

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar Oláh György Doktori Iskola
Képzési terv

Tartalom:

A PhD képzés elemei	2
Mintatanterv	4
Kutatási területek	5
Szervetlen Kémia	5
Szerves Kémia	8
Fizikai Kémia	14
Analitikai Kémia	17
Biokémia és Biotechnológia	20
Kémiai Technológiák	22
Vegyipari Művelettan	23
Anyagtudomány	27
Élelmiszertudomány	31
Tárgycsoportok, tantárgyak	34

A doktori iskola által meghirdetett témákban végzett **kutatási tevékenység** jelenti a doktori képzés legfontosabb részét. Minden Ph.D. hallgatóhoz (továbbiakban hallgató) egy és csak egy témavezető tartozik, aki teljes felelősséggel irányítja és segíti a témán dolgozó hallgató tanulmányait, kutatási munkáját, illetve a doktorjelölt fokozatszerzésre való felkészülését. Témavezető a BME legalább két éve tudományos fokozattal rendelkező főállású dolgozója, Professor Emeritusa, vagy az egyetemmel doktori képzésre együttműködési megállapodást kötött intézmény legalább két éve tudományos fokozattal rendelkező főállású dolgozója lehet. A BME VBK nyugdíjas dolgozói az Oláh György Doktori Iskola Tanácsának (DIT) döntése alapján vállalhatnak témavezetést. Külső témavezető mellé a DIT konzulenszt jelöl ki, aki segíti a témavezető munkáját és figyelemmel kíséri a hallgató szakmai haladását.

A doktori képzés során a hallgatók - a témavezetővel egyeztetett módon - a DIT által elfogadott tárgyak közül 1 két féléves főtantárgyat (2x10 kreditpont – továbbiakban krp), és 4 egy féléves melléktárgyat (4x4 krp) választanak. A melléktárgyak kínálatát bővíti a DIT szemináriumsorozata (4 krp). Melléktárgyként a fentiekén túlmenően maximum 50%-ban az ELTE, illetve a SOTE valamint a BME más doktori képzéseiben szereplő tárgyak is választhatók – a DIT engedélyével. A választott tárgyak megnevezését a doktoráns félévente elkészített és témavezető által aláírt munkaterve tartalmazza.

A képzés része az **irányított oktatás**, mely kötelezően választható tantárgy keretében a hallgató az előadói és kommunikációs képességeit egy kijelölt tárgyfelelős oktató irányítása alatt, előre kidolgozott és jól dokumentált oktatási anyag alapján, egyetemi kontakt-óra tartásával fejleszti. A tantárgyat és a hozzárendelt kreditet – a témavezetővel egyeztetve – a témavezető/konzulens tanszékének vezetője jelöli ki, teljesítését a kijelölt oktató javaslata alapján a tanszékvezető igazolja. A képzés idejére összesítve 24 krp teljesítendő ebben az oktatási formában.

A kutatómunkára a doktori munka előrehaladtával növekvő időráfordítással összhangban növekvő számú krp adható, melyet a témavezetővel egyetértésben határoz meg a hallgató, és teljesítését a témavezető igazolja. A kutatómunka kreditszáma úgy határozandó meg, hogy heti 40 óra kutatómunka 30 krp értékű.

Mivel a kutatómunka elengedhetetlen feltétele az eredmények publikálása, a DIT az abszolutórium megszerzését a kutatómunkán belül kötelezően előírt publikációs krp-ok

megszerzéséhez köti az alábbiak szerint:

1. A hallgató a képzési ideje alatt legalább egy a kutatómunkájával kapcsolatos szóbeli szakmai előadást kell tartson célszerűen az Oláh György Doktori Iskola évente szervezett doktoráns konferenciájának valamelyikén (5 krp). A hallgató által megtartott másik szóbeli előadás MTA munkabizottsági ülésen, illetve a DIT által elfogadott fórumon, valamint nemzetközi konferencián (ez utóbbi esetben lehetséges a doktoráns eredményeinek poszterként történő prezentációja, mely szintén 5 krp értékű).

2. A hallgató kutatómunkájának témájából a Ph.D. képzés ideje alatt megírt impakt faktorral rendelkező nemzetközi folyóiratban angol nyelven megjelent (vagy közlésre dokumentáltan elfogadott) legalább egy publikáció. Egy ilyen közlemény 10 krp értékű. Amennyiben a szerzők között több hallgató van, a krp értékeket csak a több mint 50%-os részvételi arányú hallgatónak számoljuk el.

A doktori képzésben az abszolutórium megszerzéséhez 180 krp szükséges. Ebből 120 krp a tudományos kutatómunka. A tudományos kutatómunka része a publikációs tevékenység, mely legalább egy, a hallgató által megtartott szóbeli előadás (5 krp) és legalább egy impakt faktorral rendelkező nemzetközi folyóiratban (angol nyelven) megírt publikáció (10 krp) követelményt tartalmaz, és összességében legalább 20 krp értéket el kell érjen. 36 krp az előírt tananyag elsajátítása, 24 krp az irányított oktatási tevékenység.

MINTATANTERV

Képzések és tantárgyak megnevezése	tárgy típus	Szemeszterek						Összes kredit
		1	2	3	4	5	6	
Differenciált szakmai ismeretek (lásd tárgyak: 34 oldal)								
Főtárgy	KV	10/v/10	10/v/10	-	-	-	-	20
Melléktárgy	KV	8/f/8	4/f/4	4/f/4	-	-	-	16
Oktatási tevékenységek								
Irányított oktatás	KV	4/f/4	4/f/4	4/f/4	4/f/4	4/f/4	4/f/4	24
Összesen		22	18	8	4	4	4	60
Kutatási tevékenységek								
Kutatás	KV	8/f/8	12/f/12	22/f/22	26/f/26	26/f/26	26/f/26	120
Ebből publikáció	KV				5	5	10	20
Kutatás összesen	KV	8/f/8	12/f/12	22/f/22	26/f/26	26/f/26	26/f/26	120
Összesítve		30	30	30	30	30	30	180
Jelmagyarázat:	KV: kötelezően választható tantárgy 6/v vagy f/6 - előadás/vizsga vagy félévközi jegy/kredit							

Kutatási területek

Szervetlen kémia területen:

Foszfororganikus polimerek konjugációs készségének tanulmányozása.

Korszerű elektronikus eszközökben (OLED, FET, NLO) a szerves/elemorganikus oligomerek, illetve polimerek vizsgálata intenzíven kutatott területté vált az utóbbi években, mivel a szerves vegyületek tulajdonságaiból adódóan könnyűek, jól feldolgozhatóak, s így kis energiafelhasználású azaz alacsony költségű alkalmazásokban hasznosíthatók. A foszfor-szén analógia felismerése (90-es évek) óta, foszfortartalmú heterociklusos rendszereket tartalmazó oligomerek és polimerek szintézise és optikai illetve elektronikai tulajdonságaik tanulmányozása is az érdeklődés fókuszába került. Szintetikus foszforkémiával foglalkozó kollégák csoportjaival együttműködve foszfol, illetve ditienil-foszfol bázisú oligomerek elméleti kémiai módszerek segítségével történő vizsgálatát végezzük, tanulmányozva a HOMO-LUMO felhasadást és az ezt befolyásoló tényezőket. Aromassági mérőszámok meghatározásával a konjugáció mértékére vonunk le következtetést. Időfüggő sűrűségfunkcionál számítások (TD DFT) felhasználásával bizonyítottuk továbbá, hogy ezen vegyületcsaládok optikai tulajdonságai jól megjósolhatók. A szintetikus és az elméleti munkák összehangolásával további π -konjugált foszfororganikus rendszerek megtervezett kialakítása valószínűsíthető meg.

T. Kárpáti, L. Nyulászi, R. Réau et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 6058.

L. Nyulászi, O. Hollóczki, R. Réau et al. *Org. Biomol. Chem.* **2006**, *4*, 996.

T. Kárpáti, L. Nyulászi, T. Baumgartner et al. *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 7487.

Foszfinidének előállítási lehetőségeinek vizsgálata

A szénecsoport elemeiből stabil, alacsony koordinációjú vegyületek (karbén és karbénanalógok) előállítása, valamint alkalmazási lehetőségeik feltárása új lendületet adott a nitrogénecsoport alacsony koordinációjú vegyületeit előállítani szándékozó törekvéseknek is, melyek közül a foszfinidének (R-P ípusú vegyületek) tűnnek a legígéretesebb szintetikus célnak. Ilyen típusú vegyületek stabilizálhatóságának megjósolására kiválóan alkalmazhatók *ab initio* és sűrűségfunkcionál módszereken alapuló számítások. Hasonló számításos kémiai módszerek felhasználásával nyílik lehetőség arra is, hogy alkalmas prekursorokat válasszunk ki, melyek termodinamikailag, és kinetikailag egyaránt alkalmas kiindulási anyagként szolgálnak a kívánt célvegyület előállításához. Az oldószer molekuláival való explicit kölcsönhatást számításainkban figyelembe véve további lehetőség adódik a célvegyület stabilizálhatóságának modellezésére. A számításos kémiai vizsgálatokhoz kapcsolódó szintetikus munka során kapott eredményeket figyelembe véve további lehetőség adódik a modellrendszerek számítására és az eredmények finomítására.

Z. Benkő, R. Streubel, L. Nyulászi, *Dalton Transactions*, **2006**, *36*, 4321.

Z. Benkő, D. Gudat, L. Nyulászi, *Chem. Eur. J.*, **2007**, *13*, DOI: 10.1002/chem.200701077.

Oldatban lejátszódó szerves és elemorganikus reakciók tanulmányozása explicit oldószermolekulák figyelembevételével.

Kémiai reakciók modellezésére szolgáló kvantumkémiai számításokat leggyakrabban izolált molekulákra végeznek el, mintegy a gázfázisú reaktivitást modellezve. Mivel a kémiai reakciók gyakran oldatban mennek végbe, a gázfázisú modellezés tetemes hibát okozhat, amit általában úgy vesznek figyelembe, hogy az oldószert kontinuumnak tekintik. A legnagyobb kölcsönhatási energiák (hidrogénhíd, elektronpár-donor hatások) azonban nem kezelhetők a kontinuummodell segítségével, és explicit oldószermolekulák figyelembevétele szükséges. A kutatás célja annak feltérképezése, hogy kisméretű szerves rendszerek reakciói során milyen oldószerekkel való kölcsönhatásokkal kell számolni. Vizsgálatainkhoz olyan reakciókat választunk, melyek esetén ismert, hogy a gázfázisú modellezés helytelen eredményre vezetett, mint például a szilícium-dioxid nanorendszerek előállítására használatos szol-gél eljárás (alkoxi-sziloxán hidrolízis), illetve éteres közegben lejátszódó reakciók.

J. F. Nixon, L. Nyulászi, et al. *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 7121.

Semleges hipervalens szerves-szilícium és germánium vegyületek előállítása

A 14-es főcsoport nehezebb elemei (Si, Ge) közismerten jóval nagyobb hajlandóságot mutatnak hipervalens szerkezetek kialakítására, mint a szén. Semleges hipervalens szerkezetre azonban csak elvétve található példa az irodalomban, és ezen esetekben is általában nagyon labilis és kis kötésrenddel írható le a kialakuló ötödik (esetleg hatodik) kötés, amint azt például kísérleti szerkezetekből adódó atomtávolságok mutatják. A kutatás célja olyan vegyületek megtalálása és előállítása, melyekben a szilícium (germánium) öt stabil kötéssel rendelkezik. Munkamódszernek a kvantumkémiai számítások és a szintetikus munka együttes alkalmazása látszik célravezetőnek. A számítások segítségével feltérképezhetők azok a hatások, melyek a hipervalens szerkezeteket stabilizálják. A számítások alapján legesélyesebben stabil rendszerek meghatározása után az új molekulák szintézisét kell megvalósítani, majd az új típusú rendszerek viselkedését, reaktivitását, esetleges kedvező fizikai-kémiai tulajdonságait vizsgálni.

T. Veszprémi, L. Nyulászi, J. Verkade et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 1500.

Fémkomplexek szerkezeti és spektroszkópai vizsgálata

A vizsgálatok célja szokatlan kötésszerkezetű d-elemeknek szerves ligandumokkal alkotott komplexei szerkezetének, spektroszkópai és kötési tulajdonságainak meghatározása, mivel az ilyen rendszerektől elképzelhető, hogy katalizátorként aktivitást mutassanak. Ehhez FT-IR és FT-Raman spektroszkópai - kooperációban Röntgen-diffrakciós - méréseket valamint kvantumkémiai számításokat használunk. A számításokkal meghatározzuk a komplex összes lehetséges szerkezetét, elemezzük stabilitási viszonyait. A szilárd fázisú szerkezettel összevetve értelmezzük a kristályban a szomszédos molekulák között fellépő erőket. A spektroszkópai mérésekkel, a spektrumok hozzárendelésével meghatározzuk a molekulák jellemző rezgéseit. A sávok azonosításánál nagyban felhasználjuk a kvantumkémiai számítások eredményeit. Elemezzük továbbá a komplexekben fellépő fém-ligandum kölcsönhatásokat, különös tekintettel a koordinatív kötésre.

D. Nemcsok, A. Kovács et al. *Chemical Physics*, **2006**, *328*, 85.

B. Nyulasi, A. Kovács *Chemical Physics Letters*, **2006**, *426*, 26.

A. Kovács, Z. Varga. *Coordination Chemistry Reviews*, **2006**, *250*, 710.

Szervetlen-halogenidek szerkezetvizsgálata kvantumkémiai számításokkal

Az szénecsoport elemeinek alacsony (kettes) koordinációjú vegyületei vizsgálata az elemorganikus kémiának egyik leggyorsabban fejlődő területe az utóbbi években, mióta stabil karbénok, szililének, germilének előállítására sor került, s igen kedvező tapasztalatok adódtak például katalitikus alkalmazásokban. Az alacsony koordinációjú szervetlen analógok közül a dihalogenidek is jelentős stabilitást mutatnak magasabb hőmérsékleten gázfázisban. Korábbi fém-halogenid szerkezetvizsgálatainkat követően kutatásaink célja a periódusos rendszer 14. csoportjában tartozó elemek egyes dihalogenidjeinek szerkezetvizsgálata, elsősorban magas szintű kvantumkémiai számításokkal. Az izolált molekulák szerkezetvizsgálatán túl tanulmányozandó a gőzfázis összetétele az adott rendszerek elpárologtatási hőmérsékletén a számítási eredményekből kapott termodinamikai jellemzőket felhasználva, és amennyiben indokoltnak látszik, korábbi elektrondiffrakciós kísérleti adatokat újrazsgálva.

Hargittai, M. et. al. *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 8133.

Hargittai, M. *J. Chem. Phys.* **2005**, *123*, 196101.

Varga, Z.; Hargittai, M. et al. *Chem. Eur. J.*, **2006**, *12*, 8345-8357.

Szilárd anyagok modellezése molekulafürtök számításával illetve periodikus határfeltétel modell segítségével.

Az elméleti kémiai számítások segítségével jól modellezhetők szilárd felületen lejátszódó reakciók, amennyiben sikerül egy olyan molekulafürtöt találni, amely a rendszer megfelelő leírását adja. Korábbi munkáinkban sikerült ilyen klasztereket találni szilíciumoxidok jellemzésére, és jó eredménnyel tudtunk modellezni üvegekben lejátszódó reakciókat. A fenti munkák folytatásaként periodikus határfeltételen alapuló számítások eredményével kívánjuk a molekulafürt-modell használhatóságát összevetni. Vizsgálni kívánunk továbbá felületeken lejátszódó reakciókat. A két eltérő koncepciójú modell párhuzamos használatával a szilícium-dioxid rendszerek mellett olyan gyakorlati fontossággal bíró rendszerek tanulmányozásával kívánunk foglalkozni, mint az alumínium-oxid illetve a titán-dioxid, melyek például katalitikus alkalmazásokban bírnak jelentőséggel.

I. Bakk, D. Szieberth D, *Journal of Molecular Structure-THEOCHEM*, **2006**, *770*, 111.

D. Szieberth, L. Nyulászi, E. Niecke et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 637.

Szerves Kémia területen:

Heterociklus egységet tartalmazó akirális és királis koronaéterek előállítása és molekuláris felismerésük tanulmányozása

A molekuláris felismerés, vagyis amikor két vagy több molekula az azokat körülvevő molekulahalmazból egymást kiválasztja és rendezett szerkezetté áll össze, általános és létfontosságú jelenség a természetben. E jelenség működésére példa a DNS kettős csavar kialakulása, az antitest-antigén kölcsönhatás, a szubsztrát specifikus kapcsolódása az enzim aktív centrumához, a természetes ionoforok szelektív fémion-megkötőképessége és transzportja a biomembránokon keresztül, vagy az egyféle konfigurációjú aminosavak és cukrok metabolizmusa. A molekuláris felismerés azonban - mint ezt az utóbbi évtizedek kutatási eredményei egyértelműen bizonyították – viszonylag egyszerű szintetikus makrociklusokkal, mint amilyenek pl. a koronaéterek, is kiváltható.

A koronaéter típusú makrociklusok a Nobel-díjas Pedersen munkásságát követően széleskörű kutatások tárgyát képezik nemcsak szintézisük, de számos technológiai és analitikai felhasználásuk terén is. Ezek között nagy jelentőséggel bírnak a heterociklus (piridin, piridon, akridin, akridon stb.) egységet tartalmazó koronaéterek.

A kutatás célja egyrészt olyan heterociklus egységet tartalmazó enantiomertiszta királis koronaéterek előállítása és vizsgálata, amelyek komplexképzésükben várhatóan nagy enantioszelektivitást mutatnak királis protonált primer aminok (pl. aminosavak és származékaik) enantiomerjeivel szemben, másrészt olyan akirális analogonok szintézisét és tanulmányozását célozza meg, amelyek biológiai szempontból fontos fémionokkal szemben mutatnak nagy szelektivitást. A nagy szelektivitást mutató új makrociklusokat ezután felhasználhatjuk optikai és elektrokémiai szenzorok hatóanyagaiként, vagy enantiomerek, illetve kationok szelektív elválasztására (pl. extrakcióval vagy folyadékmembránon keresztül történő szelektív transzport segítségével, illetve kromatográfiával szilikagélhez, Merrifield-féle polimer gyantához vagy egyéb szilárd hordozóhoz kötve).

P. Huszthy, M. Hollósi et al., *Tetrahedron: Asymmetry* **2006**, 17, 1883.

P. Huszthy, F. Bertha et al., *Tetrahedron: Asymmetry* **2006**, 17, 2538.

P. Huszthy, J. Fetter et al., *Tetrahedron*, **2007**, DOI: 10.1016/J.tet.2007.09.056.

Természetes szerves anyagok kutatása

Új szintézismódszer kidolgozása az Alzheimer-kór kezelésében alkalmazott galanthamin és származékai szintézisére.

