

## **Az etilén szelektív oxidációja**

*Témavezető: Barthos Róbert*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezatkémiai Intézet*

A szénhidrogének szelektív oxidációjának sikeres megvalósítása vegyipari és környezetvédelmi szempontból is igen jelentős feladat. Szemben a teljes oxidációval, melynek során a reaktáns szén-dioxiddá és vízzé alakul, a szelektív oxidáció során az átalakulást igyekszünk részlegesen oxidált termékek keletkezése irányába kormányozni. Ennek jelentősége abban rejlik, hogy így a kiindulási anyagunkból értékesebb termékeket nyerhetünk.

Munkánk során az etilén szelektív oxidációját tervezzük vizsgálni. Ebben a folyamatban a két kívánatos szelektív oxidációs termék az acetaldehid ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ) és az ecetsav ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ).

Először réteges szerkezetű magnézium-alumínium kettős hidroxidot szintetizálunk, majd a rétegek közé vanádiumot és palládiumot építünk be. Az így előállított anyagot katalizátorként használjuk etilén oxidálásához oxigénnel, víz jelenlétében. A reakció termékeit gázkromatográffal fogjuk elemezni.

Elsősorban azoknak a diákoknak a jelentkezését várjuk, akiket érdekel a szerves kémiai szintézis, a kémiai reakciók irányítása katalizátorokkal, valamint a korszerű gázkromatográfiai analitikai módszer.

## **Egy új szerves molekula előállítása és jellemzése**

*Témavezető: Kovács Péter*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet*

Az intézet Heterociklusos Kémiai Laboratóriumában több évtizede foglalkozunk olyan heterociklusos vegyületek előállításával, amik várhatóan jótékony hatással bírnak az emberi szervezetre és így gyógyszerként felhasználhatók. A kutatótábor alatt bepillantást engedünk egy ilyen vegyület előállításába. A keletkező vegyület szerkezetét igazolnunk is kell, amit különböző modern analitikai módszerekkel végzünk (NMR, IR, MS).

A táborba olyan érdeklődőket várunk, akiket érdekel a laboratóriumban végzendő kísérleti munka, szeretnek különböző vegyszerekkel dolgozni. Az előállított vegyületet a reakció elegyből izoláljuk, azaz elkülönítjük a keletkezett melléktermékektől. A tisztításhoz

kromatográfiás tisztítási módszereket (vékonyréteg kromatográfia, oszlop kromatográfia) használunk.

Lehetőséget biztosítunk különböző spektroszkópiai mérések megismerésére és végrehajtására, amikkel a keletkező vegyület szerkezetét bizonyítani tudjuk.

## **Felületaktív anyagok monomolekuláris filmjei levegő/víz határfelületen**

*Témavezető: Románszki Loránd*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

A felületaktív anyagok közös jellemzője, hogy molekulájukban megtalálható egy hosszú, vízben rosszul oldódó szénhidrogén lánc és egy vízben jól oldódó funkciós csoport. Jellemző viselkedésük, hogy a levegő/víz határfelületen feldúsulnak, ezáltal pedig csökkentik a víz – egyébként igen nagy – felületi feszültségét. Ennek egyik gyakorlati haszna az, hogy mosószerek, mosogatószer, folyékony és szilárd szappanok, samponok, fogkrémek fő összetevőiként jelentősen megkönnyítik a mosást. Az élővilágban a sejtmembrán fő építőelemei szintén ilyen felületaktív anyagok, de felületaktív anyagokkal élelmiszeradalékként is találkozunk nap mint nap, továbbá ilyen anyagokat használnak egyes kőolaj-kitermelési eljárásokban, ércek dúsításában, stb.

