



# KONFERENCIA KIADVÁNY CONFERENCE PROCEEDING

Műszaki Kémiai Napok 2017  
Chemical Engineering Conference 2017

2017. április 25-27.  
Pannon Egyetem, Veszprém, Egyetem u. 10.

A konferencia rendezői:  
Pannon Egyetem Mérnöki Kar  
Vegyésmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet

honlapcím: <https://mkn.uni-pannon.hu>

A kiadványt összeállította és szerkesztette:

Dr. Abonyi János  
Balogh András  
Klein Mónika  
ISBN 978-963-396-094-3

Támogatóink:



# Műszaki Kémiai Napok 2017

## Tudományos Bizottság

### Elnök

Abonyi János

### Tagok

Bélafiné Bakó Katalin

Chován Tibor

Guttman András

Gyenis János

Hancsók Jenő

Holló András

Mika T. László

Modla Gábor

Németh Áron

Németh Sándor

Szalai István

Szépvolgyi János

Vonderviszt Ferenc

## Szervező bizottság

### Titkár:

Klein Mónika

## TARTALOMJEGYZÉK

<b>NAGY FÉNYÁTERESZTÉSŰ HIBRID SZILIKA BEVONATOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS JELLEMZÉSE</b>	<b>9</b>
Ábrahám Attila, Kócs Lenke, Hórvölgyi Zoltán	
<b>NÖVÉNYOLAJ MIKROKAPSZULÁZÁSÁNAK VIZSGÁLATA MEMBRÁNTECHNIKA ÉS PORLASZTVA SZÁRÍTÁS KOMBINÁCIÓJÁVAL</b>	<b>10</b>
Albert Krisztina, Koris András, Vatai Gyula	
<b>BELSŐ UDVAROK LÉGSZENNYEZETTSÉGÉNEK MODELLEZÉSE KÜLÖNBÖZŐ PEREMFELTÉTELEK ÉS SZÉLSEBESSÉGEK ESETÉN VÁROSI KÖRNYEZETBEN</b>	<b>11</b>
Katalin Antalné Bökfı, Tamás Varga, Endre Domokos	
<b>ÚJ TECHNOLÓGIÁK MEGTÉRÜLÉS BECSLÉSE IDŐSZAKONKÉNT VÁLTOZÓ ERŐFORRÁSOK, IGÉNYEK, ÉS TÁROLÁSI LEHETŐSÉGEK MELLETT</b>	<b>17</b>
Bartos Anikó, Bertók Botond	
<b>INVESTIGATING MEMBRANE ACTIVITY OF NON-NATURAL HYDROPHOBIC PEPTIDES</b>	<b>18</b>
Beke-Somfai Tamás	
<b>HOMOGENITÁS VIZSGÁLATA FOLYADÉKTARTÁLYOKBAN</b>	<b>19</b>
Bobek Janka, Rippelné Dr. Pethő Dóra	
<b>TEHÉNTEJ RÉSZLEGES SÓMENTESÍTÉSİ TECHNOLÓGIÁJÁNAK MODELLEZÉSE SUPERPRO DESIGNER PROGRAM ALKALMAZÁSÁVAL</b>	<b>20</b>
Attila Csighy, Andras Koris, Gyula Vatai	
<b>PROGRAMOZHATÓ STRUKTÚRA FOLYAMATRENDSZEREK MODELLEZÉSÉRE</b>	<b>21</b>
Béla Csukás, Mónika Varga	
<b>WMA GUMIBITUMENEK REOLÓGIAI VIZSGÁLATA</b>	<b>22</b>
Déri Zsófia, Gergó Péter, Perlaki Róbert, Dr. Geiger András, Dr. Holló András	
<b>EFFECT OF HONEY ON BARLEY FLOUR SUPPLEMENTED PRETZEL</b>	<b>23</b>
Vinod Dhaygude, Ildikó Szedljk, László Somogyi and Vikas Nanda	
<b>TÖBBFÁZISÚ RENDSZEREK MATEMATIKAI MODELLEZÉSI LEHETŐSÉGEI</b>	<b>24</b>
Egedy Attila	
<b>BIOJET KOMPONENSEK ELŐÁLLÍTÁSA KÜLÖNBÖZŐ ÁTMENETIFÉM / HORDOZÓ KATALIZÁTOROKON</b>	<b>25</b>
Eller Zoltán, Hancsók Jenő	