A vindolin reakciókészségének vizsgálata. Új citosztatikus aktivitású vindolin-származékok szintézise.

L. Hazai, Cs. Szántay, Cs., Jr., Cs. Szántay, et al., *Synth. Commun.*, **2005**, 35, 2371.

Gy. Kalaus, I. Greiner, L. Hazai, Cs., Szántay, et al., *Tetrahedron*, **2006**, 62, 12011.

Aszpidoszpermán- és rokon indolváz alkaloidok szintézise és kémiai továbbalakítása

A 90-es évek elején egyszerű, konvergens szintézisutat dolgoztunk ki az aszpidoszpermánváz alkaloidok előállítására. Megvalósítottuk (többek között) a vinkadiformin, a taberzonin, a minovincin, és a 3-oxominovincin nevű alkaloidok első vagy racionális szintézisét. Eredményeink között említhetjük a fentiekkel közeli rokonságban lévő ibofillidin alkaloidok minden eddig ismert tagja (összesen hat alkaloid) szintézisének a megvalósítását

is. Ezen az úton továbbhaladva célul tűztük ki az említetteknél bonyolultabb, több aszimmetriacentrummal rendelkező indolvázias alkaloidok előállítását, valamint azok biomimetikus gyűrűtranszformációját (eburnánvázias alkaloidok és alkaloidszerű molekulák előállítása). Céljaink között szerepel továbbá néhány alkaloid enantioszelektív szintézisének a megvalósítása is.

Gy. Kalaus, I. Greiner, Cs. Szántay, et al. *J.Org.Chem.*, **2002**, 67, 7255.

Gy. Kalaus, I. Greiner, Cs. Szántay, et al. *Heterocycles*, **2006**, 68, 257.

Új, atropizomériát mutató vegyületek előállítása és szintetikus alkalmazása

A kutatási program keretében célul tűztük ki új, atropizomériát mutató 1-arilpirrol származékok szintézisét, az enantiomerek elválasztását és az optikailag aktív termékek ligandumként, organokatalizátorként és királis reagensként történő alkalmazási lehetőségeinek kutatását. A kutatási témában az alábbi kérdéseket kívánjuk tanulmányozni:

- a különböző irányító csoportokkal helyettesített 1-aril-pirrolok regioszelektív mono- és dimetallálását, a reakciók eredménye és az alkalmazott komplexánsok szerkezete közötti összefüggéseket,
- az előállított izomerkeverékek reszolválását,
- az optikailag aktív alapvegyületek további kémiai átalakítását amino-, hidroxil-, imidazol-, karboxil-csoportokat tartalmazó származékok előállítása céljából.
- az új királis vegyületek alkalmazási lehetőségeit reszolválószerként és katalizátorok komponenseként enantioszelektív reakciókban.

F. Faigl, et al., *Synth. Commun.* **2006**, 36, 2841.

F. Faigl, L. Poppe et al., *Chirality* **2006**, 18,.

Fémorganikus reagensek alkalmazása sztereoszelektív reakciókban

Poláris fémorganikus reagensekkel könnyen reakcióba vihetők olyan vegyületek is, amelyek csak igen gyengén savas karakterű hidrogén atomot tartalmaznak ($pK_a > 30$). A metallálás előnye, hogy olyan fémorganikus intermediereket és ezekből elektrofilekkel, vagy sztereoszelektív átrendeződési reakciókkal olyan termékeket lehet előállítani, amelyek hagyományos kémiai módszerekkel csak kerülő úton, többlépéses szintézisben nyerhetők. A jelen kutatási program keretében célul tűztük ki

- a kutatócsoportunk által nemzetközi együttműködés keretében korábban kidolgozott új sztereoszelektív átrendeződési reakciókhoz szükséges királis kiinduló anyagok általánosan használható előállítási módszerének kidolgozását (enzimatis és hagyományos reszolválás),
- az átrendeződési reakciókkal előállítható optikailag aktív oxetánok és telítetlen 1,4-diolok további átalakítási lehetőségeinek vizsgálatát,
- a kifejlesztett új szintézisúton új, királis ligandumként is hasznosítható termékek (pirrolidinek, (korona)éterek, alkoholok) előállítását.

F. Faigl, A. Thurner, B. Vas, L. Tőke, *J. Chem Res. (S)*, **2003**, 132-133.

Szabályozott hatóanyag-leadású gyógyszerkészítmények előállítása és vizsgálata

A gyógyászati célú anyagrendszerek jelentősége a műszaki anyagtudományban az utóbbi időben fokozott mértékben növekszik, s ez különösen érvényes a kontrollált hatóanyagleadású gyógyszerhordozó rendszerekre. A gyógyszergyárak részéről felmerülő igények teljesítésére lehetőséget nyújt a tanszéken kifejlesztett új eljárás, amely reaktív felületaktív anyagok segítségével kialakított nanorészecskék alkalmazásán alapul. A kutatás olyan új típusú vegyületek szintézisére irányul amelyektől az eddig kidolgozott módszerek továbbfejlesztése, valamint az alkalmazástechnikai és stabilitási jellemzők javulása várható. Az ismert és új gyógyszerformálási módszerek hatásosságát modell-gyógyszerformák hatóanyagleadásának kinetikája alapján célszerű összevetni. Az új adalékanyagok hatásának minősítése termoanalitikai, spektroszkópiai és felületanalitikai módszerekkel történik. Vizsgálni kell a módosító eljárások hatására kialakuló határfelületi réteg összetételét, a felületi réteget alkotó komponensek laterális (síkbeli) és mélységi eloszlását és ezek hatását a reológiai jellemzőkre és a termikus stabilitásra. Ennek lehetőségét teremtették meg a közelmúltban beszerzett XPS (röntgenfotoelektron spektroszkóp) AFM/microTA (atomerő mikroszkóp), Raman mikroszkóp és Thermal Scanning Rheometer berendezések. Az analitikai és alkalmazástechnikai vizsgálatok elvégzése, az eredmények feldolgozása és kiértékelése után a gyakorlatban is felhasználható összefüggéseket kell megállapítani a technológia, a szerkezet és a tulajdonságok között.

Gy. Marosi, et al., *Polymers for Advanced Technologies*, **2006**, 17, 884.

Makrociklusos receptorok szintézise és tulajdonságaik vizsgálata

A szupramolekulák harmadik generációját képviselő kalixarének (tiakalixarének, rezorcinarének) sajátos térszerkezetük és változatos kémiai átalakíthatóságuk miatt különösen alkalmasak szelektív receptor-szubsztrát kölcsönhatásokra és ezért a szenzorkutatás és fejlesztés kitüntetett célvegyületei. A kutatómunka célja olyan tervezett molekuláris kölcsönhatásokra képes kalixarén származékok, koronaéterek szintézise, amelyek alkalmasak lehetnek ionok, akirális és királis molekulák felismerésére és kellő szelektivitás esetén kémiai-, elektroanalitikai- és optikai szenzorok kifejlesztésére.

I. Bitter, E. Pretsch, et al. *Anal. Chim. Acta* **2006**, 572, 1.

I. Bitter, et al. *Tetrahedron* **2006**, 62, 10215.

Monoszacharidokból felépülő királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív reakciókban

Az egyik legkorszerűbb és legaktuálisabb kutatási irány az aszimmetrikus szintézisek, katalitikus enantioszelektív reakciók vizsgálata. A jelen kutatás célja új monoszacharid-alapú királis koronaéterek szintézise, komplexképző tulajdonságaik mellett annak vizsgálata, hogy bizonyos reakciókban fázistranszfer katalizátorként alkalmazva képesek-e aszimmetrikus indukciót kifejteni. A kutatás célja glükózból, galaktózból, mannózból stb. kiindulva 15-24 tagú, a gyűrűben oxigén- és nitrogén-atomokat tartalmazó makrociklusok előállítása. Mindez 4-6 lépéses szintézisekben, az eddig kidolgozott módszerek továbbfejlesztésével (kromatográfiás módszerek, IR, NMR, MS spektroszkópia alkalmazása). A különböző tulajdonságok mint pl. a komplexképző sajátosságok vizsgálata, az extrahálóképesség mérése folyadék-folyadék és szilárd-folyadék rendszerben, a királis megkülönböztető képesség

mérése, stb. UV-technikával történik. Az új királis koronaétereket fázistranszfer katalizátorként alkalmazzuk olyan reakciókban, ahol enantiomerek keletkezésére van lehetőség és fém kation is szerepet játszik a reakció mechanizmusában. Ilyen modellreakciók lehetnek: Michael típusú addíciók, prokirális ketonok redukciója, telítetlen kötés epoxidációja, aldol típusú reakciók stb. Az enantioszelektivitás vizsgálata optikai forgatóképesség méréssel és ^1H -NMR spektroszkópiával történik. Kedvező hatás esetén optimalizálásra kerül sor. Fontos feladat az összefüggések feltárása a királis katalizátor szerkezete és hatása között. A kutatómunka során kapott eredmények jelentős előrelépést hoznának az aszimmetrikus szintézisek területén, gyakorlati adaptálásuk pedig a gyógyszeriparban és más területeken is nagyon aktuális.

P. Bakó, Gy. Keglevich, M. Kubinyi et al., *Tetrahedron:Asymmetry*, **2005**, 16, 1861.

P. Bakó, Gy. Keglevich, M. Kubinyi et al., *J. Incl. Phenom.* **2006**, 55, 295.

Kémiai kezelések hatása különböző eredetű natív cellulózok finomszerkezetére

A különböző eredetű cellulózok cellobióz egységekből épülnek fel. Eltérések az átlag molekulatömegben a kísérőanyagok összetételében és mennyiségi arányaiban és végül, de nem utolsósorban a szupermolekuláris (szubmikroszkópos) szerkezetükben van. A szupermolekuláris szerkezet a kolloid méretektől a molekuláris nanométeres tartományig jól tanulmányozható különféle mikroszkópos technikákkal. Az elemvizsgáló scanning elektron mikroszkóp alkalmas a kolloid méret tartomány szerkezetének felderítésére, valamint alkalmas a makrofibrillák felszínén lévő molekulák összetevőinek azonosítására. Az atomerő mikroszkóp a makro és mikro fibrillák felületi homogenitásának tanulmányozását teszi lehetővé. A műszerrel összekacsolt mikro-termoanalizátor biztosítja a fibrillák, illetve láncmolekulák közötti a nanotartományban eltérő kötőerők tanulmányozását is. A RAMAN mikroszkóp a molekuláris tartomány szerkezeti felderítésére alkalmas különös tekintettel a mikro- fibrillák illetve polimer láncok közötti feszültségek kimutatására illetve az ilyen feszültségeket okozó kémiai kezelések hatására bekövetkező változások meghatározására. A papírgyártásra felhasznált fenyőrostokat mind környezetvédelmi, mind gazdasági okok miatt új nyersanyagokkal célszerű helyettesíteni. Ezen nyersanyagok ilyen irányú felhasználásának alapvető feltétele: cellulóz tartalmuk finomszerkezetének minél alaposabb felderítése. A helyettesítésre legalkalmasabb növénycsoport az évente megújuló, élő fűfajtákhoz tartozik. Ilyen megújuló nyersanyagforrással (ipari fű) hazánkban energia termelési céllal folynak termelési és felhasználási kísérletek. Az ipari fű cellulózforrásként is felhasználható. A kutatás célja a Szarvasi-1 Ipari-fűből nyert cellulózzrost fiziko-mechanikai tulajdonságainak felderítése, és különböző kémiai kezelések hatásának megállapítása, összehasonlítva a papírgyártásra alkalmas cellulózok tulajdonságaival. Az eddigi eredményeket 2006-ban a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség Környezetvédelem kategóriában Különdíjjal jutalmazta.

A. Víg, P. Sallay, I. Rusznák et al., *Cellulose Chemistry and Technology*, **2006**, 40, 353.

Inklúziós komplexeket képző komponensek hatása színezékek fotoiniciált bomlásának mechanizmusára

A színezékek fotobomlási mechanizmusa oxidációs, redukciós vagy gyökös folyamat. A valóságban gyakran egynél több reakció zajlik fotobomláskor, a mechanizmus leírásakor mégis a domináns folyamat szerepét vizsgálják. A fotobomlás vizsgálható színezékoldatban, de vizsgálható szálas szubsztrátumra felvitt állapotban is. Az utóbbi esetben célszerű megkülönböztetni a szubsztrátum-színezék kovalens kapcsolatával létrejött rendszert azoktól,

amelyekben a két komponens között csak szekunder kapcsolat alakult ki. Mind oldatban, mind szubsztrátumon az egyedi színezékmolekulák mellett aggregátumok fellépésével is számolni kell. Ha az oldatba vagy a színezett rendszerbe a színezékmolekulákkal inklúziós komplex képzésére alkalmas adalék kerül, akkor a szolvatált színezék, illetve a szubsztrátumhoz kötött molekula állapota megváltozik. Feltételezésünk szerint az inklúziós komplexképző adalék olyan új rendszert alakíthat ki, amely módosítja a fotoinduált színezékbontás kinetikáját akár annak gyorsításával, akár lassításával. A kutatás során inklúziós komplexképző adalékként kiválasztott ciklodextrinokkal, valamint koronaéterekkel tervezzük a vizsgálatok elvégzését. A fotobomlást nagynyomású higanygőzlámpával indítható és az átalakulás kinetikáját spektrofotometriás módszerekkel tervezzük követni.

A. Víg, I. Rusznák, P. Sallay, et al., *Dyes and Pigments*, **2007**, 72, 19.

Szilárd sav és szilárd bázis katalizátorok aktivitásának vizsgálata szerves szintézisekben

Az elmúlt években egyre nagyobb jelentőségűvé vált a különböző ásványi alapú katalizátorok használata. A szilárd savak (természetes és módosított zeolit, montmorillonit, stb.) reakcióit sokszor és sokan vizsgálták, használatuk számos előnyét bizonyították. A hasonló szerkezetű bázikus karakterű anyagok vizsgálatáról kevesebb információ áll rendelkezésre, jóllehet ezek az anyagok is rendelkeznek savas karakterű rokonai valamennyi előnyével. A korábbi tanszéki kutatások során sikeresen valósítottuk meg magnézium- és alumínium-oxid alapú hidrotalcit segítségével malonészterek és CH-savak fázistranszfer katalitikus, ciklopropánkarbonsav-származékokat eredményező gyűrűzárási reakcióját, bisz-Mannich-bázisok ciklizációját arilpiperidin-származékokká, egyéb heterociklusos vegyületek előállítását, stb. Új heterogén, szilárd bázisú hordozóra felvitt palládium katalizátort fejlesztettünk ki, és alkalmaztuk sikeresen szén-szén kapcsolási reakciókban (Heck, Suzuki, Sonogashira reakciók). Kis pórusméretű, enyhén savas karakterű zeolit típusú adszorbens segítségével pedig különböző kondenzációs reakciókat hajtottunk végre jó termeléssel. A munka célkitűzése új, savas, illetve bázikus karakterű katalizátorok kifejlesztése, reaktivitásuk további vizsgálata alkilezési, acilezési, ciklizációs, és egyéb heterogén fázisú reakciókban, a reakciók regio- és esetleges sztereoselektivitásának tanulmányozása.

Z. Hell, et al., *Adv. Synth. Catal.*, **2006**, 348, 523.

Z. Hell, et al., *Catal. Commun.*, **2006**, 7, 1022.

Foszforheterociklusok mint akirális és királis P-ligandok

A címben jelzett kutatás jelenleg a következő szálakon fut:

- újszerű 5- és 6-tagú akirális és királis gyűrűs foszforvegyületek szintézise és azok hasznosítása P-ligandként átmeneti fémkomplexek előállításában.
- P-heterociklusok reszolválása diasztereomer sópárokon, vegyületpárokon és asszociátumokon keresztül

A fenti kutatások gyakorlati jelentőségét a katalizátor rendszerekben való alkalmazhatóság adja, melyek szelektivitással rendelkezhetnek. Több területen ipari vonatkozásokhoz is kapcsolódunk.

Gy. Keglevich, H. Szelke: Heterocyclic Ene-P compounds in *Science of Synthesis*, (Thieme Verlag) Vol. 33, 2007 pp 745.

Enzim-inhibitorok és szubsztrát analagonok szintézise és biológiai vizsgálata

Az enzimek működését befolyásoló vegyületek alkalmazása a modern gyógyszerkémia egyik legfontosabb területe. A tanszéki kutatócsoport az MTA SZBK Enzimológiai Intézetével együttműködve sikeres kutatásokat folytat különféle potenciális enzim-inhibitorok és szubsztrát analagonok szintézise és biológiai hatásának felderítése érdekében. Eddigi legfontosabb eredményeink potenciálisan β -laktamázgátló 2-izooxacefémvázas vegyületek sztereoszelektív szintézisének kidolgozása, illetve a dezoxiuridin- α,β -metiléndifoszfát (dUPCP) és a dezoxiuridin- α,β -imidodifoszfát (dUPNP) szubsztrát analagonok különböző fajokból származó dUTPázon történő vizsgálata.

Ezen eredményekre alapulva a *PhD* kutatás célja további hasonló szerkezetű vegyületek (pl.: 2-izoazacefémvázas vegyületek, 5-(α,β -imidodifoszfórilamino)-2,5-didezoxiuridin és karba analagonok sztereoszelektív szintézisének kidolgozása, és a megfelelő enzimekkel történő vizsgálata.

J. Nagy, J. Nyitrai et al. *Tetrahedron:Asymmetry*, **2006**, 17, 3111.

J. Nagy, J. Nyitrai et al. *Arkivoc*, **2008**, 9.

J. Nagy, B. Vértessy et al. **2007** Oct 11; PMID: **17932923** [PubMed - as supplied by publisher]

Fizikai Kémia területen:

Speciális tulajdonságokkal rendelkező nanostrukturált vékonyrétegek előállítása nedves kolloidkémiai eljárásokkal

Munkánk célja olyan modellszintű kutatások megvalósítása, amelyek révén az általunk "fabrikált" nanofilmek alkalmasak lehetnek optikai és optoelektronikai felhasználásra. Az általunk alkalmazott – alapvetően Langmuir-Blodgett típusú – eljárásokkal szerkezetileg igen változatos vékonyrétegek előállítása lehetséges kompozit/mag-héj típusú nanorészecskék felhasználásával, ill. kevert, és/vagy különbözőképpen funkcionált rétegek egymásra építésével. Modellanyagként SiO_2 , ZnO , TiO_2 különböző méretű nanorészecskéit használjuk, amelyeket a reagensek kontrollált hidrolízisével, ill. egyéb, folyadékközegű eljárással állítunk elő. Az összetett filmek szerkezetének tervezéséhez olyan számítási eljárást dolgozunk ki, amely képes a folytonos inhomogenitású rendszerekben a fényterjedés modellezésére. A nanofilmeket számos in situ és ex situ módszerrel tanulmányozzuk és jellemezzük: pl. TEM, XRD, dinamikus és sztatikus fényszórás, elektroforézis, filmmérleg, Brewster-szög mikroszkópia, pásztázó szög reflektometria, számítógépes szimuláció, AFM, UV-VIS spektroszkópia, elektromos vezetőképesség. Optimalizáljuk az előállított filmek tulajdonságait a potenciális, gyakorlati felhasználás szempontjából.

