact with a medium containing oxygen. Unfortunately the erosion continually erases the protective oxide layer therefore the maintenance of this layer must be ensured. But according to our calculation, the Schikorr reaction takes place only higher temperature. That was not problem in the older power plant because they have oxygen content in the lower temperature places due to the leakages. The modern power plants have no leakage, that's why they have not enough oxygen content for the formation of protective oxide layer at the lower temperature places. The authors suggest the right oxygen content holding in the low temperature places in order to let protective oxide layer build on surfaces existing at those places.

Keywords: water-steam-cycle of power plant, flow accelerated corrosion, chemical conditioning

ÖSSZEFOGLALÓ

A modern erőművek víz-gőz körfolyamatai a műszaki fejlődés eredményei miatt ma már sok szempontból különbözik a régi erőművek víz-gőz korfolyamataitól. Az új erőművek technológiai rendszere tömörebb, kevesebb a légbetörés vagy a pótvíz igény. A szerkezeti anyag területén is más, manapság egy homogénebb, csak szénacélból és acélötvözetekből készült rendszereket készítenek. Megnőttek a teljesítmények, ami viszont fokozza az eróziós problémákat. A változások miatt a régi, bevált kémiai kondicionálási módszerek már nem megfelelőek, ezért újból korróziós jelenségek lépnek fel. A szerzők elemzik az újonnan fellépő korrózió kialakulásának okait és javaslatot tesznek a megelőzésre alkalmas kémiai technológiára.

Kulcsszavak: erőművi víz-gőz körfolyamat, eróziós-korrózió, kémiai kondicionálás

A Wacker-oxidáció heterogenizálása palládium és vanádium tartalmú katalizátorokon

Heterogenization of Wacker-oxidation Over Palladium and Vanadium Containing Catalysts

BARTHOS Róbert, VALYON József

MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyagtudományi és Környezetkémiai Intézet, 1117 Budapest,
Magyar tudósok körútja 2., Tel: +36-1-3826861, barthos.robort@ttk.mta.hu, www.ttk.mta.hu

ABSTRACT

The Wacker reaction is a process for a selective oxidation of olefins to aldehydes and ketones. The commercial homogeneous process has several disadvantages: highly corrosive reaction mixture, formation of chlorinated byproducts, difficult separation of the products and the catalyst solution etc. In present study we describe a preparation and characterization of solid catalysts comprising two co-operating redox systems ($\text{Pd}^0/\text{Pd}^{2+}$ and $\text{V}^{4+}/\text{V}^{5+}$) and having ordered structure on nanometer scale.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Wacker-reakció az olefinek szelektív oxidációja aldehidekké és ketonokká. Az ipari szinten alkalmazott homogén eljárásnak számos kedvezőtlen tulajdonsága van, így például a reakcióközeg erősen korrozív, nemkívánatos klórozott melléktermékek képződnek, nehézkes a termékek elválasztása a reakcióelegytől. Előadásunkban heterogén Wacker-típusú katalizátorokat mutatunk be, melyekben a $\text{Pd}^0/\text{Pd}^{2+}$ és a $\text{V}^{4+}/\text{V}^{5+}$ redoxi-párt nanométeres szinten rendezett szerkezetekben rögzítettük.

Kulcsszavak: Szelektív oxidáció, heterogenizálás, hordozott Pd/V katalizátorok, nanoszerkezetek, acetaldehid szintézis

Ülő csepp-párolgás tanulmányozása makropórusos szén nanocső filmekről

Sessile Droplet Evaporation Study from Macroporous Carbon Nanotube films

Dr. BOGYA Erzsébet Sára¹, Drd. HAVASI Viktor², Adj. Dr. KUKOVECZ Ákos^{1,2}

¹MTA-SZTE "Lendület" Porous Nanocomposites Research Group,
²University of Szeged, Department of Applied and Environmental chemistry

ABSTRACT

Although sessile droplet evaporation is fairly well understood on non-absorbing surfaces, much less is known about evaporation from porous materials. The goal of this research is the establishment of basic droplet evaporation characteristics from macroporous carbon nanotube films. The study combines electrical resistance (evaporation profile) measurements of the film during evaporation, synchronised with weight and temperature variation (recorded with Infrared camera) monitoring.

ÖSSZEFOGLALÓ

Habár ülő cseppek párolgása nem abszorbeáló felületekről széleskörűen tanulmányozott, sokkal kevesebbet tudunk a pórusos anyagokról való párolgás folyamatáról. Ezen kutatás célja makropórusos szén nanocső filmekről való csepp párolgás alapjellemzőinek meghatározása. Méréseink során egyidejűleg követük a film elektromos ellenállás változását (párolgás profil), a csepp súly- és hőmérséklet (Infravörös kamerával rögzítve) változásával.

Kulcsszavak: Csepp párolgás, makropórusos, szén nanocső film, párolgási profil, Infravörös kamera

**Diels-Alder addukt alkalmazása
alakemlékező poliuretánok szintézisében**

**Applying Diels-Alder Adduct
in the Syntheses of Shape-memory Polyurethanes**

CZIFRÁK Katalin¹, LAKATOS Csilla¹, PAPP Rita¹, KARGER-KOCSIS József²,
ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹ Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (36)-52-512900, Fax: (36)-52-518662, applchem.@science.unideb.hu

² Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Polimertechnika Tanszék, 1111 Budapest,
Egry József u. 1. Tel.: (36)-1-463-2003, Fax: (36)-1-463-1527, pt@pt.bme.hu

ABSTRACT

The syntheses of reversible crosslinked polymers more intensively investigated area in the science. The thermoreversible Diels-Alder adduct from maleimide and furan derivatives increasingly applied coupling agent in those polymers, which possesses shelf-healing ability in addition to shape memory effect. In this lecture the syntheses and investigation of shape-memory polyurethanes containing Diels-Alder adducts as reversible crosslinks will be presented..

ÖSSZEFOGLALÓ

A reverzibilis keresztkötést tartalmazó polimerek szintézise a makromolekuláris kémia intenzíven kutatott területe. A maleimid és furán vegyületekből felépülő termoreverzibilis Diels-Alder addukt gyakran alkalmazott összekötő elem azokban a polimerekben, amelyek alakemlékező tulajdonságuk mellett öngyógyuló "kéességük" is van. Jelen előadásban Diels-Alder adduktot tartalmazó alakemlékező poliuretánok előállítását és részletes vizsgálatát mutatjuk be.

Kulcsszavak:Diels-Alder reakció, poliuretán, öngyógyuló polimer, alakemlékező polimer

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 pályázat által nyújtott anyagi támogatást. A kutatást a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program” című kiemelt projekt is támogatta (KS). A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Lebomló polietilén kompozitok kifejlesztése csomagolóanyag céljára

Development of a Degradable Polyethylene Composites for Wrapping Purpose

DEÁK György, DÉKÁNY-ADAMOCZKY Anita, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, Debrecen, Magyarország
4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Tel.: +36(52) 512900, Fax: +36(52) 518-662

ABSTRACT

Department of Applied Chemistry, University of Debrecen joined to a project of a firm producing mainly polyethylene foil for packaging purpose in 2012.

The aim of the project was to develop a foil made of polyethylene composite using readily available commercial additives.

Composites were prepared first in the laboratory, and later scale up was done using the most promising ones. Mechanical, xeno- and composting test were done for qualification of the polyethylene-films which ones seemed to be good for wrapping purpose.

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy főleg polietilén csomagolóanyagokat gyártó cég pályázatához csatlakozott a Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszéke 2012-ben.

A pályázatban szereplő cél – egy lebomló polietilén csomagoló fólia kifejlesztése – könnyen beszerezhető adalék anyagok bedolgozásával.

A tervezett keverékeket előbb laboratóriumban készítettük el, majd a megfelelő kompozitokkal méretnövelést végeztünk. Mechanikai, xenotest és komposztálási vizsgálatokkal minősítettük a csomagolófólia gyártás céljára megfelelő termékeket.

Kulcsszavak: Polietilén, csomagolófólia, lebomló, méretnövelés, kompozit

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: INNO-08-2-2009-0022, OTKA K-101850 és TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036, amely az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

**Dohányfüst és dohányfüst-maradék analízise
valós idejű közvetlen analízis ionizációs (DART)
tandem tömegspektrometriával**

**Detection of Tobacco Smoke by Direct Analysis
in Real Time (DART) Tandem Mass Spectrometry**

KUKI Ákos, NAGY Lajos, NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

The residual tobacco smoke contamination (thirdhand smoke, THS) on the clothes of a smoker was detected by direct analysis in real time (DART) mass spectrometry. DART-MS enabled sensitive and selective analysis of nicotine as the indicator of tobacco smoke pollution. Tandem mass spectrometric (MS/MS) experiments were also performed to confirm the identification of nicotine. Transferred thirdhand smoke originated from the fingers of a smoker onto other objects was also detected by DART mass spectrometry. DART-MS/MS was utilized for monitoring the secondhand tobacco smoke (SHS) in the air of the laboratory using nicotine as an indicator.

ÖSSZEFOGLALÓ

A dohányosok ruházatán adszorbeálódó dohányfüst maradékot (thirdhand smoke, THS) vizsgáltuk valós idejű közvetlen analízis ionizációs (DART) tömegspektrometriával. DART-MS módszerrel a nikotin, mint a dohányfüst szennyeződés indikátora nagy érzékenységgel és szelektivitással detektálható. A nikotin azonosítását tandem tömegspektrometriás vizsgálatokkal is megerősítettük. A dohányosok kezéről tárgyak felületére átvitt füstszennyeződést szintén detektálni tudtuk DART tömegspektrometriával. A DART-MS/MS módszert alkalmaztam a laboratóriumunk levegőjében lévő dohányfüst monitorozására.

Kulcsszavak: valós idejű közvetlen analízis ionizációs tandem tömegspektrometria (DART MS/MS), dohányfüst, nikotin, passzív dohányzás

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: OTKA K-101850 és TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036, amely az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Tejsavbaktériumok szerepe a takarmányok tartósításában

Role of the Lactic Acid Bacteria in Silage Conservation

Dr. LASLO Éva¹, Dr. MARA Gyöngyvér¹, FUNKENHAUZER Bernadett¹, DOBRI Emőke¹,
Dr. SALAMON Rozália Veronika², Dr. LÁNYI Szabolcs¹, Dr. ÁBRAHÁM Beáta

¹Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Műszaki- és Társadalomtudományi Kar, Biomérnöki
Tanszék, Csíkszereda, Szabadság Tér 1, tel. +40266-317121, fax. +40266-372099, e-mail:
lasloeva@sapientia.siculorum.ro www.sapientia.siculorum.ro

²Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Műszaki- és Társadalomtudományi Kar,
Élelmiszertudományi Tanszék, Csíkszereda, Szabadság Tér 1, tel. +40266-317121, fax. +40266-372099,
www.sapientia.siculorum.ro

ABSTRACT

The practical use of lactic acid fermentation in biotechnology is the high-quality silage preparation. The aim of our research is microbial inoculant preparation to improve the nutrient content and fermentation of the forages. During our work we selected from the biochemical characterized, identified bacterial strains, originated from traditional fermented foods, silages the most promising strains with high fermentation capacity.

ÖSSZEFOGLALÓ

A tejsavas erjedés egyik biotechnológiai felhasználása a jó minőségű silótakarmány készítése. Kutatásunk célja tápérték- és erjedésnövelő mikrobiális oltóanyagok előállítása. Éppen ezért munkánk során tejsavasán fermentált élelmiszerekből, takarmányból származó tejsavbaktériumokból választottuk ki biokémia jellemzésüket, identifikációjukat követően a legnagyobb fermentációs képességgel rendelkező potenciális törzseket.

Kulcsszavak: tejsavbaktérium, tejsavas erjedés, takarmány, erjedés növelő, tápérték.

Fényemittáló maleimid tartalmú polimerek előállítása és vizsgálata

Synthesis and Characterization of Fluorescent Maleimide-containing Polymers

LÁZÁR László, BORBÁS Anikó, HERCZEGH Pál, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Tel.: (36)-52-512900, Fax: (36)-52-518662, applchem.science.unideb.hu

ABSTRACT

We report on the preparation and polymerization of different maleimide-containing monomer units. The synthesized monomers (acrylate derivatives) were polymerized via free radical polymerization. The prepared fluorescent monomers and polymers were fully characterized by NMR, GPC and MS. The optical properties of the monomers and oligomers were also studied and it was found that the color of the emitted light varies from green to yellow, depending on the polarity of the solvent used for the preparation of the solution.

ÖSSZEFOGLALÓ

Fluoreszcens tulajdonságokkal rendelkező maleimid tartalmú alapláncokat szintetizáltunk. Az előállított monomereket (akril-származékok) gyökös módszerrel polimerizáltuk. A fluoreszcens termékeket tisztítottuk és részletesen karakterizáltuk NMR, GPC és tömegspektrometriás mérésekkel. Az elvégzett optikai vizsgálatok kimutatták, hogy az előállított monomerek és polimerek, az oldat elkészítésénél használt oldószer polaritásától függően, zöld vagy sárga fényt emittálnak.

Kulcsszavak: monomer, fényemittáló, gyökös polimerizáció, polimer, fluoreszcens

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm a következő pályázatoknak, alapítványoknak az általuk nyújtott anyagi támogatást: OTKA K-101850, TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036, valamint Bolyai János Kutatási Ösztöndíj.

Strukturális szénhidrátbontás silóból származó baktériumok esetében**Structural Polysaccharide Degradation by Silage Bacteria**

Dr. MARA Gyöngyvér¹, Dr. LASLO Éva¹, BECZE Annamária¹,
Dr. SALAMON Rozália Veronika², Dr. LÁNYI Szabolcs¹, Dr. ÁBRAHÁM Beáta

¹Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Műszaki- és Társadalomtudományi Kar, Biomérnöki Tanszék, Csíkszereda, Szabadság Tér 1, tel. +40266-317121, fax. +40266-372099, e-mail: maragyongyver@sapientia.siculorum.ro www.sapientia.siculorum.ro

²Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Műszaki- és Társadalomtudományi Kar, Élelmiszertudományi Tanszék, Csíkszereda, Szabadság Tér 1, tel. +40266-317121, fax. +40266-372099

ABSTRACT

Plant biomass represents an abundant and valuable renewable natural resource that may be used for a wide range of purposes, including the production of fuels and chemicals in addition to food and feed. Microbial conversion of structural polysaccharides is the topic of many researches. Autochthonous bacterial strains able to degrade structural polysaccharides were isolated from different type of silages. Bacterial strains were isolated on selective culture media containing as carbon source carboxymethylcellulose, cellulose, xylane, phytate and pectin. The isolated bacterial strains were further analysed for polysaccharide fermentation.

ÖSSZEFOGLALÓ

A növényi biomassza egy értékes energiaforrást jelent napjainkba, használjuk üzemanyagként, a vegyiparban, táplálkozásra vagy akár takarmányozásra. A biomasszában található szénhidrátok mikrobiális bontása tehát igen aktuális kutatási téma. Különböző típusú silótakarmányból izoláltunk strukturális szénhidrátbontó baktériumtörzseket, hiszen a silótakarmányban olyan baktériumközösségek szelektálódnak, amelyek tudják hasznosítani ezeket a szénforrásokat. Az izolálás szelektív táptalajon történt, ahol a bakteriális növekedéshez szükséges szénforrásként karboximetil-cellulózt, cellulózt, xilánt, fitátot és pektint használtunk. Az izolálást követően a baktériumtörzseket jellemeztük szénhidrát fermentáló képességük alapján.

Kulcsszavak: strukturális szénhidrát, szénhidrátbontó baktériumok, silótakarmány.

**Apoláros polimerek karakterizálása
atmoszférikus nyomású fotoionizációs körülmények között**

**Characterization of non-polar Polymers
Under Atmospheric Pressure Photoionization**

NAGY Lajos, KUKI Ákos, NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, Debrecen, Magyarország
4032 Debrecen, Egyetem tér 1., Tel.: +36(52) 512900, Fax: +36(52) 518-662

ABSTRACT

The atmospheric pressure photoionization (APPI) is one of the most important ionization methods to study non-polar molecules. In this study different non-polar polymers such as polyethylene, polyisobuthylene and their derivatives were investigated under APPI conditions. The series appeared in the APPI-MS spectra were fully identified. The measurements were performed in positive and negative ion mode. Based on the measurements it can be concluded that the APPI negative ion mode is appropriate to study the intact polymer molecules furthermore the APPI positive ion mode is useful for fragmentation studies.

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során apoláros polimerek (PE, PIB és származékaik) karakterizálását végeztük atmoszférikus nyomású fotoionizációs (APPI) körülmények között. Az apoláros polimerek ionizációja sokszor jelent problémát a tömegspektrometriában, ugyanakkor az APPI technika jól alkalmazható a vegyületek ionizációjára. A polimerek vizsgálatát pozitív és negatív ionmódban is elvégeztük. A mérések alapján kijelenthető, hogy a negatív ionmód kiválóan alkalmas az apoláros polimerek fragmentáció nélküli vizsgálatára, ugyanakkor pozitív ionmódban jellemzően fragmentációs vizsgálatok végezhetők, amely a molekula szerkezetének felderítésében, igazolásában alapvető fontosságú

Kulcsszavak: APPI-MS, MS/MS, apoláros polimerek, karakterizálás, dopant

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a K-101850 OTKA, a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 pályázatok, valamint a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

Új izocianonaftalin alapú fluoroforok különleges fluoreszcencia kioltási tulajdonságai

The Unique Quenching Properties of Novel Isocyanonaphthalene Based Solvatochromic Fluorophores

NAGY Miklós, RÁCZ Dávid, LÁZÁR László, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (36)-52-512900, Fax: (36)-52-518662, applchem.science.unideb.hu

ABSTRACT

1-amino-5-isociano-naphthalene (ICAN) and its monoallyl derivative exhibited strong fluorescence quenching in the presence of small amounts of pyridine. The formation of a hydrogen bonded ground state pyridine complex was detected, however quantum chemical calculations revealed the presence of an additional π -stacked pyridine complex. The Stern-Volmer plot of the quenching process exhibited a downward curvature and after a minimum the fluorescence intensity increased back to a significant level at high pyridine concentrations. Significant fluorescence was observed even in pure pyridine. A new mechanism and a simple mathematical equation were derived to explain the downward curvature and the remaining fluorescence by the formation of a fluorescent π -stacked complex.

ÖSSZEFOGLALÓ

Piridin jelenlétében az 1-amino-5-izocianonaftalin és monoallil származéka jelentős fluoreszcencia kioltást mutatott. Kísérletileg egy alapállapotú hidrogén-kötésű komplex képződést mutattuk ki, azonban kvantumkémiai számítások egy további, piridinnel képzett pi-komplex jelenlétére utaltak. A kioltási folyamat Stern-Volmer diagramja lefelé görbült. Piridin hozzáadagolására a fluoreszcenciás intenzitás egy minimum elérése után jelentős mértékben visszaemelkedik nagy piridin koncentrációknál. Még tiszta piridinben is jelentős intenzitást mértünk. A kioltási folyamatra új mechanizmust javasoltunk és egy egyszerű matematikai összefüggést vezettünk le a Stern-Volmer görbe alakjának magyarázatára fluoreszcens pi-komplex képződését feltételezve.

Kulcsszavak: naftalin, fluoreszcencia, quenching, piridin, komplex

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük az OTKA K-101850 és a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 pályázatok által nyújtott anyagi segítséget. A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése országos program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Kémiai harmadlagos kőolajkitermelés során termelt kőolaj vizsgálata

Investigation of Crude Oil Produced by Chemical Enhanced Oil Recovery

NAGY Roland¹, KOTHENCZ Réka², Dr. BARTHA László², VÁGÓ Árpád³

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., web:www.uni-pannon.hu

²Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyipari Művelettan Intézeti Tanszék
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., web:www.uni-pannon.hu

³MOL-Nyrt., ÚT IMA, 1117 Budapest, Október huszonharmadika u. 18., web:www.mol.hu

ABSTRACT

In order to increase the oil production in reservoirs where it's no longer possible by traditional way., The one of the most effective methods is the chemical enhanced oil recovery (CEOR). The vegetable oil based emulsifiers have a growing importance in the CEOR as environmentally friendly, biodegradable additives.

The aim of this study was to investigate and compare the main properties of the crude oils produced by the conventional secondary and a possible CEOR method. Based on the analysis significant differences were found in the main physical and chemical properties of the two crude oils originated from the same reservoir.

ÖSSZEFOGLALÓ

A hagyományos módszerekkel már nem termeltethető tározók olajkitermelésének növelésére az egyik leghatékonyabb módszer a kémiai harmadlagos kihozatal (CEOR). A növényi olaj alapú emulgeálószerrek egyre nagyobb jelentőséggel bírnak a kémiai harmadlagos kőolaj-kitermelés során, mint környezetbarát, biodegradálható adalékok.

Célunk a hagyományos és CEOR kitermelési módszerekkel felszínre hozott kőolaj főbb fizikai és kémiai tulajdonságainak vizsgálata és összehasonlítása volt. A vizsgálatok segítségével megállapítottuk, hogy a kétféle eljárással kitermelt kőolaj főbb fizikai és kémiai tulajdonságai között szignifikáns különbség van, továbbá a kémiai harmadlagos kőolaj-kitermelés a közetpórusokban csapdázódott, nehezen mobilizálódott kőolajat hozta a felszínre.

Kulcsszavak: harmadlagos kőolajkitermelés, kőolaj analízis, szelekció

A noszkapin és noszkapin származékok fragmentációjának vizsgálata ESI-MS/MS módszerrel

The Fragmentation of the Noscapine and Noscapine Derivatives Using ESI-MS/MS Method

NAGY Tibor¹, NAGY Lajos¹, KUKI Ákos¹, SZABÓ Katalin², SIPOS Attila³,
ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

²Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

³Debreceni Egyetem Gyógyszerészi Kémia Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

The noscapine is an opium alkaloid extracted from opium poppy (*Papaver somniferum*). This alkaloid shows antitumor activity in various cancers thus the investigation of the effects of the noscapine and noscapine derivatives is important. The noscapine and seven derivatives of the noscapine were studied using electrospray ionization tandem mass spectrometry method. In order to study the fragmentation of these compounds the proton and sodium ion were used as ionizing agents. Applying the breakdown curves the fragmentation pathways of the protonated and sodiated derivatives were determined. In addition the energetics of the fragmentations was also studied hence the stability order of the derivatives was determined.

ÖSSZEFOGLALÓ

A noszkapin az ópium kísérő alkaloidja, amely a kerti mákból (*Papaver somniferum*) nyerhető. A noszkapin rákellenes hatását kimutatták több fajta tumorról szemben, mint a tüdő, mell és vastagbél rák. Nemcsak a noszkapin, hanem annak különböző származékainak a hatását is vizsgálják. A noszkapin hét származékának a fragmentációs tulajdonságait vizsgáltuk tandem tömegspektrometriás módszerrel elektroporlasztásos ionizációs technikát használva. A letörési görbéket felhasználva a fragmentációs útvonalát meghatároztuk a protonált és a nátriummal ionizált noszkapin származékoknak. E fragmentációs útvonalak között jelentős különbségeket találtunk. Mindezek mellett meghatároztuk az 50 %-os fragmentációhoz szükséges ütközési energiát, amely alapján stabilitási sorrendet állítottunk fel a noszkapin származékok között.

Kulcsszavak: noszkapin, tandem tömegspektrometria, ütközés indukált disszociáció, fragmentációs útvonal, letörési görbe

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: OTKA K-101850 és TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036, amely az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Új típusú, izocianid csoportot tartalmazó aromás szolvatokróm fluoroforok előállítása és vizsgálata

Synthesis and Investigation of a New Type of Isocyanide-containing Aromatic Solvatochromic Fluorophores

RÁCZ Dávid¹, NAGY Miklós¹, ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹ Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (+36)-52-512900/22454, Fax: (36)-52-518662, applchem.science.unideb.hu

ABSTRACT

A new family of fluorescent molecules with solvatochromic properties were synthesized on phenyl, biphenyl, naphthalene and fluorene substrates with amine and isocyanide functional groups. Their solvatochromic behaviour can be explained by the charge separation between the donor (amino) and the acceptor (isocyano) groups on the same molecule. Compounds having different structures and their N-alkyl derivatives differ in their emission maxima and the extent of their solvatochromic effect.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk során új, szolvatokróm tulajdonságú fluoreszcens vegyületcsaládot állítottunk elő fenil, bifenil, naftalin és fluorén szubsztrátokból amin és izocianid funkciós csoportokkal. Szolvatokróm viselkedésük a molekulákon egyidejűleg jelenlévő donor (amin) és izocianid (akceptor) csoportok közötti töltésmegoszlással magyarázható. A különböző szerkezetű molekulák és ezek N-alkil származékainak emissziós maximuma, valamint szolvatokróm effektusának mértéke minden esetben más.

Kulcsszavak: izocianid, szolvatokróm, fluorofor, fluoreszcencia, emisszió

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük az OTKA K-101850 és a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 pályázatok által nyújtott anyagi segítséget. A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése országos program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

A hulladékhasznosítás aktuális kérdései

Actual Issues of Waste Utilization

Prof. Dr. RÉDEY Ákos¹, JUZSAKOVA Tatjana PhD¹, FRÁTER Tamás PhD², Dr. DIOSSY László², UTASI Anett¹, Dr LAUER János³, RADULY István⁴, RADULY Lenke⁴

¹ Pannon Egyetem, Környezetmérnöki Intézet,

Egyetem u. 10., 8200 Veszprém, Magyarország, email: redeg.akos@gmail.com

² Chianti 3D Kft., 8200 Veszprém, Kittenberger K. u. 12., Magyarország

³ Fire-Moon Mérnöki és Szolgáltató Kft., 8500 Pápa, Külső-Veszprémi út 57/b., Magyarország

⁴ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Közgazdaság és Gazdálkodástudományi Kar,
400591 Kolozsvár, Teodor Mihali u. 58–60., Románia

ABSTRACT

The waste management includes several actions as follows: elimination of waste, decrease of the amount of the generated waste, waste collection, neutralization and disposal of waste. The prevention, reuse, reutilization, neutralization and energetic utilization of the waste are important elements of the waste management. The biomass exhibit a very significant energy source all over the world. The objective of the energetic utilization is to generate energy (biogas, pellet, biohydrogen, biofuel).

ÖSSZEFOGLALÓ

Hulladékgazdálkodás az a tudatos tervszerű cselekvés, mely a hulladékok kiküszöbölését, keletkezésének megszüntetését, valamint csökkentését, az elkerülhetetlenül létrejövő hulladékok megfelelő gyűjtését és lehetőség szerinti hasznosítását, végső esetben pedig ártalmatlanítását és elhelyezését jelenti. A megelőzés, az újra használat, újrahasznosítás, energetikai hasznosítás kiemelt hangsúlyt kaptak a lerakás mellett. A biomassza jelentős energiaforrást jelent a világon. Az energetikai hasznosítás célja, hogy közvetlenül hasznosítható energiahordozót (biogáz, pellet, biohidrogén, bioüzemanyag,) állítsunk elő.

Kulcsszavak: Hulladékgazdálkodás, hulladék energetikai hasznosítása, biomassza

Köszönetnyilvánítás

Jelen munka az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával készült, a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 projektek keretében.

Kaukázusi nehézolajok kénhidrogén tartalmának eltávolítása és analitikai vizsgálata

Removal of Hydrogen Sulfide from Crude Oil and Analytic Examination

RIPPELNÉ Dr. PETHŐ Dóra, Dr. HORVÁTH Géza

Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
H-8200 Veszprém, Egyetem u 10., pethod@almos.uni-pannon.hu

ABSTRACT

The contents of crude oil depend on its geographical distribution. According to their sulfur content two groups can be distinguished: sweet crude oil is petroleum containing low levels of sulfur whereas petroleum containing more than 0.5% sulfur is categorized as sour. Sulfur can be present in crude oil in both organic and inorganic forms. Strict threshold limits are set for sulfur content during processing. Caucasian heavy crude oils have high sulfur content, most of which is present in the form of hydrogen sulfide. The removal of hydrogen sulfide is possible either by stripping or the addition of chemicals. The efficiency of these methods was examined. In the stripping experiments, the quality and volume flow of the stripping gas and the temperature were varied. Hydrogen sulfide content was measured in the leaving stripping gas, from which the amount of hydrogen sulfide leaving the oil was calculated. A coupled potentiometric titration was used to determine the amount of hydrogen sulfide that remained in the oil. Another possible method for the removal of hydrogen sulfide is the addition of chemicals. A number of scavenger chemicals are available on the market. The amount of scavenger and the applied conditions depend on the hydrogen sulfide content of the oil. The addition of the scavenger was done by mixing according to the specifications given by the distributing companies.

Keywords: crude oil, sour oil, hydrogen sulfide, stripping, scavenger

ÖSSZEFOGLALÓ

A kőolaj összetétele az előfordulási helyétől függ. Az olaj kéntartalma alapján két csoportot különböztetünk meg. Édes olajoknak nevezzük az alacsony kéntartalmú olajokat. Ha a kéntartalom meghaladja a 0,5 %-ot savanyú olajokról beszélünk. A kén szerves és szervesetlen formában egyaránt jelen lehet. A feldolgozás során a kéntartalomra szigorú határértékek vonatkoznak. A kaukázusi nehézolajok magas kéntartalmúak, melynek jelentős része kénhidrogén formájában van jelen. Eltávolítása sztrippeléssel és kémiai vegyszerek adagolásával lehetséges. Az eljárások tisztítás hatásfokát vizsgáltuk. A sztrippelési kísérletek során a sztrippelő gáz minőségét és térfogatáramát és a sztrippelés hőmérsékletét változtattuk. A kilépő sztrippgázban mértük a kénhidrogén tartalmat, ebből számoltuk az olajból távozó kénhidrogén mennyiségét. Az eljáráshoz illesztett potenciometrikus titrálással határoztuk meg az olajban maradt kénhidrogén mennyiségét. A kénhidrogén eltávolításának másik lehetséges módszere a kémiai vegyszerek adagolása. A kereskedelemben számos scavenger vegyszer van forgalomban. A scavenger mennyisége és az alkalmazott körülmények az olaj kénhidrogén tartalmától függenek. A scavenger adagolása bekeveréssel történt a forgalmazó cégek receptúráinak megfelelően.

Kulcsszavak: kőolaj, savanyú olaj, kénhidrogén, sztrippelés, scavenger

Politejsav tartalmú alakemlékező poliuretánok előállítása és jellemzése

Syntheses and Characterization of Shape-memory Polyurethanes Containing Polylactic Acid

VERNER Erika¹, CZIFRÁK Katalin¹, KARGER-KOCSIS József², ZSUGA Miklós¹,
KÉKI Sándor¹

¹ Debreceni Egyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: (36)-52-512900, Fax: (36)-52-518662, applchem.@science.unideb.hu

² Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Polimertechnika Tanszék, 1111 Budapest,
Egry József u. 1. Tel.: (36)-1-463-2003, Fax: (36)-1-463-1527, pt@pt.bme.hu

ABSTRACT

Nowadays the polylactic acid and poly(ϵ -caprolactone) are frequently used components in the synthesis of biocompatible and biodegradable polyurethanes. The biocompatible and biodegradable polyurethanes are often employed in different field of medicine (e.g. oral and general surgery). In this lecture, the syntheses and investigation a series of linear and crosslinked polyurethanes containing polylactic acid will be presented.