Felületaktív anyagoknak monomolekuláris, mindössze 2 nanométer vastag rétegeit kényelmesen tanulmányozhatjuk az ún. Langmuir kádban. A kádba öntött nagy tisztaságú víz felületére feljuttatott molekulák összetételük egy erre a célra szolgáló kar („gát”) segítségével, miközben a műszer folyamatosan méri a felületi feszültség változását. Az így kapott felületi nyomás – terület görbék (izotermák) alakjából és jellemző töréspontjaiból a filmréteg egyes jellemzői meghatározhatók. A film szerkezete, és így a kapott izotermák alakja is jellemző az illető vegyületre, továbbá nagyban függ a felhasznált vízben esetleg feloldott segédanyagoktól és a hőmérséklettől is. A film kialakulása az ún. Brewster-szög mikroszkóppal közvetlenül is láthatóvá tehető. Különböző felületaktív anyagok összehasonlítására van lehetőség különböző körülmények között.

## **Felületkémiai mintázatok – sokszorosító grafika mikroszkopikus méretben**

*Témavezető: Keresztes Zsófia*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

A természetben megtalálható felületek mikroszkóppal megfigyelhető geometriai szerkezete sok érdekes jelenség magyarázataként szolgálhat. Ilyen például egyes növények leveleinek vízlepergető, öntisztuló képessége. Ha a felületen több kémiai komponens rendezett mintázatot alakít ki, akkor az a felület a kémiai összetételre és a mintázatokra jellemző egyedi módon kerül kapcsolatba, azaz „kommunikál” környezetével. Amennyiben a kémiai komponens egy biomolekula, akkor a mintázott felület a biológiai jelnek megfelelő választ vált ki környezetéből, ebből adódik, hogy például élő sejtek „szeretnek” vagy éppen „nem szeretnek” közel kerülni hozzá.

A biológiai folyamatokban a mikroszkopikus mintázott felületek bioszintézis útján jönnek létre. A mesterségesen kialakított felületek mintázatának kialakításához és a mintázat sokszorosításához megfelelő technológia alkalmazása szükséges. Felületi mintázatok sokszorosítása, a nyomtatás gyakorlata sok évszázados múltra tekint vissza, a felületre történő nyomatkészítés, sokszorosítás technikája akár miniatürizált formában is alkalmazható megfelelő körülmények között.

A kutatótábori munka során megismerkedünk a mikro- és nanoméretű mintázatok kialakítására alkalmas lágy litográfiás módszerekkel, biomolekulákból mintázatokot hozunk létre, nagyfelbontású mikroszkópos módszerekkel „megnézzük” a mintázatot, és végül kipróbáljuk, hogy milyen jellegzetes választ váltanak ki az adott felületek egy biológiai környezetben.

## **Fotofizikai vizsgálatok szilárd mátrixokban**

*Témavezető: Demeter Attila*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

Mindenki tudja, hogy a fény milyen fontos hatással van környezetünkre – elég a fotoszintézisre gondolni. A molekulák egy fénykvantum elnyelése nyomán az alapállapotból gerjesztett elektronállapotba kerülnek, amelyből ún. fotofizikai folyamatban spontán más (gerjesztett vagy alap-) elektronállapotba léphetnek át, vagy fotokémiai változásban bomlanak

vagy izomerizálódnak. Azt a folyamatot, amikor az első lépésben keletkezett gerjesztett állapotú molekula az alapállapotba úgy lép át, hogy közben fényt bocsát ki, fluoreszcenciának nevezzük, míg ha a sugárzásos átmenet egy más típusú, közbenső állapotból történik, foszforeszcenciáról beszélünk.

A projektnek, amelybe a műszeres, spektroszkópiai vizsgálatok iránt érdeklődők betekintést nyerhetnek, van egy különleges vonása: olyan molekulákat tanulmányozunk, amelyek fényelnyelés nyomán nem egy, hanem két hullámhosszon is bocsátanak ki fényt (lumineszkálnak). Arra vagyunk kíváncsiak, hogy mennyire más ennek az ún. kettős-lumineszcenciának a természete, amikor a molekulát folyadékfázisban szabadon, illetve nagy viszkozitású közegbe helyezve gerjesztjük. Naftálimidszármazékok molekuláit változtatható lokális viszkozitású poli(metil-metakrilát)-ba „fagyasztjuk”, és megvizsgáljuk, hogy a viszkozitás hogyan változtatja a kettős-lumineszcencia természetét. Az ábrán láthatóhoz hasonló spektrumsorozatokot veszünk fel. A spektrumok viszkozitásfüggéséből megpróbálunk arra következtetni, hogy mennyire tudja gátolni a gerjesztett állapotú molekula – melynek konformációja eltér az alapállapotétól – mozgását, ha nagy a közeg viszkozitása.