Z. Hórvölgyi et al., *Thin Solid Films*, **2005**, 484, 310.

Z. Hórvölgyi et al., *Langmuir*, **2006**, 22, 6944.

Héjszerkezetű kompozit (nano-, ill. mikro-) részecskék előállítása és vizsgálata

A héjszerkezetű kompozit részecskékben előnyösen ötvöződnek az egyedi komponensek tulajdonságai, mely lehetővé teszi szélesebb körben való felhasználásukat. Régóta ismert pl., hogy a festékiparban előszeretettel használt fehér pigment, a titán-dioxid, fotokatalitikus hatása miatt rövid idő alatt tönkreteszi a kialakított festékbevonatot, hacsak nem vonják be a felhasználás előtt vékony szilícium-oxid réteggel, mely számottevően nem rontja a pigment fedőképességét, de szigetelő tulajdonsága miatt eredményesen gátolja a fotokatalitikus hatást kiváltó elektrontranszportot. A héjszerkezetű kompozit részecskék a modern anyagtudomány fejlődésével egyre nagyobb szerephez jutnak elektromágneses és optikai alkalmazásokban (pl. "bandgap engineering").

A javasolt munka célja az, hogy új tulajdonságú, héjszerkezetű kompozit (nano- és mikro) részecskéket állítsunk elő nedves kolloidkémiai eljárással, és általánosítható ismereteket nyerjünk a magrészecske bevonásának folyamatáról, valamint a befolyásoló paraméterek pontos szerepéről, valamint, hogy speciális optikai, elektro-optikai tulajdonságú nanorétegeket állítsunk elő belőlük. A preparatív munka eredményeit nagyműszeres vizsgálatokkal (SEM, TEM, AFM, filmmérleg, spektroszkópia, stb.) jellemezzük.

Z. Hórvölgyi et al., *Thin Solid Films*, **2005**, 484, 310.

Z. Hórvölgyi et al., *Langmuir*, **2006**, 22, 6944.

Határfelületi kölcsönhatások vizsgálata töltő- és erősítőanyagot tartalmazó polimerekben, felületkezelés

A kutatómunka keretében különböző polimer mátrixú rendszerekben kívánjuk vizsgálni a komponensek közötti határfelületi kölcsönhatást. A kölcsönhatás jellemzéséhez szükséges fizikai mennyiségeket peremszögméréssel és inverz gázkromatográfiával (IGC) határozzuk meg, amihez különböző minta-előkészítési, mérési és számítási módszerek kidolgozása szükséges. A határfelületi kölcsönhatások erősségét széles tartományban változtatjuk megfelelő polimer és a töltőanyag típusok kiválasztásával és a töltőanyag felületkezelésével. A hagyományos töltőanyagokon szerzett tapasztalatainkat különleges adalékok, nano-erősítőanyagként használt rétegszilikátok és természetes erősítőanyagok (faliszt, természetes szál), jellemzésére használjuk fel. Mérjük a heterogén polimer rendszerek reológiai és mechanikai tulajdonságait. Ellenőrizzük az eddigiekben használt modellek általános érvényességét, és új modelleket dolgozunk ki a kölcsönhatások, a szerkezet és a tulajdonságok közötti kapcsolatok leírására.

G. Vancsó, B. Pukánszky et al., *Polymer*, **2006**, 47, 4638.

Kalaposgombák biológiailag aktív komponenseinek izolálása és azonosítása spektroszkópiai módszerekkel.

A kutatás célja új, biológiailag aktív, elsősorban sejt szaporodást gátló anyagok (pl. antibiotikumok) előállítása főleg ehető kalaposgombákból. A biológiai detektálásokkal irányítottan dolgozó kromatográfiás módszerekkel szétválasztott és izolált komponensek azonosítása szerkezetvizsgálati, elsősorban spektroszkópiai módszerekkel és jellemzése biológiai módszerekkel. Eddigi vizsgálataink arra mutatnak, hogy ezek a gombák valóban tartalmaznak sejt szaporodást gátló (elsősorban antimikrobiális hatású) anyagokat. A munka során főleg ehető kalaposgombák vizsgálatával foglalkozunk. Kidolgozandók a biológiai detektálásokkal irányított megfelelő kromatográfiás elválasztási módszerek. Vizsgálандók az izolált anyagok sejt szaporodást gátló, elsősorban antimikrobiális hatása. Ezeknek az anyagoknak a spektroszkópiai vizsgálataihoz olyan mintákat kell előállítani, amelyek alkalmasak rezgési spektroszkópiai és különféle elektrongerjesztési szinképek mérésére. Értékelendők a mikrobiológiai és spektroszkópiai mérések eredményei.

F. Billes, et al. *Spectrochimica Acta A* **2006**, 64, 600.

Polimorf polimerek nukleált keverékeinek előállítása: kristályosodási, olvadási és szerkezeti jellegzetességeinek vizsgálata

A kristályosodás termikus feltételeitől függően és/vagy speciális adalékanyagok (szelektív gócképzők) jelenlétében számos polimer (polipropilén, polibutén, poli(vinilidén-fluorid), poliamidok és poliészterek) különféle polimorf módosulat formájában kristályosodhat. A polimerek polimorfijának elméletében számos megoldatlan probléma van (monotrópia vagy enantiotrópia esete áll-e fenn, termikus kezelés vagy mechanikai hatásokra fellépő polimorf átalakulások szerkezeti értelmezése, stb.). A polipropilén polimorfijával kapcsolatos kutatásaink során számos újszerű jelenséget figyeltünk meg (olvadási és hőkezelési memória effektus fellépése, kristálynövekedési módosulátváltozás kialakulása). A kutatás keretében ezen jelenségeket tanulmányozzuk más polimorf polimereken. A tanulmányozandó polimerek az alábbiak: polipropilént, poli(trimetilén-tereftalát), poli(butilén-tereftalát), szündiotaktikus polisztirol. Alapvető cél annak megállapítása, hogy melyek az egyedi, illetve az általánosítható törvényszerűségek polimorf polimerek viselkedésében. A polimorf polimereket és

ezen többalkotós rendszereit kalorimetriás,(DSC, TMDSC) fénymikroszkópos, SEM, AFM és röntgendiffrakciós módszerekkel vizsgáljuk, Ezeket részletes mechanikai vizsgálatok (összehasonlító DMTA, szakítás és törésmechanikai mérések) egészítik ki.

J. Varga et al. *European Polymer J.*, **2006**, 42, 3257.

Fotodinamiás terápia szenzibilizátorainak fotokémiai jellemzése

A fotodinamiás terápia a daganatos betegségek új, ígéretes gyógymódja. Fényérzékenyítő anyag (fotoszenzibilizátor) és látható fény segítségével érhető el a szelektív sejtpusztulás, a környező ép szövetek károsítása nélkül. A hatásmechanizmus részleteit még nem ismerjük, de azt bizonyították, hogy a szenzibilizátor a látható fény hatására gerjesztett elektronállapotba kerül, gerjesztési energiáját átadja a sejtben oldott oxigénnek, így szingulett oxigén keletkezik, s az utóbbi roncsolja a sejteket. A vizsgálatokhoz UV/látható spektrométert, spektrofluorimétert és lézeres villanófény-fotolízis készüléket használunk. Speciális berendezésünk a szingulett oxigén közvetlen kimutatását lehetővé tevő nagyérzékenyséű fotodióda. A vizsgált potenciális szenzibilizátorokat részben a BME Szerves Kémiai Technológia Tanszékén szintetizált, részben nemzetközi együttműködésben kapott porfirin- illetve ftalocianin-származékok, valamint bórtartalmú vegyületek. Azokkal a vegyületekkel, amelyek méréseink alapján megfelelő fotofizikai és fotokémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, lehetőség van a hatékonyság megállapítására biológiai vizsgálatok elvégzésére az MTA-KK-val együttműködésben.

T. Vidóczy et al., *J. Porph. Phthaloc.* **2005**, 9, 531.

Mezopórusos szenek felületmódosítása, jellemzése és kölcsönhatásai orvosi biológiai szempontok szerint választott nagy molekulákkal

A munka célja orvosi biológiai szempontból fontos közepes és nagyméretű molekulák valamint a gyógyászati célokra alkalmazott pórusos szenek közötti kölcsönhatások mechanizmusának vizsgálata. Ilyen molekulák eltávolítása nemcsak számos patológiai esetben szükséges, az aktív szenek hasznosíthatók akut és/vagy krónikus mérgezés esetén, melyet pl. mikrobiális toxinok okoznak, vagy amely autoimmun betegségek, sepsis vagy toxikus sokk következtében lép fel. A jelenleg is alkalmazott pórusos szenek nincsenek optimálva ilyen nagy molekulák megkötésére, a nagy fajlagos felületet ugyanis hozzáférhetővé is kell tenni. Ugyanakkor nem egyszerűen „léptékváltásról” van szó, hogy a kisebb molekulákat és a mikropórusokat nagyobbakra cseréljük, hiszen a fehérjéhez hasonló nagy molekulák alakjukat is megváltoztathatják környezeti hatásokra. Fontos tehát a fizikai kémiai és biokémiai interdiszciplináris megközelítés. Az alkalmazandó módszerek egy részét nem-pórusos rendszerekre alakították ki, ezért azokat adaptálni kell pórusos anyagainkra. A kutatás eredményeivel hozzájárulhatunk olyan orvosi biológiai érdeklődésre számot tartó optimált hatóképesseű biokompatibilis pórusos rendszerek kialakításához, melyek a jelenleg alkalmazottaknál kedvezőbb terápiákat tesznek lehetővé.

László K., Czakk O., Josepovits K., Rochas C., Geissler E.: Influence of Surface Chemistry on the SAXS Response of Polymer-Based Activated Carbons. *Langmuir*, **2005**, 21, 8443.

K. László, E. Geissler: Surface Chemistry and Contrast Variation SAXS in Polymer-Based Activated Carbons. *Carbon*, **2006**, 44, 2437.

K. László, E. Tombácz, Cs. Novák: pH dependent adsorption and desorption of phenol and aniline on basic activated carbon. *Colloids and Surfaces A*, **2007**, 306, 95.

Analitikai Kémia területen:

Kémiai és bioszenzorok kutatása és fejlesztése

Nagyszámú komponens egyidejű és egymás melletti mérésére, illetve monitorálásra alkalmas mikrochipek, szenzorok jelenleg az analitikai kémia és az élettudományok érdeklődésének homlokterében vannak. Alkalmazási területeik között szerepel az orvosi diagnosztika, környezetanalitika, folyamatirányítás és élelmiszeranalitika. Kutatócsoportunk a kémiai és bioszenzorok, illetve miniatürizált bioanalitikai rendszerek fejlesztésének minden fázisában, az alapkutatástól sok esetben a prototípus gyártásig és végalkalmazásig, részt vesz. A szenzorfejlesztésben végzett kutatásunkat az új típusú nanoszerkezetek és szintetikus lingadumok (peptid nukleinsavak, ionoforok, aptamerek) szintézise és molekuláris felismerésre való alkalmazása jellemzi. A molekuláris felismerés és szelektív membrántranszport-folyamatok vizsgálatához új nagyérzékenységű felületanalitikai módszerek (Képkalkító Felületi Plazmonrezonancia, Hiperspektrális Optikai mikroszkópia, Pásztázó Elektrokémiai Mikroszkópia) fejlesztését is végezzük. Elsődleges célunk között szerepel az új érzékelési sémák felfedezése, illetve a detektálási folyamatok mechanizmusának értelmezése. Egyik kiemelt kutatási irányunk a kémiailag módosított nanopórusok előállítása és molekuláris felismerésre való alkalmazása. Világszinten elsőként állítottunk elő és alkalmaztunk biológiailag módosított nanopórusokat fehérjék és nukleinsavak szelektív felismerésére. Eredményeinket 2007-ben a Nature Nanotechnology a nanotechnológia kiemelten fontos és perspektivikus kutatási irányzataként (research highlights) ismertette. Ugyancsak kiemelt kutatási területünk az ionszelektív érzékelők fejlesztése. Szerves kémikusokkal együttműködésben új típusú szelektív komplexképzők, ionoforok, szintézisét és vizsgálatát végezzük, amely egyes vegyületek kereskedelmi forgalmazásához vezetett. Másrészt kutatásaink eredményeképpen sikerült a korábbi érzékelőknél akár egymilliószor kisebb kimutatási határral rendelkező ionszenzorokat kifejleszteni és jelenleg folyamatban van ezek detektorként való alkalmazása affinitási rendszerek esetében.

G. Jágerszki, R. E. Gyurcsányi, L. Höfler and E. Pretsch, *Nano Lett.*, **2007**, 7, 1609.

R. E. Gyurcsányi and E. Lindner, *Cytometry Part A*, **2006**, 69A, 792.

F. Sundfors, R. Bereczki, J. Bobacka, K. Tóth, A. Ivaska and R. E. Gyurcsányi, *Electroanalysis*, **2006**, 18, 1372.

Szerves technológiai nyomszennyezők meghatározása

A szerves vegyipari intermedierek, végtermékek, gyógyszeripari alapanyagok, gyógyszerek, élelmiszeripari termékek, textíliák, stb. technológiai szennyezőinek a minőségi és mennyiségi ismerete döntően befolyásolja a termékek kereskedelmi pozícióját.

A munka célja választható kurrens modell termékek szerves technológiai nyomszennyezői analíziséhez szükséges mintavételi, minta-előkészítési, GC és GC-MS elemzési módszereinek a kidolgozása és validálása, különös tekintettel a különböző dúsításos minta-előkészítési megoldások és a gázkromatográfiás elválasztás illesztésére, a nyomszennyezők minél kisebb koncentrációjának megbízható detektálása érdekében.

Balla J. A gázkromatográfia analitikai alkalmazásai (Edison House Kft.) Budapest, **2006**.

M. Kállai, V. Máté, J. Balla. *Chromatographia*, **2003**, 57, 639.

I. Tanczos, C. Schwarzsinger, H. Schmidt, J. Balla. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, **2003**, 68-69, 151.

Az analitikai jel és a molekulaszervezet kapcsolatának vizsgálata

A jel-anyagmennyiség függvénykapcsolat ismerete a műszeres analitikai mennyiségi elemzés alapja. Ezt kísérleti úton, modell anyagok (standardok, teszt anyagok, stb.) segítségével (kalibrálás) határozzuk meg. Lineáris kapcsolat esetében az érzékenység, relatív érzékenység meghatározhatóvá válik. Sok esetben azonban ilyen standard anyag nem szerezhető be, mert gazdaságosan nem állítható elő. Ez esetben is kell tudni mennyiségi információt szolgáltatni. Ehhez azonban ismerni kell a vizsgált molekula szerkezete (jelképző tulajdonsága) és az analitikai jel kapcsolatát. A kutatás során a gyakran alkalmazott gázkromatográfiás FID (lángionizációs detektor), az ECD (elektronbefogási detektor) és a tömegszelektív detektor, az MSD jelképzésének molekuláris szerkezeti háttérének vizsgálata válik szükségessé. A FID vizsgálata terén már születtek eredmények, a kutatómunka célja ennek a folytatása az ECD illetve az MSD detektorok esetén, ahol eddig csak kezdeti, előkészületi munkákra került sor.

Kalász Huba, Lengyel József szerkesztők: A gyógyszerek szervezetbeni sorsa és vizsgálómódszerei Balla J. 11. fejezet: **Gázkromatográfia**, Semmelweis Kiadó, Budapest, 2006.

M. Kállai, J. Balla, *Chromatographia*, **2002**, *56*, 357.

Mintaelőkészítési módszerek összehasonlító vizsgálata

A talaj és vízszennyezők megbízható analitikája a környezeti problémák felismerése szempontjából kiemelt jelentőségű. A kutatómunka keretében célunk gyors mintaelőkészítési módszerek kidolgozása talaj és víz szennyezők meghatározására. Ennek során szilárd fázisú mikroextrakciós módszereket (SPME), gőztéranalízist (HS-GC), szilárd fázisú extrakciót (SPE), gyorsított oldószeres extrakciót (ASE) kell összevetni (ahol ez lehetséges) a hagyományosnak tekintett ultrahanggal segített és Soxhlet – extrakciós eljárásokkal. A kutatás során kiemelten vizsgálandó célvegyületek a klórozott szénhidrogének. A mérésre alkalmazandó technikák közül a HS – GC analízis mellett a csatolt gázkromatográfiás-tömegspektrométeres technika GC – MS, illetve a nagynyomású folyadékkromatográfiás módszerek (HPLC) vizsgáljuk.

P. Forlay-Frick, Z. B. Nagy, J. Fekete, *J. Liquid Chrom. Rel. Techn.*, **2002**, *25*, 1431.

Optikailag aktív vegyületek kromatográfiás elválasztása

A vizsgálatok különböző ipari szempontból fontos biológiailag aktív vegyületek (gyógyszerek, peszticidek) elválasztására alkalmas GC és HPLC módszer kidolgozására irányulnak. A kutatómunka során egyik célunk az álló- és mozgófázis hatásának tanulmányozása. További feladat annak összevetése, hogy a direkt és indirekt enantiomer elválasztásnak mikor és hol van alkalmazási lehetősége. A kutatás végcélja annak meghatározása, hogy mely típusú vegyületek esetén milyen elválasztási módszer használható optimálisan (pontosság, reprodukálhatóság és költséghatékonyság szempontjából).

J. Fekete, I. Gebefügi et al., *Chromatographia* 2003, *57*, 147.

Szerves mikroszennyezők meghatározása élővizekben

A téma az Európai Unió 2000 ún. tiltó listáján szereplő vegyületek meghatározását tűzi ki céljául. Az eddigi módszerek lassúak, a ppb szinten történő meghatározásra időigényes mintaelőkészítési módszereket írnak elő. Célunk új mintaelőkészítési módszerek és mérési technikák kidolgozása és alkalmazása. A vizsgálandó célvegyületek: policiklusos aromás szénhidrogének, peszticidek: atrazin, simazin, klórpírifosz, klórfenvinfosz, diuron, izoproturon, alaklór, endosulfán, lindán, trifluralin, DHEP, nemionos felületaktív szerek metabolitjai: oktilfenol, nonilfenol. A vizsgálatokhoz felhasználandó módszerek a megfelelő mintaelőkészítés után GC (GC-MS) és HPLC technikák.