<b>FRUKTO-OLIGOSZACHARIDOK KVANTITATÍV ANALÍZISE MESTERSÉGES NEURONHÁLÓVAL KIEGÉSZÍTETT SPEKTROSKÓPIÁS MÓDSZERREL</b>	<b>31</b>
Erdős Balázs, Maarten Grachten, Kovács Zoltán	
<b>VEGYES ÉLESZTŐKULTÚRA ÉS NÉHÁNY FERMENTÁCIÓS ELJÁRÁS HATÁSA A TEJSAVÓPOR ALAPÚ ETANOL ELŐÁLLÍTÁSÁRA</b>	<b>32</b>
Farkas Csilla, Kerepesi Veronika, Schubert Bianka, Rezessyné Szabó Judit, Nguyen Duc Quang	
<b>SZABÁLYOZOTT HATÓANYAGLEADÁSÚ BIOKOMPATIBILIS ÉS BIOLÓGIAILAG LEBONTHATÓ INTERFERON-BÉTA TARTALMÚ KOMPOZIT RÉSZECSKÉK FEJLESZTÉSE</b>	<b>33</b>
Fodorné-Kardos Andrea, Feczko Tivadar	
<b>NAD<sup>+</sup> KOFAKTOR ELEKTROKÉMIAI REGENERÁLÁSA</b>	<b>34</b>
Frank Tamara, Tóth Gábor, Nemestóthy Nándor	
<b>SZAKASZOS FOLYAMATOK ÜTEMEZÉSE P-GRÁF MÓDSZERTANNAL: KÖZBÜLSŐ TÁROLÁS MODELLEZÉSE</b>	<b>35</b>
Frits Márton, Bertók Botond	
<b>ACÉLOK KÉN-HIDROGÉN OKOZTA KORRÓZIÓJÁNAK VIZSGÁLATA GÁZOLAJ ÉS BIOMASSZA ELEGYBEN</b>	<b>36</b>
Gergely András, Kristóf Tamás	
<b>HULLADÉK ELASZTOMEREK ALKALMAZHATÓSÁGA POLIPROPILÉNEN</b>	<b>37</b>
Greczula Enikő, Simon-Stóger Lilla, Dr. Varga Csilla	
<b>ELGÁZOSÍTÓ REAKTOR HIDRODINAMIKAI MODELLEZÉSE</b>	<b>38</b>
Gyurik Livia, Egedy Attila, Jun Zou, Miskolczi Norbert, Ulbert Zsolt, Haiping Yang	
<b>SYNTHESIS OF DRUG CONTAINING NANOPARTICLES</b>	<b>44</b>
Hegedüs Imre, Meiczinger Mónika, Kasza György, Iván Béla and Nagy Endre	
<b>INTEGRATION OF THE FOULING DESCRIPTION INTO MODELS OF OSMOTICALLY DRIVEN MEMBRANE PROCESSES</b>	
Endre Nagy, Imre Hegedüs, Emily W. Tow, John H. Lienhard V	
<b>HULLADÉK GUMIŐRLEMÉNY ALKALMAZÁSA POLIETILÉN ALAPÚ BLENDEKBE</b>	<b>46</b>
Heller Balázs, dr. Varga Csilla, dr. Bartha László	
<b>MÁGNESES FOLYADÉKOK VÁLASZIDEJÉNEK MEGHATÁROZÁSA MÁGNESES SZUSZCEPTIBILITÁS MÉRÉS ALAPJÁN</b>	<b>47</b>
Horváth Barnabás, Szalai István	
<b>FUNKCIONALIZÁLT FLAGELLIN VARIÁNSOK LÉTREHOZÁSA ÉRZÉKELŐRÉTEGEK KIALAKÍTÁSÁHOZ</b>	<b>48</b>
Jankovics Hajnalka, Tompa Éva, Kakasi Balázs, Tóth Éva, Székér Patrik, Vonderviszt Ferenc	