A kristályos fázisú naftálimidek fotofizikájának felderítésére is tervezünk vizsgálatokat, amelyekben az a „különleges”, hogy a kimenetelük teljesen bizonytalan.

## **Hogyan épül fel a sejtmembrán? Egyszerű modellek előállítása és vizsgálata**

*Témavezetők: Mihály Judith, Keszthelyi Tamás*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Molekuláris Farmakológiai Intézet*

Az élő sejtek citoplazmáját sejtmembrán veszi körül, egy olyan szelektíven áteresztő határoló réteg, mely fizikailag elválasztja a sejten belüli alkotókat a sejten kívüli környezettől, azonban lehetővé teszi a környezettel való anyag- és információcserét. A sejtmembrán felépítésének és működésének minél pontosabb megértése elengedhetetlen ahhoz, hogy a sejtben zajló folyamatokat ellenőrizni, és szükség esetén célirányosan befolyásolni tudjunk, vagyis hogy pontos diagnosztikai, és mellékhatásoktól mentes, minimális hatóanyagot igénylő terápiás eljárások legyenek kidolgozhatók.

A sejtmembrán alapját az elsősorban foszfolipidekből álló kettősréteg alkotja, és ehhez kapcsolódnak a membrán funkcionális egységei: a fehérjék és szénhidrátok. Kutatásaink során a sejtmembránok egyszerű modelljeként szolgáló, különböző összetételű foszfolipid

szerveződések alapkutatás szintű vizsgálatával foglalkozunk. Vizes oldatban a foszfolipidek spontán önszerveződéssel háromdimenziós képződményeket - micellákat és vezikulákat - alkotnak, míg a víz/levegő határfelületen kétdimenziós szerveződések - monorétegek - alakulnak ki. A víz/levegő határfelületről a monoréteg átvihető szilárd hordozóra, amelyen egy újabb monoréteg felvitelével kettősréteg alakítható ki. Az itt említett természetes és mesterséges két- és háromdimenziós lipid szerveződések modellül szolgálnak a sejtmembrán működésének megértéséhez, valamint liposzómás gyógyszerhordozók és bioszenzorok tervezéséhez.

A kutatótábori munka keretében az érdeklődő diákok vezikulákat és vízfelszíni lipid monorétegeket fognak készíteni. A lipid szerveződések szerkezetét és kölcsönhatásait műszeres eljárásokkal fogják vizsgálni. Ezt a témát, melynek során egy biológiai eredetű és elsősorban biokémiai jellegű problémát modern fizikai-kémiai módszerekkel tanulmányozunk, széles érdeklődési körrel rendelkező diákok számára ajánljuk. A témán előreláthatólag két diák fog dolgozni, érdeklődés szerint akár eltérő mélységben vizsgálva a probléma biokémiai illetve műszeres, fizikai oldalát.

## **„Intelligens” polimerek előállítása és vizsgálata**

*Témavezetők: Osváth Zsófia, Szabó Ákos*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet*

Bizonyos kis szerves molekulák összekapcsolásával óriásmolekulákat állíthatunk elő. Ezek a polimereknek is nevezett anyagok, amelyek közé a műanyagok alapanyagai is tartoznak, a kis molekulákhoz képest különleges tulajdonságokkal rendelkezhetnek.