P. Forlay-Frick, Z. B. Nagy, J. Fekete, *J. Liquid Chrom. Rel. Techn.*, **2002**, 25, 1431.

Fényforrások higanykoncentrációját csökkentő amalgámok kutatása

A kutatás feladata az újabb EU-direktíváknak megfelelő alacsony higanytartalmú, ólommentes kompaktfénycső-amalgámokként felhasználható alacsony higanytartalmú rendszerek keresése, termodinamikai fázisrendszereik irodalmi és szabadalmi feltérképezése, a fázisösszetételnek termodinamikai paraméterek felhasználásával történő számítógépes modellezése. A fenti módszerekkel megtervezett új összetételű amalgámminták higanytenziójának mérése, részletes analitikai kémiai (XRD, SEM-EDX, XRF, ICP, AAS) és termoanalitikai (DSC) vizsgálata. Különböző amalgám és segédamalgám rendszerek együttes tranziens és stacionárius Hg-gőztenziója alakulásának meghatározására alkalmas mérőberendezés tervezése, és a kifejlesztendő mérési módszer validálása. A fentiekben kidolgozott amalgámokkal kísérleti lámpák fényáram-tesztelése a környezeti hőmérséklet függvényében.

H. Lovas, J. Madarász et. al. *Materials Science Forum, Advanced Materials Forum III*, **2006**, 516, 1363.

I. M. Szilágyi, J. Madarász, F. Hange, Gy. Pokol, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2006**, 17, 3413.

Nukleáris spektroszkópiai vizsgálatok

A kutatómunka eszköze a nukleáris spektroszkópia, melyet alkalmazva vizsgálatok végezhetők a röntgen, gamma és alfa spektroszkópia területein. A kutatómunka széles témakört fog át, az alapkutatótól a megvalósított ipari elemzésekig. Vizsgálataink lehetséges témakörei aktív-szenes katalizátorok palládium tartalmának meghatározása, biológiai minták esszenciális és toxikus elemalkotóinak elemzése, muzeális műkincsötvözetek elemösszetételének felderítésére, avagy atomerőműi kibocsátások elemzésére. A vizsgálatokhoz korszerű számítástechnikai háttér, és modern berendezések állnak rendelkezésre.

I. Gresits I. S. Tölgyesi *J. of Radioanal. And Nucl. Chem.*, **2003**, 258, 107.

Biokémia és Biotechnológia területen:

Oxidatív enzimek alkalmazása a cellulóz alapú szálanyagok feldolgozása során

Több év óta foglalkozunk a biotechnológiai eljárások textilipari alkalmazási lehetőségeinek vizsgálatával. Elsősorban a cellulóz alapú szálanyagok környezetbarát, enzimekkel segített kikészítésére koncentrálnak. Korábban főként kereskedelmi forgalomban kapható hidrolitikus enzimeket (celluláz, pektináz és xilanáz) alkalmaztunk, továbbá részletesen vizsgáltuk az enzimek és komplexképzők együttes alkalmazását a cellulóz alapú szálanyagok természetes kísérőanyagainak az eltávolításában. A kutatómunka során oxidatív enzimeket alkalmazunk a pamut, a len és a kender bioelőkészítésében. Mindhárom szálanyag esetén a lignin-tartalmú természetes kísérőanyagok degradációja/eltávolítása okozza a legtöbb nehézséget. Mivel az oxidatív enzimek egy csoportja a lignin redox degradációs reakcióit katalizálja, alkalmazásuk eredményes lehet a bioelőkészítésben. A kereskedelmi forgalomban kapható oxidatív enzimkészítményeken kívül fermentációval előállított enzimeket is használunk.

E. Csiszár, et al., *Enzyme and Microbial Technology*, accepted 2007.

E. Csiszár, et al., *Biotechnol. Lett.*, 2005, 27

Lignocellulóz alapú mezőgazdasági melléktermékek és hulladékok frakcionálása és optimális feldolgozása kémiai technológiai és biotechnológiai módszerekkel

A lignocellulózokból történő etanol előállítás az utóbbi évek folyamán a mezőgazdasági kémiai technológiai tudományág egyik központi kutatási területévé fejlődött. A kutatások során az elsődleges cél a várható előállítási költségek csökkentése volt, és a fejlesztések ma már olyan szintre jutottak, hogy a lignocellulózokból történő etanol előállítás költségét várhatóan már nem lehet jelentősen tovább csökkenteni. Az etanol előállítás gazdaságosságán azonban sokat javítana a cellulózon kívüli frakciók, tehát a hemicellulóz, a lignin, és bizonyos minor komponensek (növényi olajok, fehérje) kinyerése, és értékes terméké alakítása. A kutatás elsősorban bizonyos konkrét alapanyagok esetében (kukoricaszár, kukoricamaghéj, búzakarpa) vizsgálja a frakcionálás és előkezelés lehetőségeit, figyelemmel kísérve az alapanyagban lévő összetevők (keményítő, cellulóz, hemicellulóz, lignin, fehérje) „sorsát” és felhasználhatóságát.

K. Réczey, et al., *Process Biochemistry*, **2005**, 40, 3519.

K. Réczey, et al., *Appl. Biochem. Biotechnol.*, **2005**, 121, 243.

Mikrobiális enzimek előállítása és vizsgálata

A nemzetközi együttműködésben folyó kutatás enzimek (L-leucin-aminopeptidáz, celluláz, xilanáz, transzglutamináz, kitináz, stb) előállítására irányul. A szintézis mikroorganizmusokkal, szilárd fázisú fermentációban (SSF) vagy süllyesztett/rázólombikos fermentációban (SF) történik. Az kutatás szerves részét képezi az enzimek tisztítása, jellemzése, tulajdonságvizsgálata.

G. Szakács et al., *Eukaryotic Cell*, **2006**, 5, 657.

G. Szakács et al., *Current Biol.*, **2005**, 15, 1242.

De novo fermentációk és biokonverziók fehér biotechnológiai alkalmazásai

A posztindusztriális társadalom egyik legégetőbb problémája a hagyományos kőolajalapú alapanyagok és energiaforrások fokozatos kimerülése lesz. Ma ennek felismerése egyre növekvő jelentőséget biztosít a megújuló, azaz szénhidrát, illetve növényolajalapú energia és alapanyaggyártásnak. Mikrobiális fermentációkkal és biokonverziókkal egy sor kémiai/vegyipari alapanyag, ún. platformalkotó vegyület állítható elő ilyen természetes cukor és olajforrások felhasználásával. Jelenleg a zöldoldószer és műanyagipari alapanyagként is felhasználható tejsavnak és a biodízel-melléktermék glicerinnek biotechnológiákkal történő előállítását illetve átalakítását tűztük ki célul, e témákban folyik fejlesztő kutatás.

B. Kupcsulik, B. Sevela, *Chem. Biochem. Eng. Q.* **2005**, 19, 99.

B. Sevela, et al., Eljárás 1,3-propándiol előállítására biotranszformációval, P0500961/1, bejelentés napja: 2005. október 19.

Modern mérnöki módszerek a környezeti kockázatfelmérésben és a kockázatsökkentésben

A kutatás célja a rendelkezésre álló és a fejlesztés alatt lévő talajtesztelési és szennyeződés mérési technikák és talajremediációs módszerek összegyűjtése, jellemzése, alkalmazhatóságának vizsgálata, verifikálása. A fentiekben megkapott eredmények alapján lehetővé válik a céltól függő talajtesztelési módszeregyüttesek és kockázatközpontú kockázatsökkentési módszerek, módszeregyüttesek összeállítása. Ilyen módon adatbázisok és döntéstámogató rendszerek kialakítása válik lehetővé, a fent említett modern kockázatfelmérési és -csökkentési módszerek elérhetővé tétele és piacra kerülése érdekében.

K. Gruiz, et al., *Chemosphere* **2007**, 66, 428.

Sejtciklus regulációs hálózatok matematikai analízise

Komplex biológiai rendszerek matematikai modellezése a biológiai kutatások egyre elfogadottabb módszere. Egy bonyolult szabályozó hálózat működésének megértéséhez elengedhetetlen a rendszer számítógépes vizsgálata. A számítógépek nyelvére a biokémiai reakciókinetika módszereivel fordítjuk át a molekulák kölcsönhatásait. Ilyen számítógépes matematikai módszerekkel vizsgáljuk a sejtek szaporodását szabályozó hálózat viselkedését. A sarjadzó és hasadó élesztők vizsgálata mellett az emlős sejtciklus komplex hálózatát is elkezdjük vizsgálni, a kutatás célja lesz, hogy ebbe a témába bekapcsolódjon és modelleket dolgozzon ki az emlős sejtek sejtciklusának szabályozására.

A. Csikász-Nagy, B. Novák, J. J. Tyson et al., *Biophysical Journal* **2006**, 90, 4361.

Uracil-DNS metabolizmus és jelátvitel

A DNS-ben leggyakrabban előforduló spontán módosulás az uracil bázis megjelenése. A DNS-beli uracil általában hibát jelent, de egyes élettani folyamatokban specifikus jelátviteli szereppel bír. A kutatási téma tárgya a DNS-beli uracil beépülésének szabályozásáért, felismeréséért és javításáért felelős enzimrendszerek tanulmányozása. A kutatási téma során a szerkezeti biológia modern módszereit, továbbá a molekuláris és a sejtbiológia eszköztárát alkalmazzuk, különös tekintettel a rendszerszemléletű biológia és kémia (systems biology, systems chemistry) megközelítéseire.

J. Toth, et al, B. G. Vertessy *J Biol Chem.* **2007** 282 PMID: 17848562

A. Bekesi, et al, B. G. Vertessy *Biochem Biophys Res Commun.* **2007** 355:643

O. Barabas O, et al, B. G. Vertessy *J Biol Chem.* **2004** 279:42907

Kémiai Technológiák területen:

A len tulajdonságainak vizsgálata kiváló minőségű színezett ruházati textíliák előállítására céljából

Több év óta foglalkozunk a lenből készült szálanyagok tulajdonságainak vizsgálatával. A fogás/esés javítását és a gyűrődési hajlam csökkentését célzó kutatásaink folytatásaként célunk a színezett lenszövetek nedves színtartósági tulajdonságainak javítása. A lenből készült ruházati termékek hosszú élettartamúak és drágák. Jogos fogyasztói igény tehát, hogy az ilyen termékek kiváló minőségűek legyenek. A színezett len termékek nedves színtartósági tulajdonságai viszont gyengék, még reaktív színezés esetén is. Annak ellenére, hogy megoldatlan a jó minőségű színezett len termékek előállítása, a len színezésével foglalkozó szakirodalom rendkívül szerény. A len alapvető színezési jellegzetességeinek megismerése után célunk a hagyományos színezési folyamatok optimalizálása, illetve új és hatékony eljárás kidolgozása színezés és enzimikus kezelés együttes alkalmazásával.

E. Csiszár et al., *Textile Research Journal*, **2006**, 76, 629.

Membránszűrő technológiák alkalmazása szennyvízkezelésben

Környezetvédelmi szempontokból kiemelt jelentőségű az iparban az EDTA és más szerves kelát-komplexbérek nehézfémmel alkotott rendkívül stabil vegyületeinek eltávolítása. A környezetbe kerülő nehézfémek a komplexképzők hatására mobilissá válnak és a szennyezés szétterjedését elősegítik. A nehézfémek között kiemelkedő a kobalt(III) komplex szerepe, ezen belül radioaktív ^{60}Co komplexeinek mozgékonyasága és stabilitása. A nehézfémek EDTA komplexei nem- vagy csak rossz hatékonysággal távolíthatók el a jól ismert adszorpció, ioncserés és szűrési technológiákkal. A nemzetközi gyakorlatban a komplexek elrontásával (UV- peroxid- és katalitikus oxidáció) értek el viszonylagos sikereket, de ezek az eljárások bonyolultak és drágák. A kutatás során vizsgáljuk RO, NF és UF technológiák alkalmazását szennyvizek oldott sótartalmának és komplexben lévő nehézfém ionjainak elválasztásában, kiemelten kezelve a Co(III)(EDTA) és Co(III)EDA komplexek elválasztását. A munka során a bórsavas oldatok membrántechnikai kezelésének vizsgálata szükséges, a laboratóriumi kísérleteket ionkromatográfiás módszerrel kiértékelve.

G. Pátzay, et al., *Int. J. Nucl. Energ. Sci. Technol. (IJNEST)*, **2006**, 2, 328.

G. Pátzay, et al., *Desalination*, **2005**, 175, 179.

A mikrohullámú technika alkalmazása szintézisekben

A környezetbarát szintézismódszerek kutatása a zöldkémia legjelentősebb szele. A cél egyrészt ismert reakciók hatékonyabb (tehát gyorsabb és szelektívebb) lejárata, másrészt nehezen menő reakciók gyorsítása, ill. a hagyományos körülmények között nem végbemenő reakciók lehetővé tétele, harmadrészt a biztonságtechnikai és egészség- ill. környezetvédelmi szempontból káros oldószerek kiváltása vagy oldószertelen technikák kidolgozása. A szilárdfázisú hordozón megvalósított átalakítások is nagy lehetőséget jelentenek. A fentiekben megfogalmazott célkitűzések realizálására a mikrohullámú technika alkalmazása jelenthet megoldást.

I. Greiner, G. Keglevich et al. *Synth. Commun.*, **2007**, 37, 317.

Vegyipari Művelettan területen:

Bioetanol előállítása hibrid elválasztási eljárásokkal

A manapság egyre inkább alkalmazásra kerülő bioüzemanyagok közül az etanol gazdaságos előállítása a feladat, mely erjedési folyamatok során viszonylag kis koncentrációban keletkezik, melyből az etanolt desztillációs eljárásokkal nyerik ki. A kutatási téma keretében azt vizsgáljuk, hogy híg vizes etanol oldatból, hogyan lehet az üzemanyag minőségű etanolt hibrid elválasztási eljárásokkal a jelenleginél hatékonyabb módon előállítani. A hibrid elválasztási eljárások a desztilláció és a membránműveletek kombinációját jelentik. A munka során kísérleti módszereket és számítógépes modellezést egyaránt használunk, s e módszerek együttes alkalmazása – mely stratégiát más rendszerek elválasztási problémáinak megoldására már sikerrel alkalmaztunk – a kutatási feladat hatékony megoldására biztosít lehetőséget.

K. Koczka, P. Mizsey, Z. Fonyó, *Central European Journal of Chemistry* (2007) accepted

Szanyi, A., P. Mizsey, Z. Fonyó, *Chem. Biochem. Eng. Q.*, 19(2) 111-121 (2005)

Membránműveletek tanulmányozása

A membránműveletek a tiszta folyamatok közé sorolhatók. A kutatás célja környezetközpontú elválasztási feladatok tanulmányozása membránműveletekkel. Ide soroljuk az egyes membránszűrési feladatokat és a pervaporációt. Az elválasztás elsősorban a nem-ideális elegyek elválasztását ill. hulladékvizek tisztítását jelenti. A munka részben során számítógépes modellezésből, részben kísérleti tevékenységből áll.

Lovasz, A., P. Mizsey, Zolt Fonyó, , *Chem. Eng. J.*, **2007**, 133, 219.

Csefalvay, E., Z. Szitkai, P. Mizsey, Z. Fonyó, *Desalination* **2007** accepted.

Vegyipari folyamatok környezetközpontú tervezése figyelembe véve a szabályozhatóság szempontjait

A vegyipari folyamatok tervezése komplex tevékenység, mely napjainkban a gazdaságossági vizsgálatok mellett magába foglalja a környezetvédelmi szempontok teljesítését is. Ezt az integrált tervezést mindezek mellett még úgy kell megoldani, hogy a szabályozhatóság szempontjait is szem előtt tartsuk. A gazdaságosság mellett ma már ezért egyre inkább komplexen értékelik a tervezési alternatívákat. Az integrált tervezésbe beletartozik az anyag és energiaintegráció figyelembevétele és alkalmazása is. A tervezési alternatíváknál egyre inkább a z életciklus elemzés szempontjai kerülnek előtérbe.

Tamas Benko, Claas Teichmann, Peter Mizsey, Daniela Jacob, *Atmospheric Environment*, accepted for publication, **2007**.

Benko, T., A. Szanyi, P. Mizsey, Z. Fonyó, , *Central European Journal of Chemistry*, 4(1) **2006** 1-19

Szanyi, A., P. Mizsey, Z. Fonyó, *Ind. Eng. Chem.*, **2004**, 43, 8269.

Racz, L., P. Mizsey, A. Kraslawski, *Periodica Polytechnica*, **2006**, 50, 109.

Racém vegyületek resolválása szuperkritikus extrakció alkalmazásával

Napjainkban egyre nagyobb az igény a királis vegyületek optikailag aktív formában történő előállítására, elsősorban a gyógyszeripar területén. Ennek oka, hogy a királis molekulákból felépülő szervezetre az egyes enantiomerek gyakran más-más hatást fejtenek ki, így az új gyógyszerek engedélyeztetésénél a nemzetközi ajánlások alapján előnyt élveznek a csak a

kedvező biológiai hatású enantiomert tartalmazó termékek. A rezolválásra egy új lehetőséget biztosít a szuperkritikus szén-dioxidos extrakció, amely a hagyományos eljárásokhoz viszonyítva környezetkímélő technológiát jelent, és tisztább termék előállítását teszi lehetővé. A módszer világ szinten újdonságnak számít, amit a Kar kutatói dolgoztak ki és alkalmaztak először. A kutatási tevékenység az alábbiakra terjed ki:

- Gyógyszeripari jelentőséggel bíró racém vegyületekhez megfelelő szelektivitású rezolváló ágensek keresése.
- A technológia paramétereinek vizsgálata különös tekintettel a mintaelőkészítés és feldolgozás jelentőségének meghatározására.
- Alkalmasnak tűnő modellvegyületen az oldószerek (szuperkritikus illetve szerves) hatásának vizsgálata az enantiomertisztaságra. A szuperkritikus extrakció paramétereinek optimalizálása. A felismert hatások értelmezése.

A munkához rendelkezésre állnak a szuperkritikus extraktorok, és a minták vizsgálatához szükséges eszközök.

