



# MKE 1. NEMZETI KONFERENCIA

2011. május 22-25.  
Sopron



PROGRAM ÉS ELŐADÁS ÖSSZEFOGLALÓK



# MKE 1. NEMZETI KONFERENCIA

2011. május 22-25.  
Sopron

Társszervezők:



PROGRAM ÉS ELŐADÁS ÖSSZEFOGLALÓK

## KÖSZÖNETET MONDUNK AZ MKE 1. NEMZETI KONFERENCIA TÁMOGATÓINAK:

### EZÜSTFOKOZATÚ TÁMOGATÓK



RICHTER GEDEON



### TÁMOGATÓK



### POSZTERDÍJ TÁMOGATÓK



\* \* \*

### MKE 1. NEMZETI KONFERENCIA PROGRAM ÉS ELŐADÁS ÖSSZEFOGLALÓK 2011

© Magyar Kémikusok Egyesülete, Budapest, 2011

ISBN 978-963-9970-11-3

Szerkesztették:  
Adányiné Kőbörkösi Nóra  
Wöfling János

## TARTALOM

Beköszöntő .....	xi
A kiállítók listája .....	xii
Tudományos program .....	xiii
Programtáblázatok .....	xv
Részletes program .....	xix
Előadás összefoglalók	
Plenáris előadások .....	1
Szóbeli előadások .....	15
Fenntartható kémia – társadalom, gazdaság, környezet szekció .....	17
Kémia tanulás és tanítás: mit, mennyit és hogyan? szekció .....	29
Kémia az egészség szolgálatában szekció .....	45
Kémia holnap – a jövő kémiája szekció .....	85
Kémia és környezet szekció .....	117
„Kombinatorikus kémia - Furka Árpád 80 éves” szekció .....	145
Komplexxémia szekció .....	157
ChemiKut szekció .....	175
Poszterek	
Poszter szekció 1 .....	181
Poszter szekció 2 .....	251
Szerzőindex .....	311
Résztevők listája .....	323

**A TRIKLÓRETELÉN OXIDÁCIÓJA VIZES OLDATBAN  
OXIDATION OF TRICHOLORETHYLENE IN AQUEOUS SOLUTION**

**Lente Gábor<sup>a</sup>, Fábíán István<sup>a</sup>, Simon Adrienn<sup>a</sup>, Aleksandar Mijatovic<sup>b</sup>,  
Mario Gabricevic<sup>c</sup>, Tin Weitner<sup>c</sup>, Ana Budimir<sup>c</sup>, Olga Impert<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> *Debreceni Egyetem*

<sup>b</sup> *University of Kragujevac, Szerbia*

<sup>c</sup> *University of Zagreb, Horvátország*

<sup>d</sup> *Nicolaus Copernicus University, Torun, Lengyelország*

*E-mail: lented@delfin.unideb.hu*

Az angol nyelvű előadás a Debreceni Egyetem az Új Magyarország Fejlesztési Terv által támogatott, „Kémiai és biotechnológiai alapkutatások vízzáró rétegek és talajvizek halogénezett szénhidrogén szennyezőinek eltávolítására” című, TÁMOP-4.2.2-08/1-2008-0012 (CHEMIKUT) szerződés számú projektjének keretein belül az oxidációs csoportban végzett munkáról számol be, amelynek hangsúlyi pontja a triklóretilén vizes fázisú oxidációjára alkalmas módszer kifejlesztése volt.

A triklóretilén teljes mineralizációját eredményező oxidációja hat elektronos, így szükségszerűen köztitermékek keletkezésével jár. Számos különböző követési módszert kipróbálva tanulmányoztuk a kémiai oxidációs folyamatot peroxomonoszulfát-ion, hidrogén-peroxid, peroxodiszulfát-ion oxidálószerrel használatával katalizátorok jelenlétében és távollétében. Az előadásban a részletes kinetikai vizsgálatok eredményét mutatjuk be és környezetvédelmi felhasználhatóság szempontjából értékeljük őket.