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban gyakran alkalmaznak politejsavat és polikaprolaktont biokompatibilis és biodegradábilis poliuretánok szintézisében. Ilyen típusú poliuretánokkal találkozhatunk pl. az orvostudomány számos területén (pl. száj, illetve általános sebészetben). Jelen előadásban politejsavat tartalmazó lineáris és térhálós poliuretánok előállítása és jellemzése területén elért eredményeinket mutatjuk be.

Kulcsszavak: politejsav, poli(ϵ -kaprolakton), poliuretán, alakemlékező polimer

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 pályázat által nyújtott anyagi támogatást. A kutatást a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program” című kiemelt projekt is támogatta (KS). A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Folyékony mikrominták analízise kapacitívan csatolt mikroplazma felhasználásával

Liquid Microsamples Analysis Using a Capacitively Coupled Microplasma Source

DARVASI Jenő¹, FRENȚIU Tiberiu¹, CADAR Sergiu², PONTA Michaela¹

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, 400028 Kolozsvár,
Arany János utca 11 szám, tel. 0264-593833, edarvasi@chem.ubbcluj.ro

²National Institute for Research and Development of Optoelectronics Bucharest, Research
Institute of Analytical Instrumentation, Donath 67, 400293 Cluj-Napoca, Romania

ABSTRACT

A capacitively coupled plasma microtorch (10 W plasma power, Ar consumption below 200 ml min⁻¹) used for multielemental analysis of liquid microsamples is presented. Constructive details of the sample introduction system in microplasma source, achieved results and technical characteristics of the microspectrometer and accessories for sample introduction are provided.

Keywords: capacitively coupled plasma, microspectrometer, optical emission spectrometry, liquid microsamples

ÖSSZEFOGLALÓ

Folyadék mikrominták többelemes analízisére alkalmazott kapacitívan csatolt mikrofáklyás plazma-emissziós mikrospektrométert mutatunk be (plazma teljesítmény: 10W, Ar fogyasztás: 200 ml min⁻¹ alatti). Szó esik a mikroplazmába történő mintabeviteli módszerek konstruktív részleteiről, az elért eredményekről és bemutatjuk a mikrospektrométer és mintabevivő tartozékainak technikai paramétereit.

Kulcsszavak: kapacitív plazma, mikrospektrométer, emissziós spektrometria, folyékony mikrominták

Direkt invertálás a spektrális (AI)térben

Direk Inversion in the Spectral (Sub)Space

EŐRI János, VÖRÖS Tamás, KOLOS Zsuzsanna, Dr. PONGOR Gábor

Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézet, Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A
Elérhetőség: eorij@chem.elte.hu ill. pongor@chem.elte.hu

ABSTRACT

Recently a novel method, called Direct Inversion in the Spectral Subspace (DISS_L) has been developed for the qualitative (and, in a limited sense, quantitative) analysis of homogeneous chemical mixtures. The method could work with any kind of molecular spectra (e.g., UV/Vis, IR, Raman, CD, VCD, NMR, etc.). The method has been developed in both non-linear as well as linear versions. Their applications have been demonstrated on multicomponent mixtures.

ÖSSZEFOGLALÓ

Korábbi közleményünkben (Direct inversion in the spectral subspace: A novel method for quantitative and qualitative analysis of chemical mixtures, G. Pongor, J. Eőri, J. Rohonczy, Zs. Kolos, J. Math. Chem. 47, 1085-1105 (2010)) egy olyan új eljárásról számoltunk be, amely kémiai elegyek összetételének meghatározására alkalmas, amennyiben ismerjük az elegy és az azt alkotó komponensek spektrumát. Minden olyan spektrumfajta használható, amelynél a jel arányos a részecskeszámmal (és az arányossági tényező független a frekvenciától). Céljaink szempontjából alkalmas például az IR, UV/VIS, CD, VCD, NMR és ORD spektrumok használata.

Két mikrofizikai posztulátum és három feltétel (amelyből az egyik megegyezik az egyik posztulátummal) segítségével egy nem-lineáris normál-egyenletrendszer írható fel, amely iterációval oldható meg. A módszer matematikai szempontból hasonló a Pulay és Császár által megalkotott DIIS egyenletekhez, és így Direkt Invertálás a Spektrális Altérben (angol néven DISS vagy DISS_L) néven neveztük el.

Ezen előadásban a módszer újabb változatáról számolunk be, amely iteráció nélkül is megoldható. Matematikailag bebizonyítottuk a két eljárás teljes ekvivalenciáját. Az újabb eljárás a Direkt Invertálás a Spektrális Térben nevet kapta (rövidítve DISS_Magyar). A hozzákapcsolt név az eljárás eredeti felfedezőjére utal, aki viszont mikrofizikai megalapozás nélkül, és kizárólag ORD-spektrumokra alkalmazta. Mindkét eljárásunk, tehát a DISS_L és a DISS_Magyar két közelítési szinten került megfogalmazásra: az egyik az úgynevezett normált, a másik a nem-normált változat. Többkomponensű mintaelegyek vizsgálatával mutatjuk be a módszerek teljesítményét.

Kulcsszavak: Analitika, többkomponensű elegyek, koncentráció, Lagrange-multiplikátor, DISS.

FGFR1 gén vizsgálata emlő daganatokban célzott terápia optimalizálásához

Examination of FGFR1 Gene in Breast Cancer for Targeted Therapy Optimisation

FÉLEGYHÁZI Fruzsina Éva, tudományos munkatárs¹,
 GURBI Bianka, TDK hallgató²,
 Dr. BRAUSWETTER Diána, PhD hallgató²,
 KOHÁNKA Andrea, laboratórium vezető¹,
 Dr. PETÁK István, tudományos igazgató¹

¹KPS Orvosi Biotechnológiai és Egészségügyi Szolgáltató Kft.,
 1024 Budapest, Retek u. 34., Tel.: 061/782-1650

²Semmelweis Egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet,
 1094 Budapest Tűzoltó u. 37-47., 1444 Budapest, Pf.: 260

ABSTRACT

The breast cancer is one of the leading death cause among women. In our laboratory we precieved that the amplification and polisomy of the FGFR-1 gene is abundant in these type of cancer. The goal of our examination is to present the coamplifications and mutations attached with the copy number variations of the FGFR-1 gene. We also examined the HER-2 status of the breast cancer. The results of the molecular porifling could be the base of the selection of the targeted therapies for patients with breast cancer.

ÖSSZEFOGLALÓ

A mellrák az egyik vezető halálozási ok a nők körében. Laboratóriumi munkánk során észleltük, hogy különösen gyakori az FGFR1 gén amplifikációja és poliszómiája is ebben a daganattípusban. Vizsgálataink célja bemutatni az FGFR1 gén kópiaszám változásával együtt járó koamplifikációkat és mutációkat, a HER-2 státusz figyelembe vétele mellett. A pontos molekuláris profil eredményei felhasználhatóak a páciens számára megfelelő célzott terápia kiválasztásában.

Kulcsszavak: Mellrák, FGFR1, HER-2, gén kópiaszám, célzott terápia.

MEK, mint potenciális indirekt célpont vizsgálata hasnyálmirigy daganatok in vitro modelljében

MEK as Potential Indirect Target in Pancreatic Cancer in Vitro Model

GURBI Bianka, TDK hallgató¹,
FÉLEGYHÁZI Fruzsina Éva, tudományos munkatárs²,
Dr. BRAUSWETTER Diána, PhD hallgató¹,
Dr. PETÁK István, tudományos igazgató²

¹Semmelweis Egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézet,
1094 Budapest Tűzoltó u. 37-47., 1444 Budapest, Pf.: 260

²KPS Orvosi Biotechnológiai és Egészségügyi Szolgáltató Kft.,
1024 Budapest, Retek u. 34., Tel.: 061/782-1650

ABSTRACT

The KRAS gene is mutant in the 60-90% of the pancreatic cancer. We don't have any drug for the inhibition of mutant KRAS at our disposal, so it is necessary to identify indirect targets. During our work we proposed to identify potential targets for therapy and the examination of the inhibition of these targets in pancreatic cancer cell lines. According to our results the KRAS mutation itself is not the predictive marker of the MEK inhibition's effectiveness in pancreas carcinoma cell lines, but in a smaller molecular group it could be worth to improve the MEK inhibitors.

ÖSSZEFOGLALÓ

A pancreas daganatainak mintegy 60-90%-a KRAS mutációval rendelkezik. A mutáns KRAS gátlására nem rendelkezünk hatóanyagokkal, ezért indirekt támadáspontok azonosítására van szükség. Munkánk során célul tűztük ki a potenciális terápiás célpontok azonosítását és gátlásuk vizsgálatát hasnyálmirigy daganat sejtvonalakon. Eredményeink szerint a KRAS mutáció önmagában nem prediktív markere a MEK-gátlás hatékonyságának pancreas carcinoma sejtvonalakban, de egy szűkebb molekuláris alcsoport esetében érdemes lehet a MEK gátlók klinikai fejlesztése.

Kulcsszavak: Pancreas carcinoma, KRAS mutáció, MEK, MEK-gátlás, célzott terápia.

Peptidek fotolízisének vizsgálata tiolspecifikus fluoreszcens jelzővegyületekkel

Thiol-specific Fluorescent Labels for Studying the Photolysis of Disulfide Bridges in Peptides

KNAPP Krisztina¹, Dr. NEMES Anikó¹, CSERÉP B. Gergely², Dr. KELE Péter²,
Dr. CSÍK Gabriella³, Dr. MAJER Zsuzsa¹

¹ELTE, Kémiai Intézet, Kiroptikai Szerkezetvizsgáló Laboratórium, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/a tel.: +36 1 372 2500/1407, fax.: +36 1 372 2592,

²MTA-TTK, Szerves Kémiai Intézet, Kémiai Biológia Kutatócsoport, 1117 Budapest, Magyar Tudósok Körútja 2, tel.: +36 1 382 6986

³SOTE, Biofizika és Sugárbiológiai Intézet, 1094 Budapest, Tűzoltó utca 37-47 tel.: +36 1 459 1500/60222, fax.: +36 1 266 6656

e-mail: knkriszta@chem.elte.hu, <http://www.chem.elte.hu/departments/kiro/>

ABSTRACT

Recently there is a growing interest in the research considering the impact of UV irradiation on the structure and function of proteins and peptides. As models, we designed oligopeptides to study the UV-light mediated disulfide scission. Our aims were to prove and quantify the photochemical splitting of disulfide bridge with different thiol-specific fluorescent labels by fluorescence spectroscopy and HPLC. We have synthesized model peptides and their adducts with fluorescent dyes to identify the evolved -SH through their fluorescence labeled peptide derivatives.

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjaink egyik fontos kutatási iránya fehérjék és peptidek fotolízisének és az ezzel összefüggő szerkezeti és funkcionális változásának felderítése. Kutatásaink célja fehérjéknél kisebb egységeken, peptidmodelleken vizsgálni az UV-fény hatására lejátszódó fotokémiai reakciót. A fotolízis során képződő szulfhidril-csoport kimutatására és kvantitatív meghatározására különböző tiolspecifikus fluoreszcens jelzővegyületeket alkalmaztunk, melyek a képződött festék-SH adduktok fluoreszcenciás és/vagy kromatográfiás detektálását teszik lehetővé.

Kulcsszavak: diszulfid-híd, fotolízis, fluoreszcencia spektroszkópia, fluoreszcens festék

Köszönetnyilvánítás:

OTKA K100720 (M. Zs.), LP2013-55/2013 (K.P.).

Hozzájárulások az 1,4-butándiol *E. coli*-ban megvalósuló bioszintetikus útvonalának tervezéséhez

Contributions to Engineering a New Four-step Biosynthetic Pathway for 1,4-Butanediol in *E. coli*

Dr. MIKLÓSSY Ildikó^{1,2}, Dr. BODOR Zsolt¹, SINKLER Réka¹,
Dr. ORBÁN Kálmán Csongor¹, Dr. ÁBRAHÁM Beáta¹, Dr. LÁNYI Szabolcs¹

¹ Sapientia EMTE, Műszaki és Társadalomtudományi Kar,
53104 Csíkszereda, Szabadság tér 1.,

Tel.: +40 266 317 121, Fax: +40 266 372 099, mttk.csik.sapientia.ro

² Universitatea "Politehnica" București, Facultatea de Chimie Aplicată și Știința Materialelor,
Str. Gh. Polizu Nr. 1-7, Sector 1, 011061 București,
Tel: +4021 402 3935, Fax: +4021 311 1796, www.chim.upb.ro

ABSTRACT

1,4-butanediol (BDO) is considered a platform molecule used for the production of important added-value products (lactones, tetrahydrofuran (THF), polyurethanes, polyesters and polyethers). Here we present design of a sustainable, bio-based production method, based on engineering a new, four-step biosynthetic pathway for BDO in *E. coli* as a host strain. In silico construction, analysis and optimization of recombinant strains with improved properties, as well as selection of several candidate enzymes for the new pathway with suitable enzymatic properties has been carried out.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az 1,4-butándiol (BDO) fontos kiinduló molekula néhány magas hozzáadott értékű vegyipari termék előállításához (laktonok, tetrahydrofuran, poliuretánok, poliéterek és poliészterek). Jelen tanulmányban a BDO biológiai, fenntartható előállítását megvalósító módszert mutatjuk be, amelynek alapja egy négylépéses, a metabolikus mérnökség módszereivel *E. coli* gazdaszerzetben tervezett új bioszintetikus útvonal. Eddigi munkánk során a rekombináns *E. coli* törzsek in silico tervezését, elemzését és optimalizálását, illetve az útvonal lépéseit megvalósító, megfelelő katalitikus tulajdonságokkal rendelkező enzimek kiválasztását végeztük el.

Kulcsszavak: 1,4-butándiol, metabolikus mérnökség, bioszintetikus útvonal, *E. coli* gazdaszerzet

Bortezomid, egy fontos rákellenes hatóanyag kvantumkémiaiája

Quantum Chemistry of Bortezomid, an Important Anticancer Agent

Dr. BILLES Ferenc egyetemi magántanár¹, Dr Hans MIKOSCH Assistenzprofessor²

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, H-1521 Budapest, Budafoki út 8., tel.: +36-1-463-1267, email: fbilles@mail.bme.hu

²Bécsi Műszaki Egyetem, Kémiai Technológiai és Analitikai Intézet, A-1060 Wien, Getreidemarkt 9/E164-EC, Ausztria, Tel.: +43 (1) 58801 15870, Email: Hans.Mikosch@tuwien.ac.at

ABSTRACT

Bortezomid (Velcade) is effective like inhibitor against myeloma and several types of non-Hodgkin lymphoma diseases. It acts as anticancer agent through joining the active part of proteasoma S26, the S20. It is a tripeptid that contains also boron-carbon bonds. This makes interesting the molecule for chemists besides its biological activity. Molecular structure, atomic net charges, vibrational spectra were calculated with Gaussian 09 code using the DFT B3LYP functional and 6-311+G* basis set.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Bortezomid (Velcade) inhibitoroként hatásos mieloma és számos nem-Hodgkin lymphoma típusú betegségek ellen. Rákellenes hatóanyagként oly módon hat, hogy kapcsolódik az S26 proteasóma aktív részéhez, az S20-hoz. Tripeptid, amely bór-szén kötést is tartalmaz. Biológiai hatása mellett ez teszi érdekessé a vegyész számára. A molekula szerkezetét, atomi netto töltéseket, rezgési spektrumot számítottunk a Gaussian 09 kóddal, a DFT B3LYP funkcionállal és a 6-311+G* bázis készlettel.

Kulcsszavak: Myeloma és non-Hodgkin kór, bór-szén kötés, kvantumkémia, molekulaszervezet, rezgési spektrum.

Nedvesedési vizsgálatok vízben duzzadó polimerek felületén

Wettability Studies on the Surface of Swelling Polymers

KISS Bálint, DABÓCZI Mátyás, KOTÁN Péter, KOVÁCS Attila,
TOKAJI Zsolt, HÓRVÖLGYI Zoltán

BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, H-1111 Budapest, Budafoki út 6-8.
balintkiss@mail.bme.hu

ABSTRACT

The purpose of this work was the examination of wetting properties of swelling polymer surfaces in order to develop suitable methods for characterizing the time-dependent wetting behaviours. The tests were carried out on biopolymers (mainly chitosan) and other hydrogel surfaces by measuring the contact angles of pure water and different aqueous solutions. For the measurements biopolymer thin films were prepared by dip-coating technique on glass substrates. The thickness of the coatings were studied by UV-Vis spectroscopy. The contact angle measurement was carried out with sessile drop and captive bubble methods. The results obtained by the different methods will be compared to each other in our presentation.

Keywords: wettability, contact angle, sessile drop, captive bubble, swelling polymer

Acknowledgements: The financial support of the National Development Ministry (R&D: Contracts of Competitiveness and Excellence (VKSZ_12), VKSZ_12-1-2013-0080) is gratefully acknowledged.

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk célja vizes közegben duzzadó polimerek nedvesíthetőségének vizsgálata olyan módszerek kidolgozása céljából, amelyek alkalmasak időben is változó felületek tulajdonságainak tanulmányozására és jellemzésére. A vizsgálatokat biopolimer filmek (kitozán) és egyéb tömbi anyagok felületein végeztük tiszta víz, valamint különböző pH-jú vizes oldatok peremszögeinek meghatározása révén. A vékony bevonatokat mártásos technikával állítottuk elő üveghordozókon. A filmek vastagságának meghatározására UV-Vis spektroszkópiai méréseket végeztünk. A peremszögeket ülőcsepp- és tapadó buborék- módszerek alkalmazásával határoztuk meg. Előadásunkban összehasonlítjuk és értékeljük a különböző módszerekkel nyert eredményeket.

Kulcsszavak: nedvesíthetőség, peremszög, ülőcsepp-módszer, tapadó buborék-módszer, vízben duzzadó polimerek

Köszönetnyilvánítás: A munkát a Nemzeti Fejlesztési Minisztérium (K+F Versenyképességi és Kiválósági Szerződések (VKSZ_12) pályázat, VKSZ_12-1-2013-0080) támogatta.

A felhasznált energiafajták különböző mértékben okoznak globális felmelegedést. Bölcs fejlesztések csökkenthetik a veszélyt

The Types of Energy Used Influences the Global Warming in Different Way. Advised Improvements Can Reduce the Danger

Dr. MUZSNAY Csaba ny. előadótanár, kutató vegyész

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia Kar, Kolozsvár-Cluj-Napoca, cmuzsnay@chem.ubbcluj.ro,
Otthoni cím: 400275 Str. Horea Nr. 56-58/4, cmuzsnay2000@yahoo.com

ABSTRACT

The causes of GLW can not be reduced to one. Many warming and cooling factors must be taken into account on the surface of our planet. Only energies referring to a specific surface are comparable. Use of renewable non-exhaustible sources of energy (solar, wind, environmental heat pump) should be brought into the foreground of the exhaustible one (biomass).

ÖSSZEFOGLALÓ

A Föld globális felmelegedése (GFM) nem szűkíthető egyetlen okra. Bolygónk felületén nagyon sok felmelegedést és lehűlést okozó tényező figyelembe vételével kell számolni. Csak adott felületre vonatkozó energiák hasonlíthatók össze. A megújuló nem kimeríthető energiaforrások (nap, szél, hőszivattyús földhő) felhasználását kell előtérbe helyezni a kimeríthetőkkel (biomassza) szemben.

Kulcsszavak: megújuló ki- és nem ki-meríthető energiaforrások, hőszivattyús földhő felhasználás.

Több mint hatéves kutató munka eredményeként világossá vált, hogy a Föld GFM-e nem szűkíthető egyetlen okra, hanem a többokúság (plurikauzalitás) megállapítása szükségeltetik. A szerző megfogalmazása szerint „ma már a GFM nem más mint energia-termelés és –fogyasztás mindenek felett” (EME TTUD-i Szakoszt. ülése, 2014. jún. 26.). A GFM vitathatatlan tény, de a megrögzött ellenzők nem képesek ezt elfogadni, ezzel lehetetlenné tennék a tudományos vizsgálatokat. A GLF okai rendkívül vitatottak. Sokféle meddő, vagy egymással ellentmondó állítás lát napvilágot. Sokan még a CO₂ kizárólagos szerepét vallják. Valójában Földünk felületén nagyon sok felmelegedést és lehűlést okozó tényező figyelembe vételével kell számolni. Számos kutató olyan nagy földfelszint elérő napenergiával hasonlítja össze az emberi tevékenységhez kapcsolódó energiaváltozásokat, hogy ez utóbbiak teljesen elhanyagolhatóknak tűnnek. Pedig csak egységnyi felületre vonatkozó energiák hasonlíthatók össze egymással. Általában a földi energia-termelés és –fogyasztás végső soron hővé alakul, de nem kizárt a lehűlés bekövetkezése sem. Így pl. az energiatermelő erőművek közvetlen környezetében a helyi napenergiát meghaladó energia szóródik, ami helyi felmelegedést és éghajlatmódosulást okoz. Helyi hirtelen energia felszabadulás miatt hosszasan csökkenhet a környező földfelületre jutó napenergia mennyisége (pl. atombomba robbantás), és a hőmérséklet is. Alternatív, megújuló energia-forrásokra van szükség a nem megújulókat átváltására. A megújuló energiaforrások nagyszámúak és közéjük soroljuk pl. a közvetlen hatású napenergiát (fotoelektromos cella, konverzió), a közvetett hatású napenergiát (víz, szél – nyomáskülönbség eredményeként, biomassza képződés - fotoszintézis nyomán), vagy geotermikus konverzió. A megújuló energiaforrások közül a nem kimeríthetők (nap, szél) felhasználását kell előtérbe helyezni a kimeríthetőkkel (biomassza) szemben, kivéve a hulladékfeldolgozást. Egyre inkább előtérbe kerül a környezeti földhő (levegő, talajhő, felszíni vizek hője) hőszivattyús hasznosítása, mely nagyon előnyös hőforrásnak tekinthető. Ezáltal a disszipiált hő egy része újra hasznosulhat. Hőszivattyús fűtés esetén az épületek hőellátását és nyári hűtését indokolt összekapcsolni, Ilyenkor a nyári hűtés ellátása energetikailag kedvezőbb, mint a villamos üzemű légkondicionáló berendezések, és mérsékli a nyári villamos csúcsok kialakulását

Kolloidkémiai alapokon előállított arany nanoszerkezetek

Gold Nanostructures Prepared Based on a Colloid Chemical Approach

ZÁMBÓ Dániel, PhD. hallgató, POTHORSZKY Szilárd, PhD. hallgató,
GERGELY-FÜLÖP Eszter, PhD. hallgató, NAGY Norbert, PhD. hallgató,
DEÁK András PhD. hallgató

MTA Természettudományi Kutatóközpont - Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet
H-1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.
+36 1 392 2602, deak@mfa.kfki.hu, www.mfa.kfki.hu

ABSTRACT

We present our recent result from the work on the manipulation and self-assembly of nanoparticles. The aim of the work is to use main concepts from colloid chemistry in the interaction energy manipulation between colloids in order to fabricate advance architectures from nanoparticles. Three specific examples will be shown: (i) bulk clustering of spherical gold nanoparticles upon applying external stimuli, (ii) directed assembly of spherical and rod-shaped particles and (iii) organising nanoparticles in a circular pattern using capillary lithography.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az előadásban a nanorészecskék önszerveződésével kapcsolatos eredményeinket mutatjuk be. Munkánk célja, hogy kolloidkémiai alapokról elindulva, a részecskék közötti kölcsönhatások megfelelő tervezésével nanorészecskékből hierarchikus szerkezeteket hozunk létre. Három fő témakörhöz köthető eredményünket mutatjuk be: (i) gömb alakú arany nanorészecskék klaszter képzése külső inger hatására, (ii) gömb és rúd alakú részecskék irányított önszerveződése és (iii) nanorészecskék elrendezése gyűrű alakú mintázatokba kapilláris litográfia segítségével.

Kulcsszavak: arany nanorészecskék, plazmonika, kolloid kölcsönhatások, önszerveződés

Új típusú, influenza vírus hemagglutinin-gátló önszerveződő teikoplanin antibiotikum származékok

Self-assembling Teicoplanin Antibiotic Derivatives as New Influenza Virus Hemagglutinin Inhibitors

Dr. BERCZKI Ilona¹, Dr. KICSÁK Máté¹, Dr. BORBÁS Anikó¹,
Dr. Evelien VANDERLINDEN², Prof. Dr. Lieve NAESENS², Prof. Dr. HERCZEGH Pál¹

¹ Debreceni Egyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Gyógyszerészi Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen,
Egyetem tér 1., +36-52512900, bereczki.ilona@pharm.unideb.hu

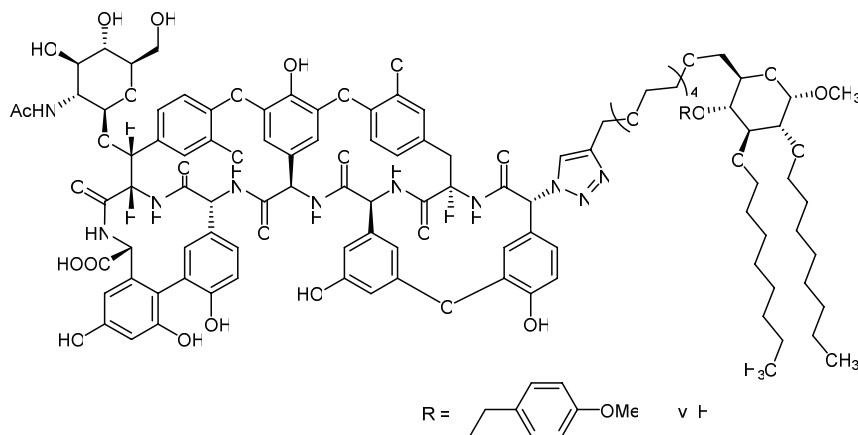
² Rega Institute for Medical Research, KU Leuven, B-3000 Leuven, Belgium

ABSTRACT

In order to obtain new, cluster-forming antibiotic compounds, teicoplanin pseudoaglycon derivatives containing two lipophilic n-octyl chains have been synthesized. The compounds proved to be poor antibacterials, but, surprisingly, they exhibited potent anti-influenza virus activity against influenza A strains.

ÖSSZEFOGLALÓ

Klaszterképző tulajdonságú, oktil-láncokat tartalmazó teikoplanin pszeudoaglikon antibiotikum-származékok szintézisét tűztük ki célul. Az előállított származékok gyenge antibakteriális tulajdonsággal rendelkeztek, ezzel szemben meglepően hatásos vírusellenes szerekeknek bizonyultak influenza A törzsekkel szemben.



Kulcsszavak: Teikoplanin, antibiotikum, klaszterképző, influenza, hemagglutinin

Antitrombotikus hatású heparin-analóg pentaszacharid-szulfonsavak szintézise

Synthesis of Antithrombotic Sulfonic Acid Containing Heparin Analogue Pentasaccharides

Dr. HERCZEG Mihály¹, MEZŐ Erika², VARGA Eszter¹, ESZENYI Dániel²,
Dr. BORBÁS Anikó¹

¹DE-GYTK, Gyógyszerészi Kémiai Tanszék, 4010 Debrecen, Pf. 70.

²DE-TTK, Szerves kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

e-mail: herczeg.mihaly@science.unideb.hu, tel: +36-52-512-900/22896

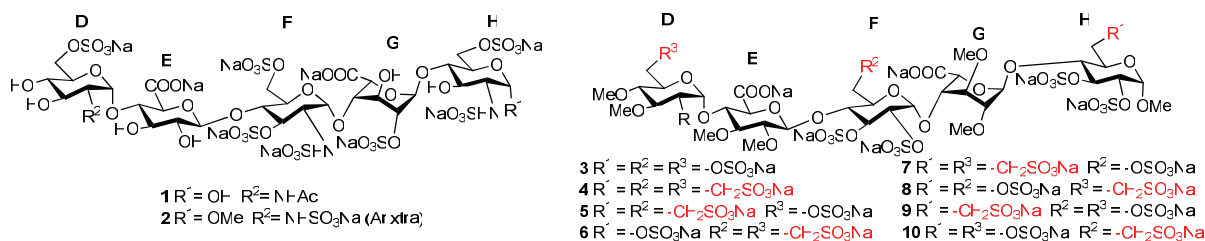
ABSTRACT

In the Department of Pharmaceutical Chemistry of University of Debrecen, we are dealing with the synthesis of new antithrombotic oligosaccharides based on the Idraparinux (3). Our goal is the preparation of anticoagulants by systematic replacement of the key sulfate-ester groups to sulfonatomethyl moieties. Idraparinux (3) and two sulfonic-acid analogues (4, 5), in which the 6-O-sulfate groups on the glucose units F, H and D, F, H are partially replaced with sulfonatomethyl moieties have been prepared until now. Based on the in vitro anticoagulant evaluation the pentasaccharide-disulfonic acid (5) is an outstanding anticoagulant agent, while the pentasaccharide-trisulfonic acid (4) has only a moderate anticoagulant activity. To get more information about the role of the sulfonic acid moieties in the anticoagulant action, synthesis of further sulfonatomethyl-containing pentasaccharides has been decided. Here, we present the synthesis of the new regioisomeric sulfonic-acids (6-10).

Keywords: heparin; anticoagulation; pentasaccharide; sulfonic acid; glycosylation

ÖSSZEFOGLALÓ

A Debreceni Egyetem Gyógyszerészi Kémiai Tanszékén az Idraparinux vezérmolekulából kiindulva új típusú antitrombotikumok szintézisét kutatjuk. Célunk az antikoaguláns hatásban kulcsszerepet játszó szulfátészterek szisztematikus cseréjével szulfonsav-típusú véralvadásgátlók előállítására. E kutatások keretében már előállítottuk az Idraparinuxot (3) és két szulfonsav mimetikumát (4, 5), amelyekben az F, H és a D, F, H glükóz egységek 6-O-szulfát-csoportjait metánszulfonsav csoportra cseréltük. In vitro véralvadásgátlási mérések alapján a pentaszacharid-diszulfonsav (5) kiemelkedő véralvadásgátló hatású szer, míg a pentaszacharid-triszulfonsav (4) csak közepes antikoaguláns hatással bír. A véralvadás-gátlás értékekben lévő különbségek szerkezeti okainak meghatározása érdekében célul tűztük ki újabb 6-szulfonatometil-tartalmú pentaszacharidok szintézisét. Előadásunkban az újabb, regioizomer szulfonsavak (6-10) szintézisében elért eredményeinket mutatjuk be.



Kulcsszavak: heparin, antikoaguláció, pentaszacharid, szulfonsav, glikozilezés

This research was supported by the **European Union** and the **State of Hungary, co-financed by the European Social Fund** in the framework of TÁMOP 4.2.4. A/2-11-1-2012-0001 'National Excellence Program'.

Új típusú β -laktám származékok előállítása Ugi reakcióval

Synthesis of New Type of β -lactams Derivatives Using Ugi Reaction

NAGY Zsolt László¹, prof. Dr. HERCZEGH Pál¹

DE-OEC, Gyógyszerészi Kémia Tanszék, 4010 Debrecen, Pf. 70..

e-mail: sporadicprion@gmail.com , tel: + 3652512900/22896

ABSTRACT

The new types of β -lactams are very important to fight new resistant bacterial species like MRSA (methicillin resistant staphylococcus aureus). Different types of cephalosporins like 7-ACA (7 - amino cephalosporanic acid), 7-ADCA (7 – aminodesacetoxycephalosporanic acid) and penicillins like 6-APA (6 - aminopenicillanic acid) have been derivatized using Ugi reaction. Obtaining new cephalosporins and penicillins having peptoid side chains. The highly variable Ugi reaction makes possible to synthesise large number, new potentially antibacterial derivatives. We like to introduce the synthesis of these new type of cephalosporins, and penicillins adducts.