<b>ADHÉZIÓS MOTÍVUMOKKAL RENDELKEZŐ FLAGELLIN VARIÁNSOK LÉTREHOZÁSA SEJTADHÉZIÓS VIZSGÁLATOKRA</b>	<b>49</b>
Kakasi Balázs, Kovács Boglárka, Tóth Éva, Jankovics Hajnalka, Horváth Róbert, Vonderviszt Ferenc	
<b>BIOFILM NÖVEKEDÉS A MIKROBIÁLIS ÜZEMANYAGCELLÁKBAN</b>	<b>50</b>
Keller Enikő, Bakonyi Péter, Nemestóthy Nándor	
<b>ELEKTROAKTÍV VÉKONYRÉTEGEK ALKALMAZÁSA AFFINITÁS SZENZOROKBAN</b>	<b>51</b>
Keresztes Zsófia, Marek Tamás, Felhősi Ilona, Mészáros Gábor	
<b>CHLORELLA VULGARIS ÜLEPEDÉSÉNEK VIZSGÁLATA</b>	<b>52</b>
Kiss Bernadett, Németh Áron	
<b>LIGNIN VALORIZÁLÁSA KATALITIKUS DEPOLIMERIZÁLÁSSAL</b>	<b>53</b>
Tamás I. Korányi, Xiaoming Huang, Emiel J.M. Hensen	
<b>AEROSZOL MINTÁK ÖKOTOXICITÁSÁNAK VIZSGÁLATA AZ OECD MAGASABRENDŰ NÖVÉNYEK VEGETATÍV NÖVEKEDÉSGÁTLÁS TESZTPROTOKOLLJA ALAPJÁN</b>	<b>54</b>
Nora Kovács, Eszter Horváth, Bettina Eck-Varanka, Katalin Eszter Hubai, Gábor Teke, András Hoffer	
<b>DINAMIKUS SZIMULÁTOR FEJLESZTÉSE: FENOL ELŐÁLLÍTÁSA KUMOLBÓL</b>	<b>55</b>
Alex Kummer, Tamás Varga	
<b>IBUPROFÉN RESZOLVÁLÁSA (S)-2-FENILGLICINOLLAL SZUPERKRITIKUS SZÉN-DIOXID OLDÓSZERBEN</b>	<b>61</b>
Lőrincz László, Madarász János, Sohajda Tamás, Székely Edit	
<b>ALIFÁS ÉS AROMÁS KARBONSÁVAK NAGYHATÉKONYSÁGÚ ELVÁLASZTÁSA MAKROCIKLIKUS ANIONCSERE-KROMATOGRÁFIÁVAL</b>	<b>62</b>
Lukács Diána, Horváth Krisztián, Horváth Ottó, Hajós Péter	
<b>DESCRIPTION OF SELECTIVITY OF ANTISOLVENT FRACTIONATION BASED OPTICAL RESOLUTION USING SOLUBILITY PARAMETERS</b>	<b>64</b>
Mihalovits Máté, Kemény Sándor, Lőrincz László, Székely Edit	
<b>ÖNSZERVEZŐDÉSELŐÁLLÍTOTT NANORÉSZECSKÉK</b>	<b>65</b>
Miskolczi Zsombor, Harangozó József Gábor, Biczók László, Véronique Wintgens, Catherine Amiel	
<b>SZELEKTÍV KÉN-HIDROGÉN ABSZORPCIÓ VIZSGÁLATA NÁTRIUM- HIDROXID OLDATBAN JET REAKTOR ALKALMAZÁSA ESETÉN</b>	<b>66</b>
Molnár Éva, Rippelné Dr. Pethő Dóra, Dr. Horváth Géza	
<b>HETEROTRÓF ALGATECHNOLÓGIÁK – ANTIMIKROBIÁLIS HATÓANYAGOK HATÁSA</b>	<b>67</b>
Nagy Balázs József, Dr. Németh Áron István	