E. Székely, B. Simándi, E. Fogassy et al., *J. Supercrit. Fluids*, 2006, **37**, 384.

E. Székely, B. Simándi, E. Fogassy et al., *Chirality*, 2007, .

Gyógyászati, kozmetikai és élelmiszeripari célra alkalmas növényi hatóanyagok kinyerése szuperkritikus extrakcióval

A szuperkritikus szén-dioxidos extrakció egy modern, környezetkímélő elválasztási módszer. Napjainkban már elterjedten alkalmazzák ipari méretben is, elsősorban élelmiszeripari vagy kozmetikai felhasználású termékek előállítására. Előnye, hogy így tiszta, szerves oldószernyomoktól mentes termék állítható elő, aminek értéke sokkal nagyobb, mint a hagyományos oldószerekkel előállított kivonatoké. A kutatómunka célja értékes növényi anyagok (pl. antioxidánsok, színezékek) szuperkritikus extrakciójának vizsgálata gyógyászati, kozmetikai és élelmiszeripari célra alkalmas adalékok előállítása céljából. A projekt célja a szuperkritikus extrakció optimális műveleti paramétereinek meghatározása, a termékek (extrakt és maradék) minőségi és mennyiségi összehasonlítása a hagyományos módon (vízgőz-desztillációval és oldószeres extrakcióval) nyerhető termékek hasonló paramétereivel. A kísérletekhez rendelkezésre áll egy 5 dm³ extraktor térfogatú, max. 500 bar és max. 200 °C paraméterekkel üzemeltethető laboratóriumi készülék. A kutatás során az alábbiak tanulmányozása szükséges:

- Laboratóriumi kísérletek végzése a növényi hatóanyag kinyerésére. Az előkészítés (örlés, stb.) hatásának vizsgálata az extrahálhatóság és a termék minőségére. Az extrakció üzemviteli paramétereinek (nyomás, hőmérséklet, oldószera-ram, extrakciós idő) változtatásával az elválasztás kedvező körülményeinek meghatározása. Az extrakt minőségének meghatározása.
- Az extrakció anyagmérleg egyenleteiből kiindulva egyszerűsített matematikai modellek alapján a művelet számítása.
- A fitoanalitikai vizsgálatok egy része együttműködés keretében a SOTE Gyógynövény- és Drogismereti Intézetében történik.

B. Simándi et al., *J. Agric. Food Chem.*, 2005, **53**, 17.

B. Simándi, Növényolajok kinyerése és feldolgozása szuperkritikus oldószerekkel, In: Olajnövények, növényolajgyártás (Szerk. Kiss Béla), Mezőgazda Kiadó, Budapest, 2007.

Biológiai rendszerek vizsgálata szuperkritikus szén-dioxidban

Az enzimek és egyéb fehérjék előállítása, alkalmazása a modern iparban mind a vegyipari, mind az orvosi területen nagyon jelentős és innovatív terület. Ezek a fehérjék azonban érzékenyek az extrém hatásokra, mint a magas hőmérséklet, szerves oldószerek, stb. Ennek a limitációnak a feloldására nyújthat a szuperkritikus szén-dioxid megfelelő, környezeti szempontból is előnyös megoldási lehetőséget. Ezen alkalmazáshoz tanulmányozni kell a szuperkritikus extrakció alkalmazhatóságát a kutatás célvegyületeire. Így a kutatás célja annak vizsgálata, hogy a fehérjék viselkedését, bioaktivitását a szén-dioxidos közeg hogyan befolyásolja, a rendelkezésre álló nagynyomású fázisegyensúly mérő cellában. A fenti vizsgálatokhoz a kísérlettervezés metodikáját kívánjuk felhasználni, a rendelkezésre álló a szuperkritikus fázisegyensúly mérő készülékben végezve a kísérleteket.

E. Székely, B. Simándi, E. Fogassy et al., *Chirality*, 2007, .

Vegyipari termelő vállalatok ütemezési problémáinak optimalizása vegyes egészértékű nemlineáris programozással.

A műszaki kémia egyik legfontosabb feladata a kémiai termelő folyamatok, vegyipari üzemek optimális kialakítása, tervezése, és üzemeltetése. A folyamatok optimalizálása során keressük azt a struktúrát és azokat a műveleti paramétereket, amelyek mellett a kémiai folyamat, vegyipari üzem a legtöbb profitot, hasznot adja. A vegyes egészértékű nemlineáris programozással lehetőség van a műveletek szimultán tervezésére és optimalizálására, úgy, hogy közben a folyamat optimális struktúráját is meghatározzuk. Ehhez azonban szükség van a műveletek és folyamatok eddigi modelljeinek továbbfejlesztésére. A kutatási munka során új MINLP modellek dolgozandók ki vegyipari műveletekre, elosztó-hálózatokra és ütemezési feladatokra.

E. Rév, Z. Lelkes, Z. Fonyó, et al., *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2003**, 42, 162.

Szakaszos reaktív desztilláció vizsgálata middle vessel kolonnában.

A szakaszos reaktív desztilláció a legígéretesebb hibrid műveletek közé tartozik, fő felhasználási területei a gyógyszeripari szintézis és oldószer regenerálás. Az extraktív és reaktív desztilláció szakaszos megvalósításának jellegzetessége, hogy a kolonna valamely pontján folyamatos betáplálást igényelnek, így a művelet tulajdonképpen félfolyamatos jellegű. Ez döntően befolyásolja a gyakorlati megvalósíthatóságot. A doktori munka célja, hogy a fenti művelet middle-vessel kolonnában történő megvalósíthatóságát vizsgálja.

A kutatás során a következő vizsgálatok elvégzése szükséges:

- Szakaszos extraktív és reaktív desztilláció vizsgálata szakaszos rektifikálóban.
- Szakaszos extraktív és reaktív desztilláció vizsgálata szakaszos sztripperben.
- Szakaszos extraktív és reaktív desztilláció vizsgálata middle vessel kolonnában.

E. Rév, E. Z. Fonyó, Z. Lelkes, et al., *Chemical Engineering and Processing*, **2005**, 44, 1237.

Minőségügyi statisztika a kémiában és a vegyiparban

Az analitikai kémiai munkában és a gyártások adatainak elemzésénél szükség van az ingadozásforrások elemzésére, hatásuk számszerűsítésére. Ennek fő módszere a varianciakomponens-analízis. Az eredmények birtokában számításokat végezhetünk a termék-egyedek minőségi jellemzői (pl. tablettakonzentráció) ingadozási tartományának becslésére, ennek módszere a tolerancia-tartomány számítása. A mérési eredmények értékelésének másik fő módszere a statisztikai próba. Ennek egyre inkább használatos módja az intervallum-hipotézisek vizsgálata. A kutatási munkában a fenti matematikai-statisztikai apparátust használjuk kémiai, vegyipari valamint élelmiszer és biotechnológiai problémák megoldására.

S. Kemény, K. Réczey, et al., *Measurement*, **2005**, 38, 194.

F. Békés, S. Kemény, and M. Morell, *Eur. J. Agronomy* **2006**, 25, 155.

Anyagtudomány területen:

Nyitó/záró mechanizmussal rendelkező membránok előállítása és transzportfolyamataik tanulmányozása

A kutatási téma olyan új, külső hatással szabályozható permeabilitású membrán létrehozása, amelybe nano vagy mikroméretű csatornákat építünk be monolit vagy kompozit mikrogél részecskékből. A gélmátrixba ágyazott nanométer és/vagy mikrométer tartományba eső gél részecskék mérete környezeti hatásokkal (hőmérséklettel, pH-val, ionerősséggel, só koncentrációval, elegyösszetétellel, mágneses és/vagy elektromos térrel, mikrohullámmal, ultrahanggal és fénnel) széles határok között, pillanatszerűen változtatható, így ezzel a csatornák pórusmérete szabályozható. A lánc-szerű füzérekbe rendezett gélgömbök térfogatának csökkenése a membrán transzporttulajdonságainak megváltozását idézi elő. A membrán permeabilitásának megváltoztatásával a membránon keresztüli anyagtranszportot is szabályozhatjuk. A membrán transzport tulajdonságainak szabályozása lehetővé teszi a membrán orvosbiológiai felhasználását, mint pl.: gyógyszerhatóanyag leadás szabályozása külső környezeti paraméterek megváltoztatásával. A számos lehetséges ipari felhasználás közül említésre érdemes a szelektív megkötés, elválasztás, tisztítás, frakcionálás, valamint méret alapján történő komponens elválasztás lehetősége illetve mikroreaktorként, mikro pumpaként történő alkalmazás.

M. Zrínyi et al., *Macromolecules*, **2006**, *39*, 1939.

M. Zrínyi et al., Magnetic Field-responsive Smart Polymer Composites (review), *Advances in Polymer Science*, *Oligomers, Polymer Composites, Molecular Imprinting*, p. 137-189 Springer-Verlag Berlin Heidelberg (**2007**)

Aminosav alapú polimergélek

A kutatás célja aminosav alapú polimerek és polimergélek fejlesztése és vizsgálata, elsősorban humábiológiai alkalmazásokra, ezen belül főként szabályozott hatóanyag-leadás megvalósítására. A polimergélek alapanyaga a poliszukcinimid, melyből különböző keresztkötőkkel sikerült a környezet változásaira érzékeny géleket előállítani. A kutatás során vizsgáljuk a gélek fizikai és kémiai tulajdonságait, valamint új géleket hozunk létre. Ezen rendszerekkel hatóanyag-kioldási kinetikát és más, az alkalmazásokhoz kapcsolódó vizsgálatok elvégzését tervezzük.

M. Zrínyi et al., Magnetic Field-responsive Smart Polymer Composites (review), *Advances in Polymer Science*, *Oligomers, Polymer Composites, Molecular Imprinting*, p. 137-189 Springer-Verlag Berlin Heidelberg (**2007**)

Új anyagok és technológiák környezeti szempontból kedvező megoldásokhoz: természetes és/vagy biológiailag lebontható polimerek és kompozitjaik.

A műanyag csomagolóanyagok hulladékai jelentős környezeti terhelést okoznak napjainkban. A hulladékok mennyiségének csökkentése és a probléma kezelése többféle módon képzelhető el, de átfogó megoldás jelenleg még nem létezik. Ugyanakkor a tendencia új anyagok és technológiák keresése, biológiailag lebontható polimerek alkalmazása. Az legegyszerűbb megoldás a műanyagok újrafeldolgozása, amelynek azonban gyakran törvényi és műszaki akadályai vannak. Munkánk egyik célja PET csomagolóanyag újrafeldolgozhatóságának vizsgálata. A PET nem bontható le biológiailag, helyettesítését alifás poliészterekkel kísérik meg. Ezek műszaki jellemzői azonban nem minden esetben elégítik ki az igényeket. A kutatás különböző alifás észterek kémiai szerkezete és tulajdonságai közötti kapcsolatok feltárására,

illetve a tulajdonságok módosítására irányul (gócképzők, töltő és erősítőanyagok). Biológiai lebontható polimerek és polimer rendszerek előállítását többféle módon kíséreljük meg. Lágyított keményítőt állítunk elő és módosítjuk különböző társító és erősítő anyagokkal. Rétegszilikátokkal nanokompozitokat készítünk és a szilikát előkészítésével, az adagolás sorrendjével, valamint a feldolgozási körülmények változtatásával módosítjuk a szilikát delaminációjának mértékét. A mátrixként felhasználható polimereket különböző természetes szálakkal erősítjük tulajdonságaik javítása érdekében. Minden esetben részletesen jellemezzük az előállított polimereket és kompozitjaikat és vizsgáljuk szerkezet-tulajdonság összefüggéseiket. Faliszttal módosított polipropilén kompozitokat készítünk és vizsgáljuk a komponensek jellemzőinek, az összetételnek, a határfelületi kölcsönhatásoknak és a szerkezetnek a kompozitok tulajdonságaira gyakorolt hatását.

B. Pukánszky et al., *Compos. Interfaces* **2006**, 13, 1.

B. Pukánszky et al., *J. Polym. Sci. Phys.* accepted

Agyérbészetre alkalmas poliuretánok előállítása és vizsgálata

Az agyvérzés az érfal meggyengülése, egy vérzsák kialakulása és kiszakadása miatt következik be. A legmodernebb eljárások szerint ezt úgy gyógyítják, illetve bekövetkezését úgy akadályozzák meg, hogy a vérzsákba polimer oldatot vezetnek, ami ott kicsapódva megakadályozza annak kiszakadását, de ugyanakkor nem gátolja a vér áramlását az erekben. A kutatás célja olyan agyérbészeti célra alkalmas polimer előállítása, amely megfelel az orvosi alkalmazás által támasztott számos követelménynek. Ilyenek az élettani semlegesség, preferáltan szövetbarát viselkedés, és az operációhoz, illetve a beteg további életéhez kapcsolódó kívánalmak, mint a molekulasúly, oldatviszkozitás, oldhatóság, polaritás, kölcsönhatás a környezettel, mechanikai tulajdonságok és stabilitás. Az említett tulajdonságok együttesét a polimer kémiai szerkezete határozza meg, ami tág határok között változhat és elsősorban a polimerizációs reakcióban felhasznált komponensek mennyiségétől és minőségétől, valamint a polimerizáció technológiájától függ. A kívánt tulajdonságok függenek a konkrét alkalmazás körülményeitől is. A munka során változtatjuk a poliuretán kémiai szerkezetét és vizsgáljuk a szerkezet és az orvosi szempontból fontos tulajdonságok közötti kapcsolatokat, a kívánt célra legmegfelelőbb anyag előállítása érdekében.

B. Pukánszky et al., *Eur. Polym. J.* **2005**, 41, 727.

B. Pukánszky et al., *Eur. Polym. J.* **2005**, 41, 1699.

Mikromechanikai deformációs folyamatok heterogén polimer rendszerekben

A heterogén polimer rendszerekben, azaz a töltőanyagot tartalmazó polimerekben, polimer keverékekben és szálerősítésű kompozitokban a külső feszültség hatására lokális deformációs folyamatok mennek végbe, melyek meghatározzák az anyag makroszkopikus tulajdonságait. Az egymással kompetitív folyamatok bekövetkezésének valószínűsége nem ismert, a domináló folyamat a komponensek jellemzőitől, a szerkezettől és a határfelületi kölcsönhatásoktól függ. A kutatás során mikromechanikai deformációs folyamatokat kívánjuk vizsgálni modellezéssel, a térfogati deformáció mérésével, akusztikus emisszióval, illetve a mechanikai jellemzők meghatározásával. A vizsgálatokhoz megfelelő modellanyagokat állítunk elő a diszpergált komponens méreteinek, rugalmas jellemzőinek és a határfelületi

kölcsönhatás erősségének változtatásával. Kapcsolatot keresünk ezek között a jellemzők a kompozit szerkezete és tulajdonságai között. Modellszámítások segítségével megállapítjuk az egyes deformációs folyamatok relatív súlyát a teljes deformációban.

B. Pukánszky et al., *Eur. Polym. J.* **2005**, *41*, 2520.

Szerkezet-tulajdonság összefüggések vizsgálata polimer/rétegszilikát nanokompozitokban

A kutatás célja nyírás hatására delaminált szerkezetű anyagok előállítása és vizsgálata. Tanulmányozzuk a delaminációt befolyásoló termodinamikai és kinetikai tényezőket. PP nanokompozitokban funkcionizált PP, esetleg egyéb komponensek adagolása segítségével változtatjuk a kölcsönhatás erősségét és a szerkezetet. Különböző módszerek segítségével meghatározzuk az organofil szilikát szerkezetét és felületi jellemzőit. Tanulmányozzuk a felületkezelő szer, a fázisközvetítő és a töltőanyag között lejátszódó kémiai és fizikai kölcsönhatásokat. Módszereket dolgozunk ki a delamináció mértékének becslésére és meghatározzuk azt különböző módon előállított nanokompozitokban. Kapcsolatot keresünk a kialakult szerkezet, a delamináció mértéke és a kompozit tulajdonságai között. Vizsgáljuk a nanokompozitokban kialakuló határfelületi kölcsönhatások szerepét a kompozitok mechanikai tulajdonságainak meghatározásában. Az eredményeket megkíséreljük kiterjeszteni polimerizációval előállított nanokompozitok jellemzésére, illetve rétegszilikátot tartalmazó vékony rétegek előállítására és vizsgálatára.

B. Pukánszky et al., *Macromol. Mater. Eng.* **2006**, *291*, 858.

B. Pukánszky et al., *Macromol. Chem. Rapid Commun.* **2006**, *27*, 132.

Adaptív polimer gélek kifejlesztése szennyvíztechnológiai alkalmazás céljára

A hagyományos szennyvíztechnológia eljárásokban a spontán kialakuló pelyhek figyelembe vételével üzemeltetnek szennyvíztisztítási technológiát, ezzel szemben az innovatív megközelítés alapján a technológiai célkitűzésekhez alkalmazkodva tervezünk meg és állítotunk elő mikroszkópos méretű, adaptív mesterséges vázszerkezetet. A nanotechnológiai megközelítés alapján pontosan tervezett méretben és szerkezetben állítotunk elő olyan, a szennyvíztechnológia szempontjából releváns környezeti változásokra adaptív módon reagálni képes mikroszkópos méretű szerkezetet, amely egyszerűbbé és megbízhatóbbá teszi a szennyvíztisztító telepek működtetését. ***Jelenleg sem nemzetközi, sem pedig hazai műhelyekben nem folynak olyan kutatások, amelyek közvetlenül a tisztítási eljárásokban kulcsszerepet játszó eleveniszap pelyhek architektúrájának, és ebből adódóan működésének optimalizációjára irányulnának.*** Az eleveniszap pelyhek spontán formálódó vázszerkezetét helyettesítő adaptív kolloid vázrendszer alkalmazásával elérhető például, hogy a környezeti paraméterek (pl.: pH vagy hőmérséklet) változásának hatására összehúzódó, vagy táguló mikroszerkezetben a gélfelületen megtelepedő bakteriális sejtek elektrondonor és akceptor hozzáférését szabályozzuk. Az alkalmazott hidrogél szerkezetet felhasználhatjuk különböző mikroszennyező anyagok szelektív megkötésére is, és így azokat a vízfázisból szelektíven feldúsítva a bakteriális lebomláshoz szükséges optimálisan magas szubsztrát koncentráció is biztosítható.