Keywords: β -lactam, cephalosporin, Ugi-reaction, peptoid, $\Delta 3$ - $\Delta 2$ isomerisation

ÖSSZEFOGLALÓ

Új típusú β -laktámok szintézise rendkívül fontos a folyamatosan megjelenő újabb rezisztens törzsek (MRSA) megjelenése végett. Különböző β -laktámokkal végeztem reakciókat, köztük 7-ACA, 7-ADCA és 6-APS-sel. Melyekből Ugi reakció segítségével cefalosporinok 7-es, illetve penicillinek esetében 6-os helyzetben speciálisan szubsztituált molekulákat kaptunk amelyek Ugi reakció eredményezte speciális peptid jellegű (peptoid) csoportban különböztek. Előadásomban az elért eredményeinket szeretném bemutatni, amelyben többek között kitérek munkám során tapasztalt nehézségekre, és a cefalosporinokra rendkívül jellemző delta3-delta2 izomerizációra illetve annak elkerülésére.

Kulcsszavak: β -laktám, cefalosporin, Ugi-reakció, peptoid, $\Delta 3$ - $\Delta 2$ izomerizáció

Hogyan befolyásolják az enantiomer-felismerést a királis rendszerekben lejátszódó kölcsönhatások?

How is the Enantiomeric Recognition Influenced by the Interactions of Chiral Systems?

PÁLOVICS Emese¹, SZELECZKY Zsolt², FAIGL Ferenc², FOGASSY Elemér²

¹ MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéki Kutatócsoport

² BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, H-1111 Budapest, Budafoki út 8,

ABSTRACT

The driving force [1] of the formation of the homo- and heterochiral associates in the mixtures of chiral compounds is probably the effort of the system to separate the most symmetric associates from the less symmetric ones. A possible way to achieve separation of these associates is the distribution between two phases which is controlled by the interactions formed in chiral systems.

ÖSSZEFOGLALÓ

A királis vegyületek keverékeiben a homo- és heterochirális asszociátumok képződésének a mozgató ereje valószínűleg a rendszer azon természetes törekvésén alapszik, hogy a szimmetrikusabb asszociátum elváljon a kevésbé szimmetrikustól. Ezen szétválasztás egyik legbiztosabb módja a két fázis közötti megoszlásami e királis rendszerben kialakuló kölcsönhatások kihasználásával érhetünk el.

Kulcsszavak: Reszolválás, szimmetrikus asszociátum, aszimmetrikus asszociátum, fázisok közötti megoszlás, eutektikus összetétel.

Az élő szervezetekben, a gyógyszerek között meghatározó szerepe van a királis (az aszimmetrikus) vegyületeknek. A kémiai szintézisek során, keletkezett racém vegyületek elválasztásával juthatunk a megfelelő királis vegyülethez (a single enantiomerekhez). A racém vegyületek enantiomerjeinek az elválasztására több módszer ismeretes, de az ipari célokra történő elkülönítési módszerek közös jellemzője, hogy a királis vegyületek keverékeinek két (vagy több) fázis közötti megoszlására és ezeknek a fázisoknak az elválasztására épülnek.

Munkánk során azt tapasztaltuk, hogy az enantiomer keverékek jellemző tulajdonságai határozzák meg a fázisok közötti megoszlást. A reszolválások során a diasztereomerkeverékek viselkedése a lejátszódó kölcsönhatások, hasonló mint az őket alkotó enantiomerkeverékével (abban az esetben is ha a reszolválóagens nincs szerkezeti rokonságban a racém vegyülettel). Az eutektikus összetétel meghatározó szerepét itt is megfigyelhetjük [2].

Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetet mondanak az OTKA (K 104769 Fogassy E. és K 104528 Faigl F.) valamint a Richter Gedeon Nyrt által nyújtott támogatásért.

Irodalmi hivatkozások:

- [1] Soloshonok, V.A.: *Angewandte Chemie International Ed.*, 45, 766-769, 2006.
- [2] Pálovics, E.; Szelezky, Zs.; Földi, B.; Faigl, F.; Fogassy E.; Nogradi M.; Schindler, J.; *RSC Advances*, 4, 21254-21261 2014

TiO₂ alapú aerogélek: szintézis, szerkezet, morfológia és fotokatalitikus tulajdonságok

TiO₂-based aerogels: Synthesis, Morphological, Structural and Photocatalytic Properties

Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2,3}, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. Cosmin COTEȚ¹, Dr. Lucian BAIA²,
Dr. HERNÁDI Klára³, Dr. Veronica COȘOVEANU¹, Dr. Virginia DANCIU¹

¹ Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818
web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár
Mihail Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906
web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezeti Kémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar,
Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720
web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

ABSTRACT

TiO₂-based nanocomposites with highly porous structures are gaining more and more attention due to their specific properties and large variability of synthesis pathways offering an alternative approach against traditional/commercially available photocatalysts. In our work several TiO₂-based aerogels are presented, modified with different materials, such as SiO₂, Ag and doped with N, taking under the loupe their morphological and structural properties (investigating their mesoporous character, band-gap values, crystallinity) and correlating them with the obtained photocatalytic efficiencies.

Keywords: TiO₂ aerogels, sol-gel method, photocatalytic activity, hydrogen production

Acknowledgements:

This research was realised in the framework of the TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 National Excellence Programme. The project was subsidised by the European Union and co-financed by the European Social Fund.

ÖSSZEFOGLALÓ

A megnövelt porozitású TiO₂ alapú nanokompozitok egyre nagyobb érdeklődésre tartanak számot, különös tekintettel a különleges tulajdonságaikra s a nagy „játékteret” biztosító, változatos szintézis módszerekre, alternatívaként feltűnve a hagyományos, ipari/kereskedelmi fotokatalizátorokkal szemben. Munkánk során TiO₂ alapú aerogéleket állítottunk elő, változatos szintézis-paraméterek mellett módosítva az alapkatalizátort SiO₂-vel, ezüsttel, dópolva nitrogénnel, vizsgálva ezek szerkezetét (porozitásukat, kristályossági fokukat, tiltotsáv-szélességüket) összefüggést keresve az előállítási „útvonal” és a fotokatalitikus aktivitás között.

Kulcsszavak: TiO₂, nanokristályok, hidrotermális kezelés, fotokatalikus aktivitás, hidrogén fejlesztés

A vörösiszap PVC-s semlegesítése és hatása a katalitikusan aktív fémtartalomra

Red Mud Neutralization by PVC and Its Influence on Content in Catalytically Active Species

Dr. LOVÁSZ Tamás¹, Dr. CSAVDARI Alexandra¹, Dr. GÁL Emese¹, BRÉM Balázs¹,
Dr. FRENȚIU Tiberiu¹, Dr. BÓDIS Jenő¹, Dr. YUZHAKOVA Tatiana²

¹Babes-Bolyai Tudományegyetem, Arany jános Utca 11. RO-400028, Kolozsvár,
e-mail:acsavdari@chem.ubbcluj.ro

²Pannon Egyetem, Egyetem Utca 10, 8200 Veszprém, www.uni-pannon.hu

ABSTRACT

Red mud is a by-product of the Bayer procedure for processing bauxite ore during alumina production. A major risk when re-using red mud is its high alkalinity: pH of untreated aqueous slurry lies between 9.2 and 12.8, whereas environmentally friendly industrial stockpiling requires pH values of at least 8.5-8.9. However, red mud may be used as catalyst because of its high content in iron (20-35%) in form of Fe₂O₃, as well as minor constituents such as V, Cr, Ni, Cu, Mn, Zn.

In this work, red mud samples were ICP analyzed before and after reaction with HCl and PVC. PVC chips were used in mild (H₂O solvent, 100°C) and more aggressive (DFE solvent, 250-260°C) conditions in simple experimental set-ups. In both cases HCl was released, and pH of samples was lowered. Mild conditions prove to be environmentally friendly as procedure, but lower pH just enough to make red mud almost safe for stockpiling. On the other hand, the solid phase of the slurry concentrates in catalytically promising species. When using the more aggressive and expensive reaction conditions, pH drops as dramatically as in the samples neutralized directly with HCl. Yet, remaining solid phase contains less of the potential catalysts as compared to the untreated ones.

ÖSSZEFOGLALÓ

A vörösiszap egy mellékterméke a timföldgyártásnak, amelynek tárolása nagy környezeti kockázatot jelent, ugyanis: a kezeletlen vizes zagynak a pH értéke 9,2 és 12,8 között van, míg a környezetbarát tárolás esetében a megengedett pH-érték 8,5-8,9. A magas fémtartalmú vörösiszap (pl. vas 20-35%, Fe₂O₃ formában) felhasználható mint másodlagos nyersanyagforrás a fémfeldolgozó-iparban, vagy katalizátorként a kisebb arányban megjelenő (V, Cr, Ni, Cu, Mn, Zn) alkotóelemek miatt. Kutatásunkban HCl-al illetve PVC-vel kezelt vörösiszap mintákat elemeztünk ICP eljárással.

Hulladék PVC-t használva, enyhe (H₂O oldószer, 100 °C), illetve energikusabb (DFE oldószer, 250-260°C) körülmények között egyszerű kísérleti berendezést alkalmazva, vizsgáltuk a vörösiszap lúgos jellegének csökkenését. Enyhe körülmények között is megfigyelhető pH-érték csökkenés ami elegendő ahhoz, hogy a vörösiszap környezetbarát tárolását biztosítsa. Magasabb hőmérsékleten a pH-érték csökkenése megegyezik a HCl-al közvetlenül semlegesített vörösiszapéval. A visszamaradat szilárd fázisban a várhatóan katalitikus aktivitást biztosító elemek mennyisége változik a nem kezelt vörösiszaphoz képest.

Kulcsszavak: vörösiszap, PVC, ICP analízis, semlegesítés, fémtartalom

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 pályázat támogatta.

A fotofermentációs hidrogén-előállítás kinetikai jellemzése

Kinetic Study of Photofermentative Hydrogen Production

MOLNOS Éva, dr.ing., adjunktus

Sapientia – Erdélyi Magyar Tudományegyetem, Műszaki és Társadalomtudományok Kar,
Csíkszereda, Élelmiszertudományi Tanszék;
530104 Csíkszereda, Szabadság tér, 1. szám, Hargita megye, Tel.: +40-266317121, Fax: +40-
266372099, Email: dekanihivatal.mttk@sapientia.siculorum.ro, <http://www.em.sapientia.siculorum.ro/>

ABSTRACT

One possibility for biological hydrogen production is the use of photofermentative bacteria. These bacteria can use inorganic sulphur compounds and/or organic acids for their metabolism, while producing hydrogen. In order the process to be economically sustainable, has to be determined the optimal conditions, which require kinetic analysis of various experimental data. This work presents the kinetic data processing of the experiments carried out with a photoheterotroph, anaerobe purple sulphur bacteria.

Keywords: nitrogenase, Hox1 hydrogenase, Thiocapsa roseopersicina, thiosulphate, kinetic parameter

ÖSSZEFOGLALÓ

A biológiai hidrogén-előállítás egyik lehetősége a fotofermentatív baktériumok felhasználása. E baktériumok szerves kénvegyületeket és/vagy különböző szerves savakat használnak fel az anyagcseréjükhöz, miközben hidrogént szabadítanak fel. Az eljárás gazdaságosabbá tételének feltétele a folyamat optimalizálása, amelyhez a különböző kísérleti adatok kinetikai feldolgozása elengedhetetlen. Jelen dolgozat egy anaerob, fotoheterotróf bíbor kénbaktérium mutáns törzsével végzett kísérletsorozat adatainak kinetikai feldolgozását mutatja be.

Kulcsszavak: nitrogénáz, Hox1 hidrogénáz, Thiocapsa roseopersicina, tioszulfát, kinetikai paraméter

A közlekedésből származó légszennyezettség és a légúti megbetegedések kapcsolatának vizsgálata

Analysis of the Connection Between Traffic Related Air Pollution and Respiratory Diseases

NAGY Georgina¹, DOMOKOS Endre¹ Ph.D., Silvia VILČEKOVÁ² Ph.D.

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Környezetmérnöki Intézet

Egyetem u. 10.; 8200 Veszprém, Hungary, H-8201 Veszprém, P.O. Box 158.

Tel.: +36 (88) 624-296; Fax: +36 (88) 624-533;

nagy.georgina87@gmail.com, <http://www.uni-pannon.hu/>

²Technická univerzita v Košiciach, Stavebná fakulta, Ústav environmentálneho inžinierstva, 4 Vysokoškolská St., Kosice, Slovak Republic SK-042 00

ABSTRACT

It is well known that pollution of the environment, especially pollution of the air is one of the greatest and most important problems of our time. The composition, condition and last but not least the evolution of the ambient air quality significantly affect the quality of human life. According to the World Health Organization's latest report in 2012, more than 7 million people died worldwide as a result of air pollution, and nearly 600 thousand people from the European region. The major sources of air pollution are transportation engines, power and heat generation, industrial processes, and the burning of solid waste. Due to the industrial development occurred in the XX century there has been substantial growth in the population, the number of vehicles and buildings. In our study we therefore investigated the relationship between the increased level of traffic related air pollutants (SO₂, CO, PM₁₀) and respiratory diseases, cardiovascular diseases, as well as the annual household expenditure on health care.

ÖSSZEFOGLALÓ

Közismert tény, hogy a környezetszennyezés - azon belül is a légszennyezés - napjaink egyik legnagyobb és legfontosabb problémája. A környezeti levegő összetétele, állapota s nem utolsósorban minőségének alakulása jelentősen befolyásolja az emberi élet minőségét. Az Egészségügyi Világszervezet legfrissebb jelentése alapján 2012-ben világszerte több mint 7 millió ember halt meg a légszennyezés következtében, s ebből csaknem 600 ezer fő az európai régióban. A városi területeken bekövetkező légszennyezés fő oka az antropogén eredetű veszélyes szennyező anyagok légkörbe kerülése; a fosszilis üzemanyagok erőművekben, egyedi és távfűtésben, valamint a gépjármű közlekedésben való elégetése során. A XX. században bekövetkezett ipari fejlődés következtében a lakosság, a gépjárművek valamint az épületek száma jelentős növekedésnek indult. Tanulmányunkban éppen ezért a megnövekedett járműforgalomból származó légszennyező anyagok (SO₂, CO, PM₁₀) és a légzőrendszer betegségei, keringési megbetegedések valamint a háztartások egészségügyre fordított éves kiadásainak kapcsolatát vizsgáltuk.

Kulcsszavak: levegőszennyezés, közlekedés, légzőrendszer betegségei, keringési betegségek, regresszió analízis

Nanoszerkezetű fotokatalizátorok és kompozitjaik – alakszobrászat és aktivitás

Nano-sized Photocatalysts and their Composites – Shape Tailoring and Activity

Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2,3}, SZÉKELY István¹,
KEDVES Zsolt¹, SASZET Kata¹, HAMPEL Boglárka¹, FODOR Szilvia¹,
TÓTH Zsejke-Réka¹, ORBÁN Eszter¹, KOVÁCS Zoltán¹,
Dr. HERNÁDI Klára³, Dr. DOMBI András³, KÁSA Zsolt³, VAJDA Krisztina³,
KARÁCSONYI Éva³, Dr. Virginia DANCIU³, Dr. Adriana VULPOI^{2,4},
Dr. Veronica COȘOVEANU³, Dr. Lucian BAIA^{2,4}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Mihail Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar,
Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár
Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

ABSTRACT

Photocatalysis is one of the research areas of materials science which directly applies shape tailoring as a tool for tuning the photocatalytic activity of the nanomaterials. During this process the growth of the crystallographic planes of the nanocrystals will be inhibited/catalyzed. As each facet of a specific nanocrystal confers a specific property, so their ratio establishes the final property set of the material. Consequently, a large scale of particularities can be adjusted, such as optical properties, adsorption affinity and electron storage. To enlighten these aspects semiconductors: TiO₂, WO₃, Bi₂(WO₄)₃ and noble metals were obtained (Au, Pt and Pd) (and in some cases their composites) and their properties were explored with several methods, while realizing a clear photocatalytic activity – shape correlation in each case.

Keywords: Semiconductors, noble metals, photocatalytic activity, nanocrystal shape-tailoring

ÖSSZEFOGLALÓ

A fotokatalízis az anyagtudomány egy olyan ágához kapcsolódik, amelyben nanokristályok alakformázása egy aktuálisan alkalmazott eszköz az egyes tulajdonságok finomhangolására. A módszer lényege, hogy egy adott kristályoldalt szelektíven növesztünk, vagy éppen növekedését gátoljuk. Mivel minden egyes oldal más-más tulajdonságokkal ruházza fel a nanokristályokat, ezért az „alakszobrászat” végterméke egy sajátos tulajdonságokkal ellátott anyag lesz. Többek között rugalmasan szabályozhatóvá válnak az optikai tulajdonságok, adszorpciós kapacitás, elektron affinitás, stb. Ezekre a tulajdonságokra összpontosítottunk különböző TiO₂, WO₃, Bi₂(WO₄)₃ félvezetők és nemesfémek (Au, Pt and Pd), illetve az általuk alkotott kompozitjaik esetében is, sikeresen megállapítva a fotokatalitikus aktivitások alakfüggési sajátosságait.

Kulcsszavak: Félvezetők, nemesfémek, fotokatalitikus aktivitást, nanokristályok alakszobrászata

Maros és Hunyad megye szennyezett mellékfolyóinak, nehézfémekkel történő szennyezettség csökkentésének tanulmányozása

Studying to Reduce of Contamination with Heavy Metals of River Mures and their Contaminated Tributaries in Hunedoara County

Chem.SZÖLLÖSI-MOTA Andrei

Phd.Student, Petrosani University, Petrosani str.Universitatii nr.20 , Hunedoara
Tel. 0254 549749 email:andrei.szollosi@yahoo.com

ABSTRACT

The aims of the paper is the Mures river Hunedoara county, as well as major tributaries contamination with heavy mtels survey with ICP-AES method of analysis. The survey aims to sediments and water samples were analyzed. One of the most polluted tributaries of the Hunedoara County is Certej, especially as regards the concentration of zinc caused by mining industrial of waters and mining waste. In order to reduce the pollution with heavy metals of mine water, studied natural zeolits assignment to the case studied, which are excellent adsorbents for heavy metal ions.

ÖSSZEFOGLALÓ

A tanulmány célja a Maros folyó Hunyad megyei, valamint fontosabb mellékfolyóinak nehézfémekkel való szennyezettségének felmérése ICP-AES analitikai módszer segítségével. A felmérés célja érdekében vízmintákat és üledékmintákat elemeztem. A Certej egyike a legszenyezetebb mellékfolyóinak a Hunyad megyei szakaszon, főleg a cink koncentrációt illetően, az ércbányászatban felhasznált ipari vizek es bányameddők miatt.A szenyezettség csökkentése érdekében a bányavizek természetes zeolitokkal való kezelését tanulmányoztam, amelyek kitűnő nehézfém adszorbensek.

Kulcsszavak: nehézfémek, zeolitok, vízszennyeződés, üledékek, Maros

A BorsodChem Zrt. és az oktatás kapcsolata

BorsodChem and the Education

MIHALKÓ Andrea¹, Dr. BÁN Kinga,¹FARKAS László¹

¹BorsodChem Zrt., H-3700 Kazincbarcika, Bolyai tér 1. Tel.: (36)-48 511 211

E-mail: andrea.mihalko@borsodchem.eu

ABSTRACT

BorsodChem takes part in training and education for several decades.

The firm supports and takes active part in the training of chemical technicians, chemical engineers as well chemists.

BorsodChem organised a “Special Circle of Chemistry” with experiments for elementary school students interested in chemistry.

For secondary school students, plant visits are organised and places are proved in BC for their compulsory professional practice and the ones having excellent academic achievement are rewarded.

For the students of the faculties of chemistry, chemical engineering and material engineering of Hungarian universities, road shows and plant visits are organised. In addition, Bsc and Msc diploma work topics are offered as well as places for the summer professional practice. We introduced a “Scholarship program” to support the students offering jobs for entrants.

Keywords: education, chemical technicians, chemical engineers, chemists, secondary school, university

ÖSSZEFOGLALÓ

A BorsodChem Zrt. több évtizede folytat oktató és oktatást támogató tevékenységet. Támogatjuk és aktív szerepet is vállalunk a vegyésztechnikusok, vegyészek és vegyészmérnökök képzésében.

A Vegyész Szakkör megszervezésével az általános iskolai kémia iránt érdeklődő gyermekeket célozzuk meg, ahol a kísérletezéssel ismerkedhetnek meg.

A középiskolás tanulók számára gyárlátogatást szervezünk. Lehetőséget biztosítunk a kötelező szakmai gyakorlat elvégzéséhez és a kiemelkedő eredményeket elérőket jutalmazzuk.

A magyarországi egyetemek vegyész, vegyészmérnök és anyagmérnök hallgatóinak rendszeresen road-show-kat, gyárlátogatásokat szervezünk. Biztosítjuk a nyári szakmai gyakorlat lebonyolítását, és a Bsc, illetve Msc szakdolgozati témák kidolgozásának lehetőségét. A „Tanulmányi ösztöndíj program” bevezetésével segítjük a hallgatók egyetemi tanulmányait, és ez által munkahelyet is kínálunk a pályakezdők számára.

Kulcsszavak: oktatás, vegyésztechnikus, vegyész, vegyészmérnök, szakközépiskola, egyetem

Stabil szénhidrátmimetikumok szintézise thio-click módszerrel**Thio-click Approach to the Synthesis of Stable Glycomimetics**

Dr. BORBÁS Anikó, Dr. CSÁVÁS Magdolna, Dr. LÁZÁR László, Dr. HERCZEG Mihály,
ESZENYI Dániel, SZILÁGYI Eszter, BEGE Miklós, Prof. HERCZEGH Pál

Department of Pharmaceutical Chemistry, University of Debrecen,
H-4032, Egyetem tér 1, Debrecen, Hungary
Tel: +36 52 512900; Fax: +36 52 512900; e-mail: borbas.aniko@pharm.unideb.hu

ABSTRACT

Over the last decade, the photoinduced thiol-ene coupling, free-radical addition of a thiol to a nonactivated carbon-carbon double bond, has been recognised as a robust ligation tool possessing many of the attributes of click chemistry. The great synthetic potential of the reaction has been amply demonstrated in areas of polymer chemistry and material sciences for network formation, dendrimer synthesis, and polymer functionalization. Herein we present hydrothiolation reactions of exo- and endoglycals and sugar exomethylene derivatives with various thiols upon irradiation at λ_{\max} 365 nm in the presence of photoinitiator to produce a wide range of S-linked and C-S-bridged glycomimetics.^{1,2}

Keywords: exoglycal, endoglycal, exomethylene, photocatalysis, radical, hydrothiolation

ÖSSZEFOGLALÓ

A „click”reakciók körébe sorolható a terminális alkéneken lejátszódó fotokatalizált, gyökös mechanizmusú tioladdíció, mivel enyhe körülmények között és bármilyen oldószerben végrehajtható, gyors, regioselektív és kiváló hozamú. A tio-click reakciót elterjedten alkalmazzák a polimerkémiaiban és az anyagtudományok terén, és újabban glikokonjugátumok előállítására is hasznosítják. A módszer kiterjesztése céljából részletesen vizsgáltuk exo- és endociklusos kettős kötést tartalmazó szénhidrátok reakcióját különböző tiolokkal UV-fény (365 nm) és fotokatalizátor jelenlétében, és megvalósítottuk néhány bioreleváns oligoszacharid tio-mimetikumának egyszerű szintézisét.^{1,2} A nyert tioglikozidok és C-S-kötésű konjugátumok különösen értékes glikozid mimetikumok fokozott kémiai stabilitásuk és a glikozidázokkal szembeni rezisztenciájuk miatt.

Kulcsszavak: exoglikál, endoglikál, exometilén, fotokatalízis, gyök, tioladdíció,

Acknowledgement. This work was supported by the János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences and by the Hungarian Research Fund (OTKA K 109208).

References

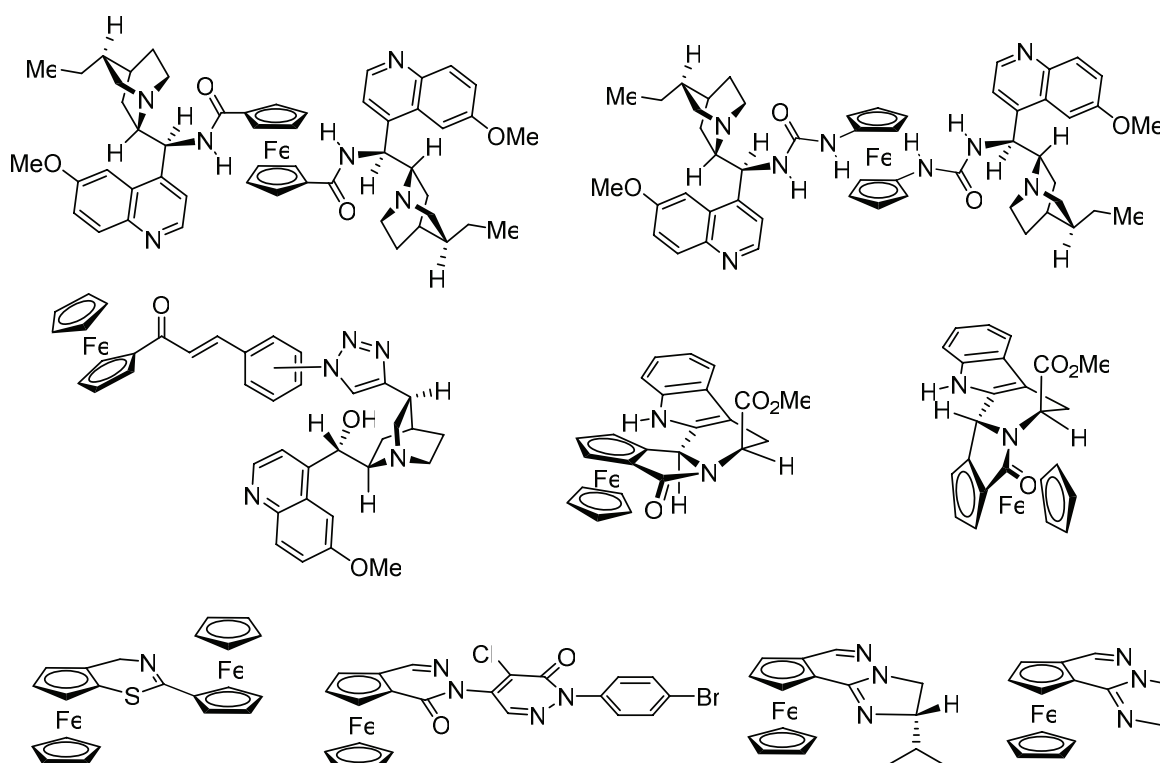
1. Lázár, L.; Csávás, M.; Herczeg, M.; Herczegh, P.; Borbás, A. *Org. Lett.* **2012**, *14*, 4650.
2. Lázár, L.; Csávás, M.; Hadházi, Á.; Herczeg, M.; Tóth, M.; Somsák, L.; Barna, T.; Herczegh, P.; Borbás, A. *Org. Biomol. Chem.* **2013**, *11*, 5339.

Újtípusú ferrocénszármazékok: előállítás, szerkezet, antitumor aktivitás**Novel Ferrocene Derivatives: Synthesis, Structure, Antitumor Activity**

Antal CSÁMPAI¹, Zoltán KOVÁCS¹, Dániel CSÓKÁS¹, László-Lajos KOCSIS^{1,2},
Kinga-Judit FODOR¹, Szilvia BŐSZE, Ildikó SZABÓ², Ferenc HUDECZ²

¹Eötvös Loránd University, Institute of Chemistry, Department of Inorganic Chemistry,
Budapest, Hungary

²Hungarian Academy of Sciences Research Group of Peptide Chemistry at
Eötvös Loránd University of Sciences, Budapest, Hungary

**ABSTRACT**

During the last decades remarkable attention has been paid to the chemistry of ferrocene derivatives due to their wide range of biological effects including highly promising anticancer activity detected under *in vitro* and *in vivo* conditions. In the frame of our ongoing research we prepared, characterized and tested a number of different types of novel ferrocene-containing heterocyclic compounds of which selected representatives are presented above.

ÖSSZEFOGLALÓ

Változatos biológiai hatásuknak, köztük *in vitro*- és *in vivo* körülmények között kimutatott tumorellenes aktivitásuknak köszönhetően az utóbbi évtizedekben kiemelkedő érdeklődés mutatkozott a ferrocénszármazékok kémiája iránt. A jelenleg is folyamatban levő kutatásaink keretén belül előállítottunk, jellemeztünk és teszteltünk számos, változatos szerkezetekkel jellemezhető újtípusú ferrocén-tartalmú heterociklusos vegyületet, melyek néhány jellemző képviselője a fenti ábrán látható.

Porfirinek, eredmények és perspektívák

Porphyrins, Results and Perspectives

GÁL Emese, BRÉM Balázs, GAINA Luiza-Ioana,
CRISTEA Castelia, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița

„Babes-Bolyai” Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Arany János, 11, Kolozsvár, Románia, 400028
gal.emese.81@gmail.com

ABSTRACT

Porphyrins have been extensively exploited as platforms for the study of theoretical principles and applications in a wide variety of fields such as chemistry, physics, material science, engineering, biology and medicine¹ Most of the currently approved clinical photosensitizers for photodynamic therapy belong to the porphyrin family².

The synthesis of new chromophore architectures based on arrays of phenothiazine and (hetero)aromatic units joint in the meso positions of a porphyrin core (phenothiazinyl A₄, phenothiazinyl and (hetero)aryl: AB₃ trans-A₂B₂ and A₃B), is described. Selected meso-phenothiazinylporphyrins were evaluated as photosensitizers for photodynamic therapy (PDT) by in vitro irradiation of two human skin cell lines (HaCaT and A431) using red and blue light³.

ÖSSZEFOGLALÓ

A porfiriniket széles körben tanulmányozzák és a legkülönbözőbb területeken alkalmazzák mind a kémiában, fizikában, anyagtudományban, az iparban, biológiában és az orvostudományban¹. Jelenleg, a legtöbb jóváhagyott klinikai fotoszenszibilizátor, amelyet a fotodinamikus terápiában alkalmaznak, a porfirinek osztályába tartozik². Fenotiazin-, és (hetero) aromás egységekkel meso pozícióban szubsztituált, AB₃ trans-A₂B₂ és A₃B, új kromofor szerkezetek szintézisét mutatjuk be. Különböző meso-fenotiazinil-porfirinek fotoszenszibilizátor tulajdonságait tanulmányoztuk a fotodinamikus terápiában (PDT), vörös és kék fény segítségével, in vitro besugárzással, két típusú emberi sejtvonalon (HaCaT és A431)³.