**TRIKLÓR-ETILÉN OXIDÁCIÓJA HIDROGÉN-PEROXIDDAL:  
KATALÍZIS VANÁDIUM KOMPLEXEKEL****Rác András, Takács Anett, Kócs Tamara, Serra Bendegúz, Kéri Mónika,  
Tóth Imre, Bányai István***Debreceni Egyetem, Kémiai Intézet, CHEMIKUT kutatócsoport\*  
E-mail: [ibanyai@delfin.unideb.hu](mailto:ibanyai@delfin.unideb.hu)*

A halogénezett szénhidrogén tartalmú oldószerek a korábbi ipari és honvédelmi tevékenység következtében jelentős talaj és talajvíz szennyezőkké váltak hazánk bizonyos, de jól körülhatárolható területein. A jelenleg alkalmazott fizikai tisztítási (sztrippelés) eljárások költségesek és nem mindig hatékonyak, így a kémiai eljárások jelentősége nem csökken. A hidrogén-peroxid, mint környezetbarát oxidálószer azonban katalizátor nélkül nem alkalmazható.

Munkánk során a vanadát-ion komplexeinek katalitikus hatását vizsgáltuk, és megállapítottuk, hogy fémkomplexek általában hatékonyabbak, mint maga a vanadát ion. Ennek oka az, hogy a katalitikusan legaktívabb részecskék általában az egy koordinált peroxidot tartalmazzák, a „segéd” ligandum megakadályozza a második peroxid koordinációját. Megállapítottuk, hogy többek között a vanádium a citrát, tartarát és pikolinát komplexei igen kis koncentrációban is hatékony katalizátorok. E kis molekulákhoz hasonló donorcsoportokkal funkcionizált makromolekulák is hatékonyak bizonyultak. Megvizsgáltuk a dendritikus katalízis lehetőségét és azt tapasztaltuk, hogy valódi dendrimerek közül a PAMAM típusúak ötödik generációja katalizálja a triklór-etilén oxidációját, de sajátos több szélsőértékes koncentráció-idő görbét mutat. Egyéb biotechnológiai eredetű funkcionizált makromolekulák ugyan gyorsítják az vanádiummal való oxidációt, de a katalizátor regenerálódása lassú, és ez a sebesség meghatározó lépés. A reakció termékeit NMR spektroszkópián azonosítottuk.

**Köszönetnyilvánítás:** A munka a TÁMOP-4.2.2-08/1-2008-0012 számú CHEMIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg. A kutatásokat a TEVA Gyógyszergyár Rt. támogatta.

**DEGRADATION OF TRICHLOROETHYLENE  
BY *PSEUDOMONAS PUTIDA* F1****Erzsébet Fekete, Éva Fekete and Levente Karaffa**

*Department of Biochemical Engineering, Faculty of Science and Technology, University  
of Debrecen, H-4010, Debrecen, Hungary  
E-mail: kicsizsoka@yahoo.com*

Trichloroethylene (TCE) is a suspected carcinogen and is one of the most commonly detected volatile organic contaminants in groundwater. Considering this, research focusing on both anaerobic reductive dechlorination and aerobic degradation via cometabolism has been undertaken in our laboratory. A number of studies have demonstrated that aliphatic and aromatic hydrocarbon-degrading bacteria, such as those that degrade phenol and/or toluene are capable of aerobic cometabolic transformation of TCE to readily degradable oxygenated compounds. Under anaerobic conditions, PCE (tetrachloroethylene) and TCE have been reductively dechlorinated by mixed cultures to less-chlorinated ethenes and, under certain conditions, to the nontoxic products ethene and ethane. Under aerobic conditions, PCE is considered nonbiodegradable, while TCE can be broken down to mainly nontoxic products by certain nonspecific oxygenases, such as methane monooxygenase or toluene dioxygenase.

The primary aim of the present study was to investigate the toluene dioxygenase system of the *Pseudomonas putida* F1 bacterial strain responsible for the high TCE-degrading activity in the chemostat enrichment. Additionally, we have examined the ability of bacterial cells grown in the presence of different concentrations of toluene in fluid medium. We have provided evidence that under certain defined conditions *P. putida* F1 is capable of growing reasonably well in TCE-containing medium in the absence of toluene, is able to transcribe the genes encoding toluene dioxygenase and, most importantly, has a high affinity towards TCE that results in the rapid degradation of this compound in submerged batch cultures. We have concluded that *P. putida* F1 is a potential candidate for large-scale *in situ* biodegradation aimed at TCE-contaminated water.

**Acknowledgement:** The research was supported by the EU and co-financed by the European Social Fund through the Social Renewal Operational Programme under the project CHEMIKUT (TÁMOP-4.2.2-08/1-2008-0012). The financial support of TEVA Hungary Ltd. is also highly appreciated.