Az egyik ilyen tulajdonság lehet az ún. „intelligens” viselkedés, ami nem a mesterséges intelligencia megvalósulása, hanem a környezet bizonyos jellemzőinek (ilyen lehet a közeg pH-ja, a hőmérséklet, elektromos vagy mágneses tér) megváltozására adott ugrásszerű választ jelent. Az ilyen anyagok feltehetően nagy szerepet fognak betölteni a XXI. századi technikai fejlődésben, ezért előállításuk, vizsgálatuk, viselkedésük „hangolása” (vagyis a válasz szabályozása) napjainkban a polimer kémiai kutatások egyik fő irányát alkotja.

A labor során a résztvevők megkísérelhetnek előállítani „intelligens” viselkedést mutató polimereket, és különböző kísérleteket végezhetnek ilyen anyagokkal.

Elsősorban laboratóriumi munka iránt érdeklődő diákoknak ajánljuk a témát.

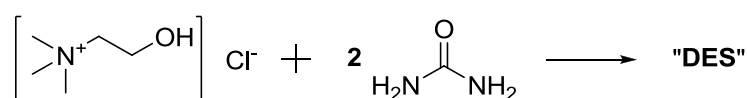
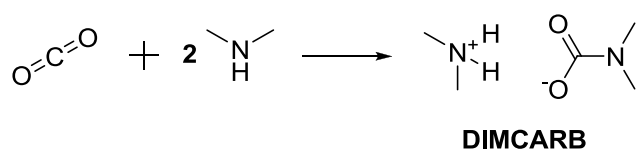
## Ionos folyadékok előállítása és alkalmazása

*Témavezetők: Horváth Dániel Vajk, Szigeti Mariann*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet*

Sókkal legtöbbször kristályos formában találkozunk, vannak azonban olyan különleges képviselőik, amelyek szobahőmérsékleten folyadékok. Ezeket az anyagokat ionos folyadékoknak nevezzük. Számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek: jó oldószerei szerves anyagoknak, alacsony a gőznyomásuk (gyakorlatilag alig párolognak), valamint visszaforgathatóságuk miatt többször felhasználhatóak, ezzel is csökkentve a kémiai folyamatok költségeit és környezetszennyezését.

A nyári tábor keretei között hozzánk ellátogató diákok szerves kémiai laboratóriumi munkájuk során két ionos folyadékot fognak önállóan készíteni. Ezek érdekessége, hogy egyiket (DIMCARB) két gázból, a másikat (ún. DES) pedig két szilárd anyagból állítják majd elő. Az így nyert anyagok két felhasználási lehetőségével ismerkednek meg: oldószerként és extraháló szerként alkalmazzák.



Olyan diákokat várunk, akik szeretnének az ionos folyadékok előállítása és alkalmazása révén betekintést nyerni egy szerves kémiai labor életébe és munkájába. A reakciók kivitelezése során a hallgatók megismerkednek majd szintetikus szerves kémiai műveletekkel: keverés, melegítés, extrakció, szárítás, átkristályosítás, vékonyréteg kromatográfia.

Célunk, hogy a négynapos laborgyakorlat alatt kicsit megismertessük a hozzánk kerülő tanulókkal az alapvető eszközöket, technikákat, amelyekkel a molekulákat átalakítjuk, izoláljuk, illetve ízelítőt adjunk egy „klasszikus” vegyész munkájából.

## **Miből van, mivé lesz a ruhanemű?**

*Témavezetők: Czégény Zsuzsanna, Bozi János, Sebestyén Zoltán*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezatkémiai Intézet*

A műanyag és biomassza hulladék egyik környezetbarát újrahasznosítási módja azok magas hőmérsékleten, inert atmoszférában történő hőbontása, pirolízise. Az így keletkező pirolízis olaj vegyipari alapanyagként vagy tüzelőanyagként hasznosítható.

A textil termékek többsége természetes és mesterséges szálak keveréke, így a textilhulladék egyik kézenfekvő hasznosítási útja, hogy pirolitikus úton értékes termékekké alakítjuk.