<b>INNOVATÍV NAGY ÁTERESZTŐ KÉPESSÉGŰ FERMENTÁCIÓS VIZSGÁLATOK</b>	<b>68</b>
Németh Áron	
<b>PEKTIN TARTALMÚ TÁMASZTÓRÉTEGES FOLYADÉKMEMBRÁNOK ALKALMAZÁSA GÁZSZEPARÁCIÓ CÉLJÁBÓL</b>	<b>69</b>
Németh Zsófia, Lövitusz Éva, Nemestóthy Nándor	
<b>AZONOS TERÜLETEN TERMESZTETT KÖLESFAJTÁK EGYES FITONUTREINSEINEK ÖSSZEHASONLÍTÁSA</b>	<b>70</b>
Peczenová Noémi, Andrea Brunori, Palkó Magdolna, Vinod Dhaygude, Szedljak Ildikó	
<b>FINOMÍTÁS – PETCHEM INTEGRÁCIÓ C<sub>9</sub> MELLÉKÁRAM HASZNOSÍTÁS</b>	<b>72</b>
Péter Monika, Koncsik József	
<b>BIOGÉN NANOKRISTÁLYOK MÁGNESSÉGÉNEK VIZSGÁLATA ÉS EGYDIMENZIÓS MÁGNESES NANOSTRUKTÚRÁK LÉTREHOZÁSA BIOMIMETIKUS SZINTÉZISSSEL</b>	<b>73</b>
Pósfai Mihály, Bereczk-Tompa Éva, Kovács András, Rafal Dunin- Borkowski, Tóth Balázs, Vonderviszt Ferenc	
<b>KUKORICAROST ALAPÚ BIOFINOMÍTÓ FOLYAMAT TECHNOLÓGIAI- GAZDASÁGOSSÁGI MODELLEZÉSE ASPENTECH PROGRAMOKKAL</b>	<b>74</b>
Gergely Rácz, Anna Aszalós, Csaba Fehér, Zsolt Barta	
<b>KAPILLÁRIS ELEKTROFORÉZIS ALAPÚ VIZSGÁLAT A PROSZTATA- SPECIFIKUS ANTIGÉN GLIKÁNSZERKEZETÉNEK PROSZTATARÁK ÁLTAL OKOZOTT LEHETSÉGES VÁLTOZÁSÁIRA</b>	<b>75</b>
B. Reider, G. Járvás, M. Szigeti, A. Guttman	
<b>FELÜLETKEZELT SZÉN NANOCÖVEK VIZSGÁLATA INVERZ GÁZKROMATOGRÁFFAL</b>	<b>76</b>
Rieder Norbert, Varga Csilla, Dallos András	
<b>SZERELŐSOR GYÁRTÓSOR KIEGYENLÍTÉS KONVEJOR ÁLLÁSIDŐK FIGYELEMBEVÉTELÉVEL</b>	<b>77</b>
Ruppert Tamás, Abonyi János	
<b>NAGY HOZZÁADOTT ÉRTÉKŰ DÍZELGÁZOLAJ-KEVERŐKOMPONENSEK ELŐÁLLÍTÁSA</b>	<b>78</b>
Sági Dániel, Hancsók Jenő	
<b>SZILIKON MEMBRÁNOK VIZSGÁLATA, KÉN-HIDROGÉN ELTÁVOLÍTÁSA</b>	<b>84</b>
Salekovics Alexandra, Nemestóthy Nándor	
<b>HULLADÉK ELASZTOMER-TARTALOM NÖVELÉSÉNEK HATÁSA HULLADÉK POLIETILÉNBEN</b>	<b>85</b>
Simon-Stöger L., Greczula E., Varga Cs., Bartha L.	