## KLÓROZOTT SZÉNHIIDROGÉNEK REDUKTÍV DEHALOGÉNEZÉSE

Kathó Ágnes<sup>a,b</sup>, Bertók Ágnes<sup>a</sup>, Udvardy Antal<sup>a</sup>, Szatmári Imre<sup>a</sup>, Papp Gábor<sup>b</sup>,  
Torma Krisztián<sup>a</sup>, Susmit Basu<sup>a</sup>, Voronova Krisztina<sup>a</sup>, Horváth H. Henrietta<sup>b</sup>,  
Ambroz Almássy<sup>a</sup>, Czégény Csilla Enikő<sup>a</sup>, Ósz Katalin<sup>a</sup>, Horváth Henrietta<sup>b</sup>,  
Csajbók Éva<sup>a</sup>, Joó Ferenc<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Debreceni Egyetem TTK Fizikai Kémiai Tanszék és

<sup>b</sup>MTA-DE Homogén Katalízis Kutatócsoport

4010 Debrecen, Egyetem tér 1; Pf. 7

E-mail: joo.ferenc@science.unideb.hu

A talaj és rétegvizeket szennyező szerves halogénszarmazékok ártalmatlanításának egyik lehetséges módszere a redukció, akár stöchiometrikus mennyiségben alkalmazott redukálószerrel, akár katalitikus hidrogénezés útján. A környezetben előforduló szennyezett vizek jellemzője a halogénezett (elsősorban klórozott) szénhidrogének kémiai szempontból igen kis koncentrációja. A katalitikus hidrogénezéshez figyelembe kell venni, hogy a reakciókörülmények szükségszerűen kedvezőtlenek a hidrogén-aktiválás és gyors hidrogenolitikus folyamatok számára (alacsony hőmérséklet, atmoszférikus nyomás).

Munkánk során számos katalitikus rendszert vizsgáltunk meg különféle szerves halogénvegyületek (hexil-klorid, benzil-klorid, ciklohexil-klorid, klórbenzol továbbá a megfelelő bromid és jodid származékok) redukív dehalogénezésében elsősorban katalitikus hidrogénezéssel. A vizsgált katalitikus folyamatok:

1. Homogén katalitikus hidrogénezés átmenetifémek vízdoldható komplexjeivel
2. Heterogén katalitikus hidrogénezés polimerekkel stabilizált fémkolloidokkal
3. Heterogén katalitikus hidrogénezés kereskedelmi katalizátorokkal áramlásos reaktorban

Homogén katalizátorként Ni(II) és Pd(II) szulfonált szalénnel [szalén = *N,N'*-etilénbisz-(szalicilimin)] képzett komplexei, [PdCl<sub>2</sub>(mtpms)<sub>2</sub>] (mtpms = monoszulfonált trifenilfoszfán), K[Ru(Hedta)] és vízdoldható Au(I)-N-heterociklusos karbénkomplexek szolgálták. A Ni(II)- és Pd(II)-szulfoszalén komplexek vizes oldatban hidrolitikusan instabilnak bizonyultak, a hidrogénezett szalénszarmazékok vizsgálata folyamatban van. Jelentős feleslegben alkalmazott benzil-klorid a [PdCl<sub>2</sub>(mtpms)<sub>2</sub>] foszfán ligandumjával foszfónium-sót képzett ami hidrogén atmoszférában fémkiváláshoz vezetett. A kereskedelmi katalizátorok közül a 10% Pd/C áramlásos rendszerben jó hatásokkal hidredehalogénezte a klór- és brómbenzolt.

Legalkalmasabb katalizátornak a poli(vinilpirrolidon)nal stabilizált palládium (Pd-PVP) mutatkozott. Nagyobb mennyiségű (mmol) szubsztrátum reakciójában e katalizátor morfológiája a reakció előrehaladtával változik, aktivitása pedig csökken a felszabaduló HCl hatására. Ezért a reakciókat pH-sztatikus körülmények között, egy e célra összeállított automatizált berendezésben vizsgáltuk, amikor is a felszabaduló sav közömbösítéséhez szükséges lúg mennyiségének mérésével a folyamat időbeli követése is lehetséges volt.

Fentiekben túlmenően kísérleteket végeztünk stabilizált vaskolloidok, mint stöchiometrikus redukálószer alkalmazására is.

**Köszönetnyilvánítás**

A kutatás a TÁMOP-4.2.2-08/1-2008-0012 sz. CHEMIKUT projekt keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával, valamint az NKTH-OTKA (68482 sz. projekt) és a TEVA Zrt támogatásával valósult meg.