A természetes szálak közül legnagyobb mennyiségben a pamutot használjuk, aminek közel 99%-a cellulóz. A szintetikus szálak közül a legjelentősebbek a poliészter típusú poli(etilén tereftalát) (PET) (pl. polár pulóver), a poliamid típusú nylon 6 és nylon 6,6 (pl. harisnya), a polipropilén (pl. esőkabát) és a poli(akril-nitril) (akril). A szintetikus textil szálak a világ teljes textilfelhasználásának 57%-át adják.

A kutatótábor alatt megvizsgáljuk, hogy a különböző ruhaneműk anyagának hőbomlásakor milyen összetételű termékelegy (pirolízis olaj) keletkezik. A komponenseket pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria módszer segítségével azonosítjuk. Ez nem csak a pirolitikus újrahasznosítás szempontjából fontos, hanem a keletkező hőbomlástermékek alapján azonosítjuk az anyag kémiai minőségét is (pl: a címke szerint 100% pamut valóban az?).

## **Pd-katalizált kémia (Kémia Nobel-díj 2010)**

*Témavezető: Balogh József*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet*

A kutatócsoportunkhoz érkező diák a nyári tábor keretein belül szerves kémiai laboratóriumi munkája során Pd-katalizátort és új szén-szén kötést tartalmazó heterociklusos molekulát fog önállóan előállítani.

A szénatomokon alapuló kémia magának az életnek is az alapja. Az összetett szerves vegyületek előállításakor a legfőbb feladat a szénatomok megfelelő összekapcsolása. A szénatomok azonban stabilitásuk miatt nem könnyen reagálnak egymással. Egyszerűbb szerves molekulák létrehozásakor ezt át lehet hidalni úgy, hogy reaktívabbá teszik a

szénatomokat, amikor azonban valóban bonyolultabb molekula létrehozása a cél, akkor az a módszer már túl sok melléktermékkel jár. Ezen a problémán segít a katalizátorok, például a palládium alkalmazása.

Új szén-szén kötés kialakítása minden időben a szintetikus szerves kémia meghatározó átalakításai közé tartozott. A klasszikus C-C kötést létrehozó módszerek (pl. Grignard-reakció, Wittig-reakció, cikloaddíció stb.) mellett az elmúlt 30 évben az átmenetifémek (Pd, Ni, Cu) által katalizált keresztkapcsolási (cross-coupling) reakciók jelentősen kiterjesztették a szintetikus lehetőségeket.

Ezeket az úgynevezett palládium-katalizált keresztkapcsolásokat világszerte használják a szerves-kémiai kutatásokban, a módszerrel létrehozott molekulákat pedig például a gyógyszer- és elektronikai iparban alkalmazzák.

A 2010-es kémiai Nobel-díjat Richard F. Heck (University of Delaware, USA), Ei-ichi Negishi (Purdue University, USA) és Akira Suzuki (Hokkaido University, Japán) kapták a palládiumatomok által katalizált szerves kémiai reakciók területén elért eredményeikért.

A munka során Suzuki kapcsolás segítségével fogunk boronsav származék és aromás halogenid között új szén-szén kötést létrehozni. A reakciók során a hallgatók megismerkedhetnek a szintetikus szerves kémiai műveletekkel, technikákkal. Ide tartozik a keverés, melegítés, átkristályosítás, vékonyréteg-kromatográfia, forralás, extrakció, szárítás, flash oszlop kromatográfia, vákuumdesztillációs berendezés használata. Megismerkedhetnek a molekula azonosításához szükséges készülékekkel. (pl. olvadáspont mérő, IR készülék, NMR, elemanalizátor)

## **Polimer/lignin keverékek előállítása**

*Témavezető: Pataki Piroska*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezatkémiai Intézet*

A lignin a természetben nagy mennyiségben megtalálható, megújuló anyag, a cellulóz mellett a növények egyik fő alkotórésze. A fa 20-30 %-ban tartalmazza. A biodízel és a papírgyártás mellékterméke. Az ilyen módon keletkezett lignin ára alacsony és legnagyobb részét fűtőanyagként használják fel. A társadalom környezettudatosságának növekedése azt eredményezi, hogy minden iparág, beleértve a műanyagipart is, egyre nagyobb mennyiségben

használ fel természetes nyersanyagforrásokat. A lignin felhasználása jelentős környezetvédelmi és gazdasági előnyökkel járna.