<b>GYÓGYSZERIPARI ALAPANYAGOK POLIMER CSOMAGOLÓANYAGOKON KERESZTÜL VALÓ MÉRÉSE KÜLÖNBÖZŐ OPTIKAI ELRENDEZÉSŰ NIR SPEKTROFOTOMÉTEREKSEL</b>	<b>86</b>
Slezsák János, Szabó Éva, Gergely Szilveszter	
<b>MŰANYAGHULLADÉKOK KRAKKOLÁSA SZAKASZOS REAKTORBAN: KLÓRTARTALMÚ ALAPANYAG HATÁSA A LEJÁTSZÓDÓ FOLYAMATOKRA</b>	<b>92</b>
Sója János, Miskolczi Norbert	
<b>SHIMDAZU ICP-MS 2030 BEMUTATÁSA ÉS ALKALMAZÁSA A KÖRNYEZETANALITIKÁBAN.</b>	<b>93</b>
Somfai Attila	
<b>EXTRACELLULÁRIS VEZIKULÁK ORIENTÁLHATÓSÁGÁNAK VIZSGÁLATA POLARIZÁLT FÉNYSPEKTROSKÓPIÁVAL</b>	<b>94</b>
Szigyártó Imola	
<b>BIOOLAJ NEHÉZ MARADÉK VIZSGÁLATA GUMIBITUMEN RENDSZERBEN</b>	<b>95</b>
Tálosi Gréta, Gergó Péter, Dr. Geiger András, Dr. Hancsók Jenő, Dr. Holló András	
<b>PSZEUDOKOMPONENSEKBŐL ÁLLÓ REAKCIÓHÁLÓZAT KINETIKAI AZONOSÍTÁSA VÁKUUMGÁZOLAJ HIDROKRAKKOLÁSA SORÁN</b>	<b>96</b>
Till Zoltán, Varga Tamás, Chován Tibor	
<b>SZÉN-DIOXID LEVÁLASZTÁS AMINOS ÉS AMMÓNIÁS ABSZORPCIÓVAL</b>	<b>102</b>
Tóbel Kitti, Hégyes László, Láng Péter	
<b>NAGY TELÍTETT SZÉNHI-DROGÉN TARTALMÚ SUGÁRHAJTÓMŰ ÜZEMANYAG ELŐÁLLÍTÁSÁNAK VIZSGÁLATA</b>	<b>108</b>
Tomasek Szabina, Varga Zoltán, Hancsók Jenő	
<b>GÁZOLAJOK ÉGÉSI TULAJDONSÁGAINAK JAVÍTÁSA ALTERNATÍV KOMPONENSEKSEL</b>	<b>114</b>
Tóth Orsolya, Visnyei Olivér, Holló András, Hancsók Jenő	
<b>FINOMHANGOLHATÓ POLARITÁSÚ POLI(VINIL-ALKOHOL) (PVA) BIO-KOPOLIMEREK SZINTÉZISE METATÉZIS POLIMERIZÁCIÓVAL</b>	<b>120</b>
Tuba Róbert	
<b>SZILIKAGÉL HASZNÁLATÁNAK A HATÁSA A SÖR KERESZTÁRAMÚ MEMBRÁNSZŰRÉSÉRE</b>	<b>122</b>
Varga Áron, Tóth Eszter, Márki Edit	
<b>RACÉM 1-FENILETANOL BOKATALIZÁLT KINETIKUS RESZOLVÁLÁSA TERMÉK-ELVÁLASZTÁSSAL</b>	<b>123</b>
Varga Zsófia, Szécsényi Ágnes, Kmecsek Ildikó, Székely Edit	
<b>KO-FERMENTÁCIÓS TEJSAVÓHASZNOSÍTÁS</b>	<b>124</b>
Vidra Aladár, Németh Áron	