Z., Zrinyi, et al., IASON – Intelligent Activated Sludge Operated by Nanotechnology, *9th Conference on Colloid Chemistry*, Siófok, Hungary, 3-5 Oct. **2007** (lecture)

Környezeti paraméterekre érzékeny polimergélek és elasztomerek

Az ezredforduló jelentős változást eredményezett az anyagtudományban. Az egyre bővülő felhasználói igények paradigmaváltást kényszerítettek ki. Az új gondolkodásmód kulcsszavává a környezethez való alkalmazkodóképesség vált. Az anyagok passzív változatlanságára irányuló törekvéseket felváltotta az anyag és környezete dinamikus együttélését vizsgáló szemléletmód. Megjelent egy új fogalom: az intelligens anyag. Az intelligens anyag elnevezés az anyagtudomány egy olyan új területére utal, amely az anyag és közvetlen környezete aktív kapcsolatát igyekszik feltárni és kiaknázni. Elsődleges célja olyan szintetikus anyagok tervezése, előállítása és tulajdonságainak vizsgálata, amelyek a felhasználó számára előnyösen képesek reagálni a környezetükből származó fizikai és/vagy kémiai hatásokra. Környezeti hatásokra érzékeny gélek a biológia és az orvos-biológia területén új lehetőségeket nyithatnak meg. Polimergélek térfogatának a környezeti paraméterekkel előidézett befolyásolása megteremtette a szabályozott gyógyszerhatóanyag-leadásnak egy teljesen új lehetőségét. A kioldódás szabályozásának egyik lehetséges módja a lokális hőmérséklet megváltoztatásával előidézett gélkollapszus. A gél térfogatával szabályozott hatóanyag kioldódás alkalmazását megnehezíti a hőmérséklet változtatásának technikai problémája. Ennek egyik lehetséges megoldását szintén a mágnesesség kínálja. Ha a gélgömbökbe olyan mágneses anyagot építünk be, amelynek mágneses hiszterézise van, akkor dinamikusan változó mágneses térben a hiszterézisvesztesség hő formában jelenik meg, és úgy növeli a gélgömb hőmérsékletét, és ezen keresztül a kioldódás sebességét, hogy közben a környezet hőmérséklete nem változik. Hasonlóképpen használható ki a dielektromos hővesztesség is nagyfrekvenciás elektromos tér alkalmazásával.

G. Filipcsei A., Szilágyi I., Csetneki M., Zrínyi, *MACROMOLECULAR SYMPOSIA*, **2006**, 239, 130.

G. Filipcsei, I. Csetneki A., Szilágyi, M. Zrínyi, *Advances in Polymer Science*, Oligomers, Polymer Composites, Molecular Imprinting, Ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, **2007**, pp. 137-189.

Élelmiszertudomány területen:

Közeli infravörös spektroszkópiai módszerek vizsgálata

Biológiai rendszerek, élelmi nyersanyagok és élelmiszerek kvalitatív/kvantitatív elemzésében a gyors roncsolásmentes mérő és elemző módszerek egyre szélesebb körben terjednek. A roncsolásmentes módszerek közül a különféle spektroszkópiai (NIR/NIT, FT-IR, IR, Raman), reológiai valamint képalkotásos és képelemzési (imaging) technikák a legígéretesebbek. A kutatási témában célunk a növényfiziológiai folyamatok (érés, post-harvest, csírázás), technológiai műveletek, eljárások és minőségvizsgálati területeken felhasználható fenti méréstechnikák fejlesztését, alkalmazási lehetőségek vizsgálatát és optimalizálását tűzi célul. A fizikai alapelvű vizsgáló eljárások révén nyert adatok multidimenzionális statisztikai és kemometriai elemzése új dimenziót nyit a minőségelemzés területén.

Sz. Gergely, A. Salgó, *J. Near Infrared Spectr.*, **2007**, 15, 49.

A. Salgó, et al., *Cereal Chem.*, **2007**, 84, 97.

Protein kináz komplexek leírása és fehérje aptamerek előállítása

Napjainkra számos élőlény teljes genom szekvenciája ismertté vált, és több tízezer mRNS expressziós szintjének egyidejű mérése is rutin feladattá lett az RNS detektáló mikroszippek elterjedésével. Az ily módon beköszöntött "posztgenomikus" korszak kihívása a fehérje szintű kutatások felgyorsítása. Szemben a DNS-sel és RNS-sel -amelyek kémiai, fizikai tulajdonságaikban viszonylag homogének-, minden egyes fehérje egyedi tulajdonságokkal rendelkezik, ezért a fehérjék a nukleinsavakhoz hasonló léptékű tanulmányozása rendkívül összetett feladat. Külön nehézséget jelent, hogy már maga a vizsgálandó fehérje előállítása is költséges és időigényes. Az optimális fehérjetermelő módszer feltételeinek legjobban a sejtmentes, *in vitro* transzlációs megközelítések tehetnek eleget. Laborunk egyik fő célkitűzése a búzacsíra kivonaton alapuló *in vitro* transzlációs rendszer optimalizálása és alkalmazása. A transzlációs rendszerben termeltetett fehérjék felhasználása rendkívül sokrétű. Munkánk során két intenzíven kutatott területre fókuszálunk.

-Növényi protein kinázok szubsztrátjainak azonosítása

-Toxikus és allergén fehérjék aptamerekkel történő kimutatása

A kutatási téma sikeres kivitelezése széleskörű metodikai háttérrel feltételez, így a résztvevő hallgatók jártasságot szerezhetnek a molekuláris biológia, fehérje biokémia és növényélettan területén.

T. Mészáros, et al., *The Plant Cell*, **2004**, 16, 643.

Biológiaiailag aktív komponensek vizsgálata

Az élelmiszerek vagy élelmiszer alapanyagok biológiaiailag aktív komponenseinek vizsgálata több szempontból is fontos. Egyrészt szükséges annak megállapítása, hogy az élelmiszerek tartalmazzák-e a szükséges komponenseket és milyen mennyiségben, másrésztől vizsgálandó, hogy mentesek-e az esetleg toxikus komponensektől. Ezzel összefüggésben tanulmányozandó az élelmiszerekkel szembeni intolerancia, aminek egyik fő oka lehet az élelmiszerekben előforduló biológiaiailag aktív komponensek jelenléte. Ugyanakkor növényfiziológiai oldalról megközelítve a tématerületet a mezőgazdasági növények termőképességét leginkább

befolyásoló környezeti stresszek, mint például a szárazság, a magas sótartalom, a magas és alacsony hőmérséklet, a talaj ásványi anyag illetve szennyező nehézfém tartalma, a növények anyagcsere folyamatait jelentősen megváltoztatják. A stressz hatására bekövetkező változások a biológiailag aktív molekulák vizsgálatai alapján jól jellemezhetők. A biológiailag aktív molekulák közül nagyjelentőségű az aminosavak és biogén aminok, melyek vizsgálata a fenti területeken (élelmiszerkémia, élelmiszer allergia, növényfiziológia) különböző elválasztás-technikai módszerekkel (Aminosav analizátor, HPLC, OPLC) adja a kutatási tevékenység célját.

Simon-Sarkadi, L., et al., *J. Agric. Food Chem.* **2005**, *53*, 7512.

Simon-Sarkadi, L., et al., *Biologia Plantarum*, **2006**, *50*, 793.

Növényi fehérjék komplex jellemzése

A növényi fehérjék sajátosságainak tanulmányozása több szempontból is fontos lehet. A búzafehérjék esetében a fehérjeszerkezet és összetétel és a termékminőség szempontjából alapvető fontosságú reológiai tulajdonságok közötti kapcsolat tanulmányozása, értelmezése a cél. Más növényi fehérjeforrások viszont alternatív megoldást kínálhatnak a fehérjeellátásban, egy részük könnyen kinyerhető, magas tápértékkel rendelkeznek és fizikai-kémiai tulajdonságaik alapján felhasználhatók komplex anyagi rendszerekben, élelmiszerekben, gyógykészítményekben, kozmetikai termékekben. Mindezek ellenére, számos esetben az értékes fehérjeforrásnak számító anyagok melléktermékként, kevésbé értékes formában kerülnek felhasználásra. A kutatómunka célja többirányú: Új, potenciális növényi fehérjeforrások keresése és hasznosítási lehetőségeik feltérképezése; a fehérjék egy- illetve többlépcsős izolálása és frakcionálása, alegység-szerkezetének és -összetételének tanulmányozása, vizsgálati módszerek fejlesztése és optimálása; a fehérjekészítmények táplálkozástani-, szerkezeti, felületi, reológiai és un. technofunkcionális (pl. habképzés, emulziós sajátosságok, hidrofóbítás, stb.) vizsgálata; a fehérjeszerkezet és a funkcionalitás közötti kapcsolat tanulmányozása; a fehérjekészítmények humán célú alkalmazási lehetőségeinek keresése valamint közreműködés a kutatáshoz kapcsolódó módszertani és mérés-technikai fejlesztésekben (felületi tulajdonságok modellszintű mérése, elválasztástechnikai módszerek és mikroméretű vizsgálati technikák fejlesztése, stb.). Jelenleg elsősorban a búza, a gabonacsírák, a hüvelyes magvak valamint az un. pseudo-cereáliák (amarant, hajdina, köles, stb.) vizsgálatával foglalkozunk.

S. Tömösközi, A. Salgó A, F. Békés, et al., *Cereal Chem.*, **2004**, *81*, 550.

A mitokondrium szerepe a növényi sejt aszkorbinsav koncentrációjának és redox állapotának szabályozásában

Az aszkorbinsav a növényi és állati sejtek legfontosabb vízoldható antioxidánsa, továbbá számos enzim kofaktora. Az ember és néhány más állatfaj a bioszintetikus útvonal utolsó lépését katalizáló enzim mutációja miatt képtelen előállítására, felvételét elsősorban növényi forrásokból biztosítja. Meglepő módon a növényi aszkorbinsav bioszintetikus útvonalat csak a közelmúltban sikerült felderíteni. A szintézis folyamatában a mitokondrium kulcsszerepet játszik. A bioszintézis utolsó lépését katalizáló enzim (L-galaktono-1,4-lakton dehidrogenáz) a mitokondrium belső membránjában található, szoros kapcsolatban a mitokondriális elektrontranszferrel. A megfelelő aszkorbinsav szint biztosításában a *de novo* bioszintézis mellett a különböző reakciók során oxidálódott aszkorbinsav visszaredukálása is fontos szerepet kap. Az oxidált forma, a dehidroaszkorbát aszkorbáttá történő visszaforgatását első

ízben a kloroplaszt esetében írták le. A visszaredukálásához szükséges elektronok a NADPH-ról glutation közvetítésével kerülnek a dehidroaskorbátra. A redukciós ciklus enzimeinek jelenlétét a mitokondriumban is kimutatták. A közelmúltban leírásra került mitokondriális dehidroaskorbát/aszkorbát transzporter és a dehidroaskorbát redukálásában résztvevő enzimek mitokondriális jelenléte arra utal, hogy a mitokondrium a *de novo* aszkorbát bioszintézis mellett az aszkorbinsav megfelelő redox állapotának fenntartásában is szerepet játszik.

Ezen ismeretek alapján a kutatómunka során a következő tényezőket szeretnénk megvizsgálni:

1. Az intracelluláris transzport szerepét az aszkorbinsav koncentráció és redox státusz alakulásában
2. A DHA regenerációs mechanizmusának felderítése.
3. Az ASC bioszintézisének és fogyasztásának vizsgálata. Az ASC regeneráció fontosságának meghatározása mellett megvizsgáljuk, milyen szerepet játszik az ASC bioszintézis és fogyás az intracelluláris ASC készlet fenntartásában.
4. Az elsődleges anyagcsere és az ASC/DHA transzportja, bioszintézise és regenerációjára közti kölcsönhatás vizsgálata
5. Az így nyert kvantitatív adatokat szeretnénk egy metabolikus modellbe integrálni.

A. Szarka, et al., J. Biol. Chem. **2004**, 279, 3370.

A. Szarka, et al., Physiol. Plant. **2007**, 1279, 225.

Élelmiszerekben kis mennyiségben előforduló biológiailag aktív komponensek vizsgálata korszerű elválasztástechnikai módszerekkel

A gabonák, olajos magvak biológiailag aktív komponensei kis mennyiségük ellenére igen nagy jelentőségűek a humán táplálkozásban. Fontos szerepet töltenek be az egészség megőrzésében, és egyes betegségek elkerülésében is. A fitoösztrogének hormonháztartásban betöltött szerepe intenzíven kutatott terület. Ezen vegyületeknek egyes gabonákban, magvakban található mennyisége tehát igen fontos információ mind a táplálkozásbiológia, mind a nemesítés szempontjából. A kutatási munka során mintaelőkészítési lépések kidolgozása, majd elválasztástechnikai módszerek fejlesztése a cél korszerű elválasztástechnikai módszerekkel (GC/MS, CE, HPLC). A rendelkezésre álló igen nagy számú mintapopuláció vizsgálatával és elemzésével a különböző gabonafajták biológiai jelentősége összehasonlítható és értékelhető.

É. Scholz, A. Salgó, et al., *Chromatographia*, **2002**, 56, 127.

Az Oláh György Doktori Iskola Tanácsa által elfogadott tárgyak listája:

Főtárgyak (2 féléven keresztül hallgatandó, 2 x 10 krp értékben) listája. A tárgycímek mögött zárójelben a./, b./ c./ stb. jelzéssel ellátott címek melléktárgyként (4krp) külön felvehető tárgyakat jelölnek.:

1. Modern analitikai és szerkezetvizsgálati módszerek. (a./Kémiai és bioszenzorok. b./Az analitikai elválasztás módszerei. c./Spektroszkópiai módszerek szerves vegyületek szerkezetfelderítésében)

Tematika: a./ Klasszikus analitikai módszerek: Az analitikai kémia alapfogalmainak áttekintése. A mennyiségi értékelés eljárásai: kalibráció, addíció, belső standard módszer. Az elemzések hibái és megbízhatósága. Az analitikai módszerek teljesítményjellemzői. Térfogatos és tömegszerinti analízis. Egyensúlyi viszonyok leírása. Titrálások kémiai és műszeres végpontjelzése. A különböző titrimetriás módszerek alkalmazási lehetőségei. Termikus analízis. A fő módszerek működése: termogravimetria, fejlődőgáz-elemzés, DTA, differenciális pásztázó kalorimetria (DSC), egyéb módszerek. Kapcsolt mérés technikák a termikus analízisben. A módszerek alkalmazási lehetőségei. Az atomspektroszkópia, az elem tömegspektrometria alapjai. Az atomi energia szintek, atomspektrumok, elem izotópok szeparálása, tömegspektrometria. Az induktívsatolású plazma optikai emissziós spektrometria, műszerezés, analitikai alkalmazások. GD optikai emissziós spektrometria és GD tömegspektrometria. Induktív csatolású plazma tömegspektrometria eleve, műszerezése és analitikai alkalmazása. Kémiai és bioszenzorok: Az előadás fő célkitűzése, hogy egy integrált tudást adjon a kémiai és bioszenzorok témakörét felölelő interdiszciplináris tématerületről. A kémiai és bioszenzorok analitikai jelentőségének és fontosabb jellemzőinek az ismertetését követően a szenzorkutatásban használt legfontosabb szintetikus receptor és biomolekulákat, valamint a különböző energia átvivő mérés technikákat (elektrokémiai, optikai és termikus) tekintjük át. Részletesen tárgyaljuk azokat az alapfolyamatokat, melyek a szenzorok működésének megértését segítik és azokat a módszereket, melyek a szenzor paraméterek meghatározása szempontjából fontosak. Röviden bemutatjuk a szenzorok miniaturizálása, szenzor sorok kialakítása szempontjából fontos mikrofabrikációs eljárásokat. Konkrét analitikai példákkal illusztráljuk a szenzorok széleskörű alkalmazási lehetőségeit. b./ Az Analitikai elválasztás módszerei: Gázkromatográfia: A minőségi azonosítás lehetőségei a gázkromatográfiában. A retenciós index és szerepe a minőségi azonosításban. Gázkromatográfiás retenciós adatok. Egykolonnás és többkolonnás rendszerek a minőségi azonosításban. Specifikus detektorok a minőségi azonosításban. A gázkromatográfiás mennyiségi elemzés elvi lehetőségei és minőségi jellemzői. A GC-s rendszerek alkalmaság vizsgálata. A gázkromatográfiás módszerek validálásának főbb szempontjai. (Analitikai célok, analitikai követelmények, teljesítményjellemzők, a validálás végrehajtása, dokumentálás, stb.) A GC- módszer kidolgozásának szempontjai. A GC alkalmazása a gázelemzésben. A GC a szénhidrogén iparban. A környezetanalízis GC-s lehetőségei. A GC gyógyszeripari alkalmazásai. GC szerepe a mezőgazdaságban és az élelmiszeriparban. A GC-MS mint összetett analitikai rendszer. A tömegspektrometriás minőségi identifikálás elvi alapjai. Az MS rendszerek felépítése (mintabevitel, ionforrások, analizátorok, detektorok, vákuumrendszer, adatfeldolgozás). Összetett ionforrások: MALDI, FAB, CI, APCI, ESI, APPI. Analizátorok: TOF, QP, IT, ICRS, MS/MS, MSⁿ. Nagyfelbontású GC-MS. On-line

mintaelőkészítési megoldások: HS-GC-MS, SPME-GC-MS, SPME-HPLC-MS, P&T-GC-MS, stb. Gyakorlati alkalmazások: gyógyszeripari, élelmiszer analitikai, környezet analitikai, szerves vegyipari analitikai, szermaradvány analitikai, stb. példák. Nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia(HPLC): A hagyományos HPLC mellett az utóbbi években új megoldásokat dolgoztak ki az elválasztás sebességének növelésére. Ultra nagynyomású folyadékkromatográfia (UHPLC), nagy hőmérsékletű folyadékkromatográfia(HTLC), ultra nagynyomású és nagy hőmérsékletű folyadékkromatográfia(UPLC-HTLC). Mindezen technikákkal együtt előtérbe került 2 μm alatti kis geometriájú kolonnák használata. A sebesség és a hatékonyság másik lehetősége a monolit kolonnák használata és a hejserű tölteteké. Az előadásban foglalkozom az egyes technikák megkövetelte műszerezettséggel a módosult elválasztási paraméterek szerepével és a módszer átvitel kérdéseiről a hagyományos HPLC-ről a gyors kromatográfiás rendszerekre. c./ Spektroszkópiai módszerek a szerves szerkezetfelfedezésben: A tárgy célkitűzése, hogy a hallgatók elsajátítsák a vegyületek szerkezetfelfedezéséhez, szerkezetazonosításához szükséges NMR-spektroszkópiai ismereteket és önállóan alkalmazni is tudják azokat a mindennapi gyakorlatban. A mágneses magrezonancia spektroszkópia fizikai alapjainak áttekintése és a jellemző spektrális paraméterek ismertetése. Az alapvető egy- és kétdimenziós NMR mérési módszerek, valamint a spektrális paraméterek és a kémiai szerkezet összefüggéseinek tárgyalása. Spektrumértékelési technikák bemutatása, az ^1H és ^{13}C kémiai eltolódások empirikus számításának gyakorlása. Új metodikák a biológiai, biokémiai és fizikai-kémiai alkalmazások területén.