A kutatótábor ideje alatt egy szintetikus előállított műanyagból és ebből a megújuló nyersanyagforrásból, a ligninből különböző összetételű keverékeket készítünk, melyeket vizsgálható formára hozunk (lapokat préselünk, majd próbatesteket vágunk ki belőlük). Szakítógéppel az anyagok mechanikai tulajdonságait, mikroszkóppal a szerkezetét tanulmányozzuk. Az éghetőség meghatározásához égési vizsgálatokat is végzünk rajtuk.

Célunk, hogy felderítsük az összetételnek a keverékek tulajdonságaira gyakorolt hatását.

Elsősorban műszeres és számítógépes ismeretekkel rendelkező diákokat várok a témára.

## **Szén-dioxid megkötő arany(I)tartalmú óriásmolekula előállítása**

*Témavezetők: Deák Andrea és Jobbágy Csaba*

*MTA Természettudományi Kutatóközpont Szerves Kémiai Intézet*

Az arany az emberiség történetében az egyik legfontosabb szerepet játszó fém. Az ókorban tisztasága miatt a szépség, a gazdagság és a hatalom jelképévé vált, miközben köréje mítoszok szövődtek. A középkorban az alkimisták egyik fő célja a Bölcsek Kövének a megalkotása volt, melytől azt remélték, hogy minden közönséges anyagot az örök és tökéletes fémmé, arannyá tud változtatni. Az egykori sarlatánok, akik aranykolloidokkal házaltak, ma modern kutatók, és az általuk előállított aranyvegyületek a reumás ízületi gyulladás, az asztma és a bőr bizonyos autoimmun betegségeinek a kezelésében játszanak fontos szerepet. Az arany ellenállósága miatt fontos szerepet tölt be az elektronikai iparban, de nagy jelentősége van az űrtechnikában és újabban például a hőszigetelő ablakok gyártásánál. Jelenleg is számos kutatás folyik szerte a világban, hogy az érdekes tulajdonságú aranyvegyületeket hogyan lehet a mindennapi életben felhasználhatóvá tenni.

A Szupramolekuláris Laboratóriumban akár több száz atomból álló olyan óriásmolekulákat állítunk elő melyek arany(I) centrumokat is tartalmaznak. A számos hasznos tulajdonsággal (lumineszcens, katalitikus, redox-aktív, stb.) rendelkező arany(I)-nek az óriásmolekulába történő beépítésével előállított új anyagok sokkal értékesebbek bármilyen nemesfémmel, hiszen ezek a vegyületek jövőbeli felhasználást nyerhetnek a gyógyászat, nanotechnológia, a kémiai technológia, az elektronika, környezetvédelem stb. területén. A globális felmelegedés következményeként mind-mind sürgetőbb olyan CO<sub>2</sub> megkötő anyagoknak az előállítása,

melyek hatékonyan kötnek meg gázmolekulákat. A nyári kutatótáborba jelentkezők közül azokat a „kíváncsi kémikusokat” várjuk, akik szívesen megismerkednének az aranytartalmú vegyületek kémiájával, és szeretnének preparatív kémiai labormunkát végezni. Együtt előállítunk majd egy olyan arany(I)tartalmú óriásmolekulát (összegképlete:  $C_{52}H_{44}Au_2N_2O_6P_4$ ), melynek a kristályrácsa képes szén-dioxid molekulák elnyelésére és megkötésére. A téma iránt érdeklődőknek azt nem ígérhetjük, hogy együtt megfejtjük az aranycsinálás titkát, de az igen, hogy a kutatótábor végén az együtt szerzett tudás közös élményével leszünk gazdagabbak.