Kulcsszavak: fenotiazinil-porfirinek, PDT, fotoszenszibilizátor

¹ K.M.Kadish, K.M. Smith, R. Guilard, Handbook of porphyrin science, vols. 1-20. Academic Press; 2000

² Z. Huang, *Tech. Can. Res. Treat.* **2005**; 4(3):283-93

³ E. Gal, B. Brem, I. Pereteanu, L. Gaina, T. Lovasz, M. Perde-Schrepler, L. Silaghi-Dumitrescu, C. Cristea, L. Silaghi-Dumitrescu *Dyes and Pigments*, **2013**, 99, 144-153

Aromás magokra épített bivalens kén és szelén tartalmú szénhidrát származékok szintézise és szerkezetvizsgálata

Syntheses and NMR Studies of Bivalent S and Se Containing Carbohydrate Derivatives Attached to Aromatic Scaffolds

Dr. ILLYÉS Tünde Zita¹ egyetemi tanársegéd, VARGA Viktória¹ egyetemi hallgató,
BAKOS Gabriella² egyetemi hallgató, Dr. E. KÖVÉR Katalin³ egyetemi tanár,
Dr. SZILÁGYI László¹ professzor emeritus

¹Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Szerves Kémiai Tanszék,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1, fax: +36-52-512-744

²Budapesti Műszaki Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3-9

³Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
4032 Debrecen, Egyetem tér 1, fax: +36-52-518-660
illyes.tunde@science.unideb.hu

ABSTRACT

Di-(bromo-methylene)benzene and -naphthalene derivatives substituted in various positions were reacted with per-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl-isothio(seleno)uronium bromides to give disubstituted aromatic glycosyl-sulfides and selenides. Aromatic naphthalene 1,4- és 1,5- bis-methane thiosulfonates furnished aryl-methylene-glycosyl disulfides under mild conditions. The structure of the new derivatives are being investigated using 1D/2D homo- and heteronuclear NMR techniques.

Keywords: Financial support from OTKA NN 109671 and OTKA K 105459 is gratefully acknowledged.

ÖSSZEFOGLALÓ

Különböző helyzetekben szubsztituált di-(bróm-metilén)-benzol és -naftalin származékokat per-O-acetil- β -D-glikopiranozil-izotio(szeleno)urónium bromidokkal reagáltatva enyhe körülmények között aromás diszubsztituált glikozil-szulfidokat és szelenideket állítunk elő. Az aromás naftalin 1,4- és 1,5- bisz-metántiosulfonátok aril-metilén-glikozil diszulfidokat eredményeznek. Az új származékok szerkezetét 1D/2D homo- és heteronukleáris NMR módszerekkel vizsgáljuk.

Kulcsszavak: Izotio(szeleno)urónium só, glikozil-szulfid, glikozil-szelenid, glikozil-diszulfid, NMR

A kutatást az OTKA NN 109671 és az OTKA K 105459 támogatta.

Szénhidrát alapú koronaéterek szintézise és alkalmazása

Synthesis and Application of Sugar-based Crown Ethers

Dr. RAPI Zsolt^{*1}, Dr. BAKÓ Péter¹, BOTYÁNSZKI Adrienn¹, DÉMUTH Balázs¹,
NEMCSOK Tamás¹, SÓTI Péter¹, SZABÓ Tamás¹, VIGH Tamás¹

¹:BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, H-1111 Budapest, Budafoki u. 8.

^{*}:Tel: +00 36 463 2194, zsrapi@mail.bme.hu

ABSTRACT

For several years, the synthesis and investigation of carbohydrate-based chiral crown ethers have been an interesting topic at the Department of Organic Chemistry and Technology (BUTE). Monoaza-15-crown-5-type lariat ethers were synthesized starting for the appropriate monosaccharides (e.g. D-glucose, D-galactose, etc.). D-Glucose was transformed into different monosaccharides (e.g. 2-deoxyribohexopyranoside), and lariat macrocycles containing nitrogen atom were prepared from them. Sugar alcohols were also used (e.g. L-threitol) in the synthesis of crown ethers. Macrocycles synthesized in our group were applied as chiral phase transfer catalysts in asymmetric reactions (Darzens condensation, Michael addition, etc.) and good enantioselectivities were measured (up to 99% ee).

ÖSSZEFOGLALÓ

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén több éve foglalkozunk szénhidrát alapú királis koronaéterek előállításával és ezek tulajdonságait királis fázistranszfer katalizátorként aszimmetrikus szintézisekben vizsgáljuk. A megfelelő monoszacharidokból (pl. D-glükóz, D-galaktóz stb.) kiindulva monoaza-15-korona-5 típusú lariat étereket állítottunk elő. A D-glükózt más konfigurációjú monoszacharidokká (pl. 2-deoxiribohexopiranozid) alakítva szintén nitrogéntartalmú lariat makrociklusokat nyertünk. A koronaéterek szintézisére cukoralkoholokat is felhasználtunk (pl. L-treitol). Az előállított koronaétereket királis fázistranszfer katalizátorként alkalmaztuk számos aszimmetrikus reakcióban, (Darzens-kondenzáció, Michael-addíció, stb). A keletkezett termékek jó enantiomerfelesleggel képződtek, több esetben 99% ee értékeket is mértünk.

Kulcsszavak: enantioszelektív szintézis, királis koronaéter, fázistranszfer katalízis, szénhidrátok, enantiomerek

Új vegyes azid tartalmú Co-komplexek glioximokkal

New Mixed Azide Containing Co-complexes with Glyoximes

ifj. Dr. VÁRHELYI Csaba¹, Dr. POKOL György², Dr. GÖMÖRY Ágnes³,
Dr. SZILÁGYI Imre², Dr. GOGA Firtuța¹, NAGY Renáta-Ildikó¹

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia Kar, 400 028-Kolozsvár, Arany János u. 11,
vcaba@chem.ubbcluj.ro, firutagoga@yahoo.com, nagy_reni89@yahoo.com

²Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111-Budapest, Szt. Gellért tér 4,
pokol@mail.bme.hu, imre.szilagyi@mail.bme.hu

³MTA Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2,
gomory.agnes@ttk.mta.hu

ABSTRACT

New mixed azide containing Co-glyoximato-complexes, $[\text{Co}(\text{GlyoxH})_2\text{N}_3\text{L}]$ (GlyoxH₂: benzyl-methyl-glioxime, ethyl-methyl-glioxime, methyl-i-propyl-glioxime, phenyl-glioxime; L: 2-amino-pyrimidine, 3-HO-aniline, 4-Et-aniline, t-Bu-amine, 2-naphthyl-amine) have been synthesized by reaction of the components, dissolved in ethanol or water, at room temperature. The oxidation of Co^{II} to Co^{III} was realized by air bubbling.

After a short historical survey and a classification, the new synthesized cobalt-complexes were described. The physico-chemical properties of these compounds were studied by FTIR, UV-VIS, XRD spectroscopy, mass spectrometry and thermoanalytical methods (TG, DTA, DTG).

Some Co-glyoximato-complexes present antibacterial activity. The skeleton of the B₁₂-vitamine molecule, which is used in the treatment of pernicious anemia, is also a Co(III)-glyoxime group. It is noteworthy that such substances can be useful in the field of medicine. The cobalt complexes are also used in analytical chemistry, they are catalysts in hydrogen preparation from water.

The authors also studied the biological activity, the antimicrobial effect of the prepared complexes.

ÖSSZEFOGLALÓ

Új vegyes azid tartalmú kobalt-glioximát komplexek, $[\text{Co}(\text{GlioxH})_2\text{N}_3\text{L}]$ (GlioxH₂: benzil-metil-glioxim, etil-metil-glioxim, metil-i-propil-glioxim, fenil-glioxim; L: 2-amino-pirimidin, 3-HO-anilin, 4-Et-anilin, t-Bu-amin, 2-naftil-amin) szintézise valósult meg a komponensek etanolban vagy vízben való oldásával, és szobahőmérsékleten való reagáltatásával. A Co^{II} oxidációja Co^{III}-ra levegő buborékoltatásával történt.

Rövid történelmi áttekintés és osztályozás után, a szerzők az előállított kobalt-komplexek kémiai sajátosságait, szerkezetét vizsgálják, FTIR, UV-VIS, XRD spektroszkópiái, valamint termoanalitikai (TG, DTA, DTG) és tömegspektrometriai módszerekkel.

A kobalt(III)-komplexek biológiai szerepe jelentős, mert a vészes vérszegénység elleni küzdelemben a B₁₂-vitamint is használják, melynek molekulaváza Co(III)-glioxim-csoportot tartalmaz. Ezen kívül antimikrobás szerek, az analitikai kémiában használatosak, katalizátorok a hidrogén vízből való előállításánál.

A szerzők úgyszintén tanulmányozták az előállított komplexek biológiai aktivitását, antimikrobás hatását.

Kulcsszavak: α-dioximok, glioximok, azometinek, Co-komplexek, termikus bontás, spektroszkópiái vizsgálatok, biológiai aktivitás

Az EGTA-BBA ligandum néhány fémiionnal kialakuló komplexének koordinációs kémiai vizsgálata

Physicochemical Investigation of EGTA-BBA Complexes Formed with Several Metal Ions

FARKAS Edit, GARDA Zoltán, Dr. KÁLMÁN Ferenc Krisztián,
Dr. TÓTH Imre és Dr. TIRCSÓ Gyula

Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
Tel.: +36-52-512-900/22374, Fax: +36-52-518-660, e-mail: farkasedit1989@gmail.com

ABSTRACT

The Mg(II), Ca(II), Cu(II), Zn(II) and Gd(III) complexes of a newly synthesized EGTA analogue ligand, EGTA-BBA, were investigated in detail in order to characterize their equilibrium, kinetic and relaxometric properties. The EGTA-BBA is a model compound that can be used modelling the in vivo behaviour of the so called „Ca-sensitive” MRI contrast agents. Our results indicate that the formation of the Ca(II) complex is quantitative at physiological pH while the existence of the Mg(II) complex is not detectable, which means that the modification of the ligand structure does not result in lowering its selectivity towards Ca²⁺-ion.

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy újonnan szintetizált EGTA analóg ligandum az EGTA-BBA Mg(II)-, Ca(II)-, Cu(II)-, Zn(II)- és Gd(III)-ionokkal képződő komplexeinek egyensúlyi, kinetikai és relaxációs tulajdonságait tanulmányoztuk. Az EGTA-BBA ligandum egy modell vegyület, amely alkalmas az irodalomban leírt Ca-szenzitív MRI kontrasztanyagok in vivo viselkedésének vizsgálatára. Az eredményeink alapján az EGTA-BBA ligandum 100%-ban képes megkötni a Ca(II)-ionokat fiziológiás pH-n, míg a Mg(II)-ionnal gyakorlatilag nem tapasztalható komplexképződés, azaz a komplexképző szerkezetének módosítása nem rontotta el a ligandum Ca(II)-ionnal szemben mutatott szelektivitását.

Kulcsszavak: MRI, Ca-szenzitív kontrasztanyag, relaxivitás, stabilitás, inertség

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. Vizsgálatainkat az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA K-84291 és K-109029 sz. pályázatok) szintén támogatta.

Vegyesligandumú Tl(III)-komplexek egyensúlyi és kinetikai vizsgálata

Equilibrium and Kinetic Study of Mixed-ligand Tl(III) Complexes

FODOR Tamás¹, ROZINKA Felícia¹, Dr. Carlos PLATAS-IGLESIAS², ZÉKÁNY László¹,
Dr. BÉNYEI Attila³, Dr. PURGEL Mihály⁴, Dr. KÁLMÁN Ferenc Krisztián¹,
Dr. TIRCSÓ Gyula¹, Dr. TÓTH Imre¹

Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, ¹Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék,
³Fizikai-Kémiai Tanszék és ⁴MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1, Magyarország, Tel.: +36-52-512-900/22572,
Email: fodor.tamas@science.unideb.hu

²Universidade da Coruña, Departamento de Química Fundamental,
Campus da Zapateira-Rúa da Fraga 10, 15008 A Coruña, Spanyolország

ABSTRACT

Our aim was to study the thermodynamic stability, solution structure, formation and dissociation kinetics of iodido-Tl(III)-polyamino-polycarboxylate mixed ligand complexes, which may be used as in vivo carriers for various isotopes of iodine. Based on equilibrium and kinetic data obtained for [Tl(edta)]⁻ and [Tl(DOTA)]⁻ (DOTA = 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetraacetate), the Tl(III)-complexes of DOTA-derivative ligands with fewer donor groups (cisDO2A, transDO2A and DO3A) and an open-chain edta-derivative ligand (L_c) were studied with potentiometry, ¹H-, ¹³C- and ²⁰⁵Tl-NMR and UV-spectrophotometry.

ÖSSZEFOGLALÓ

Célunk, a jodido-Tl(III)-poliamino-polikarboxilát vegyesligandumú komplexek stabilitásának, oldatbeli szerkezetének, képződés- és bomláskinetikájának vizsgálata volt. Ezek a komplexek különböző jódizotópok in vivo hordozóiként működhetnek. A [Tl(edta)]⁻ és [Tl(DOTA)]⁻ (DOTA = 1,4,7,10-tetraazacyclododekán-1,4,7,10-tetraacetát) egyensúlyi és kinetikai adatai alapján, DOTA-ból származtatható, kevesebb donorcsoporttal rendelkező ligandumok (cisDO2A, transDO2A és DO3A) és egy nyíltláncú edta-származék (L_c) Tl(III)-komplexeit vizsgáltuk potenciometriával, ¹H-, ¹³C- és ²⁰⁵Tl-NMR-el és UV-spektrofotometriával.

Kulcsszavak: formation and dissociation kinetics, mixed-ligand complexes, anion-binding, equilibrium / képződési és bomláskinetika, vegyesligandumú komplexek, anion-megkötés, egyensúly.

Köszönetnyilvánítás: a kutatás az Országos Tudományos Kutatási Alprogramok (OTKA K-84291 és K-109029) a Magyar Tudományos Akadémia (Bolyai János Kutatói Ösztöndíj) és a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Két pikolinátcsoportot tartalmazó ciklén-származékok Mn²⁺-, Cu²⁺- és Gd³⁺-komplexei: egyensúly és kinetika

Equilibrium and Kinetic Characterization of the Mn²⁺-, Cu²⁺- and Gd³⁺-complexes Formed with Two Cyclen Dipicolinates

GARDA Zoltán^a, RUSCSÁK Erika^a, Dr. RODRÍGUEZ Aurora^b,
Prof. PLATAS-IGLESIAS Carlos^b, Prof. TÓTH Imre^a és Dr. TIRCSÓ Gyula^a

^a Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
4032 Debrecen, Egyetem tér 1, Magyarország,

Tel.: +36-52-512-900/22374, Fax.: +36-52-518-660, e-mail: garda.zoltan@science.unideb.hu

^b Departamento de Química Fundamental, Universidade da Coruña, Rúa da Fraga 10,
15008, A Coruña, Spain. Fax: +34 981 167 065

ABSTRACT

Magnetic resonance imaging (MRI) is known to have high resolution, however the sensitivity of this method is lower than that of other diagnostic techniques (PET, optical imaging). This problem may be addressed by the combination of methods, requiring synthesis and analysis of new complexing agents. Ligands containing pyridine groups „inserted” into the macrocycle (pyclen) or attached as a pendant arm (picolinate moiety) are quite interesting in this regard. In the present study we have investigated the equilibrium, kinetic and relaxometric properties of two ligands containing two picolinate pendant arms (DODPA and Me2DODPA). The stability constants of Mn²⁺, Gd³⁺ and Cu²⁺ complexes of DODPA and Me2DODPA are practically the same. On the other hand, the rate constants of acid catalyzed dissociation are depend on the size of the metal ion. For instance, for the larger Gd(III) ion its complex formed with the Me2DODPA ligand dissociates more slowly, while in case of Mn(II)-complexes, the [Mn(dodpa)]⁺ complex is more inert.

ÖSSZEFOGLALÓ

A mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) köztudottan jó felbontással rendelkezik, de a módszer érzékenysége elmarad a többi diagnosztikai módszer érzékenységétől (pl. PET, optikai képalkotás, stb.). Ez a hiányosság a módszerek kombinálásával orvosolható lehet, de ez új komplexképzők előállítását és vizsgálatát igényli. Ilyen tekintetben a makrociklusba (pl. piklén) vagy az oldalláncba (pl. pikolinátcsoport) „illesztett” piridincsoportot tartalmazó komplexképzők különösen érdekesek. A jelen munkánk két olyan ligandum (DODPA és a Me2DODPA) komplexei egyensúlyi, kinetikai, és relaxációs tulajdonságait foglalja össze, amely oldalláncban két pikolinátcsoportot tartalmaznak. A DODPA és a Me2DODPA ligandumok komplexeinek stabilitása gyakorlatilag megegyezik a vizsgált Mn²⁺-, Gd³⁺- és a Cu²⁺-komplexeik esetében. Ugyanakkor a komplexek savkatalizált disszociációjára jellemző sebességi állandók alapján megállapítható, hogy a fémionok mérete hatással van a komplexek disszociációjának sebességére. Így pl. a nagyobb méretű Gd(III)-ion esetében a [Gd(Me2dodpa)]⁺-komplex disszociációja bizonyult lassabbnak, míg a Mn(II)-komplexeik esetében a [Mn(dodpa)]⁺-t találtuk inertebbnek.

Kulcsszavak: diagnosztikai eljárások, kontrasztanyagok, komplexek, oldategyensúly, bomláskinetika

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. Vizsgálatainkat az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok OTKA K-84291 és K-109029 sz. pályázatok támogatásával végeztük.

Triptofánszármazékok reakciója peroxomonoszulfát ionnal: kinetika és mechanizmus

Reaction Between Tryptophan Derivatives and Peroxomonosulfate Ion: Kinetics and Mechanism

Melinda GOMBÁR¹, Dr. Gábor LENTE¹, Prof. István BÁNYAI²,
Dr. Attila KISS³, Prof. István FÁBIÁN¹

¹Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Debrecen, Hungary;

²Department of Colloid and Environmental Chemistry, Debrecen, Hungary

³Department of Organic Chemistry Debrecen, Hungary

ABSTRACT

The biooxidation of amino acid tryptophan (W) has attracted wide interest, because it generates several metabolites, which are clinically relevant substances [1]. To simulate the oxidation of W with oxidants in living systems, peroxomonosulfate ion can give important details.

The main objective was to study the kinetics and mechanism of these reactions. All examined reaction showed several overlapping consecutive steps. Spectrophotometric measurements were carried out to determine the rate constants and to characterize the stoichiometry. NMR and LC-MS measurements were performed to identify the initially formed intermediates in the reaction between L-tryptophan and peroxomonosulfate ion. This reaction showed a behavior similar to that observed earlier in the tryptophan oxidation with heme dioxygenases [2].

ÖSSZEFOGLALÓ

A triptofán oxidációja során számos, a szerkezet számára fontos metabolit képződik. A szerkezetben történő biooxidációjának modellezésére peroxomonoszulfát-ion alkalmaztunk.

A kutatás célja a triptofánszármazékok és peroxomonoszulfát-ion közötti reakció kinetikájának és mechanizmusának vizsgálata, a sebességi állandók meghatározása, a sebességi egyenlet megadása. A vizsgált reakciók mindegyike sorozatos, egymást átfedő reakciólépésekben játszódtak le. Az L-triptofán és peroxomonoszulfát-ion közötti reakció első lépésében képződő közttermékeket azonosítottuk. Ez a reakció hasonló viselkedést mutatott a korábban Basran és mts. által vizsgált reakcióhoz, amely az L-triptofán hem oxigenáz által katalizált oxidációja [2].

Kulcsszavak: triptofán, peroxomonoszulfát, oxidáció, kinetika, mechanizmus

[1] J. Basran et al., J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133, 16251-16257.

[2] Graziella E. et al., Chem. Res. Toxicol. **2008**, 21, 1271-1283.

Acknowledgement: The research was supported by the EU and co-financed by the European Social Fund under the project ENVIKUT (TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043) and Hungarian Scientific Research Fund: OTKA NK 105156

Transz-DO2A származék ligandumok előállítása és Mn²⁺-komplexeik egyensúlyi és kinetikai jellemzése

Synthesis, Equilibrium and Kinetic Properties of the Mn²⁺ Complexes Formed with Trans-DO2A Derivative Ligands

NAGY Viktória, GARDA Zoltán^a, Prof. PLATAS-IGLESIAS Carlos^b,
Prof. TÓTH Imre^a és Dr. TIRCSÓ Gyula^a

^a Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar,
Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
4032 Debrecen, Egyetem tér 1, Magyarország,

Tel.: +36-52-512-900/22374, Fax.: +36-52-518-660, e-mail: nagy.viktoria@science.unideb.hu

^b Departamento de Química Fundamental, Universidade da Coruña,
Rúa da Fraga 10, 15008, A Coruña, Spain.
Fax: +34 981 167 065

ABSTRACT

The contrast agents (CA's) applied in Magnetic Resonance Imaging (MRI) are almost exclusively Gd³⁺ complexes, which in patients with severe renal failure might associated with the disease called Nephrogenic Systemic Fibrosis (NSF). NSF has spurred the design and research of CA candidates which are better tolerated in vivo (CA's based on Mn²⁺ or Fe²⁺ as biogenic metal ions). With an aim to find the best ligand candidate for the Mn²⁺ ion complexation (that would form highly stable and inert complex with Mn²⁺ ion endowed with good relaxation properties) two 1,4,7,10-tetraazacyclododecane derivatives incorporating the acetate pendants in trans position to each other, but being considerably more rigid (PC2A) or containing ether-oxygen atoms (O2DO2A) in the macrocycle have been synthesized and studied. These structural changes made to the parent trans-DO2A ligand result in formation of monoaquated Mn²⁺ complexes with acceptable relaxation parameters, stability and kinetic inertness.

ÖSSZEFOGLALÓ

Mágneses Rezonanciás Képképzés (MRI) jelenleg piacvezető kontrasztanyagok gadolínium(III) alapúak, de a veseelégtelenségben szenvedő betegeknél detektált Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF) betegség a biogén (szervezet közeli) fémiont (pl. Mn²⁺, Fe²⁺, stb). tartalmazó jelöltek kutatása felé mozdította a kutatókat. A Mn²⁺-ion komplexálására leginkább alkalmas komplexképző (azaz stabil és inert, ill. jó relaxációs hatással is bír) kifejlesztésén dolgozva két olyan 1,4,7,10-tetraazacyclododekán származékot vizsgáltunk, amelyekben az acetát karok transz helyzetűek, de vagy merev szerkezetűek (PC2A), vagy a gyűrűben oxigén donatoratomokat (O2DO2A) tartalmaznak. A transz-DO2A alapvegyületen végrehajtott ilyen szerkezeti változtatásokkal sikerült olyan Mn²⁺-komplexeiket előállítani, amelyek a tartalmaznak koordinált vízmolekulát (ezáltal kielégítőek a relaxációs paramétereik), emellett elfogadható stabilitással és kinetikai inertséggel is rendelkeznek.

Kulcsszavak: ligandum szerkezetének hangolása, Mn²⁺-komplexeik, oldategyensúly, kinetikai jellemzők, koordinált vízmolekulák

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. Vizsgálatainkat az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok OTKA K-84291 és K-109029 sz. pályázatok szintén támogatták.

Két új triazaciklononán származék rézkomplexeinek egyensúlyi és kinetikai sajátságai

Equilibrium and Kinetic Properties of Cu(II)-complexes Formed with Two New Triazacyclononane Derivatives

VÁGNER Adrienn¹, HORVÁTH Dávid¹, Dr. NOTNI Johannes²,
Prof. BRÜCHER Ernő¹, Dr. TÓTH Imre¹, Dr. BARANYAI Zsolt¹

¹ Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Debrecen, Egyetem tér 1, H-4032,

² Radiopharmaceutical Chemistry, Technische Universität München,

Walther-Meissner-Str. 3, 85748 Garching, Germany

e-mail: adrienn.vagner90@gmail.com

ABSTRACT

Nowadays one of the most sensitive imaging modality is Positron Emission Tomography (PET). Among the β^+ -emitting radiometals, ^{68}Ga [89% β^+ ; $\tau_{1/2} = 67.7$ min] and ^{64}Cu [61% β^+ ; $\tau_{1/2} = 12.7$ h] are the most promising radionuclides, therefore the chemistry and clinical use of their complexes is under intense scrutiny.¹ The 1,4,7-triazacyclononane-1,4,7-triphosphinic acid (TRAP) derivatives are reported to be efficient Ga^{3+} chelators.² Herein we summarize a detailed investigation on the equilibrium and kinetic behaviour of Cu(II)-complexes formed with two TRAP derivatives, functionalized with propionic acid- (TRAP-Pr) and cyclohexyl-propionamide (TRAP-Cy) pendant arms. Our equilibrium studies indicate that the two TRAP derivatives have high selectivity for Cu^{2+} -ion over the endogenous Ca^{2+} and Zn^{2+} -ions. The kinetic inertness of Cu(TRAP-Pr) and Cu(TRAP-Cy) has been determined by monitoring the ligand exchange reactions with EDTA and NOTA by UV/Vis spectrometry. The ligand exchange reactions of Cu(TRAP-Pr) and Cu(TRAP-Cy) take place very slowly via spontaneous and proton-assisted dissociation of Cu(II)-complexes.

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjaink egyik legérzékenyebb orvosi képalkotó módszere a Pozitron Emissziós Tomográfia (PET). A β^+ -sugárzó izotópok közül a ^{68}Ga [89% β^+ ; $\tau_{1/2} = 67.7$ perc] és a ^{64}Cu [61% β^+ ; $\tau_{1/2} = 12.7$ óra] rendkívül előnyös radiokémiai sajátosságokkal rendelkeznek, ezért intenzív kutatások folynak komplexeik klinikai vizsgálatokban történő felhasználására.¹ Az 1,4,7-triazaciklononán-1,4,7-trifoszfínát (TRAP) származékok hatékony Ga^{3+} komplexképzőknek bizonyultak.² Munkánk során vizsgáltuk két TRAP származék, a propionsav (TRAP-Pr) és a ciklohexil-propionamid (TRAP-Cy) oldalláncokat tartalmazó ligandumok egyensúlyi és kinetikai sajátságait. Az egyensúlyi vizsgálatok alapján megállapítható, hogy mindkét ligandum lényegesen stabilisabb komplexeket képez Cu^{2+} -el, mint az endogén Ca^{2+} - és Zn^{2+} -ionnal. A Cu(TRAP-Pr) és Cu(TRAP-Cy) kinetikai inertségét EDTA és NOTA ligandummal lejátszódó cserereakcióin keresztül UV/VIS spektrofotometriás módszerrel tanulmányoztuk. A Cu(TRAP-Pr) és Cu(TRAP-Cy) ligandumcsere reakciói rendkívül lassan, a komplexek spontán és savkatalizált disszociációval játszódnak le.

Kulcsszavak: réz, egyensúly, kinetika, mechanizmus, termodinamika

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. Avizsgálatainkat az Országos Tudományos Kutatási Alap (OTKA K109029) szintén támogatta.

Irodalomjegyzék:

- ¹ T. J. Wadas, E. H. Wong, G. R. Weisman, C. J. Anderson, *Chem. Rev.* 2010, 110, 2858–2902.
- ² J. Notni, P. Hermann, J. Havliczkova, J. Kotek, V. Kubicek, J. Plutnar, N. Loktinova, P. J. Riss, F. Rösch, I. Lukes, *Chem. Eur. J.* 2010, 16, 7174–7185.

Növény növekedést serkentő baktériumtörzsek tenyésztési körülményeinek meghatározása

Determination of the Cultivation Conditions of Plant Growth Promoting Bacteria

ABOD Éva, MARA Gyöngyvér, LÁNYI Szabolcs

Sapientia University, Faculty of Technical and Social Sciences, 530104 Miercurea Ciuc, Szabadság
Square, 1., Harghita County, Tel./Fax.: +40266317121/+40266372099, e-mail:
tamaseva@sapientia.siculorum.ro, honlap: mttk.csik.sapientia.ro

ABSTRACT

The main aim of our study is the development of bacterial biopreparates based on organic matter mobilizing microorganisms. In the course of our work the cultivation conditions of the five selected bacterial strains (*Pseudomonas protegens* 3BS, *P. Jessenii* 17BS, *Stenotrophomonas rhizophylia* B21, *Acinetobacter jonsonii* R16 and *S. maltophylia* AS14SGY2) were determined, as the nutrient content of the media, pH, temperature, aeration, the effect of stirring and the amount of inoculum used.

Keywords: bacterial biopreparates, organic matter mobilization, cultivation condition

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk fő célja szerves anyag lebontó mikroorganizmusokon alapuló bakteriális biopreparátumok kifejlesztése. Munkánk során az öt kiválasztott baktériumtörzset (*Pseudomonas protegens* 3BS, *P. Jessenii* 17BS, *Stenotrophomonas rhizophylia* B21, *Acinetobacter jonsonii* R16 and *S. Maltophylia* AS14SGY2) tenyésztési körülményeit határoztuk meg, mint a tápközeg összetétele, pH, hőmérséklet, levegőztetés, a keverés hatása és a használt oltóanyagmennyiség.

Kulcsszavak: bakteriális biopreparátumok, szerves anyag mobilizálás, tenyésztési körülmények

Lágyítóhatás vizsgálata térhálós poliuretán elasztomerekben

Investigation of Plasticier Effect in Crosslinked Polyurethane Elastomers

BÁNHEGYI András^{1,2}, PhD hallgató, GULYÁS Réka³, BSc hallgató,
TRUJILLO Vilaboy José², fejlesztőmérnök, KÉKI Sándor³, DSc, egyetemi tanár,
MAROSSY Kálmán, PhD^{1,2}, egyetemi tanár

¹Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar, Polimerménöki Intézeti Tanszék,
H-3515 Miskolc-Egyetemváros B1/215 Tel.: (36)-46 565-111

²BorsodChem Zrt., H-3700 Kazincbarcika Bolyai tér 1. Tel.: (36)-48 511 211

³Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Alkalmazott Kémia Tanszék,
H-4032 Debrecen, Egyetem tér 1. Tel.: (36)-52-512900/22480
E-mail: andras.banhegyi@borsodchem.eu

ABSTRACT

In our study we have compared the properties of plasticized crosslinked polyurethane elastomers (CPU). Comparing the samples with different plasticizer concentration density, Shore A hardness were carried out, moreover Dynamic Mechanical Thermal Analysis (DMA) measurements were made in wide temperature range for determination of glass transition temperature and assessing the fine structure of polyurethanes. The compatibility between the polymer and the plasticizer were examined with migration test, which is necessary, because of different applications prescribe different limits.

Keywords: polyurethane, plasticizer, cross-linked elastomer, migration, DMA

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során térhálós poliuretán elasztomerek (CPU) lágyításával foglalkoztunk, mely során a különböző lágyítók hatását illetve a különböző lágyító tartalmú minták összehasonlítását sűrűségméréssel, Shore A keménység méréssel követtük, továbbá Dinamikus Mechanikus (DMA) vizsgálatokat végeztünk az üvegesedési hőmérséklet meghatározására és a poliuretán finomszerkezetének megítélésére.

A polimer és az alkalmazott lágyítók összeférhetőségét migrációs tesztekkel is bizonyítottuk. Ezek a tesztek nem utolsó sorban a szigorodó előírások illetve az eltérő felhasználási területen megkövetelt határértékek miatt fontosak.