2. Szervetlen kémia. (a./Főcsoportbeli elemek kémiája. b./Átmeneti és ritkaföldfémek kémiája, komplexkémia. c./Fémorganikus kémia. d./Alkalmazott szervetlen kémia; korrózió, szervetlen polimerek.)

A szervetlen vegyületek kötősszerkezetét leíró fontosabb elméletek. Kovalens, datív, ionos kötés. Kvalitatív MO elméletek. a./ Hibridizáció, VSEPR elmélet. Hipervalens vegyületek, három centrum 4 elektron kötésmodell (nemesgázvegyületek, kén és foszfor hipervalens vegyületei). Hipovalens, elektronhiányos szerkezetek, karbén és karbénanalógok, három centrum két elektron kötésmodell, bórvegyületek). Második sorbeli elemek kémiájának jellemzői. Inert s pálya hatás, többszörös kötések vs. polimer szerkezetek kialakulása. Nehéz elemek jellemzői, relativisztikus effektus. Szervetlen nagyipari technológiák kémiája (ammóniaszintézis, salétromsavgyártás, kénsavgyártás, kősóelektrolízis, szódaggyártás, alumíniumgyártás) b./ D-elemek jellemzői, csoportosításuk (korai/késői d-elemek) kristálytér és ligandumtér elmélet. Komplex vegyületek, 18 elektron szabály. Komplex vegyületek stabilitása, optikai és mágneses tulajdonságaik. F-elemek jellemzői, lantanida kontrakció, kétértékű lantanidavegyületek. c./ Poláris fémorganikus vegyületek (lítium és magnéziumorganikus vegyületek). Szerves alumíniumvegyületek. Szilícium, ón- és ólomorganikus vegyületek. Szendvicsvegyületek főcsoportbeli elemekkel és átmeneti fémekkel. Titán, króm és mangánorganikus vegyületek. Vas, kobalt, nikkelorganikus vegyületek. Platinafémek fémorganikus vegyületei. Réz és cinkorganikus vegyületek. Fémorganikus vegyületek a szén-szén kötések kialakításában. d./ Korróziós problémák, aktív és passzív védelem. Galvánelemek, akkumulátorok, tüzelőanyag cellák. Hidogéntárolás. Szervetlen polimerek, polifoszfazének. Szilikonok (olajok, gumik, gyanták). Speciális felhasználások. Vezető polimerek. Poliszilánok, elemorganikus vezető polimerek.

3. Modern számításhoz kémia. (a./Kémiai és enzimreakciók számítása. b./ Molekulatervezés c./Számítógépes modellezés az anyagtudományban)

Tematika: A kvantumkémia elméleti alapjai: A kvantummechanika axiómái, a H-atom, a Born-Oppenheimer-tétel, az egyelektronos modell, determináns alakú hullámfüggvény és az MO-elmélet. Az elméleti modellek hierarchiája: Molekulamechanika, félempirikus, HF és post-HF módszerek. A konfigurációs kölcsönhatás módszere. Többdetermináns módszerek. Perturbációszámításon alapuló módszerek. A csatolt klaszterek módszere. Oniom, QM-MM módszerek. Sűrűségfüggvény módszerek, közelítő függvények fajtái. Az elektronsűrűség fogalma. Alkalmazási lehetőségek: Atomok és molekulák energiája és elektron-szerkezete. Kémiai és fizikai fogalmakhoz rendelhető mennyiségek számítása. A kémiai kötés leírása. Molekulageometria, konformációk, konformációs tér. Kémiai reakciók modellezése, reakciók termodinamikája. Stabil szerkezetek, és nyeregponatok jellemzése, átmeneti állapotok meghatározása. Nagy rendszerek tárgyalása: oldat- és kristályszerkezetek. Molekuladinamika.

Spektrumszámítások. Molekulapályák és a fotoelektron-spektrum. Vertikális és adiabatikus ionizációs energia számítása. Elektrongerjesztési spektrum számítása. CI, CAS, TD DFT módszerek. A rezgési spektrum számítása. Harmonikus és anharmonikus közelítés. A forgási spektrum. NMR számítások.

3. Élelmiszerbiokémia.

Tematika: Az élő rendszereket alkotó vegyületek keletkezése, az élelmiszerek keletkezése. Fontosabb élelmiszerkémiai és technológiai folyamatok biokémiája. A növényi eredetű nyersanyagok légzése. Az enzim barnulás folyamatai. Az érési folyamatok biokémiája. Növényi színyanyagok képződése és biokémiai hatásai. Az aszkorbinsav biokémiája növényi rendszerekben. A fehérjék változásai élelmiszerrendszerekben. A lipidek változásai nyersanyagokban és élelmiszerekben. Szénhidrátok változásai nyersanyagokban és élelmiszerekben. Természetes bioaktív komponensek képződése és hatásai. Az élelmi láncot veszélyeztető természetes és képződő szennyező és toxikus anyagok. Új ismeretek az élelmiszeradalékokról. Az élelmiszerek hasznosulásának biokémiai folyamatai. Emésztés folyamatai: biológiai, fiziológiai és biokémiai folyamatok és szabályozásuk. A felszívódás (reszorpció) biológiai, fiziológiai és biokémiai folyamatai, szabályozás. Emésztési és felszívódási zavarok. Fehérje és aminosav anyagcserezavarok. Szénhidrát anyagcserezavarok. Lipid anyagcserezavarok. A táplálkozás egyes speciális kérdései (Szabadgyök képzés, alkohol, koleszterin, rost, szennyezések, GM anyagok, mikrobák). Betegség megelőzés táplálkozással: elhízás, kardiovaszkuláris betegségek, daganatos betegségek, mozgásszervi betegségek, egyéb. Tervezett hatású funkcionális élelmiszerek.

4. Bioreakciók mérnöki tárgyalása. (a./Mikrobiális és enzim rendszerek. b./Számításhoz molekuláris biológia. c./Biológiai szennyvíztisztítás intenzifikálása)

Tematika: a./ Kinetikai áttekintés: mikrobák növekedési és termékképzési modelljei. Eukarióták növekedése. Filumok és fajok növekedése, a növekedés strukturális modelljei, a génexpresszió és reguláció modellezése, plazmid replikáció. Metabolic engineering: multienzim enzimkinetikai alapok és alkalmazás: metabolikus kontrol analízis. Mikrobiális kölcsönhatások modellezése. b./ Sználátvivő hálózatok és sznál - válasz görbe, visszacsatolások a sználátvivő hálózatokban. Pozitív és negatív visszacsatolások kölcsönhatása: oszcillációk és fázissík diagram. Komplex szabályozási rendszerek bifurkációs

diagramjai. Diszkrét hálózatok, boolean algebra, neuron hálózatok, bakteriofág lítikus, vagy lizogenikus fejlődése, genetikai hálózatok, molekuláris hálózatok jellemző szabályozási motívumai. Sztochasztikus módszerek, fluktuációk, Gillespie módszer. Biokémiai rendszerek térbeli szerveződése. Eukarióta sejtciklus szabályozás a hasadó és sarjadzó élesztő példáján. c./ A bioreaktor elrendezés költségkímélő intenzifikálásának legújabb lehetőségei: 1./ a biológiai tápanyageltávolítás (N- és P- eltávolítás), különös figyelmet fordítva a hazai szennyvíztisztításban egyre inkább jellemző helyzetre, amikor a szennyvíz szénforrása a denitrifikáció igényeihez képest szűkös. 2./ anoxikus reaktorok megfelelő tagolásának és kombinált eleveniszapos-biofilm rendszerek alkalmazásának feltételei ill. hatásai. 3./ tápanyaghiányos (N- és/vagy P-hiányos) ill. toxikus komponenseket tartalmazó szennyvizek tisztításának új eljárásai az ipari szennyvíztisztításban.

5. Szerkezeti és Molekuláris Biológia I-II

Tematika: a/ Makromolekulák szerkezeti szintjei, és ezek kapcsolatai. Makromolekulák kölcsönhatásai egymással és kismolekulájú ligandumokkal. A szerkezeti szintek alapvető jellemzői, a kölcsönhatások fiziko-kémiai alapjai, stabil és flexibilis egységek. Szerkezet kialakulása egyedül és komplexekben. Szerkezeti szerveződés sejtekben – ezen szerveződési elvek vizsgálata sejtes rendszerekben és rekonstituált elegyekben. Makromolekulák működésének elvei – receptorok és katalizátorok. Működési modellek leírása: kvantitatív, szemi.kvantitatív és kvalitatív megközelítésekkel. Szabályozási sémák rekonstituált homogén rendszerekben. Az élő sejtben megvalósuló szabályozási szintek szerkezeti biológiai alapjai. Szerkezetvizsgáló módszerek makromolekulákra és komplexeikre: ezek előnyei, hátrányai, alkalmazhatóságuk korlátai. Monomerek szerepe (aminosavak, nukleotidok, lipid alkotóelemek) a makromolekulák szerkezetének meghatározásában. Komplex szerkezetvizsgáló módszerek : szerkezeti sejtbiológiai szintjei (atomerő mikroszkópia, elektron mikroszkópia, fluoreszcens vizsgáló módszerek, atomi szintű szerkezetvizsgáló módszerek). Kinetika: steady-state és pre-steady state tranziens vizsgáló módszerek. Fehérjekimérák tervezése.

b/ Molekuláris klónozás elemei, módszerei, a módszerek kritikus összehasonlítása és elemzése. Exogén expresszió. Retrovirális rendszerek: molekuláris alapok, megvalósítási lehetőségek, korlátok. Főbb biomérnöki rendszermodellek pro- és eukariótákban. Random vs mérnöki tervezett eljárások: mutagenézis, genom instabilitáson alapuló módszerek. Bakteriofág-alapú rendszerek. Kvantitatív génexpressziós vizsgáló módszerek. Sejtbiológiai alkalmazások. Főbb makromolekuláris jelölési rendszerek: fluoreszcens és affín tagek, clip tagek, irányítottan hasítható tagek. Génkifejeződés vizsgáló módszerei. Kísérlettervezés szerkezeti és molekuláris biológiai rendszerekben: modellkísérleti alapok, konkluzív eljárások, pozitív/negatív kontrollok alkalmazási lehetőségei. Kurrens nyitott kérdések a szerkezeti és molekuláris biológiában. Irányított evolúciós módszerek, alkalmazási korlátok. RNS-alapú evolúció. Változékonyság és stabilitás megőrzésének molekuláris mechanizmusai. Specifikus makromolekuláris felismerés különböző szintjei és ezek szerepe az életfolyamatokban. Főbb patogén kórképek molekuláris és szerkezeti biológiai alapjai. Génterápia kurrens lehetőségei. Knock-out/knock-in lehetőségek (TALEN, ZFN, CrisPR genom editálás).

6. Kémiai és szénhidrogénipari technológiák. (a./Katalízis. b./ Szénhidrogének feldolgozása. c./Katalitikus és kémiai technológiák üzemanyagok és szerves intermedierek előállítására.)

Tematika: a./ A katalízis elméleti és gyakorlati vonatkozásainak megismertetése a legújabb eredmények és alkalmazások segítségével. Elméleti ismeretek a homogén és heterogén katalizátorok működéséről, a komplexkémia és a felületi kémia eredményeinek alkalmazása a katalízisben. Gyakorlati ismeretek az újabb katalitikus eljárásokról, nemesfémek ipari katalitikus alkalmazásai: A homogén komplex katalizátorok és a heterogén katalizátorok közös és eltérő jellegzetességei. A kétféle katalízis összehasonlítása. Az átmenetifém komplex katalízis újabb eredményei. C-C kapcsolási reakciók, enantioszelektív katalízis. Miért kaptak Nobel díjat katalízissel foglalkozó tudósok 2001 (Knowles, Noyori, Sharpless), 2004 (Chauvin, Grubbs, Schrock), 2007 (Ertl)? A felületi kémia módszerei és katalitikus vonatkozású eredményei. Mire használhatjuk az egykristályokon kapott eredményeket? Új katalitikus ipari eljárások. Irányzatok a gyakorlatorientált katalízis kutatásban. Zeolitok alkalmazásai, membrán és katalizátor házasítása, heterogenizált komplexek alkalmazásai. Nemesfémek a környezeti katalízisben, reciklálásuk lehetőségei.

b./ A szénhidrogén átalakítások kémiai és technológiai jellegzetességeinek, összefüggéseinek tárgyalása. Az üzemanyagok és szerves intermedierek előállítására szolgáló legkorszerűbb technológiák, elsősorban a katalitikus eljárások megismertetése, különös tekintettel a fenntartható fejlődésre és a környezetterhelés minimalizálására. A szénhidrogének típusai, ezek főbb reakciói, tipikus reakciómechanizmusok (gyökös és karbokationos reakciók). A szénhidrogének természetes és mesterséges forrásai (kőolaj, földgáz, Fischer-Tropsch szintézis). Földgáz és szintézisgáz. A hidrogéngyártás földgáz alapon. Kőolajok összetétele, jellegzetességei. A kőolajfinomító mint komplex rendszer. Kőolajfinomítók kiépítésének sémái. Kőolajtermékek tulajdonságai, minőségi követelményei motorbenzin, jet-üzemanyag (kerozin) és diesel-gázolaj motorhajtóanyagok minőségi követelményeinek összefüggése a belsőégésű motorok működésével, fejlődésével és a környezetvédelmi elvárásokkal. Kenőolajok, motorhajtóanyag- és kenőolaj adalékok. Alternatív motorhajtóanyagok, szintetikus kenőolajok, szilárd paraffinok, bitumenek. Fontosabb kőolajfeldolgozási technológiák. Desztilláció. Motorhajtóanyagok gyártása. Kenőolajok és szilárd paraffinok gyártása és finomítása. A kőolajfeldolgozás petrokémiai ágazatai. Olefingyártás: pirolízis technológia és gázszétválasztás C₄-frakció feldolgozása, acetiléngyártás. A kőolajfeldolgozás környezeti problémái, kőolajfinomítók főbb emissziói, hulladékai és ezek csökkentési lehetőségei, technológiai

c./ Technológiák: Izomerizáció, katalitikus benzinreformálás; esettanulmány: a reformálás katalizátorainak és technológiájának fejlődéstörténete. Hidrogénező kéntelenítések és finomítások. Katalitikus krakkolás. Alkil-benzin gyártás, éterek szintézise. Hidrokrakk eljárások. Termikus krakk eljárások: késleltetett koksztólás és viszkozitástörés. Lineáris α -olefinek gyártása és felhasználása. Egyedi aromás szénhidrogének: benzol, toluol és xilolok (BTX) gyártása. BTX aromások néhány szénhidrogénipari átalakítása és felhasználása. A pirolízis jelene, alternatívái. Metanol szintézis és a metanol karbonilezés eljárásai. A kiegyensúlyozott vinilklorid technológia. Izocianátok előállítása, a foszgén kiküszöbölésének lehetősége. Az aromás vegyületek szintetikus alkalmazásának újabb lehetőségei

7. Transzportfolyamatok elmélete.

Tematika: Extenzív mennyiségek transzportja, konvektív és vezetési áram, átadási áram, források és a lokális megváltozás. Nemegyensúlyi folyamatok, termodinamikai erők. Onsager féle lineáris vezetési törvény és reciprocitási relációk. Kereszteffektusok, Curie-elv. Impulzus-, hő- és komponensátadás lamináris áramlásban. Transzportfolyamatok turbulensáramlásban. Turbulens viszkozitás és diffúziós tényező. Határrétegek, keveredési úthossz. Hő- és anyagátadás turbulenshatárrétegben. Nemnewtoni fluidumok áramlása. Hasonlóságelmélet: dimenzióanalízis. Hidrodinamikai hasonlóság és alkalmazásai. Hasonlósági számok. A hőátvitel elméleti alapjai, megnyilvánulási formái, hővezetés, konvektív hőátadás, hőátbocsátás. Mérlegegyenlet. Hőtani hasonlóság: a konvektív hőátadás kritériális egyenlete. Molekuláris diffúzió fluidumokban. Ekvimoláris szembediffúzió, Fick törvény. Ozmotikus diffúzió. Maxwell-Stefan diffúzió. Diffúzió többkomponensű rendszerekben. Termodiffúzió. Diffúzió porózus szilárd anyagon át, Knudsen és felületi diffúzió. Poros gáz modell. Párolgási sebesség. Analógia a konvektív impulzus-, hő- és komponens-transzportok között. Reynolds, Prandtl, Chilton-Colburn és Leveque analógia.

8. Fizikai Kémia I és II. (a./ Optikai spektroszkópia. b./Termodinamika. c./ Reakciókinetika és transzportfolyamatok. d./Kolloid és határfelületi kémia)

a./ Biológiai minták vizsgálata fluoreszkáló festékpróbákkal. Optikai szenzorok. Fotokróm anyagok. Fotodinamias módszerek az orvosi diagnosztikaában és terápiában. Háromdimenziós mikroszkópos képalkotás. Cirkuláris dikroizmus. b./ Bevezetés a nanotechnológiába, a nanorészecskék és a nanostrukturáltság jelentősége. Nanorészecskék előállítása nedves kémiai eljárásokkal. Nanostrukturált rétegek előállítása nedves kolloidkémiai módszerekkel. A nanorétegek jellemzésének lehetőségei reflektometriai és optikai spektroszkópiai módszerekkel. A kisszögű szórás és diffrakció elméleti alapjai. A szórásos kísérletek kivitelezése, a berendezések és mérési praktikák ismertetése. Az elektronmikroszkópos, alagút és atomerő mikroszkópos módszerek rövid ismertetése. A szórási eredmények interpretálása, egyéb módszerek eredményeivel történő összevetés. c./ Hajlékonyláncú makromolekulák térszerkezetének jellemzése. Polimer oldatok és gélek legfontosabb termodinamikai és reológiai tulajdonságai. A gombolyag-globula és a hélix-gombolyag átmenet. Polimer rendszerek fázisátmenetei. Nagyrugalmasság elmélete. „Intelligens” polimerek. d./ Határfelületek termodinamikája. Kölcsönhatási energiák meghatározási módszerei. A határfelületi jelenségek anyagtudományi alkalmazásai. A bőr felépítése és anyagcsere-tulajdonságai (lipidek, esszenciális zsírsavak; hidratált bőr; emolliencia; vitaminok a bőrben; a felszívódás útjai; a bőr öregedése). Egyszerű és összetett emulziók, mikroemulziók, gélek. Liposzómák és folyadékkristályok, membránmodell. Lamellás folyadékkristály rendszerek vizsgálati módszerei.