<b>NÖVELHETŐ-E A HETEROGÉN FOTOKATALÍZIS HATÉKONYSÁGA ÓZONIZÁCIÓVAL, HA A KATALIZÁTOR AG-TIO<sub>2</sub>?</b>	<b>125</b>
Fónagy Orsolya, Szabóné Bárdos Erzsébet, Horváth Ottó	
<b>KÍSÉRLETEK TERVEZÉSE ÉS ÉRTÉKELÉSE</b>	<b>126</b>
Kemény Sándor, Deák András, Lakné Komka Kinga, Kunovszki Péter	
<b>FLOTÁCIÓS ELJÁRÁS HATÉKONYSÁGÁNAK FOKOZÁSA A NYOMTATOTT PAPÍR FESTÉKANYAG TARTALMÁNAK ELTÁVOLÍTÁSÁRA</b>	<b>127</b>
Balla Noémi Szonja, Farkas Csilla, Nguyen Duc Quang	
<b>BIOGÁZOLAJ ELŐÁLLÍTÁSA, JELLEMZÉSE</b>	<b>128</b>
Domokos Lajos, Dr. Halász János	
<b>NITROFURANTOIN FOTODEGRADÁCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA</b>	<b>135</b>
Fonyó Máté, Szabóné BárdosErzsébet, Andrea Cafuta, Horváth Ottó, Horváth Krisztián, Sandra Babić, Irena Škorić	
<b>INTRODUCTION OF POLYOLS</b>	<b>136</b>
Suba Péter, Lengyel Nikolett, Kiss Ferenc	
<b>NEW HOMOPOLYMER PP GRADE DEVELOPMENT</b>	<b>136</b>
Kissné Lovas Kinga, Janecska Tünde, Orbánné Mester Ágnes, Kiss Ferenc	
<b>MODELL KÍSÉRLETEK A LÉZERNYOMTATOTT PAPÍR FESTÉKANYAG TARTALMÁNAK ELTÁVOLÍTÁSÁRA KITOZÁN BIOPOLIMER ALKALMAZÁSÁVAL</b>	<b>137</b>
Lesták Lea, Farkas Csilla, Rezessyné Szabó Judit, Nguyen Duc Quang	
<b>STUDYING THE PERFORMANCE OF MODIFIED CARBON NANOTUBE AS ADSORBENT MATERIAL IN OIL SPILLS CLEAN UP</b>	<b>138</b>
Noor Al Jammal, Tatjana Juzsakova, Zsófia Ifju	
<b>NITROGÉNNEL ÉS FLUORRAL MÓDOSÍTOTT TIO<sub>2</sub> FOTOKATALIZÁTOR ELŐÁLLÍTÁSA ÉS ALKALMAZÁSA</b>	<b>139</b>
Papp Antónia, Szabóné Bárdos Erzsébet, Horváth Ottó	
<b>FERMENTATION PROFILE OF DIFFERENT YEAST STRAINS ON SOUR CHERRY</b>	<b>140</b>
Pham Minh Tuan, Mohan Malkani Anbalagan, Fanni Hegedűs, Réka Varjú, Quang D. Nguyen	
<b>ULTRAHANGOS KAVITÁCIÓ ALKALMAZÁSA HASZNÁLT TERMÁLVÍZ CSÍRÁTLANÍTÁSÁRA</b>	<b>141</b>
Pozsgai Emília, Németh Zsolt, Bíró Ildikó, Galambos Ildikó	



<b>BIOLÓGIAI ÚTON ELŐKEZELT BÚZAKORPA ALKOHOLOS ERJESZTÉSE MONO- ÉS VEGYES KULTÚRÁK ALKALMAZÁSÁVAL</b>	<b>147</b>
Puhl Dóra, Farkas Csilla, Rezessyné Szabó Judit, Nguyen Duc Quang	
<b>IZOPROPIL-ALKOHOL ELŐÁLLÍTÓ ÜZEM OPERÁTOR TRÉNING SZIMULÁTORÁNAK MEGALKOTÁSA</b>	<b>148</b>
Puskás János, Egedy Attila	
<b>LABORATÓRIUMI MÉRETŰ SILÓ BERENDEZÉS VIZSGÁLATA CFD SZIMULÁCIÓVAL</b>	<b>154</b>
Radó Ákos, Egedy Attila	
<b>ITAKONSAV SZEPARÁCIÓJA ELEKTRODIALÍZISSEL</b>	<b>155</b>
Rózsenberszki Tamás, Nemestóthy Nándor, Bélafiné Bakó Katalin	
<b>NEHÉZFÉMEK SZIMULTÁN MEGHATÁROZÁSA KOMPETITÍV VIZSGÁLATOKBÓL NYERT VIZES OLDATOKBAN, POTENCIOMETRIÁS SZTRIPPING ANALÍZIS MÓDSZERREL</b>	<b>156</b>
Timothy Anemana Amangdam, Dániel Filotás, Géza Nagy, Livia Nagy	
<b>EFFECT OF INDUCER, DIFFERENT CARBOHYDRATES AND METAL IONS ON PRODUCTION OF NARINGINASE FROM <i>LACTOBACILLUS FERMENTUM D13</i></b>	<b>157</b>
Anh T. M. Tran, Erika Bujna, Judit Krénusz, Mai S. Dam, Quang D. Nguyen	
<b>EFFECT OF EXOGENOUS RIBOFLAVIN ON GROWTH AND PRODUCTION OF SOME METABOLITES BY <i>SHEWANELLA XIAMENENSIS</i> AND <i>SHEWANELLA JAPONICA</i></b>	<b>158</b>
Truong Hoang Duy, Edina Nagy, Levente Horváth, Dam Sao Mai, Quang D. Nguyen	
<b>NAGYHATÉKONYSÁGÚ OXIDÁCIÓS ELJÁRÁSOK ELŐKEZELÉSI HATÁSA A MEMBRÁNSZŰRÉS PARAMÉTEREIRE TEJIPARI SZENNYVIZEK ESETÉBEN</b>	<b>159</b>
Zakar Mihály, Kovács Ildikó, Muhi Péter, Hanczné Dr. Lakatos Erika <sup>1</sup> , Keszthelyi-Szabó Gábor <sup>2</sup> , László Zsuzsanna	