Kulcsszavak: poliuretán, lágyító, térhálós elasztomer, migráció, DMA

Dehalogénezés és hidratálás foszfaurotropinokat tartalmazó félzendvics Ru-komplexekkel

Dehalogenation and Hydration Reactions Catalyzed by Half-sandwich Ru-complexes Containing Phosphaurotropines

BOLYOG-NAGY Evelin¹, Dr. UDVARDY Antal¹, FORGÁCS Viktória¹,
Dr. HORVÁTH Henrietta², Prof. JOÓ Ferenc^{1,2}, Dr. KATHÓ Ágnes¹

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,

²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport,
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

tel.: (36)-52-512900, e-mail: katho.agnes@science.unideb.hu

honlap: <http://fizkem.unideb.hu>

ABSTRACT

Biphasic hydration of nitriles and hydrodehalogenation of halogenated organic compounds are catalyzed by [(p-cymene)RuCl₂L] complexes (L = 1,3,5-triaza-7- phosphaadamantane and its N-benzyl derivative). The catalytic activity is enhanced by addition of excess phosphine to the aqueous media.

ÖSSZEFOGLALÓ

Nitrilek hidratálását és halogénezett szerves vegyületek hidrodhalogénezését katalizálják a vízdoldható [(p-cymene)RuCl₂L] komplexek (L = 1,3,5-triaza-7- phosphaadamantán és annak N-benzil származéka). A kétfázisú rendszerek vizes közegéhez foszfint adagolva a katalitikus aktivitás fokozható.

Kulcsszavak: halogénezett vegyületek, hidratálás, hidrodhalogénezés, homogén katalízis, nitril

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt és a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Cink réteggel bevont acél hordozó oxidációval szembeni ellenállásának növelése szol-gél szilika bevonatok által

Improvement in the Oxidation Resistance of Zinc Coated Steel Substrates by Sol-gel Derived Silica Coatings

Nicoleta COTOLAN¹, Emőke ALBERT², Gabriella SZABÓ¹,
Zoltán HÓRVÖLGYI², Liana-Maria MUREȘAN¹

¹Babeș-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
400028 Cluj-Napoca, str. Arany János nr.11, Romania

²Budapest University of Technology and Economics, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology,
Department of Physical Chemistry and Materials Science, Centre for Colloid Chemistry,
H-1521 Budapest, Budafoki út 6-8, Hungary

ABSTRACT

The present work is focused on the preparation and characterization of new types of environmentally friendly compact and mesoporous sol-gel coatings for corrosion protection of electrolytically or thermally obtained zinc coatings on steel substrates. Mesoporous silica layers were prepared by dip-coating method, by using cationic or non-ionic surfactant (CTAB, Pluronic) templates and some of them were loaded with an effective corrosion inhibitor (1H-benzotriazole, BTA). Some other layers were rendered hydrophobic by silylation. Corrosion tests were carried for the sol-gel modified electrolytic and thermally obtained Zn coatings. The best improvement was obtained with silylation of the different layers independently of their type.

Keywords: sol-gel coatings, mesoporous coatings, corrosion inhibitor, silylation.

ÖSSZEFOGLALÓ

A jelen dolgozat elektrolitikus vagy termikus úton, acél hordozón kialakított cink felületek korrózió védelmére létrehozott új típusú, környezetbarát kompakt és mezopórusos szol-gél bevonatok készítéséről és jellemzéséről számol be. A mezopórusos szilika rétegek kationos és nemionos (CTAB, Pluronic) templátok felhasználásával, mártásos módszerrel készültek, és a minták egy részébe korrózió inhibitor (1H-benzotriazole, BTA) is inkubáltunk. A minták egy részét szililezéssel hidrofobizáltunk. A korróziós mérések során összehasonlítottuk az elektrolitikus és a termikus módszerrel nyert cink bevonatok korrózió ellenes hatását. Megfigyelhető, hogy a legjobb eredmény a rétegek hidrofobizálásával érhető el függetlenül ezek típusától.

Kulcsszavak: szol-gél bevonatok, mezopórusos rétegek, korrózió inhibitor, szililezés

Köszönetnyilvánítás: A munkát a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség (magyar-román bilaterális együttműködés, SOLGELCOR, TÉT_12_RO-1-2013-0011, 664/2013) támogatta.

A mátrix effektus kiküszöbölése antipszichotikumok tejből való meghatározása esetében

Elimination of Matrix Effect in Case of Antipsychotics' Determination from Milk Samples

DONÁTH-NAGY Gabriella, VANCEA Szende, ŐSZ Bianca, FAZAKAS Emőke

University of Medicine and Pharmacy of Tg. Mureş, Faculty of Pharmacy, Department of Physical Chemistry, Tg. Mureş, 540139, Gh. Marinescu str. 38, tel. 0265 215551

e-mail address: gdonath2003@yahoo.com

ABSTRACT

The antidepressive and antipsychotic drugs like fluoxetine, norfluoxetine, olanzapine, risperidone and citalopram are the most commonly used in the therapy of depression and psychosis. In case of their determination from milk samples the matrix effect occurs very often. The aim of our work was the elimination of matrix effect by the most commonly used methods, like modifying the composition of mobile phase, modifying the injected volume, use of internal standard, optimizing the sample preparation, dilution, modification of pH, liquid-liquid extraction, protein precipitation.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az antipszichotikumok és antidepresszánsok, közülük is a fluoxetin, norfluoxetin, olanzapin, risperidon és citaloprárnak a depresszió és pszichózis terápiájában leggyakrabban használt szerek közé tartoznak. Tejből való meghatározásukkor gyakran jelentkezik a mátrix effektus. Munkánk célja a fellépő mátrix effektus kiküszöbölése a leggyakrabban használt módszerek segítségével, mint pl. a mozgófázis összetételének változtatása, az injektált térfogat változtatása, belső standard használata, a mintaelőkészítés optimalizálása, hígítások, pH változtatás, folyadék-folyadék extrakció, fehérje kicsapás.

Kulcsszavak: antipszichotikumok, LC-MS/MS, mátrix effektus

Iridium(I)-NHC komplexek katalitikus alkalmazása

Catalytic Application of Iridium(I)-NHC Complexes

ERDEI Anikó¹, Dr. HORVÁTH Henrietta², MAROZSÁN Natália¹, Dr. PAPP Gábor²,
Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}

¹Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék

²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport
Debreceni Egyetem, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Telefon: (52) 512900, e-mail: erdei.aniko@science.unideb.hu
honlap: <http://fizkem.unideb.hu/>

ABSTRACT

Most synthetic pharmaceutical agents can be found in racemic mixtures, thus their transformation to enantiopure products is important. Dynamic kinetic resolution (DKR) offers new pathways for the production of enantioriched substances with high yields and selectivities. The aim of our work was to explore the catalytic activity of Ir-N-heterocyclic complexes in the racemization of secondary alcohols. This Ir(I) complex is catalytically active in hydrogen transfer reactions, too.

ÖSSZEFOGLALÓ

A legtöbb szintetikus gyógyszer hatóanyag valamilyen racém formában található meg, ezért fontos az átalakításuk enantiotiszta termékké. A dinamikus kinetikus rezolválás (DKR) révén az eredeti racém elegy nagy konverzióval és királis hatékonysággal a kívánt enantiotiszta vegyületté alakítható. Ezen folyamatok megvalósítására Ir(I)-N-heterociklusos karbén komplexeket alkalmaztunk. Emellett a vizsgált katalizátor jó aktivitást mutatott hidrogén transzfer reakciókban is.

Kulcsszavak: racemizáció, dinamikus kinetikus rezolválás, irídium-N-heterociklusos karbén komplex, hidrogén transzfer reakció, vízdoldható ligandum

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Ón kinyerése hulladék nyomtatott áramköri lemezek feldolgozásakor keletkezett másodlagos anyagáramokból

Recovery of Tin from Secondary Streams Obtained in the Processing of Waste Printed Circuit Boards

Dr. FOGARASI Szabolcs¹ tanársegéd, Dr. IMRE-LUCACI Florica²,
Dr. IMRE-LUCACI Árpád¹ docens, Dr. ILEA Petru¹ egyetemi tanár

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Vegyészmérnöki Intézet, Kolozsvár
Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818
web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: aimre@chem.ubbcluj.ro

² Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár
Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906
web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: fimre@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

The recovery of tin was achieved through direct anodic dissolution coupled with the simultaneous electrowinning of tin at the cathode using a compartmented electrochemical cell. The structure and morphology of the obtained tin deposits were characterized using SEM and EDAX measurements. The optimal operating conditions were identified based on the influence of current density and electrolyte composition on the main technical performance indicators.

Keywords: Tin recovery, waste printed circuit boards, anodic dissolution, electrowinning, secondary stream

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásaink során ónt állítottunk elő hulladék nyomtatott áramköri lemezek feldolgozásakor keletkezett másodlagos anyagáramokból közvetett anódikus kioldás valamint elektrolitikus ónleválasztás segítségével. Az előállított ón réteget szerkezetileg és morfológiailag jellemeztük SEM valamint EDAX segítségével. Az optimális működési körülményeket a főbb műszaki teljesítménymutatók áramsűrűség és elektrolit összetétel függősége alapján identifikáltuk.

Kulcsszavak: Ón kinyerés, hulladék nyomtatott áramköri lemezek, anódikus kioldás, elektrolitikus fémleválasztás, másodlagos anyagáram

Hg, As és Sb optikai emissziós spektrometriás eljárással történő meghatározásának teljesítményjellemzői, kapacitívan csatolt mikrofáklyás plazmát alkalmazva

Figures of Merit in the Hg, As and Sb Determination using Capacitively Coupled Plasma Microtorch Optical Emission Spectrometry

FRENȚIU Tiberiu¹, DARVASI Jenő¹, CADAR Sergiu², PONTA Michaela¹

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, 400028 Kolozsvár, Arany János utca 11 szám, tel. 0264-593833, edarvasi@chem.ubbcluj.ro

²National Institute for Research and Development of Optoelectronics Bucharest, Research Institute of Analytical Instrumentation, Donath 67, 400293 Cluj-Napoca, Romania

ABSTRACT

The figures of merit in the determination of Hg, As and Sb by low power and low argon consumption capacitively coupled plasma microtorch optical emission spectrometry were determined. The mercury cold vapour was chemically generated using tin chloride solution in HCl medium and non-conventional sono-induced method in formic acid. Arsenic and antimony derivatisation to hydrides was performed with sodium borohydride in the presence of L-cysteine in diluted HCl solution. Discussion about the advantages of the methods in comparison with conventional methods is presented.

Keywords: capacitively coupled plasma, optical emission spectrometry, mercury, arsenic, antimony.

ÖSSZEFOGLALÓ

Higany, As és Sb analízisére alkalmazott kisméretű és alacsony argonfogyasztású kapacitívan csatolt mikrofáklyás plazma emissziós spektrométer analitikai teljesítményjellemzőit határoztuk meg.

A higany meghatározásnál hideggőz módszert alkalmaztunk ón-klorid felhasználásával sósavas közegben és egy nem hagyományos módszert hangyasavas közegben ultrahang indukálással. Arzén és antimon esetében a hidridfejlesztés nátrium-tetrahidroboráttal történt híg sósavas közegben L-cystein jelenlétében. Bemutattuk az alkalmazott módszerek előnyeit a hagyományos eljárásokkal szemben.

Kulcsszavak: kapacitívan csatolt plazma, emissziós spektrometria, higany, arzén, antimon.

A Taguchi módszer alkalmazása a cink klorid komplexek eltávolítására anion típusú ioncserélő gyanták segítségével

Design of Experiments for Zinc Removal as Zinc Chloride Complexes on an Anion Exchange Resin Using Taguchi Method

Emilia GÎLCĂ, Andrada MĂICĂNEANU, Petru ILEA

Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Department of Chemical Engineering, 11 Arany Janos, 400028 Cluj Napoca, Romania

ABSTRACT

Ion exchange process is used in different applications, recently to separate species from the spent hydrochloric acid. Relative high cost of exchangers requires more efficient use, therefore the need to find optimum conditions of usage are an important requirement. The present paper deals with optimization of various batch parameters for the removal of zinc chloride complexes from aqueous solutions by Amberlite IRA410 resin using Taguchi's optimization methodology. Three levels adsorption parameters such as initial zinc concentration, temperature, resin quantity, acid concentration and stirring rate were considered to investigate the influence over the adsorption capacity of zinc onto Amberlite IRA410 resin..

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban a kutatásban egyre elterjedtebb az ioncserén alapuló eljárások melyek különböző nehézfémek eltávolítására alkalmazhatóak. Az ioncserélő gyanták relatív magas költségei miatt fontos követelmény az optimális használati feltételek meghatározása, amely egy döntő faktor egy hatékonyabb ipari alkalmazásra. Jelen dolgozat a cink klorid komplexek eltávolításával és a kísérleti paraméterek optimalizálásával foglalkozik a Taguchi módszer felhasználásával Amberlite IRA 410 gyantákon. Az Amberlite IRA 410 gyanta adszorpciós kapacitása a cink kezdeti koncentrációja, hőmérséklet, gyanta mennyiség, sav koncentráció illetve a keverési sebesség függvényében volt tanulmányozva.

Acknowledgements

This work was supported by the FONDUL SOCIAL EUROPEAN, Programul Operațional Sectorial Dezvoltarea Resurselor Umane 2007 – 2013, Axa prioritară: 1 „Educația și formarea profesională în sprijinul creșterii economice și dezvoltării societății bazate pe cunoaștere” Domeniul major de intervenție: 1.5 „Programe doctorale și postdoctorale în sprijinul cercetării” Titlul proiectului: “Tineri cercetători de succes – dezvoltare profesională în context interdisciplinar și internațional” Cod Contract: POSDRU/159/1.5/S/132400

A molekuláris dokkolás tanulmányozása a rezeveratrol származékoknak az *Arachis hypogaea* sztilén szintáz kristályszerkezetén

Molecular Docking Studies of Resveratrol Derivatives on the Crystal Structure of Stilbene Synthase from *Arachis Hypogaea*

Alexandra M. HARSA, Teodora E. HARSA, and Mircea V. DIUDEA

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kémia tanszék, Arany János Utca, 11, Kolozsvár, Tel. 0264 / 59 38 33, Fax 40-264-590.81, maria_sanda_13@yahoo.com, harsa.teodoraelena@yahoo.com, diudea@chem.ubbcluj.ro, www.chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

The polyphenolic alcohol resveratrol has demonstrated promising activities for the prevention and treatment of cancer. A docking method that predicts the bound conformations of flexible ligands (resveratrol) to macromolecular (1Z1F) targets has been developed and tested, in combination with a new scoring function that estimates the free energy change upon binding.^{1,2,3} Molecular docking approach using Lamarckian Genetic Algorithm was made on classes of resveratrol.

Keywords: Rezevatrol, AUTODOCK Vina, Docking, Kötési affinitás, 1Z1F receptor

ÖSSZEFOGLALÓ

A rezeveratrol egy olyan polifenol alkohol, mely ígéretesnek bizonyul a rák megelőzésében és gyógyításában. A dokkoló módszerrel meg lehet megjósolni és tesztelni a kötések konformációját a flexibilis ligandumok (rezveratrol) és a makromolekulák (1Z1F) között, melyet kombinálva egy új pontozási funkcióval megbecsülhető a szabadenergia változása.^{1,2,3} A rezeveratrol osztályokra a molekuláris dokkolási megközelítés a Lamarcki Genetikus Algoritmus alapján történt.

¹Venturelli S et al. (2013) doi:10.1371/journal.pone.0073097

² The RCSB Protein data bank. [<http://www.rcsb.org/pdb>].

³ O. Trott, A. J. Olson, (2010), J. Comput. Chem., 31 455-461.

A molekuláris dokkolás tanulmányozása a szerotonin származékoknak az emberi PPAR gamma ligandum-kötő doménnek a indometacin és nitro-233 komplexében

Molecular Docking Studies of Serotonin Derivatives on the Human PPAR Gamma Ligand-binding Domain in Complex with Indomethacin and Nitro-233

Teodora E. HARSA, Alexandra M. HARSA, Mircea V. DIUDEA

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kémia tanszék, Arany János Utca, 11, Tel. 0264 / 59 38 33, Fax 40-264-590.81, harsa.teodoraelena@yahoo.com, maria_sanda_13@yahoo.com, diudea@chem.ubbcluj.ro, www.chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Serotonin, 5-hydroxytryptamine, is one of the class of monoamine neurotransmitters, all of which have a chemical template comprised of a basic amino group separated from an aromatic nucleus by a two carbon aliphatic chain¹. In this paper we propose an easier user-friendly docking protocol for docking serotonin with target protein (3ADX) that utilizes AutoDock for docking operations.^{2,3}

Keywords: Szerotonin, AUTODOCK Vina, Dokkolás, Kötési affinitás, 3ADX.

ÖSSZEFOGLALÓ

A szerotonin, 5-hidroxi-triptamin, a monoamino neurotransmiterek osztályába tartozik, melyek mindegyike rendelkezik egy olyan kémiai sablonnal amelyben egy aromás bázikus aminocsoport el van választva egy két szénatomos alifás láncsal.¹ A kutatásunk során tanulmányoztunk a szerotonin esetében egy felhasználó-barát AutoDock dokkolási módszert a fehérjén (3ADX).^{2,3}

¹ Brodfuehrer et al, *J. Org. Chem.*, 62, **1997**, 9192-9202.

² O. Trott, A. J. Olson, *J. of Comput. Chem.*, 31, **2010**, 455-461.

³ The RCBS Protein data bank. [<http://www.rcsb.org/pdb>].



A „pozitív gadolínium anomália” vizsgálata a debreceni városi szennyvízben induktív csatolású plazma tömeg spektrometriás módszerrel

„Positive Gadolinium Anomaly” in the Waste Water of Debrecen City Studied by ICP MS/MS Spectroscopy

Dr. JURCA Tünde¹, Dr. BRAUN Mihály², Dr. KÁLMÁN Ferencz Krisztián³, Dr. TÓTH Imre³

¹Nagyváradai Egyetem, Gyógyszerészet Tanszék,

Universitatii nr. 1, Románia, 0040722476454, jurcatunde@yahoo.com

²Magyar Tudományos Akadémia, Atommagkutató Intézet, Bem tér 18/c, Debrecen, Magyarország, 0036305794850, braun.mihaly@atomki.mta.hu

³Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Egyetem tér 1 sz., Debrecen Magyarország 0036204554383, imre.toth@science.unideb.hu

ABSTRACT

The clearance of the Gd-based MRI contrast agents from the human body happens through the kidney. This is the origin of the positive gadolinium anomaly discovered in the surface water close to the large hospitals all over the world. Our aim was to detect these phenomena in the waste water of Debrecen by inductive coupled plasma mass spectroscopy (Agilent 8800 Triple Quad) using MS/MS mode via the ¹⁵⁷Gd and ¹⁵⁸Gd isotopes.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Gd-tartalmú MRI kontrasztanyagok a vesén keresztül ürülnek ki a betegek szervezetéből. A világ nagy kórházainak közelében ez okozza a felszíni vizekben a Gd-koncentráció megnövekedését, a „pozitív gadolínium anomáliát”. Vizsgálataink során ezt a jelenséget mutattuk ki Debrecen városi szennyvizében induktív csatolású tömeg spektrometriás módszerrel (Agilent 8800 Triple Quad), MS/MS módban a ¹⁵⁷Gd és ¹⁵⁸Gd izotópok alapján.

Kulcsszavak: ICP-MS, szennyvíz, gadolínium, kontrasztanyag

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a **TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043** számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg

A savas előkezelés hatása a vörösiszap katalitikus tulajdonságaira

Influence of Acidic Treatment of Red Mud on Its Catalytic Properties

JUZSAKOVA Tatjana PhD¹, Prof. Dr. RÉDEY Ákos¹, FRÁTER Tamás PhD¹,
Dr. CSAVDARI Alexandra², KOVÁCS Zsófia¹, Dr. DIOSSY László³

¹ Pannon Egyetem, Környezetmérnöki Intézet,
8200 Veszprém, Egyetem u. 10., Tel: +3688624296,
email: yuzhakova@almos.uni-pannon.hu

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Kolozsvár, Arany János u. 11, 400028, Romania, Tel: +40264590818

³ Pannon Egyetem, Georgikon Kar Meteorológia és Vízgazdálkodás Tanszék,
8360 Keszthely, Festetics u. 7.

ABSTRACT

The purpose of catalytic (hydro)cracking is to break high molecular weight hydrocarbons into smaller fragments of suitable volatility to permit their use as fuels. Acid catalyst are usually used. Red mud contains SiO₂-MgO, Al₂O₃-SiO₂, SiO₂-ZrO₂, SiO₂-TiO₂ mixed oxide components which have acidic features and are required during the cracking step. Therefore red mud can be utilized as cracking catalyst. The untreated and treated red mud was studied. The samples were treated with sulfuric and nitric acids to reduce the pH values from 12.2 to ~3.5. The untreated dried red mud has 12.2 m²/g surface area determined by BET method. The surface area of red mud increases after acid treatment. The acidity of samples was studied using the pulse chemisorption of ammonia (NH₃) probe molecule. Also the acid treatment significantly increases the number of acid sites (Lewis and Brønsted types) on surface of red mud. NH₃ sorption and BET data are compared with red mud catalytic test on hydrocracking of hydrocarbons (n-paraffin and /or aromatics).

ÖSSZEFOGLALÓ

A katalitikus (hidro)krakkolás fő célja hogy nagy molekulatömegű szénhidrogéneket - adott illékonyágú - kisebb fragmentumokká tördeljük, motorhajtóanyag-előállítás céljából. Erre a célra rendszerint savas katalizátorokat alkalmaznak. A vörösiszap többek között olyan kevert oxidokat is tartalmaz, mint a SiO₂-MgO, Al₂O₃-SiO₂, SiO₂-ZrO₂ vagy SiO₂-TiO₂, melyek savas karakterűek, ami feltétele a krakkolási aktivitásnak. A vörösiszap alkalmazhatóságát eredeti formájában, valamint előkezelés után is vizsgáltuk. Utóbbi esetben a vörösiszapot hőkezelésnek, ill. kénsavas vagy salétromsavas előkezelésnek vetettük alá, így a pH értéke 12,2 és kb. 3,5 közötti értékre csökkent. A nem előkezelt, szárított vörösiszap fajlagos felülete 12,2 m²/g-nak adódott (BET módszer). A savas előkezelés a vörösiszap felületét minden esetben növelte. A minták savasságát pulzáló kemisorpcióval (ammónia) vizsgáltuk. Tapasztalataink azt mutatták, hogy mind a Brønsted, mind a Lewis típusú savas kötőhelyek számának növekedésével jelentősen nőtt az NH₃ szorpció. A felület-meghatározás során kapott mérési eredményeket összehasonlítottuk a vörösiszap felhasználására irányuló kísérleteinkben (n-paraffinok, aromás vegyületek hidrokrakkolási reakciója) tapasztaltakkal és vizsgáltuk az ezek közötti összefüggést.

Kulcsszavak: vörösiszap, ammónia szorpció, BET, szénhidrogének hidrokrakkolása

Köszönetnyilvánítás

Jelen munka az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával készült, a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 projektek keretében.

Funkcionalizált cispentacin származékok sztereokontrollált szintézise biciklusos β -aminosavakból gyűrűnyitó metatézissel

Stereocontrolled Synthesis of Difunctionalized Cispentacin Derivatives Through Ring-opening Metathesis of Bicyclic β -amino Acids

KISS Loránd,¹ KARDOS Márton,¹ FORRÓ Enikő,¹ FÜLÖP Ferenc^{1,2*}

¹Institute of Pharmaceutical Chemistry and ²Stereochemistry Research Group of the Hungarian Academy of Sciences University of Szeged, H-6720 Szeged, Eötvös u. 6, Hungary
Tel: +36-62-546809, E-mail: kiss.lorand@pharm.u-szeged.hu
<http://www2.pharm.u-szeged.hu/gyki/uj>

ABSTRACT

A novel and efficient stereocontrolled one-step synthetic approach toward new divinylated cispentacins and oxacyclic cispentacin stereoisomers, as promising scaffolds in peptide chemistry and in the synthesis of novel functionalized substances, has been developed by ring-opening metathesis reaction of norbornene- or oxanorbornene β -amino acids with ethylene in the presence of several Ru catalysts.

ÖSSZEFOGLALÓ

Norbornén- illetve oxanorbornénvázás β -aminosav származékokból kiindulva, ruténium vegyületek által katalizált sztereokontrollált gyűrűnyitó metatézissel sikeresen állítottunk elő új, divinil-szubsztituált cispentacin valamint tetrahydrofuránvázás β -aminosav sztereoizomereket. A szintetizált vegyületek értékes monomerként funkcionálhatnak mind új típusú peptidok, mind pedig különböző funkcionizált biomolekulák szintéziseihez is.

Kulcsszavak: cispentacin, metatézis, sztereokontrollált reakció, gyűrűnyitás, funkcionizálás

Hidrogénfejlesztés nemesfémekkel módosított TiO₂ fotokatalizátorok alkalmazásával látható fényű megvilágítás mellett

Hydrogen Production Using Noble Metal Deposited TiO₂ Photocatalysts Irradiated with Visible Light

Ákos KMETYKÓ, Prof. András DOMBI, Prof. Klára HERNÁDI

Research Group of Environmental Chemistry,
Faculty of Science and Informatics, University of Szeged,
Tisza L. krt. 103. H-6720, Szeged, Hungary
(Tel.: +36 62 544 338, e-mail: kmetykoakos@chem.u-szeged.hu)

ABSTRACT

In this present work Au, Pt, Rh and Ru nanoparticles were deposited onto different kinds of TiO₂ photocatalysts by chemical reduction. The photocatalytic H₂ production performance of these catalysts was thoroughly compared in visible light irradiated ($\lambda_{\text{max}}=425$ nm) suspensions in the presence of various organics. The effect of different aspects was examined: the noble metal particle size, the crystal phase and particle size of the titania and the quality of the decomposed organic compounds. Co-deposition of different noble metals on TiO₂ and temperature dependence of the photocatalytic processes were also investigated.

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen munka keretében Au, Pt, Rh és Ru nanorészecskéket választottam le TiO₂ fotokatalizátorok felületére kémiai redukció segítségével. Ezen katalizátorok fotokatalitikus hidrogénfejlesztő képességét vizsgáltam látható hullámhossz-tartományú ($\lambda_{\text{max}} = 425$ nm) megvilágítás mellett különböző szerves áldozati reagensek jelenlétében. Számos reakciókörülményt optimalizáltam többek közt a nemesfém-részecskeméret, a titán-dioxid kristályfázisa és részecskemérete, valamint a lebontandó szerves vegyület anyagi minősége alapján. Emellett vizsgáltam két különböző nemesfém egyidejű leválasztásának lehetőségét és a fotokatalitikus folyamatok hőmérsékletfüggését is.

Kulcsszavak: nemesfém nanorészecske, hidrogénfejlődés, titán-dioxid, látható fény, kémiai redukció

A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Nehézfémek eltávolítása elektrokinetikai módszer alkalmazásával

Removal of Heavy Metals Using Electrokinetic Remediation Process

Carmen MÂNZATU¹, Boldizsár NAGY¹, Anamaria TÖRÖK¹,
Ceccarini ALESSIO², Cornelia MAJDIK¹

¹Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Department of Chemical,
11 Arany Janos, 400028 Cluj Napoca, Romania

²Department of Chemical, 35 Risorgimento, Pisa, Italy

ABSTRACT

Electrokinetic (EK) remediation has a good potential to simultaneously remove heavy metals, radionuclides, organic compounds from soil. This technology involves the application of direct electrical current (DC) with low potential and low intensity across two electrodes to remove charged contaminants. Electrokinetic remediation is a controlled application of electrical migration and electroosmosis together with the electrolysis reactions at the electrodes.

In our study was investigating the feasibility of removing heavy metals from polluted marine sediment obtained from Livorno (Italy) port using in-situ technology. At first, the properties of the sediment were analyzed using different methods. It was determinate the humidity, apparent density, water salinity (seawater), NaCl, Cl₂ and sodium metabisulfite (Na₂S₂O₅) content. During the electrokinetic remediation process carbon cloth cathode material was tested. Following the removal process it was measured the soil pH and electron conductivity.

In conclusion, studying the mechanism of the process, sediment fragmentation has occurred in different parts (five parts), whereas the heavy metals ions is transported (in highest amount) in on one side of the vessel. Also, it was followed with a change in color (ferruginous), which confirms the presence of heavy metals in this part of sediment.

The obtained laboratory results will be applied in an industrial remediation process in port Livorno.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az elektrokinetikai remediációs technikák lehetőséget nyújtanak különböző típusú talajszennyezések (nehézfémek, radioaktív izotópok és szerves vegyületek) egyidejű eltávolítására. Ez a technológia alacsony potenciálú illetve intenzitású elektromos áram (DC) két elektród közé történő közvetlen bevezetésén alapszik. Az elektrokinetikai remediáció az elektromos migráció és elektrooszmózis együttes ellenőrzött alkalmazása az elektródokon végbemenő elektrolízissel együtt. Jelen kutatás célja a livornói (Olaszország) kikötőből származó nehézfémekkel szennyezett tengeri üledékek remediációja in situ technológia segítségével. A kutatás kezdeti lépéseként meghatároztuk a tengervízi üledék nedvességtartalmát, látszólagos sűrűségét, sótartalmát (NaCl, Cl₂ és Na₂S₂O₅). Az elektrokinetikai remediációs folyamatokban szén elektródokat használtunk. A nehézfémek koncentráció változása mellett mértük az üledék pH-át és vezetőképességét.

A folyamat mechanizmusának meghatározására részletesen tanulmányoztuk a nehézfém ionok vándorlását, a kijelölt öt üledék fragmentumban. A nehézfémek jelenlétét és transzportját az üledék színváltozása kísérte.

A kísérleti eredmények hozzájárulnak egy ipari remediációs folyamat kidolgozásához, mely a következőkben a livornói kikötőben kerül alkalmazásra.

Kulcsszavak: elektrokinetikai remediáció, nehézfémek, tengeri üledék

**Módosított grafit/hemin/kitozán elektród: elektrokémiai jellemzés
és a sebességállandó meghatározása ciklikus
valamint négyszög hullám voltammetriával**

**Modified Graphite/hemin/chitosan Electrode:
Electrochemical Characterization and K_s Determination Using Cyclic
Voltammetry and Square Wave Voltammetry**

MARES Georgeta Maria középiskolai tanár, doktor^{*}, Graziella Liana TURDEAN docens,
Ionel Cătălin POPESCU egyetemi tanár

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca 11, RO-400028, Cluj-Napoca, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818
web: <http://chem.ubbcluj.ro>;

„Aurel Popp” Művészeti Líceum, Szatmárnémeti
Jean Calvin utca 6-10, Satu Mare, RO-440114; tel. 0261-716123; e-mail: gmares73@yahoo.com

ABSTRACT

Iron(III)-protoporphyrin-IX (hemin, Hm), one of the most important biological substances is strongly adsorbed on the carbonaceous electrode materials, especially on pyrolytic graphite (PG). On the graphite/hemin modified electrode (G/Hm) was attached a polymer chitosan film. The performance of the graphite/hemin/chitosan modified electrode (G/Hm/Chit) was investigated by cyclic voltammetry (CV) and square wave voltammetry (SWV) at different experimental conditions (scan rate, frequency). It was calculate the kinetic parameter K_s, the standard rate constant of electron transfer

Keywords: modified electrode, chitosan, hemin

ÖSSZEFOGLALÓ

A vas(III)-protoporfirin-IX(Fe(III)P), azaz hemin (Hm), mely a biológiai szempontból rendkívül fontos anyagok egyike, a grafit (G) felületére adszorpcióval rögzíthető és grafit/hemin (G/Hm) módosított elektród állítható elő. A keletkezett elektród felületére kitozán polimer film rögzíthető. A grafit/hemin/kitozán (G/Hm/Chit) elektród elektrokémiai viselkedésének tanulmányozására általunk használt módszer a ciklikus voltammetria (CV) illetve a négyszög hullám voltammetria (SWV). Tanulmányozás tárgyát képezte: a pásztázási sebesség, a frekvencia hatása az elektród által adott válaszra illetve a K_s kinetikai paraméter kiszámítása

Kulcsszavak: módosított elektród, kitozán, hemin

IRODALOM

- Ming. Kong, Xi Guang Chen, Ke Xing, Hyun Jin Park, **2010**, Journal of Food Microbiology, 144, 51–63.
Valentin Mirceski, Rubin Gulabovski, Fritz Scholz. *Journal of Electroanalytical Chemistry*. **2004**, 566, 351-360.
James H. Reeves, Shihua Song, Edmond F. Bowden. *Anal. Chem.* **1993**, 65, 683-688.
Á. Jaksó, **2010**, „Kitozán filmek térhálósítása ionos és nemionos molekulákkal”, Budapest., Phd. Thesis.

