

## Környezetkémiai Reakciómechanizmusok Kutatócsoport

### Dr. Fábián István, egyetemi tanár

Dr. Lente Gábor, egyetemi tanár

Dr. Ósz Katalin, egyetemi docens

Dr. Kalmár József, tudományos munkatárs

Bellér Gábor, egyetemi tanársegéd

Szabó Mária, kutatóvegyész

Ditrói Tamás, PhD hallgató

A legtöbb oldatfázisú redoxireakció mechanizmusa igen összetett, számos egymás után, illetve párhuzamosan lejátszódó, egymással versengő elemi lépéssel értelmezhető. Az ilyen mechanizmusok felderítése egymásra épülő kinetikai és sztöchiometriai vizsgálatokat tesz szükségessé, melyek feldolgozásához a klasszikus módszerek mellett nagy teljesítőképességű kiértékelő eljárásokra és az azokat megalapozó elméleti reakciókinetikai alapokra is szükség van, melyek lehetőséget teremtenek a különböző kísérletekből származó adatok együttes kiértékelésére. Kutatócsoportunk mintegy két évtizede foglalkozik a vízkezelési technológiákhoz kötődő kémiai reakciók kinetikai vizsgálatával. A szennyvizekben előforduló komponensek redoxireakcióit tanulmányozzuk a víztisztításhoz vagy fertőtlenítéshez használt erős oxidálószerrel, amelyek közül a leggyakrabban alkalmazottak a következők:

- oxiklórvegyületek: hipoklorit-ion ( $\text{OCl}^-$ ), klorit-ion ( $\text{ClO}_2^-$ ) és klór-dioxid ( $\text{ClO}_2$ )
- peroxo típusú oxidálószer: hidrogén-peroxid ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ) és peroxomonoszulfát-ion ( $\text{HSO}_5^-$ )
- ózon ( $\text{O}_3$ )

Az említett oxidálószerrel közül többnek (pl.  $\text{HOCl}$  vagy  $\text{H}_2\text{O}_2$ ), illetve a belőlük képződött származékoknak (pl. klóraminok, hipotiocianit-ion) közismerten fontos szerepe van *in vivo* folyamatokban is. Többek között meghatározó jelentőségűek az élő szervezet gyulladási folyamatokkal szembeni védekező mechanizmusában, jelátviteli folyamatokban, apoptózisban stb. Kutatásaink egy másik célja ezen folyamatok kémiai hátterének feltárása.

Az elmúlt években több alkalommal bizonyítottuk, hogy a napfénynek vagy a fotometriás mérések során használt fényforrásnak jelentős kinetikai hatása van egyes reakciórendszerekben. Ezek a fotokémiai jelenségek lehetővé teszik a foton, mint reaktáns alkalmazását a fotoérzékeny reakciók szabályozására. Kutatásaink során arra keressük a választ, hogy a fotoiniciált reakciólépések miként csatolódnak egy összetett redoxireakcióban más, termikusan aktivált reakciólépésekkel.

Az elmúlt években az Aerogél Kutatócsoportban jelentős erőfeszítéseket tettünk funkcionális aerogélek előállítására. Több olyan aerogél készült el, ami potenciálisan hatékony heterogén katalizátora lehet környezeti kémiai redoxifolyamatoknak. Ehhez kapcsolódóan intenzív kutatásokat folytatunk annak tisztázására, hogy a homogén fázisú katalitikus redoxireakciók vizsgálata során kapott eredmények hogyan használhatók heterogén katalitikus rendszerek tervezésében és a lejátszódó folyamatok értelmezésében.

Kutatócsoportunkban számos nagy teljesítményű analitikai és gyorskinetikai eszköz áll rendelkezésre a kísérleti munkához. A készülékek között megtalálható több stopped-flow készülék, egy lézer-villanófény-fotolízis készülék, egy egyedi tervezésű multifunkciós fotoreaktor, ózongenerátorok, spektrofotométerek, potenciometrius mérőrendszerek, kutatói szintű ionkromatográf stb.