# Nagy fényáteresztésű hibrid szilika bevonatok előállítása és jellemzése

*Preparation and characterization of antireflective hybrid silica coatings*

**Ábrahám Attila, Kócs Lenke, Hórvölgyi Zoltán**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi*

*Tanszék, Kolloidkémia Csoport*

*1111, Budapest, Budafoki út 6-8*

---

## **Összefoglaló**

Szilárd hordozókon nanostrukturált bevonatok létrehozásával nagymértékben javíthatóak a hordozó különböző tulajdonságai. Munkám során polikarbonát hordozó felületén alakítottam ki hibrid szilika bevonatokat szol-gél módszerrel mártásos technikával. Az eljárás előnye, hogy a kialakított bevonat tulajdonságai szabályozhatóak a réteghúzás körülményeinek és a felhasznált prekursor szol összetételének módosításával.

A bevonatok kialakításánál az volt a célom, hogy a hordozó fényáteresztő képessége növekedjen és a felülete hidrofób legyen. Az előállított bevonatokkal szemben további kritériumokat támasztottam. Ilyen kritérium volt, hogy a kedvező tulajdonságok az idő múlásával ne változzanak. A nagy fényáteresztés és hidrofób jelleg megőrzésének céljából többféle kondicionálást alkalmaztam. Az optikai tulajdonságokat UV-Vis spektrofotométerrel felvett spektrumok alapján vizsgáltam, a hidrofób jelleget pedig víz-peremszögmérés segítségével ellenőriztem.

Az eredmények azt mutatták, hogy a kialakított bevonat javítja a fényáteresztést (maximális fényáteresztés: 98,2% 720 nm-es hullámhossznál), azonban a különböző kondicionálási eljárások hatására eltérő mértékben, de romlottak az optikai tulajdonságok. A peremszögmérés eredményei alapján arra következtettem, hogy a bevonatok hidrofób jellegűek (haladó peremszög:  $119 \pm 5^\circ$ ), azonban a nagy peremszög-histerézis miatt ( $24 \pm 7^\circ$ ) a kisebb méretű vízcseppek nem gördülnek le a minták felületéről. A haladó és hátráló peremszög értékeiben nagy szórás adódott, ami a felület nagyobb léptékű inhomogenitására is utalhat.

## **Summary**

Nanostructured coatings on solid surfaces can advantageously influence different properties of the substrate. During my work, I prepared hybrid silica coatings on polycarbonate substrates by sol-gel method. The advantage of the method is that we can control the properties of the prepared coatings by changing the circumstances of the dip-coating process or varying the composition of the precursor sol.

My goal was to prepare hybrid silica coatings with improved light transmittance and hydrophobic properties. Other important criteria were that these favourable properties do not decline over time. In order to preserve the enhanced optical properties and the hydrophobicity of the surface, I applied a various type of conditioning procedures. For the investigation of light transmittance UV-Vis spectroscopy was used. The hydrophobic characteristics of the hybrid coatings were evaluated by measurement of the water contact angle.