**Összehasonlító tanulmány az ICP-AES és ATR technikát használva
öt *Salvia officinalis*ből eredő termékből**

**Comparative Study of Five Herbal Products from *Salvia Officinalis* using
ICP-AES and ATR Techniques**

Dr. MARIAN Eleonora¹, Dr. JURCA Tünde¹, Dr. BRAUN Mihály²,
Dr. GOMBOS Réka³, Dr. TÓTH Imre⁴

¹Nagyvárad Egyetem, Gyógyszerészeti Tanszék, Universitatii nr. 1, Románia, 0040729159838,
marian_eleonora@yahoo.com, 0040722476454, jurcatunde@yahoo.com

²Magyar Tudományos Akadémia, Atommagkutató Intézet, Bem tér 18/c, Debrecen, Magyarország,
0036305794850, braun.mihaly@atomki.mta.hu

³Debreceni Egyetem, Kémiai Fizika Tanszék, Egyetem tér 1 sz., Debrecen
Magyarország, +003652512900, gombos.reka@science.unideb.hu

⁴Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Egyetem tér 1 sz.,
Debrecen Magyarország 0036204554383, imre.toth@science.unideb.hu

ABSTRACT

Salvia officinalis is a herb from southern Europe and Mediterranean region, recommended as a natural remedy to treat and cure high blood pressure, intestinal and stomach diseases and airway inflammation. In this study, the sage was analyzed in the form of alcoholic extracts, oil, capsules, tea and 13 elements were determined by the use of Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry techniques, and ATR spectra were performed with Perkin Elmer Spectrum One-FTIR.

ÖSSZEFOGLALÓ

A *Salvia Officinalis* egy gyógynövény, amely Dél-Európából és a mediterrán régiókból származik, és mint természetes orvosság használják a magas vérnyomás, a gyomor és bélrendszer, a légutak gyulladásának kezelésére. Ebben a vizsgálatban a zsályát elemeztük, alkoholos kivonat, olaj, kapszula és tea formájában és meghatároztunk 13 fémeket, felhasználva az atomemissziós spektroszkópiát induktív csatolású plazmával és az ATR-t Perkin Elmer Spektrofotométerrel.

Kulcsszavak: növényi termékek, *Salvia officinalis*, ICP-AES, ATR technika

Vízoldható Ru(II)-NHC komplex katalizátorok alkalmazása hidrodehalogénezési reakciókban

Application of Ru(II)-NHC Complex Catalysts in Hydrodehalogenation Reactions

MAROZSÁN Natália¹, Dr. HORVÁTH Henrietta², ERDEI Anikó¹,
Dr. PAPP Gábor², Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}

¹Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék,
²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport,
Debrecen, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.
telefon: +36-52 (512-900), e-mail: natalia.marozsan@science.unideb.hu
honlap: <http://fizkem.unideb.hu>

ABSTRACT

Disposal of halogen-containing compounds is becoming increasingly important as their quantity in the environment has increased significantly in recent decades. In the process of hydrodehalogenation carbon-halogen bonds are broken and the halogen atom is replaced by a hydrogen, so the reaction allows removal of these harmful compounds. In this work we have investigated hydrodehalogenation of aliphatic and aromatic hydrocarbons using water-soluble Ru(II)-N-heterocyclic complex catalysts.

ÖSSZEFOGLALÓ

A veszélyes halogéntartalmú vegyületek ártalmatlanítása egyre fontosabbá válik, hiszen mennyiségük környezetünkben jelentősen megnőtt az utóbbi évtizedekben. A hidrodehalogénezés során a szén-halogén kötés felszakad és a halogén atom helyére egy hidrogénatom lép; így a folyamat lehetőséget nyújt ezen anyagok lebontására. Munkánk során halogéntartalmú alifás és aromás vegyületek hidrodehalogénezését vizsgáltuk vízoldható Ru(II)-N-heterociklusos karbén komplex katalizátorokkal.

Kulcsszavak: hidrodehalogénezés, halogéntartalmú vegyületek, homogén katalízis, N-heterociklusos karbén, Ru(II)-katalizátorok

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Pirimidin származékok QSAR tanulmányozása

QSAR Study on Pyrimidines

Raluca F. MĂTIEȘ, Mircea V. DIUDEA

Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kémia tanszék,
Arany János Utca, 11, Tel. 0264-59 38 33, Fax 40-264-590.81,
raluca_maties@yahoo.com, diudea@chem.ubbcluj.ro, www.chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

This paper presents a QSAR study conducted on a set of 35 pyrimidines, downloaded from Pubchem database, using the concept of hypermolecule. The results show a good modeling for log P with the correlation-weighted descriptor and some topological indices derived from Cluj matrices, and also with the calculated HOMO energy levels of the molecules of the studied set. The best model has been validated with an external test set that prediction was made on the clusters of similarity, correlation being higher than the model.

Keywords: pyrimidines, hypermolecule, QSAR, Cluj matrices, log P

ÖSSZEFOGLALÓ

Ezen tanulmány 35 pirimidin származék (Pubchem adatbázis) QSAR vizsgálatát mutatja be felhasználva a hipermolekula fogalmát. A tanulmányozott molekulák esetében az eredmények jó korrelációt mutattak a log P modellezése esetében a korrelációval súlyozott leíróval, néhány Cluj mátrixokból származtatott topológiai indexszel, valamint a számított HOMO energiaszinttel. A legjobb modell egy külső molekula teszt szetten keresztül lett érvényesítve, majd a predikció a hasonlóság alapján létrehozott klasztereken lett elvégezve, ahol a korreláció jobb volt mint a modell esetében.

Keywords: Pirimidin származékok, Hipermolekula, QSAR, Cluj mátrixok, log P

Hidrodehalogénezés rögzített nanoméretű vas(0) (NZVI) részecskékkel

Hydrodehalogenation by Supported Zerovalent Iron Nanoparticles

Dr. MENA-CRUZ Adrián¹, BARCZA-BERTÓK Ágnes¹, Dr. KATHÓ Ágnes¹,
Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék

²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport
4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Tel.: (36)-52-512900, e-mail: amcruz@ull.es
honlap: <http://fizkem.unideb.hu>

ABSTRACT

During the last decade, new materials and synthetic routes for obtaining reactive iron nanoparticles have been developed in depth. These nanoparticles (NP-s) show high reactivity in the degradation or removal of different pollutants, but their reactivity is significantly reduced by the physical aggregation of such magnetic nanoparticles. The use of porous materials (e.g. zeolites) proved to be effective for the stabilization of nanoparticles (even simple clusters).

ÖSSZEFOGLALÓ

Az elmúlt évtizedben számos új szintézisutat fejlesztettek ki reaktív vas(0) nanorészecskék (NZVI) előállítására. Ezek az nanorészecskék nagy aktivitást mutatnak különböző környezeti szennyezők lebontásában vagy eltávolításában, azonban aktivitásuk jelentősen csökken a mágneses nanorészecskék aggregációja miatt. Szilárd hordozókon (pl. zeolitokon) történő rögzítés hatékony módszernek bizonyult a vas(0) nanorészecskék (és klaszterek) stabilizálására.

Kulcsszavak: heterogén katalízis, hidrodehalogénezés, hidrogénezés, hordozós vas(0) nanorészecskék, NZVI

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

A balatoni víztest környezeti kémiai, gazdasági és társadalmi vizsgálata multi-kritériumos döntéshozatalt támogató eszközök segítségével

Study on the Chemical, Economical and Social Aspects of the Lake Balaton with Multi-criteria Decision Making Method

NÉMETH József, SEBESTYÉN Viktor, Dr. DOMOKOS Endre,
UTASI Anett, Prof. Dr. RÉDEY Ákos

University of Pannonia, Institute of Environmental Engineering
Egyetem u. 10.; 8200 Veszprém, Hungary, H-8201 Veszprém, P.O. Box 158.
Tel.: (88) 624-296; Fax: (88) 624-533; Mobil: (30) 301-03-95
jnemeth@almos.uni-pannon.hu, <http://uni-pannon.hu/>

ABSTRACT

The quality of the surface water of the Lake Balaton has a high priority. The chemical quality of the water is important from the points of view of tourism and also water supply in the region, and exhibits a high importance in the Hungarian economy.

The study on the water quality of the Lake Balaton can be carried by quantitative method used in Environmental Impact Assessment or by Multi Decision Criteria Making methods.

The goal of the study is to provide a reasonable proposal for the use of the water body. The hierarchy and the methodology of the decision making result in the numerical figures, which can be assessed in ranked sets having unclear borders..

ÖSSZEFOGLALÓ

A felszíni vizeink szempontjából a Balaton kiemelt fontosságú víztest. A víz kémiai minősége nem csak turisztikai, hanem ivóvízellátás-biztonság szempontjából is jelentős szerepet játszik a magyar gazdaságban.

A vizsgálat történhet környezetállapot-értékelés mennyiségi módszereivel, vagy multi-kritériumos döntéshozatalt támogató eszközökkel.

Az ilyen jellegű vizsgálat célja, hogy a víztest hasznosítására racionális javaslatot tegyen. A döntési hierarchia ezért a mérési pontokra vetítve a felhasználás módjai alapján ad számszerűsíthető eredményt, amelyet elmosódott határu halmazokba sorolva lehet kiértékelni.

Kulcsszavak: Balaton, Környezetállapot-értékelés, Multi-kritériumos döntéshozatalt támogató eszköz, Hierarchikus döntési struktúra

Jelen munka az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával készült, a **TÁMOP-4.1.1.C-12/1/KONV-2012-0015** projekt keretében.

**Aziridinek új, szelektív nyitása XtalFluor-E[®] alkalmazásával.
Fluorozott diaminokarbonsav származékok szintézisei**

**A novel Selective Fluoride Opening of Aziridines by XtalFluor-E[®].
Synthesis of Fluorinated Diamino Acid derivatives**

NONN Melinda,^{1,2} KISS Loránd,¹ SILLANPÄÄ Reijo,³ FÜLÖP Ferenc^{1,2*}

¹Institute of Pharmaceutical Chemistry and ²Stereochemistry Research Group of the Hungarian Academy of Sciences University of Szeged, H-6720 Szeged, Eötvös u. 6, Hungary ³Department of Chemistry, University of Jyväskylä, FIN-40014, Jyväskylä, Finland

Tel: +36-62-546809

E-mail: kiss.lorand@pharm.u-szeged.hu

<http://www2.pharm.u-szeged.hu/gyki/uj>

ABSTRACT

The selective introduction of fluorine by a new convenient fluoride opening of an activated aziridine ring with XtalFluor-E[®] into the framework of an aminocycloalkanecarboxylate has been accomplished. The reaction afforded through a stereoselective aziridination of the C-C double bond of bicyclic lactams followed by regioselective aziridine opening with XtalFluor-E[®] fluorinated diamino acid derivatives. The method based on selective aziridine opening by fluoride has been generalized towards the access of monocyclic or bicyclic fluorinated substances.

ÖSSZEFOGLALÓ

Aktivált aziridingyűrű XtalFluor-E[®]-el történő új, szelektív nyitásával hatékony szintézismódszert dolgoztunk ki fluorozott aminocikloalkánkarboxilátok szintézisére. Telítetlen biciklusos laktámok szén-szén kettős kötésének sztereoszelektív aziridinálását követő regioszelektív aziridin nyitásával fluortartalmú diaminokarboxilátok sztereoizomerjeihez jutottunk. A fluoriddal történő aziridin gyűrűnyitást sikeresen kiterjesztettük mono- illetve biciklusos fluortartalmú származékok szintéziseire is.

Kulcsszavak: aziridin, β -aminosav, szelektív reakció, gyűrűnyitás, fluorozás

**A mezei zsurló (*Equisetum arvense* L.)
antioxidáns hatóanyagtartalmának meghatározása**

Determination of Antioxidant Level in *Equisetum Arvense* L.

PALLAG Annamária, JURCA Tünde, VICAS Laura, PASCA Bianca

Nagyvárad Egyetem, Orvosi és Gyógyszerészeti Kar, Gyógyszerészeti szak
Romania, Oradea, P-ta 1 Decembrie nr. 10, cod 410073, Tel +40 259 411 454
e-mail: medfarm@uoradea.ro, www.medfarm.ro

ABSTRACT

Equisetum arvense L., a widely used medicinal species which is not cultivated in Romania, the medicinal product is coming from traditional collection centers. We used DPPH and Folin-Ciocalteu spectrophotometric methods to determine the antioxidant activity in the sterile stems of *Equisetum arvense* L., collected from different regions of Bihor County, in March and in September of 2014. Our results show significant differences between the studied groups.

Keywords: DPPH method, Folin-Ciocalteu method, sterile stems of *Equisetum arvense* L., antioxidant activity

ÖSSZEFOGLALÓ

A mezei zsurló (*Equisetum arvense* L) egy nagyon ismert és gyakran használt gyógynövény, melyet Romániában nem termesztenek és különböző termőhelyekről gyűjtik be. Spektrofotometrikus, DPPH és Folin-Ciocalteu módszerek segítségével meghatároztuk a 2014 márciusában és szeptemberében szedett mezei zsurló meddő hajtásainak antioxidáns aktivitását. Eredményeink jelentős különbségeket mutatnak a tanulmányozott csoportok között.

Kulcsszavak: DPPH módszer, Folin-Ciocalteu módszer, mezei zsurló (*Equisetum arvense* L) .meddő hajtása, antioxidáns aktivitás

Klorogénsavtartalom vizsgálata *Coffea arabica* L. egyes részeiben

Study of Chlorogenic Acid Content in Various Parts of *Coffea Arabica* L.

Drd. Farm. PATAY Éva Brigitta¹, șef Lucr. Dr. NEMETH Tibor Sebastian²,
Prof. Dr. NEMETH Tibor², șef Lucr. Dr. PAPP Nóra¹, Prof. Dr. VLASE Laurian³

¹PTE ÁOK Farmakognózia Tanszék, 7624 Pécs, Rókus u.2. Magyarország, e-mail:
eva.patay@gmail.com; nora4595@gamma.ttk.pte.hu, honlap: www.aok.pte.hu

²Nagyvárad Egyetem Orvostudományi és Gyógyszerészeti Kar, Farmakognózia Tanszék, 410073
Nagyvárad, Piața 1 decembrie 10., Románia, e-mail: nemethtibor2000@yahoo.com;
sebinemeth@yahoo.com, honlap: www.uoradea.ro

³Universitatea de Medicină și Farmacie „Iuliu Hațieganu”, Gyógyszerészeti Kar, 400012, Victor Babeș u.
8, Kolozsvár, e-mail: laurian.vlase@yahoo.com, honlap: www.umfcluj.ro

ABSTRACT

The purpose of our research was qualitative and quantitative determination of chlorogenic acid in various parts of *Coffea arabica* L. using HPLC / MS chromatography. The plant parts were collected in January 2013 from a 10 year old coffee shrub. Plants parts were drying and stored at room temperature and then was make a 50% ethanol extract from all of them. Preliminary results of this study suggest that the chlorogenic acid composition is closely linked to the development of individual plants. The results are intended to be supported and complemented by further studies .

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk célja a klorogénsav minőségi és mennyiségi meghatározása volt az arab kávé (*Coffea arabica* L.) egyes növényi szerveiből HPLC/MS kromatográfias eljárással. A növény fiatal és idős lombleveleit, az éretlen és érett terméscsüveg a magokkal 2013. januárjában gyűjtöttük egy Bihar megyei magántermesztésből származó, 10 éves kávécsüvegéről. A növényi minták szárítása és tárolása szobahőmérsékleten történt, majd minden mintából 50% etanolos kivonat készült. A vizsgálat előzetes eredményei arra utalnak, hogy a klorogénsavtartalom szoros összefüggésben áll a növény egyedfejlődésével, csökkenő mennyiséget mutatva például a lomblevelek fejlődésével. Eredményeinket további vizsgálatokkal kívánjuk alátámasztani és kiegészíteni.

Kulcsszavak: Klorogénsav; *Coffea arabica* ; HPLC/MS módszer

A Balaton kémiai terhelésének elemzése

Analysis of Chemical Pollutants of the Lake Balaton

SEBESTYÉN Viktor, UTASI Anett, DOMOKOS Endre

University of Pannonia, Institute of Environmental Engineering
Egyetem u. 10.; 8200 Veszprém, Hungary, H-8201 Veszprém, P.O. Box 158.
Tel.: +36 (88) 624-296; Fax: +36 (88) 624-533; Mobil: +36 (20) 586-14-68
sebestyen.viktor88@gmail.com, <http://uni-pannon.hu/>

ABSTRACT

The aim of the paper is to present the improvement of integrated quantitative methods for analysis of surface waters through a case study. Lake Balaton, the biggest lake in Hungary and Central Europe plays a very important role in the country's strategies for water management and tourism as well. The reports on the state of the lake that rely on immission data ignore the discussion of potential polluting sources and do not establish a cause-and-effect relationships, which could be provided if there is sufficient amount of statistical data. The indicators of the state of the environment provided by the integrated quantitative methods describe the chemical load and the major pollutants. These indicators may be put on one single thematic map which shows clearly that the water quality deteriorates slightly from west to east.

Keywords: Lake Balaton, Environmental state assessment, quantitative methods, GIS

ÖSSZEFOGLALÓ

A munka célja a felszíni vizek minőségét elemző integrált mennyiségi módszerek továbbfejlesztésének bemutatása egy esettanulmányon keresztül. Magyarország és Közép-Európa legnagyobb tava a Balaton kiemelten fontos szerepet tölt be az ország vízgazdálkodási-, és turisztikai stratégiájában egyaránt. A tó állapotának immissziós jellemzése figyelmen kívül hagyja a lehetséges szennyező forrásokat és nem állít fel ok-okozati összefüggéseket, amelyek megfelelő elemszámú statisztikai adathalmaz esetén felírhatóak. Az integrált mennyiségi módszerek által szolgáltatott környezetállapot jellemzők segítségével a kémiai terhelés és a főbb szennyezőanyag kibocsájtók összefoglalhatók egy tematikus térképen, amelyből kiderül, hogy a víz minősége nyugatról keleti irányban kis mértékben romlik.

Kulcsszavak: Balaton, Környezetállapot-értékelés, Mennyiségi módszerek, Térinformatika, Köszönetnyilvánítás

Jelen munka az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával készült, a **TÁMOP-4.1.1.C-12/1/KONV-2012-0015** projekt keretében.

Endokrin hatású peszticid hatóanyagok lebontása ózonos kezelés és heterogén fotokatalízis kombinációjával

Transformation of Endocrine Disrupting Pesticides by the Combination of Ozonation and Heterogeneous Photocatalysis

SIMON Gergő¹, Dr. ALAPI Tünde^{1,2}, VERÉB Gábor¹,
Dr. DOMBI András¹, Dr. HERNÁDI Klára¹

¹Környezetkémiai Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, Magyarország
6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1. Tel.: +3662 54 4719, gsimon@chem.u-szeged.hu

²Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem,
Magyarország, 6720 Szeged, Dóm tér 7. Tel.: +3662 54 4719, alapi@chem.u-szeged.hu

ABSTRACT

Emerging contaminants (ECs), such as pharmaceuticals and pesticides are a major cause for concern regarding the pollution of natural waters. Due to production, use or disposal, these compounds appear in water bodies resulting in pollution, and re-emergence in drinking water. Many of these chemicals are known to be toxic to the ecosystem, and some of them even propose threat to the human body (supposed endocrine disruption). Therefore their removal is a priority task, that cannot be effectively executed by conventional water treatment methods. One solution to this problem can be the application of advanced oxidation processes (e.g. photolysis, ozonation, photocatalysis) and their combinations. In this work the combination of ozonation and photocatalysis was applied for the transformation of endocrine disrupting phenylurea pesticides. The photocatalyst was applied either in suspended or immobilized form. The transformation of the initial compounds was traced using HPLC.

ÖSSZEFOGLALÓ

A környezetben felmerülő szennyezők, mint például a gyógyszerhatóanyagok vagy peszticidok jelentős problémaforrásnak számítanak a természetes vizek szempontjából, ugyanis az előállításuk, felhasználásuk vagy elhelyezésük során kikerülnek a természetes víztestekbe és esetenként az ivóvízből is kimutathatóakká válnak. Ezen vegyületek jelentős része mérgező az ökoszisztémára nézve, és néhányuk veszélyt jelent az emberi szervezetre is (a feltételezhető hormonális hatásuk miatt). Mindebből kifolyólag eltávolításuk a vizekből rendkívül fontos feladat, ám ennek kivitelezésére az általánosságban használt víztisztítási eljárások nem elegendőek. A probléma megoldására az egyik lehetséges válasz olyan nagyhatékonyságú oxidációs eljárások alkalmazása lehet, mint például a fotolízis, ózonos kezelés, vagy a heterogén fotokatalízis.

Ezen munka során ózonos kezelés és fotokatalízis kombinációját vizsgáltuk peszticid hatóanyagok átalakulására. A fotokatalizátort (titán-dioxid) szuszpendált, illetve hordozón rögzített formában is alkalmaztunk. Az egyes anyagok átalakulását HPLC segítségével követtük.

Kulcsszavak peszticidok, AOP, ózonozás, fotokatalízis, titán-dioxid

**Poli(N-vinil-imidazol) alapú amfifil kotrhálók előállítás
és tulajdonságaik vizsgálata**

**Synthesis and Characterization of Amphiphilic Polymer Conetworks Based
on Poly(N-vinylimidazole)**

STUMPHAUSER Tímea^{1,2}, Dr. FODOR Csaba^{2,3}, Prof. Dr. IVÁN Béla²

¹Eötvös Loránd Tudomány Egyetem, Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék
H-1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A, Magyarország

²Polimer Kémiai Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet,
Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont
H1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2, Magyarország

³Adolphe Merkle Institute, University of Fribourg, Chemin des Verdiers 4, CH-1700 Fribourg, Switzerland
email: stumphauser.timea@ttk.mta.hu

ABSTRACT

Amphiphilic conetworks (APCNs), composed of covalently bonded hydrophilic and hydrophobic polymer chains, have recently gained broad interest worldwide due to their special structure, properties and application possibilities. The presented work will discuss on the synthesis and the major characteristics of N-vinylimidazole based APCNs. The effects of the structure of the cross-linkers and composition on the properties of these new APCNs will be presented.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kovalens kötéssel összekapcsolt hidofil és hidrofób polimer láncokból álló amfifil polimer kotrhálók (AKTH-k), egyre nagyobb figyelemre tesznek szert világszerte, a különleges szerkezetüknek, tulajdonságaiknak és felhasználási lehetőségeiknek köszönhetően. Jelen munka az N-vinil-imidazol alapú AKTH-k szintézisét és fő tulajdonságaik bemutatását tűzte ki célul, kitérve a térhálósítószer szerkezetének és összetételének befolyásoló hatására.

Kulcsszavak: polimer, kotrháló, tulajdonságok, szerkezet

Izomer naftoxazinnal kondenzált heterociklusok szintézise a módosított Mannich-reakció alkalmazásával

Synthesis of Isomeric Naphthoxazine-fused Heterocycles via the Modified Mannich Reaction

Dr. SZATMÁRI István, Prof. Dr. FÜLÖP Ferenc

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerkémiai Intézet, MTA Sztereokémiai Kutatócsoport,
6720 Szeged, Eötvös u. 6., Tel.: +36-62-544-000/1966, Fax.: +36-62-545-705,
e-mail.: szatmari.istvan@pharm.u-szeged.hu, <http://www.pharm.u-szeged.hu/gyki>

ABSTRACT

The Mannich reaction is an important C–C bond formation reaction that is widely used in the syntheses of secondary and tertiary amine derivatives. The major aim of this work was to synthesize new naphth[1,2-e][1,3]oxazino[2,3-a]isoquinolines starting from aminobenzyl-naphthols and 3,4-dihydroisoquinolines. Since the synthesis of the annelation isomer naphthoxazinoisoquinolines were achieved by the reaction of naphthols with 3,4-dihydroisoquinolines followed by ring closure with the corresponding aldehydes, our further aim was to examine the scope and limitations of this reaction by using different cyclic imines such as 4,5-dihydrobenz[c]azepine or 6,7-dihydrothieno[3,2-c]pyridine.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Mannich-reakció egy jelentős eljárás új C–C kötés kialakítására, melynek során szekunder, illetve tercier aminok állíthatók elő. Jelen munka egyik fő célja új naft[1,2-e][1,3]oxazino[2,3-a]izokinolinok szintézise volt a megfelelő aminobenzilnaftol-, illetve 3,4-dihidroizokinolinokból kiindulva. Tekintettel arra, hogy az annelációs izomer naftoxazinoizokinolinok szintézisét naftol-, valamint dihidroizokinolin-származékból kiindulva, aldehides gyűrűzárással valósítottuk meg, további célul tűztük ki a reakció kiterjeszhetőségének vizsgálatát gyűrűs iminként 4,5-dihidrobenz[c]azepint, illetve 6,7-dihidrotieno[3,2-c]piridint alkalmazva.

Kulcsszavak: Mannich reakció, naftol, izokinolin, benz[c]azepin, tieno[3,2-c]piridin

A heroin hidrolízis kinetikájának vizsgálata mágneses magrezonancia spektroszkópiával

Site- and Species-specific Hydrolysis Rates of Heroin

Dr. SZŐCS Levente¹, Dr. TÓTH Gergő¹, Dr. ORGOVÁN Gábor¹,
URAI Ákos¹, Dr. HOSZTAFI Sándor¹, Dr. GERGÓ Lajos², Dr. NOSZÁL Béla¹

¹Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet,
Högyes Endre u. 9, Budapest, 1092, Magyarország

²Semmelweis Egyetem, Egyetemi Gyógyszertár Gyógyszerügyi Szervezési Intézet
ELTE Informatikai Kar, Numerikus Analízis Tanszék

ABSTRACT

Ester group is an abundant unit in bio- and drug molecules, and also, in illicit drugs of abuse. The two best-known, infamous “hard drug” agents, heroin and cocaine are molecules that uniformly bear two ester and one basic amine moieties. Their partial hydrolysis yields intermediate products of one ester and two acid-base functions, the states of which heavily influence their effects. The exact kinetic and thermodynamic description of these systems needs new methods. We determined either site- and species-specific complex ester-hydrolysis rates of heroin and its hydrolysis products (3-acetyl-morphine and 6-acetyl-morphine) at 37 °C using NMR spectroscopy, and a new custom-tailored evaluation method.

ÖSSZEFOGLALÓ

Észtercsoportot tartalmazó vegyületek nagy számban találhatók a gyógyszerkincsben, de számos kábítószer is észter típusú molekula, mint például a kokain és a heroin. Részleges hidrolízisük során a keletkező termékeken egy észtercsoport mellett megjelenik egy újabb protonálható csoport is, mely nagyban befolyásolja a metabolizmus további lépéseit. Mágneses magrezonancia spektroszkópiával elvégeztük a 3-acetil-morfin, a 6-acetil-morfin és a heroin hidrolízis-kinetikájának vizsgálatát. A méréseket 37 °C-on végeztük.

Kulcsszavak: heroin, NMR, észterhidrolízis

Malachit-zöld fitoremediációja *Salvinia natans* vízinövény alkalmazásával

Phytoremediation of Malachite Green by Aquatic Plant *Salvinia Natans*

TÖRÖK Anamaria¹, NAGY Boldizsár¹, TONK Szende², MAJDIK Cornelia¹

¹Babeş-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering,
Arany János st. 11, 400028 Cluj-Napoca, Romania

²Sapientia Hungarian University of Transylvania, Faculty of Sciences and Arts,
Calea Turzii st. 4, 400193 Cluj-Napoca, Romania

ABSTRACT

In the present work the phytoremediation of malachite green, triphenylmethane dye, was studied using the aquatic plant water butterfly wings, *Salvinia natans*. The operational parameters such as aquatic plant quantity, initial dye concentration, initial pH and temperature were studied in order to determine the optimum phytoremediation conditions. The photosynthetic pigments were determined quantitatively to detect the plant's response to abiotic stress. The mechanisms of phytoremediation were studied using Fourier Transformation Infrared Spectroscopy (FTIR), Ultraviolet-visible Spectroscopy (UV-vis) and Energy-dispersive X-ray Spectroscopy (EDX). The aquatic plant's dye removal data were described using isotherm and kinetic models.

Keywords: aquatic plant, malachite green dye, phytoremediation.

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen kutatás célja a trifenilmetán típusú színezék, a malachit-zöld fitoremediációjának vizsgálata rucaöröm, *Salvinia natans* vízinövény alkalmazásával. Kísérleteinkben a különböző paraméterek (növényi mennyiség, kezdeti színezék koncentráció, kezdeti pH és hőmérséklet) hatását vizsgáltuk a fitoremediációs folyamatok hatékonyságára. **A növényi stressz mértékének meghatározása a fotoszintetikus pigmentek (klorofill a és b, karotenoid) mennyiségi változásának mérésével történt.** A fitoremediációs mechanizmus jellemzésére a következő módszereket használtunk: Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia, UV-látható spektroszkópia és energiadiszipatív röntgenspektroszkópia. Az egyensúlyi adszorpciós modellek (izotermák és kinetikai modellezés) számítása és alkalmazása lehetővé teszi a folyamat elméleti jellemzését.

Kulcsszavak: *Salvinia natans*, malachit-zöld színezék, fitoremediáció.

Vízoldható foszfóniumsók és Ag(I)-ionok kölcsönhatása révén kialakuló önszerveződő rendszerek

Water-soluble Phosphonium Salts as Supramolecular Synthons

Dr. UDVARDY Antal¹, SZARVAS Tímea¹, Dr. BÉNYEI Attila¹, Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2},
Dr. KATHÓ Ágnes¹

¹Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék,

²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Tel.: (36)-52-512900, e-mail: udvardya@unideb.hu

honlap: <http://fizkem.unideb.hu>

ABSTRACT

Coordination of Ag⁺-ions with organic ligands containing multiple N-, O- and P-donor atoms are frequently used for synthesis of metal-organic frameworks. The P-analog of urotropine, 1,3,5-triaza-7-phospha-adamantane (pta) can also be suitable for this purpose. We prepared a library of phosphonium salts by reacting pta with unsaturated dicarboxylic acids (fumaric, maleic, itaconic, glutaconic, mesaconic, and citraconic acid). These are novel building blocks of MOFs.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az Ag⁺-ionok és N-, O- és P-donoratomokat tartalmazó szerves vegyületek által alkotott koordinációs polimereket (MOF) intenzíven kutatják. Az urotropin P-analogonja, az 1,3,5-triaza-7-foszfadamantán (pta) és telítetlen dikarbonsavak (maleinsav, fűmársav, itakonsav, glutakonsav, citrakonsav, mezakonsav) reakciójában olyan új foszfóniumsókat állítottunk elő, melyek alkalmas építőkövek lehetnek Ag-tartalmú önszerveződő rendszerek, szerves polimerek előállításához.