9. Műanyagok Fizikája I és II. (a./Reológia. b./Kristályos polimerek morfológiája. c./Polimerek deformációja és törése. d./Kölcsönhatások, elegyíthetőség, társítás)

Tematika: a./ A hőrelágyuló műanyagok teszik ki a felhasznált műanyagok közel 70 %-át. Ezeket többnyire ömledékállapotban dolgozzák fel. A polimerek ömledékreológiai jellemzése, a mért reológiai jellemzők és a feldolgozhatóság közötti kapcsolatok ismerete elengedhetetlen megfelelő termék gyártásához. A reológiai jellemzőket a polimerek molekuláris és szupermolekuláris (ömledék, fizikai térháló) szerkezete határozza meg, a szerkezet és tulajdonságok közötti kapcsolatok azonban még ma sem teljesen tisztázottak. A tárgy a reológiai mennyiségek mérésével, értelmezésével és különösen a szerkezet-tulajdonság összefüggésekkel foglalkozik a következő tematika szerint: Alapvető és

származtatott reológiai mennyiségek, mérési módszerek, alkalmazási területek. Folyás egyszerű geometriai térben, kapilláris viszkozimetria, rotációs viszkoziméterek, mérés állandó nyírással, dinamikus-mechanikai spektroszkópia. Newtoni és látszólagos viszkozitás, a viszkozitást meghatározó tényezők. Lineáris viszkoelaszticitás, a mért mennyiségek számítása és konvertálása egymásba, fizikai tartalmuk, értelmezés. Rugalmas hatások a folyás során, Weissenberg effektus, normálfeszültségek, reológiai duzzadás, ömledéktörés. Molekulaszerkezet, mólsúly és mólsúlyeloszlás, elágazások, a molekuláris jellemzők és a fizikai térháló kapcsolata. A reológiai jellemzők és a molekulaszerkezet közötti összefüggések homogén polimer ömledékekben. Többfázisú rendszerek, a reológiai jellemzők hatása a fázisszerkezet alakulására, a szerkezet és a termék tulajdonságainak kapcsolata. A termikus és deformációs előélet hatása az anyag viselkedésére és a mért reológiai jellemzőkre. b./ A szabályos szerkezetű, kristályosodásra hajlamos polimerek. A szemikristályos szerkezetet leíró morfológiai modellek. A kristályossági fok fogalma és meghatározásának módszerei (röntgendiffrakció, dilatometria, kalorimetria, spektroszkópia). A szerkezeti hierarchia szintjei: röntgen, elektronmikroszkópos és optikai mikroszkópos szint. Az elemi cellák felépítése és a különféle kristályrendszerek. Az izomorfia és polimorfia jelensége polimerek esetén. A monotrópia és az enantiotrópia. Polimorf módosulatokkal rendelkező polimerek. Hajtogatott és nyújtott láncú primer krisztallitok. A primer krisztallitokból álló halmazok jellegzetességei. Szupermolekuláris szerkezetek: egykristályok, szferolitok, cilindritok, hedritok, dendritok. A transzkristályos és a shish-kebab szerkezet. A szupermolekuláris szerkezetek jellegzetességeinek felderítésére alkalmas módszerek: fénymikroszkópia, transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkópia (TEM, SEM), atomerő mikroszkópia (AFM). A szferolitok típusai és szerkezeti felépítésük. Pozitív és negatív kettőtörésű szferolitok. Az ún. keresztsávozott (cross hatched) szerkezet. Gyűrűs és radiális szferolitok. A szupermolekuláris szerkezetek jellemzőinek tudatos szabályozására alkalmas módszerek. A polimerek kristályosodásának kinetikai elmélete. A polimerek kristályosodását leíró újabb elméletek. A kristályos polimerek nyújtás hatására fellépő átkristályosodása és azt ezt leíró szerkezeti modellek (Peterlin és Kobayashi modell). A kristályos polimerek orientált állapota az orientáció meghatározásának módszerei. Az orientált polimerek szerkezetét leíró modellek. Az orientáció hatása tulajdonságokra. Nagy modulusú és szilárdságú polimerek előállításának módszerei és ezek szerkezetét leíró modellek. A szemikristályos polimerek szerkezet-tulajdonság összefüggései. A folyadékkristályos kismolekulájú anyagok. A rendezettség különböző formái: szmektikus, nematikus, koleszterikus és diszkotikus folyadékkristályok. A folyadékkristályos polimerek (LCP) típusai: liotrop és termotrop folyadékkristályos polimerek. A főláncban és az oldalláncban mezogén csoportokat tartalmazó polimerek. Az LCP-ek kereskedelmi típusai. Többalkotós polimer rendszerek makromorfológiája. Polimerkeverékek fázismorfológiája. Egyszerű diszperziók, fibrilláris és lamelláris fázismorfológia, mikroemulziók, kokontinuus un. "mátrix a mátrixban" típusú fázisszerkezet. Fázisinverzió. c./ A szerkezeti anyagok a leggyakrabban törés következtében mennek tönkre ezért fontos a szilárdságot meghatározó tényezőknek, a szilárdság meghatározási módszereinek és a módosítási lehetőségeinek ismerete. A tárgy a különböző műanyag szerkezeti anyagokra vonatkozóan tárgyalja ezeket a kérdéseket és foglalkozik a műanyagok tönkremenetelét meghatározó tényezőkkel és azok vizsgálatával a következő tematika szerint: Mechanikai jellemzők, külső igénybevételre adott válasz. Igénybevétel típusa: rövid, hosszú, fáradás, dinamikus, statikus. Műanyagfizika: állapotok, szerkezet, jellemzők, makromolekula, jellemző tulajdonságok. Műanyagok és termékek mért mechanikai jellemzői és a műanyagfizika közötti kapcsolat. Molekuláris deformációs mechanizmusok. A szerkezet szerepe. Kényszerelasztikus deformáció. Mikromechanikai deformációs folyamatok. Alapanyagok jellemzése: szakítás, hajlítás, törés. Törésmechanikai elméletek, lineáris törésmechanika, J integrál, plasztikus törés (EWF). Dinamikus mechanikai spektroszkópia, kúszás és feszültségrelaxáció, fárasztás. A deformációs és szilárdsági

jellemzők időfüggése. A mechanikai jellemzők és az egyéb tulajdonságok kapcsolata: reológia, termikus vizsgálatok (DSC, TGA), spektroszkópia. Termékvizsgálatok. Filmek és fóliák vizsgálata: Elmendorf, Spencer, dart, szakítás. Plasztikus törés, a vastagság és a sebesség szerepe. Az orientáció hatása, szerkezet és tulajdonságok. Csövek: törés, nyomásállóság, élettartambecslés. Heterogén rendszerek. A homogén és heterogén rendszerek vizsgálata közötti különbségek. Módszerek és értelmezés. Feszültségkoncentráció, termikus feszültségek, adhézió. Mikromechanikai deformációs folyamatok és makroszkopikus tulajdonságok kapcsolata heterogén rendszerekben. Ütésálló műanyagok (HIPS, ABS, ütésálló PP), a szerkezet szerepe. Különleges vizsgálatok: fragmentáció, határfelületi nyírószilárdság stb. A mérési eredmények fizikai tartalmának megértése, az eredmények értelmezése. d./ A társított polimereket egyre nagyobb mennyiségben alkalmazzák az élet minden területén, fejlődésük üteme messze meghaladja az egyéb szerkezeti anyagokét. A társított polimerek tulajdonságait a komponensek jellemzői, az összetétel, a szerkezet és a határfelületi kölcsönhatások határozzák meg. Az utóbbi két tényező szerepe különösen fontos és mivel ezek az anyagok viszonylag újak, a rájuk vonatkozó rendelkezésre álló információk meglehetősen hiányosak. A tárgy elsősorban a szerkezet-tulajdonság összefüggésekkel és a határfelületi kölcsönhatásoknak a társított rendszerek tulajdonságai meghatározásában betöltött szerepével foglalkozik az alábbi tematika szerint: Elegyíthetőség, az elegyíthetőség előrejelzésére szolgáló modellek és meghatározási módszerek. Az egyes módszerek előnyei és hátrányai, a különböző módszerekkel meghatározott paraméterek közötti összefüggések. Elegyíthetőség és összeférhetőség, a keverékek szerkezete és a tulajdonságok közötti kapcsolatok, termodinamika és kinetika. Töltőanyagok jellemzői és jellemzése, szemcseméret, szemcseméret eloszlás, fajlagos felület és egyéb jellemzők. Felületi jellemzők, felületi feszültség, polaritás, kontaktnedvesedési elmélet és sav-bázis kölcsönhatások. A töltőanyagot tartalmazó polimerek tulajdonságainak előrejelzése. A határfelületi kölcsönhatások szerepe a tulajdonságok meghatározásában. A határfelületi kölcsönhatások módosítása, felületaktív anyagok, reaktív felületkezelés, egyéb módszerek. Szerkezet: anizotrop töltőanyagok orientációja, aggregációja, szegregáció. Mikromechanikai deformációk, a szerkezet és a terhelés hatására végbemenő deformációs folyamatok kapcsolata. Határfelületi kölcsönhatások szálerősítésű kompozitokban, a szál jellemzése, kapcsolóanyagok, felületi reakciók. Hibrid rendszerek, egyidejűleg több diszpergált komponenst (szál/töltőanyag, töltőanyag/polimer stb.) tartalmazó társított műanyagok, szerkezet-tulajdonság összefüggések.

10. Textilkémia I és II. (a./Természetes szálak. b./Szintetikus szálak. c./Technológiai folyamatok)

Tematika: a./ A tárgy a természetes szálképző polimerek terén végzett újabb fejlesztésekkel és alkalmazásokkal, egyes szálvizsgáló módszerekkel foglalkozik: új regenerált cellulóz gyártási technológia (Lyocell: az N-metil-morfolin-N-oxidban való oldás és az azon alapuló szálgyártás fő lépései, oldószer visszanyerés, a szál szupermolekuláris szerkezete, szorpciós tulajdonságai, fibrillációja, felhasználási lehetőségei); a cellulóz módosítása ojtással (ojtási reakciók, a szupermolekuláris szerkezet és a morfológia hatása az ojtásra); a cellulóz keresztkötésére alkalmas reakciók (formaldehid-mentes keresztkötő ágensek); kitozán (szál, mesterséges bőr); a selyem új alkalmazásai; gyapjú felületi kezelése; szálak vizsgálata IR spektroszkópiával, különös tekintettel a cellulózra. – A tárgy kb. negyedének terhére a doktoráns érdeklődésének megfelelő, természetes szálakkal kapcsolatos anyag feldolgozása is lehetséges. b./ A tárgy a szintetikus szálak terén végzett újabb fejlesztésekkel foglalkozik: folyadékkristály polimer alapú nagyszilárdságú szálak; poliészter szálak, felületi jellemzőik (poliészter fajták; kopolimerek; a felületi tulajdonságok alakulása a szálképzés és az utólagos módosítások során: a szálfínomság, a száleresztmetszet, a nyújtás és a hőkezelés, ill. a

hidrolízis, a plazmakezelés, az ojtás és a lézerkezelés); ún. Shin-gosen szálak (selyem-, ill. gyapjú típusú szálak, zsugorodó szálak); szálmódosítás plazmakezeléssel (a gyökök szerepe, keresztkötések kialakulása a szálfelületen, speciális tulajdonságok kialakulása); “természetutánzás” szintetikus szálakkal (selyem, bőr, szörme, lótszlevél). c./ A tárgy a textiliparban leggyakrabban feldolgozásra kerülő természetes és mesterséges szálanyagokból előállított kelmék kikészítésének technológiai folyamataival és azok elméleti hátterével foglalkozik a következő tematika szerint: Előkészítés, fehérítés. Színezés. Nyomás. Végkikészítés. Szálanyagok szorpciós folyamatai. Nedvesedés, nedvesítőszerke hatásmechanismusa, szerkezete. Adhézió. Diffúzió. Folyadékok behatolása szálakba, fonalba, kelmébe. Az oldás alapjai. Polimerek oldása.

Handbook of Fiber Chemistry, (Eds: M. Lewin, E. M. Pearce), Marcel Dekker, New York, **1998**

Surface Characteristics of Fibers and Textiles (Eds: C. M. Pastore, P. Kiekens), Marcel Dekker, New York, **2001**
T. Hongu, G. O. Phillips: New Fibers, Woodhead Publishing Ltd., **2001**

11. Szerves kémia I és II.

Tárgyprogram: A tantárgy célkitűzése: A Ph.D. hallgatók megismertetése a szerves kémia legújabb eredményeivel és a szerves kémia kurzusokon elsajátított anyag tovább fejlesztése. A két féléves tárgyban az alább felsorolt témakörök szerepelnek:

Aromás jelleg és aromaticitás. Elektrociklusos reakciók (cikloaddíciók, szigmatróp átrendeződések). Elemorganikus vegyületek. Sztereokémia (kiralitás, enantiomerek elválasztása). Sztereoszelektív és sztereospecifikus reakciók. Terpének. Telitetlen zsírsavak. Alkaloidok. Peptidek. Cukorszármazékok. Nukleinsavak. Vitaminok. Szintézisek tervezése. Ipari szintézisek. Sztereokontrollált szintézisek. Enantiokonvergens szintézisek. Enzimkatalizált reakciók.

Irodalom:

G. M. Loudon: *Organic Chemistry*, 3rd. ed. The Benjamin/Cummings Publishing Inc. New York, 1995.

J. McMurray: *Organic Chemistry*, 5th ed. McMurray Brooks and Cole Publisher , 2000.

G. Solomons, C. Fryhle: *Organic Chemistry*, 7th ed. Wiley-Interscience, New York-Chichester, 2000.

Corey, E. J.; Cheng, X.-M.: *The Logic of Chemical Synthesis*; Wiley & Sons, New York, 1989.

Nicolaou, K. C.; Sorensen, E. J.: *Classics in Total Synthesis I-II*; VCH: Weinheim. 1996, 2003.

Kürti, L.; Czákó, B.: *Strategic Applications of Named Reactions in Organic Synthesis*; Elsevier: London, 2005.

Eliel, E. L.: *Stereochemistry of Organic Compounds*; John Wiley & Sons, New York, 1994.

12. Szerves kémiai technológia I és II.

Tematika: A környezetbarát kémia és kémiai technológia kihívásai és alapelvei. Megoldási lehetőségek. Az alapanyagok megválasztásának és a reakciók kiválasztásának szempontjai. Oldószerek és segédanyagok felhasználása ill. helyettesítése. A katalitikus reakciók előnyei. A reakciók optimalizálásának szükségessége. Újrahasznosítás. Mikrohullámú reaktorok és az azokban megvalósítható reakciók. Oldószermentes reakciómegvalósítás. Oldószerek kiváltása. Ionos folyadékok mint korszerű oldószerek alkalmazása katalitikus hidrogénezésekben és hidrofórmilezésben. A tulajdonságok beállítása finom hangolással. A reakciók monitorálásának lehetőségei. In situ Fourier transzformációs IR spektrométer (ReactIR berendezés). Akirális és királis, valamint egy- és kétfogú P-ligandok és azok alkalmazása átmeneti fémkomplexelekben, továbbá azok felhasználása katalizátorként homogén katalitikus átalakításokban. Kemo-, regio-, diasztereo- és enantioszelektív átalakítások. A fázistranszfer katalízis alkalmazása szelektív reakciókban. A katalizátor kiválasztása és újrahasznosíthatósága. Ipari példák. A katalizátor kiváltásának lehetőségei. A

gyógyszeripari hatóanyaggyártási technológiák általános jellemzői, az alapanyagok kiválasztása, az intermedierek előállítási körülményei, az optimális intermedier sor kiválasztása. A technológiák kifejlesztésének módszerei, a fejlesztés legfontosabb fázisai (laboratóriumi kísérletek, méretnövelés, kísérleti gyártás). Néhány hatóanyag-gyártás technológiai lehetőségeinek elemzése, így a Klorocid (toluolból, etilbenzolból, allil-alkoholból kiinduló) eljárások jellemző stratégiái, valamint enantioszelektív szintézisek lehetőségei. A közös intermedierekhez kapcsolódó technológiák, valamint az alkalmazási lehetőségek összehasonlítása a Melipramin, a Tisercin és a Halidor szintézisek példáján. Hasonlóképpen, a Nalidixsav, a Norfloxacin és a Probon technológiai lehetőségeinek tárgyalása. A Diltiazem, a Grandaxin és a Levamisole technológiák közös elemeinek vizsgálata. A Dopegyt technológiák lehetőségei és fejlődésük. Homogén katalitikus nagyipari eljárások megvalósíthatóságának feltételei, általános követelményei – ipari példák: metanol karbonilezése, Wacker-szintézis. A hidroformilezés különféle technológiai megoldásai, fejlesztésük a katalizátor-fejlesztéssel, a ligandumok módosításával összhangban. A jövő fejlesztési irányai. A legjelentősebb hidroformilezési eljárás: n-butiraldehid előállítása, 2-etil-hexanol mint műanyaglágyító alapanyag gyártása céljából. Műanyaglágyítók, a lágyítás elmélete és mechanizmusa. A műanyaglágyítók típusai és szerkezeti jellemzőik (pl. molekulatömeg, polaritás, a poláris-apoláris sajátságok egyensúlya). A lágyítókkal szemben támasztott követelmények. A legfontosabb lágyítófajták (ftálsavészterek, foszforsavészterek, poliészter-lágyítók, klórozott szénhidrogének) gyártási eljárásai.

További szigorlati melléktárgyak (1 féléves tárgyak 4 krp értékben) listája:

1. Az Oláh György Doktori Iskola szemináriumai.*
2. Szerkezeti kémia.
3. Kemometria módszerek.
4. Korszerű környezeti technológiák és műveletek.
5. Nukleáris energiatermelés és környezetvédelem.
6. Kísérletek tervezése és értékelése.
7. Katalízis és reaktorteknika.
8. Mágneses magrezonancia spektroszkópia.
9. Makrociklusok szintézise és molekuláris felismerő képessége.
10. Poláris elemorganikus vegyületek.
11. Gyógyszeripari alapfolyamatok és technológia.
12. Gyógyszerkészítmények és biopolimer rendszerek technológiái.
13. Gyógyszerhatóanyagok optimalizációs paraméterei.
14. DNS hibajavítás

* Az Oláh György Doktori Iskola szemináriumsorozata tanévenként tíz előadásból áll, melyet a kémia, biológia, a vegyipar illetve biológiai ipar rangos hazai szakemberei, illetve a BME VBK-ra látogató neves külföldi (több Nobel-díjas előadónk is volt az évek során) professzorok tartanak. A DIT a teljesítést a szemináriumsorozaton való aktív részvétel esetén fogadja el.