Kulcsszavak: ezüst, foszfa-urotropin, foszfóniumsó, önszerveződő, szerves polimer

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt és a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

N-szubsztituált normorfin származékok szintézise és szerkezetvizsgálata

Synthesis and Analytical Study of N-substituted Normorphine Derivatives

URAI Ákos, Dr.SZŐCS Levente, Dr.HOSZTAFI Sándor,
Dr.HORVÁTH Péter, Dr.NOSZÁL Béla

Semmelweis Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Intézet
Hőgyes Endre u. 9, Budapest, 1092, Magyarország

ABSTRACT

The synthesis of modified morphine derivatives and their pharmacological study is an intensively studied area. The treatment of opioid dependences require immunoanalytical essays.

In our current research alkyl-amino side chains are attached to the D ring of the morphinan skeleton to obtain haptén substances. These can be used to study vaccine antibodies.

ÖSSZEFOGLALÓ

A kémiai módosításokkal előállított morfinszármazékok kémiai illetve farmakológiai vizsgálata, továbbra is egy intenzíven művelt terület. Az opioid dependencia kezelése során fontos szerepe van az immunalitikai vizsgálatoknak.

Munkánk során a morfin váz piperidin gyűrűjéhez aminoalkil oldalláncot kapcsoltunk haptén típusú anyagok előállítása céljából, így az esetleges vakcina ellenanyagok vizsgálatához is alkalmazhatóak lesznek.

Kulcsszavak: morfin, normorfin, ópioid, haptén, immunanalitika

Zirc város vízi környezetállapotának összehasonlító elemzése

Comparative Analysis of Water Environment Status of Zirc

UTASI Anett, SEBESTYÉN Viktor, RÉDEY Ákos D.Sc.

University of Pannonia, Institute of Environmental Engineering
Egyetem u. 10.; 8200 Veszprém, Hungary, H-8201 Veszprém, P.O. Box 158.
Tel.: +36 (88) 624-296; Fax: +36 (88) 624-533; Mobil: +36 (20) 586-14-68
utasia@uni-pannon.hu, <http://www.uni-pannon.hu/>

ABSTRACT

The monitoring of environmental status of Zirc (the capital of Bakony) is very important not only for the residents, but also in terms of tourism. The cyclical changes in state of the environment (both surface water and air quality too) can be observed seasonably in the region. To support this notion a comparative analysis was carried out based on measurements in three different periods. Three quantitative environment impact assessment methods were used. Finally the validation of the results was carried out using the paired comparison matrix technique.

ÖSSZEFOGLALÓ

Zirc város környezetállapotának monitorozása – a Bakony fővárosaként – nem csak lakói számára, hanem turisztikai szempontból is nagyon fontos. A térség környezetállapotának ciklikus változása – mind a felszíni víz, mind a levegőminőség tekintetében – évszakonként is megfigyelhető. Ennek alátámasztásaként az összehasonlító elemzés három különböző időszak mérési eredményei alapján, három mennyiségi módszer alkalmazásával történt, majd az eredmények validálása a mennyiségi módszerek páronkénti összehasonlítás mátrixos formájának alapján készült el.

Kulcsszavak: Zirc város, környezetelemzés, környezetállapot-értékelés, mennyiségi módszer,

Köszönetnyilvánítás

Jelen munka az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával készült, a **TÁMOP-4.1.1.C-12/1/KONV-2012-0015** projektek keretében.

Látható fényvel gerjesztett rutil fázisú titán-dioxidok a fotokatalitikus víztisztításban

Visible Light Activated Rutile-phase Titanium Dioxides in Photocatalytic Water Treatment Processes

Gábor VERÉB¹, Tamás GYULAVÁRI¹, Zsolt PAP^{1,2,3}, Lucian BAIA^{3,4}, Teodora RADU^{3,4},
Károly MOGYORÓSI¹, András DOMBI¹, Klára HERNÁDI^{1,5}

¹Research Group of Environmental Chemistry, Institute of Chemistry,
University of Szeged, H-6720, Szeged, Tisza Lajos krt. 103., Hungary

²Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Babes-Bolyai University,
Arany János 11, RO-400028 Cluj-Napoca, Romania

³Faculty of Physics, Babes-Bolyai University,

M. Kogălniceanu 1, RO-400084 Cluj-Napoca, Romania

⁴Institute for Interdisciplinary Research on Bio-Nano-Sciences,

Treboniu Laurian 42, RO-400271 Cluj-Napoca, Romania

⁵Department of Applied and Environmental Chemistry

University of Szeged, Rerrich Béla tér 1, H-6720 Szeged, Hungary

ABSTRACT

In the present study rutile phased titanium dioxides with different primary particle sizes (5.2-290 nm) were produced by a sol-gel method followed by calcination. The photocatalysts were characterized by XRD, DRS, TEM, XPS, IR and N₂ adsorption. Their photocatalytic efficiencies were determined in the decomposition of phenol, and in the inactivation of E. coli bacteria under visible light irradiation. The results were compared with the photocatalytic performance of commercial Aldrich rutile and Aeroxide P25 powders.

Keywords: rutile; TiO₂; particle size; E. coli; phenol

ÖSSZEFOGLALÓ

Jelen tanulmányban különböző részecskeméretű (5,2-290 nm) rutil kristályfázisú titán-dioxidokat állítottunk elő kalcinálással kiegészített szol-gél módszerrel. Az előállított fotokatalizátorokat számos anyagszerkezeti vizsgálattal jellemeztük (XRD, DRS, TEM, XPS, IR, N₂ adszorpció). A fotokatalitikus aktivitás jellemzéséhez modellszennyezőként fenolt, illetve E.coli baktériumot alkalmaztunk, míg a fotokatalizátorok gerjesztéséhez látható fényt használtunk. A vizsgált fotokatalizátorokat összehasonlítottuk a kereskedelmi forgalomban kapható Aldrich rutillal, illetve Aeroxide P25-tel.

Kulcsszavak: rutil, TiO₂, részecskeméret, E.coli, fenol

Acknowledgments

This research was supported by the European Union and the State of Hungary, co-financed by the European Social Fund in the framework of TÁMOP 4.2.4. A/2-11-1-2012-0001 'National Excellence Program'. This work was partially co-financed by the Swiss Contribution (SH/7/2/20). This work was supported for the Romanian authors by a grant of the Romanian National Authority for Scientific Research, CNCS-UEFISCDI, project number PN-II-ID-PCE-2011-3-0442.

Pd(II)-szulfosalán komplexek szintézise és katalitikus tulajdonságai**Synthesis and Catalytic Properties
of Water-soluble Pd(II)-sulfonated Salan Complexes**

Dr. VORONOVA Krisztina¹, HOMOLYA Levente¹, BUNDA Szilvia¹, Dr. UDVARDY Antal¹,
Dr. BÉNYEI Attila¹, Prof. Dr. JOÓ Ferenc^{1,2}

¹Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék

²MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

Debreceni Egyetem, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Telefon: (52) 512900, e-mail: joo.ferenc@science.unideb.hu

honlap: <http://fizkem.unideb.hu/>

ABSTRACT

Several new water-soluble tetrahydrosalan-type ligands were synthesized and characterized. Their complexes with palladium(II) showed outstanding activity in hydrogenation and redox isomerization of allylic alcohols in homogeneous aqueous solutions or in aqueous-organic biphasic systems. Sonogashira-coupling of aryl halides with terminal alkynes, and Suzuki-coupling of aryl halides and phenylboronic acids in water was also efficiently catalyzed by similar Pd(II)-sulfosalan-type catalysts.

ÖSSZEFOGLALÓ

Előállítottunk és jellemeztünk számos új vízdoldható tetrahidro-szalán (szalán) típusú ligandumot. Ezek Pd(II)-komplexei kiemelkedő aktivitást mutattak allil alkoholok vizes oldatban ill. vizes szerves kétfázisú rendszerekben történő hidrogénezésében és redoxi izomerizációjában. Ugyanezen komplexek hatékonyan katalizálták vizes közegben az aril halogenidek és terminális alkinek Sonogashira-kapcsolását valamint aril halogenidek és fenilboronsavak Suzuki-kapcsolását is.

Kulcsszavak: hidrogénezés, Pd-tetrahidro-szalán komplexek, redoxi izomerizáció, Sonogashira-kapcsolás, Suzuki-kapcsolás,

Köszönetnyilvánítás:

A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0043 számú ENVIKUT projekt és a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program című kiemelt projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. A szerzők köszönik az OTKA támogatását (K101372).

Új királis foszfin-amin ligandumok előállítása és alkalmazása palládium-katalizált allilezési reakciókban

Novel Chiral Phosphine-amine Ligands and their Application in Palladium-Catalyzed Allylation Reactions

CSÁSZÁR Zsófia, FARKAS Gergely, TÓTH Imre, BAKOS József*

Pannon Egyetem, Szerves Kémia Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

*Tel.: +36 88 624 544, fax: +36 88 624 469,

e-mail: bakos@almos.uni-pannon.hu, honlap: www.uni-pannon.hu

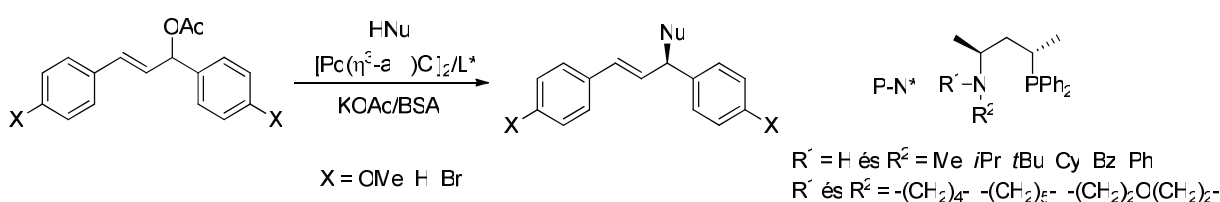
ABSTRACT

Amongst C_1 -symmetry bifunctional ligands phosphine-amines (P,N) are a particularly interesting class of compounds due to their unique stereo-electronic properties. The enantioselectivity of transition metal complexes modified with chiral P,N-ligands can be enhanced by the stereoselective coordination of one of the ligands' donor atoms. The present work focuses on the synthesis of (S,S)-pentane-2,4-diyl based P,N-ligands¹ capable of stereoselective coordination and their use in asymmetric allylic alkylation reactions. Based on our newly developed catalyst systems outstanding activities and enantioselectivities (>94% ee) could be obtained.

Keywords: asymmetric catalysis, palladium-catalyzed allylic alkylation, P,N-ligands

ÖSSZEFOGLALÓ

A foszfin-amin (P,N) típusú kelátképző vegyületek egyedülálló sztereo-elektronikus tulajdonságaiknak köszönhetően különleges helyet foglalnak el a C_1 -szimmetriájú katalizátor-módosító ligandumok között. A P,N-ligandumokkal módosított átmenetifém-komplexek enantioszelektivitása növelhető, ha a ligandum valamely donatoromja sztereoselektíven koordinálódik. Munkánk során (S,S)-pentán-2,4-diil vázat tartalmazó, sztereoselektív koordinációra képes P,N-ligandumokat állítottunk elő¹ és vizsgáltuk ezek katalitikus tulajdonságait aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban. Katalizátoraink segítségével kiemelkedő aktivitást és enantioszelektivitást (>94% ee) értünk el.



Kulcsszavak: aszimmetrikus katalízis, palládium-katalizált allil-helyzetű szubsztitúció, P,N-ligandumok

1. Farkas, G., Császár, Zs., Balogh, Sz., Tóth, I., Bakos, J. Tetrahedron Letters 55, 4120-4122 (2014).

Köszönetnyilvánítás: A kutatás a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 azonosító számú projekt és a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 Nemzeti Kiválóság Program elnevezésű projekt keretében zajlott. A projektek az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósultak meg.

Fenotiazinil-kalkonok és 2,3-dihidrobenzo-[1,4]tiazepinek előállítása**Synthesis of Phenothiazinyl-chalcones
and 2,3-dihydrobenzo-[1,4]-thiazepines**

CSEH Edina, GÁL Emese, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița

"Babes-Bolyai" Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
Kolozsvár, Arany János 11, Románia, 400028**ABSTRACT**

Chalcone is an aromatic ketone and an enone that forms the central core for a variety of important biological compounds. The substituted phenothiazine with formyl/acetyl can participate as an aldehyde or as a ketone in the synthesis of chalcones¹. The synthesis of 2,3-dihydrobenzo-[1,4]thiazepines can be achieved from chalcones with the reaction of o-aminothiophenols, in the presence of catalytic amount of acid². The benzthiazepine derivatives have a broad spectrum of biological activity, as anti-HIV, anti-depressive, antibacterial etc. activity. Pharmaceutical properties of such compounds are magnified when the heterocycle is bound to the heptatomic nucleus³.

The structure of the obtained chalcones and benzthiazepine derivatives were characterized with NMR and MS analysis. Further aims include the investigation of biological activity of the synthesized compounds.

ÖSSZEFOGLALÓ

Egy aromás aldehid és keton kondenzációs reakciójának terméke a kalkon, amelyek biológiailag aktív vegyületek központi részét képezik. A formil/acetil fenotiazin mind aldehid, mind keto komponensként részt vehet a kalkonok szintézisében¹. Az így előállított kalkonok o-aminotiofenollal savas közegben, különböző aromás 2,3-dihidrobenzo-[1,4]tiazepineket eredményeznek². A benzotiazepin származékok széleskörű biológiai aktivitással rendelkeznek: anti-HIV, anti-depresszáns, anti-bakteriális stb. Egy plusz heterociklus hozzákapsolása a benzotiazepin vázhoz, megnövelik ezen vegyületek gyógyászati tulajdonságait³.

Az előállított kalkonok és különböző aromás szubsztituenseket tartalmazó benzotiazepinek szerkezetét NMR és MS mérésekkel igazoltuk. A további céljaink közé tartozik a kapott vegyületek biológiai aktivitásának a vizsgálata.

Kulcsszavak: aldol kondenzáció, 1,4-benzotiazepin, tia-Michael addíció

Bibliográfia

E. P. Kohler, H. M. Chadwel, *Org. Synth.* **1922**, 2,1.

G. Sharma, R. Kumar, A. K. Chakraborti, *Tetrahedron Lett.*, **2008**, 49, 4272-4275.

X-L. Wu, F-M. Liu, S-W. Shen, *J. Het. Chem.*, **2010**, 47, 1350-1355

Fenotiazin alapú benzthiazolok szintézise és szerkezet vizsgálata

Synthesis and Structural Analysis of Phenotiziny-Benzthiazoles

DORNER Norbert-Zsolt, BRÉM Balázs, GÁL Emese, LOVÁSZ Tamás,
SILAGHI-DUMITRESCU Luminița

“Babes-Bolyai” Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár,
Arany János 11, Romania, 400028, rnerorbort@gmail.com

ABSTRACT

The 1,3- and 1,4-thiazine ring systems are important skeletons of natural products¹. The 1,4- thiazine ring system has an important role in pigments and dyestuffs², and has been shown to exhibit wide-ranging biological activities, such as anticancer, antifungal, antioxidant, antihypertensive, analgesic, cardiovascular, antimalarial, and antimicrobial, etc.

Over the past few decades, three main methods have been developed for the synthesis of benzothiazoles. One method involves the condensation reactions of 2-amino thiophenols with carboxylic acids³ or aldehydes⁴ under oxidative conditions. Another method involves the transition-metal-catalyzed intramolecular cyclization of 2-haloanilides or their analogues⁵. The last method involves the condensation reactions of 2-amino thiophenols with β -ketonitriles, β -ketoesters, or β -diketones at high temperature under microwave irradiation⁶.

Generally, oxidative cyclization is an efficient approach for the synthesis of thio-benzanilides by using various oxidants (quinone, bromine, and hypervalent iodine, or metal salts). Starting from phenothiazinyl-amides we obtained thio-amides with use of Lawson reagent. An intramolecular functionalization and cyclization were achieved by using FeCl_3 catalyst and $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$, affording various phenothiazinyl-benzothiazoles in moderate to excellent yields.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az 1,3- és 1,4-tiazin gyűrűrendszerek egyes fontos természetes vegyületek vázát képezik. A 1,4-tiazin gyűrűrendszer megtalálható a színezékekben és kimutatták hogy széles körű biológiai aktivitással, rákellenes, gombaellenes, antioxidáns, vérnyomáscsökkentő, fájdalomcsillapító, maláriaellenes és antimikrobiális hatással rendelkeznek.

Az elmúlt néhány évtizedben, három fő szintézis utat fejlesztettek ki a benzotiazolok előállítására. Az egyik eljárás magában foglalja a 2-amino-tiofenol kondenzációját aromás savakkal vagy aldehidekkel oxidatív körülmények között. Egy másik eljárás alapja az átmenetifém katalizálta intramolekuláris gyűrűzárása a 2-halo-anilideknek vagy ezek analógjainak. A harmadik módszer a 2-amino-tiofenol és β -ketonitril, β -ketoészter, vagy β -diketonok kondenzációjával, magas hőmérsékleten mikrohullámú aktíválással.

Egy hatékony eljárás a tiobenzanilidek szintézisének az oxidatív gyűrűzárása különböző oxidálószerrel segítségével (kinonok, bróm, jód, fém sók). Fenotiazinil-amidokból kiindulva sikeresen előállítottunk tioamidokat, Lawson reagenst használva. Ezt követően 10% FeCl_3 katalizátor és $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$ oxidálószerrel fenotiazinil-benzthiazolokat szintetizáltunk.

Kulcsszavak: tiazin, tiazol, fenotiazin, benzthiazol, gyűrűzárás

¹ S.J. Teague, A.M. Davis, P.D. Leeson, T. Oprea, *Angew. Chem. Int. Ed.* 38, 3743–3748 (1999)

² A. Aiello, E. Fattorusso, P. Luciano, M. Menna, G. Esposito, T. Iuvone, D. Pala, *Eur. J. Org. Chem.* 89, 8–900 (2003)

³ (a) Sharghi, H.; Asemami, O. *Synth. Commun.* 2009, 39, 860. (b) Wen, X.; El Bakali, J.; Deprez-Poulain, R.; Deprez, B. *Tetrahedron Lett.* 2012, 53, 2440.

⁴ (a) Blacker, A. J.; Farah, M. M.; Hall, M. I.; Marsden, S. P.; Saidi, O.; Williams, J. M. *J. Org. Lett.* 2009, 11, 2039. (b) Inamdar, S. M.; More, V. K.; Mandal, S. K. *Tetrahedron Lett.* 2013, 54, 579.

⁵ (a) Haibo Wang, a Lu Wang, a Jinsai Shang, a Xing Li, a Haoyuan Wang, a Jie Guia and Aiwen Lei, *Chem. Commun.*, 2012, 48, 76–78

⁶ Kamila, S.; Koh, B.; Biehl, E. R. *J. Heterocycl. Chem.* 2006, 43, 1609.

Az epinefrin tanulmányozása elektrokémiai módszerek segítségével

The Study of Epinephrine by Electrochemical Methods

Ileana Elisabeta ELEKES, Conf. dr. ing. Graziella Liana TURDEAN

Chemical Engineering Department, „Babes-Bolyai” University, 11, Arany Janos St,
400028 Cluj-Napoca, Romania, *Email: silai_ilonka@yahoo.com; gturdean@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

Epinephrine (EP) or adrenaline, a hormone of the catecholamine family, is an important neurotransmitter in the mammalian central nervous system and plays a very important role in the function of central nervous, renal, hormonal, and cardiovascular systems. Commonly, EP is used as a vasoconstrictor, cardiac stimulator and bronchodilator drug to treat anaphylactic shock, bronchial asthma and organic heart disease. A selective detection of EP is obtained at metallic electrodes, but the development of new materials using nanoparticles, carbon nanotubes, polymers, graphene/gold nanocomposites, dye doped sol-gel, conductive diamond electrodes, organic/and inorganic modifier increase the analytical performances of modified electrodes [1, 2].

The aim of this work was the study of the influence of the experimental conditions (scan rate, frequency, pH) on the electrochemical behaviour of epinephrine at bare graphite electrode, by both cyclic and square-wave voltammetry, in order to estimate the characteristic electrochemical parameters for explain the mechanism of the redox process. The estimation of epinephrine concentration in real sample (adrenaline vials) was obtained by standard addition methods.

Keywords: epinephrine, graphite electrode, cyclic voltammetry, square-wave voltammetry

ÖSSZEFOGLALÓ

Az epinefrin (EP) vagy más néven adrenalin a katekolaminok családjába tartozik. Az epinefrin szelektív kimutatására fém elektródokat használunk, amelyek teljesítményét növelni lehet módosított elektródok segítségével; ezeket különböző anyagok felhasználásával nyerjük, mint például a nanorészecskék, szén nanocsövek, polimerek és grafén/arany nanokompozitok [1, 2].

A dolgozat célja a kísérleti körülmények hatásának tanulmányozása (szkennelési sebesség, frekvencia, pH) az epinefrin elektrokémiai viselkedésére a grafit elektródon. A redox folyamatok megértése érdekében ciklikus és négyzőghullám voltammetriával meghatározzuk a jellegzetes elektrokémiai paramétereket. Az adrenalin fiolákban levő epinefrin koncentrációjának becslésére standard addíciós módszert használtunk.

Kulcsszavak: epinefrin, grafit elektród, ciklikus voltammetria, négyzőghullám voltammetria

References/Könyvészet

- E. I. Korotkova, O. A. Voronova, E. V. Dorozhko, Journal of Solid State Electrochemistry, **2012**, 16, 2435.
A. Masek, M. Zaborski, E. Chrzescijanska, Food Chemistry, **2011**, 127, 699.

Csurgalékvízből származó baktériumok fenolbontó képességének vizsgálata

Determining the Phenol-degrading Potential of Bacteria Isolated from a Landfill Leachate-treating Bioreactor

FIKÓ Dezső Róbert¹, JAKAB Ervin², KOVÁCS Erika¹, FELFÖLDI Tamás^{1,3}, MÁTHÉ István¹

¹Sapientia EMTE, Műszaki és Társadalomtudományi Kar, Biomérnöki Tanszék,
Csíkszereda, RO-530104, Szabadság tér 1, Tel.: 40-266-31 71 21, Fax 40-266-37 20 99,
e-mail: fiko_robi@yahoo.com, kovacserika@sapientia.siculorum.ro, matheistvan@sapientia.siculorum.ro,
www.sapientia.siculorum.ro

²Bukaresti Műszaki Egyetem, Alkalmazott Kémia és Anyagtudományok Kar,
RO-060042, Bukarest, Splaiul Independenței 313, Tel.: 4021-402 96 24, Fax 4021-402 39 34,
e-mail: jakab.ervin@gmail.com, www.upd.ro

³Eötvös Loránd Tudományegyetem, Mikrobiológiai Tanszék, Pázmány Péter sétány 1/C,
e-mail: tamas.felfoldi@gmail.com, www.elte.hu

ABSTRACT

We isolated 9 bacterial strains from landfill leachate of communal waste deposit in Cekend (Romania), where a phenol containing mineral medium was used for isolation. We identified 7 species by using the 16S rDNA gene sequences and we tested those strains phenol biodegradation capacity. *Pusillimonas ginsengisoli* CFI-78 strain can use phenol in maximum 300 mg/L concentration, while *Acinetobacter schindleri* CFI-80 strain can degrade 700 mg/L phenol in maximum 84 hours.

ÖSSZEFOGLALÓ

A cekendi hulladéklerakó csurgalékvíz-tisztító reaktorából 9 baktériumtörzset izoláltunk fenolt tartalmazó ásványi táplevest használva. A DNS alapú fajmeghatározás alapján 7 fajt azonosítottunk, amelyek fenolbontó képességét teszteltük. A *Pusillimonas ginsengisoli* CFI-78 törzs legfennebb 300 mg fenol/L, míg az *Acinetobacter schindleri* CFI-80 törzs 700 mg fenol/L teljes lebontására volt képes maximum 84 óra alatt.

Kulcsszavak: csurgalékvíz, fenolbontó baktériumok, 16S rDNS báziselemzés

**Pd nanorészecske alakjának hatása
a szennyezők fotokatalitikus bontására, illetve a H₂ fejlesztésre**

**The Effect of the Pd Shape on the Photocatalytic Degradation
of Organic Pollutants and H₂ Evolution**

FODOR Szilvia¹, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2}, Dr. Lucian BAIA^{2,4},
Dr. Virginia DANCIU¹, Dr. Adriana VULPOI^{2,4}, Dr. DOMBI András³, Dr. HERNÁDI Klára³

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818
web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár
Mihai Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906
web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar,
Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720
web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár
Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906
web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

ABSTRACT

Nowadays the elimination of environmental pollution is getting more and more attention, in which the photocatalytic processes are considered as a promising solution. Consequently, various shapes of palladium nanoparticles were deposited on commercial titanias and their photocatalytic efficiencies were evaluated (pollutant degradation/H₂ evolution). These nanomaterials were successfully characterized applying different techniques, such as (XRD, HRTEM, DRS).

Keywords: photocatalysis, palladium nanoparticles, H₂ production, organic contaminants

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban fokozott figyelmet fordítanak a környezetszennyezés folyamatának a megfordítására, melyben jelentős szerepet tölthet be a fotokatalízis, mint ígéretes megoldás. Kutatásaink során különböző alakú Pd nanorészecskékkel módosított TiO₂-t állítottunk elő, melyeket szerves szennyezők bontására, valamint H₂ fejlesztésre alkalmaztunk. Ezen anyagok, szerkezetét/morfológiáját különböző módszerekkel sikeresen felderítettük (XRD, HRTEM, DRS).

Kulcsszavak: fotokatalízis, palládium nanorészecskék, H₂- fejlesztés, szerves szennyezők

**A Z-mátrix és szimmetria alkalmazása
a kvantumkémiai modellezésben;
esettanulmány**

**The Use of Z-matrices and Symmetry in Quantumchemical Modelling;
a Case study**

GAL Cristian Andrei¹, Dr. KUN Attila-Zsolt vegyészmérnök adjunktus²

Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar magyar tagozat
Arany János utca. 11 szám, 400028, Kolozsvár

Tel.: 40-264-593833, 40-264-593877, 40-264-593844, 40-264-591998, Fax: 40-264-590818

<http://www.chem.ubbcluj.ro/~hu/hu/index.html>

¹ galkrisztianandras@yahoo.com, ² zak@chem.ubbcluj.ro

ABSTRACT

In our work we should emphasize on the role of properly constructed Z-matrices in molecular modelling. The choice of internal variables determines the symmetry and the available degrees of freedom of the system.

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánkban szeretnénk bemutatni azt, hogy mennyire hasznos lehet a megfelelően felépített Z-mátrix alkalmazása egyes molekulák modellezésében. Továbbá, szeretnénk rávilágítani még a változók kiválasztásának fontosságára és a szabadsági fokok szabályozhatóságára.

Kulcsszavak: Z-mátrix, szimmetria, szabadságfok, molekulamodellezés, potenciálisenergia-felület

**Kereskedelmi titán-dioxidok fotokatalitikus aktivitásának
és hidrogénfejlesztő képességének finomhangolása
arany és platina nanorészecskék együttes alkalmazásával**

**Fine Tuning of the Photocatalytic Activity and Hydrogen Production
Capacity of Commercial Titanias with Simultaneous Gold and Platinum
Nanoparticle Deposition**

HAMPEL Boglárka¹, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2}, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. Virginia DANCIU¹,
Dr. DOMBI András³, Dr. HERNÁDI Klára³, Dr. Lucian BAIA^{2,4}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár

Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Mihai Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar,
Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

ABSTRACT

During the present research gold and platinum nanoparticles were deposited on three different commercial titanias (P25, Aldrich anatase, Aldrich rutile). The deposition order and the proportion of Au and Pt were taken into consideration, while impregnation and in situ methods were used. For these composites the photocatalytic activity (oxalic acid degradation) and hydrogen production capacity was evaluated under UV irradiation. The morpho-structural properties were investigated by using SEM, DRS, TEM and XRD methods.

Keywords: Titania, gold, platinum, UV light, photocatalysis

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásaink során három különböző kereskedelmi titán-dioxidot (P25, Aldrich anatóz, Aldrich rutil) vittünk kompozitba arannyal, illetve platínával. Munkánk során figyelembe vettük az Au és a Pt leválasztási sorrendjét és arányát, miközben impregnálás és in situ módszereket alkalmaztunk. Ezeknek az előállított anyagoknak vizsgáltuk a hidrogénfejlesztő képességét és fotokatalitikus aktivitását oxálsavra, UV fény hatására. A kompozitok szerkezeti tulajdonságait SEM, TEM, DRS és XRD segítségével tanulmányoztuk.

Kulcsszavak: Titán-dioxid, arany, platina, UV fény, fotokatalízis

2-ferrocenilpiridazin-3(2H)-ion származékok szintézise jódferrocén keresztkapcsolási reakcióival

Synthesis of 2-ferrocenylpyridazin-3(2H)-thione Derivatives via Cross-Coupling Reactions of Iodoferrocene

Tamás JERNEI; Dr. Antal CSÁMPAI

Eötvös Loránd University, Institute of Chemistry, Department of Inorganic Chemistry
Budapest, Hungary
jernei@caesar.elte.hu

ABSTRACT

In literature a considerable attention has been paid to different classes of cross-coupling chemistry of ferrocene-based precursors to obtain a variety of target compounds relevant in material science, catalysis and biological tests. The majority of these reactions are Suzuki- or Sonogashira-couplings, but there are only scattered examples for Buchwald-Hartwig-type protocols. In the frame of our ongoing research we envisaged the extension of the group of ferrocene-based heterocycles, having valuable biological activity, by coupling ferrocene-containing precursors to lactame-type nitrogen incorporated in a heterocyclic scaffold. According to our strategy it is advantageous to terminate the synthetic pathway with the cross-coupling step which may be accompanied by significant degradation of the organometallic residue.

ÖSSZEFOGLALÓ

Az irodalomban jelentős figyelem irányult a ferrocén-alapú prekursorok keresztkapcsolási reakcióira, melyek segítségével olyan célvegyületekhez juthatunk, amelyek felhasználhatóak anyagtudományban, katalízisben, valamint gyógyszerkémiaiában. Ezen reakciók többsége Suzuki- vagy Sonogashira-kapcsolás, azonban Buchwald-Hartwig-típusú eljárásokra kevés példa fordul elő. Kutatásunk középpontjában ferrocén-alapú heterociklusos vegyületek voltak, amelyeknél jelentős biológiai aktivitásra számíthatunk, melyekben egy ferrocént tartalmazó prekuzort egy laktám-típusú, heterociklusos vázba ágyazott nitrogénhez kapcsolunk. Elképzelésünk szerint, a korábbiakban ismertetett módszer alapján, előnyös a fémorganikus részletet a szintézis végén kapcsolni, mert ezzel megelőzhető a ferrocén-csoport bomlása.

Kulcsszavak: jódferrocén, piridazin-3(2H)-ion, keresztkapcsolási reakció, Buchwald-Hartwig, katalízis

Komposzt minták biológiailag hozzáférhető nehézfém tartalmának becslése és vizsgálati módszerének validálására alkalmas referencia minta előállítása

Estimation of Bioavailable Heavy Metals Content in Compost Samples and Validation of Analytical Methods for the Reference Material

JÓNÁS Miklós^{1,3}, Dr. ALEKSZA László², Dr. HORVÁTH Márk¹, HORVÁTH Zoltán³, KOVÁCS Katalin¹, Dr. HELTAI György¹

¹ Szent István Egyetem, Kémia és Biokémia Tanszék, HU – 2103 Gödöllő. Páter Károly út. 1.

² Szent István Egyetem, Víz – és Hulladékgazdálkodási Tanszék, HU – 2103 Gödöllő. Páter Károly út. 1.

³ Babes-Bolyai Tudományegyetem Környezettudományi és Környezetmérnöki Tanszék, RO – 400294, Cluj-Napoca, Cluj, Fantanele út 30.

ABSTRACT

In this work we analysed the bioavailable of the heavy metals content from the industrial compost. After appropriate soil sample preparation: removing foreign materials, shredding, homogenising, adding homogeneous reference samples, we had two main aims. First aim was to make a samples from industrial compost for interlaboratory reference material for elemental analysis. Second aim was to make the validation of the analytical methods, for bioavailable heavy metal content of the environmental sample.

Keywords: compost, bioavailability, heavy metal, homogenisation, reference sample

ÖSSZEFOGLALÓ

Munkánk során ipari komposzt biológiailag hozzáférhető nehézfém tartalmát vizsgáltuk. Célunk az volt, hogy az ipari komposztból, megfelelő minta-előkészítés után (idegen anyagok eltávolítása, aprítás, homogenizálás, homogén mintabázis adagolása) egy olyan referencia mintát tudjunk előállítani, mely alkalmas szolgáltató/oktató laboratóriumok közötti körvizsgálatokra, illetve környezeti minták biológiailag hozzáférhető nehézfém tartalmának vizsgálatára kifejlesztett, hatékony elemzési módszerek validálására.

Kulcsszavak: komposzt, biológiailag hozzáférhető, nehézfém, homogenitás, referencia minta

Betti bázisok alkilezése és komplexálási reakciói

Alkylation and Complexation Reaction of Betti Bases

MIHÁLY Réka, GÁL Emese, LOVÁSZ Tamás

Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Szerves kémia tanszék, Babeş–Bolyai Tudományegyetem,
Kolozsvár, Arany Janos utca, 11 szám, postakód 400028, tel.: 40-264-591998, fax: 40-264-590818,
e-mail: mihaly_reka@yahoo.com

ABSTRACT

Betti bases type aminonaphthols are obtained by a three-component Mannich reaction between a carbaldehyd-, an amino compound and naphthol. The phenolic hydroxyl, and amino groups make the aminonaphthols usefull synthetic building blocks for complex organic molecules.[1] Optical active Betti bases are used as chiral ligands for enantioselective addition of dialkyl zinc to aryl aldehydes -[2]and as ligands in palladium-catalyzed Mizoroki– Heck -[3] and Suzuki-[4] reaction.

Our work was focused on the synthesis of aminonaphthols. We have studied the alkylation of the synthesed aminonaphthols and their use as ligands in complexation reactions with transition state metals.

ÖSSZEFOGLALÓ

A Betti-bázisok α/β -naftol valamint különböző amin- és aldehid-komponens Manich kondenzációja révén keletkeznek. Az ebbe a vegyületcsoportba tartozó aminonaftol származékok különböző antibakteriális aktivitással rendelkező vegyületek alapanyagai.[1] A királis aminonaftolok fémkomplexei sztereospecifikus reakciókban hatékony katalizátorok., alkalmazzák Suzuki-[4], Mizoroki-Heck reakciókban [3], illetve királis ligandumként is a dietil-cink és aldehid enantioszelektív addíciós reakcióiban [2].

Kutatásunk első részében különböző Betti-bázisok előállítását hajtottuk végre. Vizsgáltuk az előállított aminonaftol származékok alkilezési reakcióit alkil-halogenidekkel, valamint tanulmányoztuk ligandumként való felhasználásukat átmeneti fémkomplexek előállítására.

Keywords / Kulcsszavak: aminonaftol, királis ligandum, alkilezési reakció, fémkomplex,

Acknowledgments / Köszönetnyilvánítás: World Federation of Scientists- National Scholarship Programme 2014

Bibliography / Irodalom:

1. N. C. Desai, H. K. Shukla, N. A. Langalia, J. Ind. Chem. Soc., **1984**, 61, 711-721
2. C. Cimarrelli, G. Palmieri, E. Volpini, Tetrahedron: Asymm., **2002**, 13, 2417-2426
3. R. Anju, V. Ashutosh, Synth. Com., **2012**, 42, 1778-1785
4. A. R. Chaudhary, A. V. Bedekar, App. Org. Chem., **2012**, 26, 430-437

β -formil-porfirin származékok Knoevenagel típusú kondenzációs reakciói**Knoevenagel Condensation Reactions of β -formyl-porphyrins**

MOLNÁR Éva Andrea, GÁL Emese, LOVÁSZ Tamás, Luminița SILAGHI–DUMITRESCU

Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Szerves kémia tanszék, Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Arany Janos utca, 11 szám, postakód 400028, tel.: 40-264-591998, fax: 40-264-590818, e-mail: molnar_evike@yahoo.com

ABSTRACT

Formyl porphyrins are important intermediates in the construction of more elaborated systems, using several approaches, including the classical reactions of carbalddehyde groups (e.g. Wittig, Grignard, Knoevenagel) [1]. Two important methods for the introduction of formyl groups into a porphyrin macrocycle are: Vilsmeier-Haack reaction [2] and Duff reaction [3]. The formylation reactions are usually carried out by using metal complexes (Cu, Ni), using a 20 fold excess of formylating agent [4].

In our case, a mixture β -formyl and β,β' -diformyl compounds was obtained by Vilsmeier-Haack reaction of Cu and Ni complexes of 5,10,15,20-tetramethoxyphenyl-porphyrin and the products were separated by column chromatography. The Knoevenagel condensation of the β -formyl-meso-methoxyphenyl-porphyrins with N-methyl-4-methylpyridinium iodide salts was carried out in the presence of catalytic amounts of pyridine [5]. The structure of the obtained compounds were confirmed by NMR and MS measurements, the optical properties were studied using UV-Vis spectroscopy.

ÖSSZEFOGLALÓ

A formil csoport jellegzetes reakcióképességének köszönhetően a formil-porfirinnek alkalmasak bonyolult makrociklusos vegyületek előállítására (Wittig, Grignard, Knoevenagel) [1]. Az aldehid csoport β -pozícióba való bevitelére alkalmas módszerek: a Vilsmeier-Haack formilezés [2], illetve a Duff formilezés [3]. A formilezési reakciók csak a porfirinek fémkomplexei (Cu, Ni) esetében végezhetőek el, a formilező ágenszt 20-szoros fölöslegben használva [4].

A kutatómunka során az 5,10,15,20-tetrametoxifenil-porfirin Cu és Ni fémkomplexének Vilsmeier-Haack formilezésével β -monoformilezett és β,β' -diformilezett porfirin származékot tartalmazó termékkeverék keletkezett. Az oszlopkromatográfiás módszerrel elválasztott β -formil-mezo-tetrametoxifenil-porfirin vegyületeken Knoevenagel típusú kondenzációt végeztünk, N-metil-4-metilpiridinium-jodid felhasználásával, katalitikus mennyiségű piperidin jelenlétében [5]. Az előállított vegyületek szerkezetét NMR és tömegspektroszkópiás módszerrel igazoltuk, az optikai tulajdonságokat pedig UV-Vis spektroszkópiával vizsgáltuk.

Kulcsszavak: Vilsmeier-Haack formilezés, Knoevenagel kondenzáció, formil-porfirin, fémkomplex

Köszönetnyilvánítás: World Federation of Scientist - National Scholarship Programme - 2014

Felhasznált irodalom

- [1] A. Balakumar, K. Muthukumaran, J. S. Lindsey, *J. Org. Chem.*, **2004**, 69, 5112-5115
- [2] N. M. M. Moura, M. A. F. Faustino, M. G. P. M. S. Neves, A. C. Duarte, J.A.S. Cavaleiro, *J. Porphyrins Phtalocyanines*, **2011**, 5, 652-658
- [3] M. Yaseen, M. Ali, M. N. Ullah, M. A. Munawar, I. Khokhar, *J. Heterocyclic Chem.*, **2009**, 46, 251-255
- [4] M. Momenteau, B. Looock, E. Bisagni, M. Rougee, *Can. J. Chem.*, **1979**, 57, 1804-1813
- [5] L. Găină, I. Torje, E. Gal, A. Lupan, C. Bischin, R. Silaghi-Dumitrescu, G. Damian, P. Lönnecke, C. Cristea, L. Silaghi-Dumitrescu, *Dyes and Pigments*, **2014**, 102, 315-325

Külső hatásokra válaszoló arany(I) komplexek mechanokémiai előállítása

Mechanochemical Synthesis of Stimuli-responsive Gold(I) Complexes

OLÁH Laura,^{1,2} MOLNÁR Miklós,² JOBBÁGY Csaba,² MARSÍ Gábor,² Dr. DEÁK Andrea²

¹Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A,

Tel.: +36-1-372-2500, fax: +36-1-372-2592

web: <http://www.chem.elte.hu>

²MTA TTK SZKI Lendület Szupramolekuláris Kémiai Laboratórium,

1117 Budapest, Magyar Tudósok körútja 2, Tel.: +36-1-3826-514,

web: <http://www.ttk.mta.hu/szki/szupramol/>,

e-mail: deak.andrea@ttk.mta.hu

ABSTRACT

Stimuli-responsive materials that can alter their luminescence properties in response to external stimuli (thermal, optical, mechanical, solvent, anion etc.) are the focus of widespread research interest due to their practical applications. We have developed new mechanochemical methods for the synthesis of dinuclear $[\text{Au}_2(\text{diphos})_2](\text{X})_2$ (diphos = bis-diphenylphosphine) complexes. We have studied the photoluminescence, mechanochromic- and vapochromic luminescence properties of the as-synthesized dinuclear gold(I) complexes.

ÖSSZEFOGLALÓ

A külső hatásra (hő, fény, mechanikai erő, oldószer, anion stb.) lumineszcens színüket megváltoztató anyagok gyakorlati felhasználásuk révén széleskörű kutatási érdeklődésre tartanak számot. Újszerű mechanokémiai eljárást dolgoztunk ki kétmagvú $[\text{Au}_2(\text{diphos})_2](\text{X})_2$ (diphos = bisz-difenil-foszfín) komplexek előállítására. Tanulmányoztuk az így előállított kétmagvú arany(I) komplexek fotolumineszcens, mechanokróm lumineszcens és vapokróm lumineszcens tulajdonságait.

Kulcsszavak: arany(I), mechanokémia, fotolumineszcens, mechanokróm lumineszcens, vapokróm lumineszcens

TiO₂/WO₃ kompozit fotokatalizátorok előállításának módosításával

Preparation of TiO₂/WO₃ Composite Photocatalysts by the Adjustment of the Semiconductors' Surface Charge

ORBÁN Eszter¹, KEDVES Zsolt¹, SASZET Kata¹, FODOR Szilvia¹, HAMPEL Boglárka¹, TÓTH Zsejke-Réka¹, SZÉKELY István¹, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2,3}, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. Virginia DANCIU¹, Dr. Lucian BAIA^{2,4}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár
Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818
web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár
Mihail Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906
web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar,
Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720
web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem,
Kolozsvár, Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271,
tel:40-264-405300, fax:40-264-591906
web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

ABSTRACT

The present research focused on the preparation of TiO₂/WO₃ (24 wt.%) composite photocatalysts for the photodegradation of methyl orange under UV light. The composites were prepared by the adjustment of the surface charge of the individual semiconductors, realizing a homogeneous distribution of the components within the composite. The individual WO₃ and TiO₂ nanocrystals were obtained either by sol-gel or by hydrothermal synthesis. The produced nanomaterials were characterized by using TEM, SEM, XRD and DRS.

Keywords: semiconductor composites, photocatalytic activity, titania, tungsten oxide, surface charge

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásaink során különböző félvezető kompozitokat (TiO₂, WO₃) állítottunk elő, az egyéni komponensek felületi töltésének módosításával, biztosítva ezáltal az egyenletes eloszlást a kompoziton belül. Ezeket a félvezető oxidokat szol-gél vagy szolvotermális úton állítottuk elő. Az előállított kompozitokat TEM, SEM, XRD és DRS segítségével jellemeztük. A fotokatalitikus hatékonyságát sikeresen felmértük ezeknek az anyagoknak metil narancs bontásával UV megvilágítás mellett.

Kulcsszavak: félvezető kompozitok, fotokatalitikus aktivitás, titán-dioxid, volfram-trioxid, felületi töltés

A formiát ion és a pH hatása a nem-szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyagok vákuum-ultraibolya fotolízisére

The Effects of Formate Ion and pH on Vacuum Ultraviolet Photolysis of NSAIDs

RÓZSA Georgina¹, ARANY Eszter¹, ALAPI Tünde^{1,2}, KOZMÉR Zsuzsanna¹,
SIMON Gergő¹, DOMBI András¹

¹Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Kémiai Tanszékcsoport, Környezetkémiai Kutatócsoport, MAGYARORSZÁG, HU-6720 Szeged, Dóm tér 7.
Tel.: +36 62 54 4719, georgina09@gmail.com

²Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, MAGYARORSZÁG, HU-6720 Szeged, Dóm tér 7.

ABSTRACT

Advanced oxidation processes (AOPs) are based on the generation of reactive free radicals to induce the transformation of the organic contaminants. Vacuum ultraviolet (VUV) photolysis is a clear and easy method for the generation of reactive radicals ($\cdot\text{OH}$ and $\text{H}\cdot$), using Xe excimer lamp ($\lambda_{\text{max}}=172$ nm).

During this work the VUV photolytic degradation of non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) (ibuprofen, ketoprofen, naproxen, diclofenac) were examined. The impact of the hydroperoxyl radical/superoxide radical anion pair was also investigated using two different radical scavengers, HCOOH and HCOONa. We also examined the effect of the pH on degradation of these NSAIDs using HCl and NaOH. The results show that the formate ion reduced the transformation rate of NSAIDs.

ÖSSZEFOGLALÓ

A nagyhatékonyságú oxidációs eljárás során a bomlás reaktív szabad gyökök ($\cdot\text{OH}$ és $\text{H}\cdot$), illetve a szerves szennyezőkből képződő gyökök hatására megy végbe. Egyik ilyen módszer a vákuum ultraibolya (VUV) fotolízis, amely egy rendkívül tiszta és egyszerű eljárás, mely során 172 nm-es hullámhosszúságú fotonokat sugárzó Xe excimer lámpát alkalmazunk.

A munkánk során a nem szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyagok (ibuprofen, ketoprofen, naproxen, diklofenák) bomlási sebességét vizsgáltuk VUV-fotolízisük során. $\cdot\text{OH}$ gyöktranszferként HCOOH-t és HCOONa-ot alkalmaztunk, melyek bomlása során képződő szerves gyökök és gyökionok továbbalakulásából származó hidroperoxilgyökké és szuperoxid gyökionok hatását követtük nyomon. Azt, hogy a gyökpárosból melyik van nagyobb koncentrációban jelen az oldatban, a pH határozza meg. A pH hatását is megvizsgáltuk HCl-t és NaOH-ot alkalmazva, amely szintén befolyással van a gyógyszerhatóanyagok bomlására. Az eredmények azt mutatják, hogy a gyógyszerhatóanyagok átalakulási sebessége lecsökkent formiátion hatására.

Kulcsszavak: AOPs, NSAIDs, szabad gyökök, formiát ion, pH

Különböző morfológiájú TiO₂ nanokristályok előállítása és fotokatalitikus aktivitásuk vizsgálata

Synthesis of Differently Shaped TiO₂ Nanocrystallites and Analysis of their Photocatalytic Activity

SASZET Kata¹, KEDVES Zsolt¹, VAJDA Kriszta³, KÁSA Zsolt³, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2}, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. Virginia DANCIU¹, Dr. Adriana VULPOI^{2,4}, Dr. MAGYARI Klára^{2,4}, Dr. DOMBI András³, Dr. HERNÁDI Klára³, Dr. Lucian BAIA^{2,4}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár

Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Mihail Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar, Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

ABSTRACT

TiO₂ anatase nanoparticles were synthesized via hydrothermal treatment from titanium tetrachloride and titanium butoxide. The obtained crystallites were investigated by various characterization techniques (XRD, TEM, SEM). The produced titania crystallites were used as photocatalysts for degradation of organic contaminants (phenol, methyl orange). Additionally, our two differently synthesized products were studied in parallel, regarding to particle size, shape, morphology and photocatalytic activity.

Keywords: Hydrothermal crystallization, photocatalysts, photocatalytic activity, shape tuning

ÖSSZEFOGLALÓ

Kutatásunk során különböző prekursorokból kiindulva (titán-tetraklorid, titán-butoxid) hidrotermális úton két meghatározott morfológiájú anatáz kristályfázisú TiO₂-ot állítottunk elő. A nanokristályokat különböző mérési módszerekkel jellemeztük (XRD, SEM, TEM), majd fotokatalizátorként alkalmaztuk szerves szennyezők (fenol, metilnarancs) lebontásához. A kapott eredmények alapján mind szerkezeti és morfológiai, mind fotokatalitikus aktivitás szempontjából összehasonlítottuk a két különböző úton előállított titán-dioxid nanokristály típust.

Kulcsszavak: Hidrotermális kristályosítás, fotokatalizátorok, fotokatalitikus aktivitás, morfológia szabályozás

Pirazol és pirazolin származékok szintézise és foszfinezési reakciói

Synthesis and Phosphination Reactions of Pyrazole and Pyrazoline Derivatives

SIMÓ Babette, LOVÁSZ Tamás

Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Szerves kémia tanszék, Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Arany Janos utca, 11 szám, postakód 400028, tel.: 40-264-591998, fax: 40-264-590818,
e-mail: babika92@freemail.hu

ABSTRACT

Pyrazoline and pyrazole derivatives are well-known five-membered heterocycles with a broad spectrum of interesting biological properties. Apart from this they can be used as ligands in homogeneous catalytic processes. In our research we have obtained different pyrazole and pyrazoline derivatives by ring closure reactions of 1,3-diaryl-propenones (chalcones) and phenyl-hydrazine. The resulting 1,3,5-triaryl-pyrazoles and pyrazolines were subjected to lithiation and phosphination reactions using chloro-diphenylphosphine. The synthesized phenothiazinyl-aryl, ferrocenyl-aryl pyrazoles and pyrazolines and the new phosphine derivatives can be used as ligands in the synthesis of metal complexes.

ÖSSZEFOGLALÓ

A pirazol és pirazolin származékok biológiai aktivitásuk révén fontos gyógyszeralapanyagok, de ezen kívül felhasználhatók, mint ligandumok homogénkatalitikus eljárásokban. Kutatásaink során különböző pirazol és pirazolin származékok előállításával foglalkoztunk 1,3-diaril-propenonok (kalkonok) és fenil-hidrazin gyűrűzárási reakciói által, valamint az így keletkezett 1,3,5-triaril-pirazolinok és pirazolok lítiumozási és foszfinezési reakcióit vizsgáltuk kloro-difenilfoszin felhasználásával. A szintetizált fenotiazinil-aryl, ferrocenil-aryl pirazolok és pirazolinok, valamint az új foszfin-származékok felhasználhatók, mint ligandumok, fémkomplexek előállítására.

Keywords / Kulcsszavak: pirazol, pirazolin, gyűrűzárási reakciók, kalkonok, foszfinezési reakciók.

Acknowledgments / Köszönetnyilvánítás: Romanian Ministry of Education and Research, Grant CNCSIS PNII-RU-PD 416/2009

Bibliography / Irodalom:

- N. M.M. Moura, M. A.F. Faustino, M. G.P. M. S. Neves, A. C. Tomé, E. M. Rakib, A. Hannioui, S. Mojahidi, S. Hackbarth, B. Röder, F. A. A. Paz, A. M. S. Silva, J. A. S. Cavaleiro, *Tetrahedron*, **2012**, 68, 8181-8193
K. M. Dawood, T. M. A. Eldebss, H. S.A. El-Zahabi, M. H. Yousef, P. Metz, *European Journal of Medicinal Chemistry*, **2013**, 70, 740-749
T. Lovász, Gy. Túrós, L. Gaina, A. Csámpai, D. Frigyes, B. Fábrián, I. A. Silberg, P. Sohár, *Journal of Molecular Structure*, 2005, 751, 100–108

Nulladik generációjú aromás magú dendrimerek szintézise és jellemzése

Synthesis and Characterization of Zero Generation Dendrimers Containing Aromatic Core

SIPOS Tímea-Anita MSc. hallgató,
Dr. FÜSTÖS Melinda-Emese, Dr. KATONA Gabriel

Babeş- Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar,
400028- Kolozsvár, Arany János 11

ABSTRACT

Dendrimers are the most widely studied dendritic polymers. In 1978 Vögtle and co-workers initiated dendrimers chemistry by synthesis of so-called "cascade molecules". Later in 1985 Tomalia's group synthesized a new family of macromolecules called dendrimers. The structure of a dendrimer consists of three main parts: the polifunctional core, the covalently attached repeating branches organized in generations and the terminal surface functional groups.

Using 1,4-bis(bromomethyl) benzene and 1,3,5-tris(bromomethyl) benzene as polifunctional aromatic cores and diethanolamine as linked branches we synthesized the zero generation dendrimers. The substances were characterized by mass spectrometry and by NMR spectroscopy studies, which confirmed the existence of conformational isomerism.

ÖSSZEFOGLALÓ

A dendrimerek a leginkább tanulmányozott dendritikus polimerek. Vögtle és munkatársai 1978-ban elsőként vezetik be a dendrimerek kémiáját ún. „kaszkád molekulák” előállításánál. Tomalia és munkatársai 1985-ben új makromolekula családot szintetizálnak, ezeket a hiperelágazó makromolekulákat dendrimereknek nevezték. Felépítése három szerkezeti egységre tagolható: egy polifunkciós mag, a maghoz kovalensen csatolt ismétlődő, elágazó egységek (generációk) és terminális funkciós csoportok, felületi csoportok.

Felhasználva aromás centrumként 1,4-bisz(brómmetil)-benzolt illetve 1,3,5-trisz(brómmetil)-benzolt és elágazó molekulaként a dietanol-amint, előállítottuk a megfelelő nulladik generációjú dendrimereket. A vegyületek jellemzésére szolgált a tömegspektrometria illetve az NMR spektroszkópiás mérések, melyek igazolták a konformációs izoméria létét.

Kulcsszavak: Dendrimer, dietanol-amin, szerves molekula

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a PN II 178/2011 projekt anyagi támogatása tette lehetővé.

Különböző alakú WO₃ félvezetők és WO₃/TiO₂ kompozitok előállítása, fotokatalikus aktivitásának vizsgálata

The Synthesis of Differently Shaped WO₃ Semiconductors and WO₃/TiO₂ Composites. Study of Their Activity in Photocatalytic Applications

SZÉKELY István¹, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2}, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. Virginia DANCIU¹, Dr. Adriana VULPOI^{2,4}, Dr. MAGYARI Klára^{2,4}, Dr. DOMBI András³, Dr. HERNÁDI Klára³, Dr. Lucian BAIA^{2,4}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár

Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Mihai Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar, Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

ABSTRACT

Differently shaped WO₃ semiconductors and WO₃/TiO₂ nanocomposites were synthesized from precursors such as tungstic acid (H₂WO₄), sodium tungstate dihydrate (Na₂WO₄·2H₂O) and ammonium metatungstate hydrate ((NH₄)₆H₂W₁₂O₄₀·xH₂O). Hydrothermal treatment was used as crystallization process in the case of the WO₃ synthesis. The as prepared nanomaterials' structure and morphology was successfully characterized using TEM, SEM, XRD and DRS. Their applicability as photocatalysts were tested for the degradation of oxalic acid/phenol and methyl orange under UV and/or VIS irradiation.

Keywords: Tungsten trioxide, hydrothermal treatment, photocatalytic activity, crystal shaping, composites, crystal phase

ÖSSZEFOGLALÓ

Különböző alakú WO₃ félvezetőket és WO₃/TiO₂ nanokompozitokat állítottunk elő volframsavból (H₂WO₄), nátrium-volframát-hidrátból (Na₂WO₄·2H₂O) és ammónium metavolframát-hidrátból ((NH₄)₆H₂W₁₂O₄₀·xH₂O), hidrotermális kristályosítást alkalmazva a WO₃ előállítás esetében. Az így előállított nanokristályos anyagokat úgy szerkezetileg, mint morfológiailag sikeresen jellemeztük különböző mérés technikákkal (TEM, SEM, XRD és DRS). A fotokatalitikus aktivitásuk meghatározására UV és/vagy látható fény megvilágítás mellett fenolt, metil-narancsot és oxálsavat bontottunk.

Kulcsszavak: Volfram-trioxid, hidrotermális kezelés, fotokatalikus aktivitás, kristálytani "alakszabászat", nanokompozitok, kristályfázis

Különböző pozícióban brómozott AB típusú porfirinek szintézise

Synthesis of Different position brominated AB-type porphyrins

SZŐKE Orsolya, GÁL Emese, SILAGHI-DUMITRESCU Luminița

„Babeş-Bolyai” Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki kar, Arany János utca, 11 szám, Kolozsvár, Románia, 400028, tel.: 40-264-591998, fax: 40-264-590818, e-mail: sz_orisi2006@yahoo.com

ABSTRACT

Porphine readily undergoes electrophilic aromatic substitution and this is one of the most useful methods for functionalizing porphyrins. The first such investigation was reported in 1968 by Samuels et al. who studied the bromination, chlorination, and iodination of porphine¹. Reaction with bromine or N-bromosuccinimide (NBS) in chloroform yielded a mono-brominated compound and a β -substituted product. Bromo groups were also found to activate the opposite meso position of the porphine. Substituents at the β -position have greater steric and electronic effects on the porphyrin ring than substituents at the meso position². Brominated porphyrins were widely used in cross-coupling reactions Heck³, Sonogashira⁴, Stille⁵, Suzuki⁶.

The porphyrins were synthesized by Adler-Longo method, with different aromatic aldehydes in acidic media. The obtained porphyrin mixture it was separated by column chromatography. The bromination of the TPP was achieved with NBS in CHCl_3 . The structure of the obtained porphin derivatives were confirmed by NMR and MS measurements.

ÖSSZEFOGLALÓ

A porfirinek funkcionálásának egyik leggyakoribb módszere a porfín gyűrű aromás elektrofil szubsztitúciója. Az első ilyen kutatásokat 1968-ban Samuels és munkatársai végezték, ahol tanulmányozták a porfirinek brómozását, klórozását, valamint jódozását¹. A porfirint kloroformban feloldva, elemi brómmal vagy N-brómszukcinimiddel (NBS) reagáltatva, egy mono-brómozott származék keletkezik. A bróm jelenléte aktiválja a porfín ellentétes meso pozícióját. A porfirin gyűrűn, a β -pozícióban levő szubsztituenseknek nagyobb a szterikus- és elektroneffektusuk, mint a meso pozícióban levőké². A brómozott porfirineket széles körben alkalmazzák kapcsolási reakciókban: Heck³, Sonogashira⁴, Stille⁵, Suzuki⁶.

A porfirineket Adler-Longo módszerrel szintetizáltuk, különböző aromás aldehidekkel savas közegben. A kapott keveréket oszlopkromatográfiás módszerrel választottuk el. A porfirint NBS-el bromoztuk, kloroformban. A kapott porfirinszármazékok szerkezetét NMR és tömegspektroszkópiás módszerrel igazoltuk.

Kulcsszavak: AB típusú porfirin, kapcsolási reakciók, brómozott porfirinek

¹ Samuels E, Shuttleworth R and Stevens TS. *J. Chem. Soc.* 1968: 2:145-147

² A. Suzuki, *J. Organomet. Chem.*, **576**, 147 (1999).

³ O. B. Locos and D. P. Arnold, *Org. Biomol. Chem.*, **4**, 902 (2006).

⁴ N. Aratani, H. S. Cho, T. K. Ahn, S. Cho, D. Kim, H. Sumi, and A. Osuka, *J. Am. Chem. Soc.*, **125**, 9668 (2003).

⁵ S. G. DiMagno, V. S. Y. Lin, and M. J. Therien, *J. Org. Chem.*, **58**, 5983 (1993)

⁶ C. Muthiah, M. Ptaszek, T. M. Nguyen, K. M. Flack, and J. S. Lindsey, *J. Org. Chem.*, **72**, 7736 (2007).

Kereskedelmi TiO₂ és különböző alakú arany nanorészecskék által alkotott kompozitok fotokatalitikus aktivitása modell szennyezők lebontására és a keletkező köztitermékek vizsgálata

Commercial TiO₂/Au Nanocomposites with Differently Shaped Gold Nanoparticles Photocatalytic Degradation of Model Pollutants and the Analysis of the Degradation Intermediates

TÓTH Zsejke Réka¹, Dr. KOVÁCS Gábor^{1,2}, Dr. PAP Zsolt^{1,2,3}, Dr. Virginia DANCIU¹, Dr. DOMBI András³, Dr. HERNÁDI Klára³, Dr. Lucian BAIA^{2,4}

¹ Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Kolozsvár

Arany János utca, nr. 11, Cluj-Napoca, RO-400028, tel:40-264-593833, fax:40-264-590818

web: <http://chem.ubbcluj.ro>, e-mail: chem@chem.ubbcluj.ro

² Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Mihai Kogălniceanu utca, nr. 1, Cluj-Napoca, RO-400084, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://phys.ubbcluj.ro>, e-mail: phys@phys.ubbcluj.ro

³ Szegedi Tudományegyetem, Környezetkémiai Kutatócsoport, Természettudományi és Informatika Kar, Aradi vértanúk tere 1, Szeged, HU-6720

web: <http://www.sci.u-szeged.hu>, e-mail: ttkdh@sci.u-szeged.hu

⁴ Interdiszciplináris Bio-Nano Tudományok Intézete, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Treboniu Laurian utca, nr. 42, Cluj-Napoca, RO-400271, tel:40-264-405300, fax:40-264-591906

web: <http://bionanosci.institute.ubbcluj.ro>, e-mail: bionanosci@bionanosci.ro

ABSTRACT

The goal of the present research was the photodegradation of model pollutants and the detection of their primary intermediates. For this purpose TiO₂/Au composites were prepared in which the gold nanoparticles' morphology was gradually changed (triangles, spheres, wires). The composites and the Au nanoparticles were characterized by TEM, XRD and DRS. Based on the obtained results a shape-activity correlation was established.

Keywords: Gold nanoparticles, intermediates, photocatalysis, model pollutants

ÖSSZEFOGLALÓ

A jelen kutatások célja a modell szennyezők fotokatalitikus bontása és azok elsődleges köztitermékeinek felismerése. Ahhoz, hogy ezt elérjük TiO₂/Au kompozitokat használtunk, változtatva az arany nanokristályok alakját (szál, gömb, háromszög). Mind a kompozitokat mind pedig az arany nanorészecskéket morfológiailag és szerkezetileg vizsgáltuk TEM, XRD, DRS segítségével. A kapott eredményekből, egy alak-aktivitás összefüggést állítottunk fel.

Kulcsszavak: Arany nanorészecskék, köztitermékek, fotokatalízis, modell szennyezők

Jegyzetek

Jegyzetek