The results showed that the prepared coatings successfully enhance the light transmittance (maximum transmittance: 98,2% at 720 nm), however, the optical properties decreased over time. Based on the results of contact angle measurements I concluded that the surface of the samples had hydrophobic nature (advancing contact angle:  $119 \pm 5^\circ$ ), but due to the large contact angle hysteresis ( $24 \pm 7^\circ$ ) the surface of the samples' do not repel the smaller water drops. The high deviation of the contact angle values can indicate the inhomogeneity of the samples' surface at a larger scale.

---

# Növényolaj mikrokapszulázásának vizsgálata membrántechnika és porlasztva szárítás kombinációjával

*Investigation of microencapsulation of vegetable oil with combination of membrane technology and spray drying*

**Albert Krisztina, Koris András, Vatai Gyula**

*Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi Kar*


*1118 Budapest, Ménesi út 44.*

---

## **Összefoglaló**

A mikrokapszulázást széles körben alkalmazzák az élelmiszeripar területén. A legújabb technológiák kapszulázási módszereit vizsgálva a megjelenő kutatásokban, jelentős számú publikáció figyelhető meg, ahol az eljárás során membrántechnikát alkalmaznak. Ez alatt az olyan műveleteket értjük, ahol a mikrokapszula előállításának alapjául szolgáló emulziógyártást, mikroporozus membrán segítségével hajtják végre.

A jelenlegi szakirodalmak szerint a mikrokapszulázásnál a hordozót a folytonos fázisban oldják fel, és ebbe emulzifikálják az olajos fázist. Ettől eltérően, korábbi kísérleteinkben sikerrel alkalmaztunk egy új eljárást, amiben a falanyagot (maltodextrin) az olajos fázisban oldjuk fel és az emulzifikálás/ kapszulázás egy lépcsőben történik. E kutatás célja, hogy összehasonlítsuk a két módszert. Kísérleteink bizonyították, hogy kisebb átlagos szemcseméret érhető el ezzel a megoldással. A módszer esetleges hátránya a membrán korai eltömődése, mivel esetünkben a hordozó komponens szintén áthalad a membránon, nem csak az olajos fázis. Azonban ez a negatív hatás különböző módszerekkel kiküszöbölhető. A hagyományos és az új módszerrel történő emulziógyártást követően, a megformázott, olajtartalmú mikrokapszulák kinyerésére a porlasztva szárítás műveletét alkalmaztuk. Kutatásunkban vizsgáltuk a porlasztva szárítás módszerének alkalmazhatóságát mindkét típusú mikrokapszula esetén.


A SZERZŐK KÖSZÖNETÜKET FEJEZIK KI A PUBLIKÁCIÓ TÁMOGATÁSÁÉRT, MELY  AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA ÚNKP-16-3-III KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.

---

## **Summary**

Microencapsulation technology is a well accepted method in food industry. However, from a long prior, lots of attempts have been considered in this direction, at present, membrane based encapsulation technology is grabbed lot of attention. The word “membrane based encapsulation” entails that at the first step of the technique is preparation of emulsion with the help of microporous membrane.

Generally, in microencapsulation technology, the core material is dissolved in continuous phase and oil is dispersed into it. In the present investigation, we tried to develop a new way to prepare microcapsule with vegetable oil and maltodextrin, where in the first step, the core material (maltodextrin) was dissolved in oil phase and considered as dispersed phase, and subsequently it was introduced into continuous phase (water) through a microporous membrane. A comparative study has been made between conventional microencapsulation techniques with our laboratory developed technique. The average particle size of microcapsules prepared by our method is lower than the other one. After encapsulation preparation, fine tuned microcapsule was made by spray drying. However the main disadvantage of our proposed technology is rapid membrane fouling because of high solute concentration in dispersed phase. The problem can be eliminated by judicious and systematic investigations.

THE AUTHORS ACKNOWLEDGE FOR FINANCIAL SUPPORT, WHICH WAS  SUPPORTED BY THE ÚNKP-16-3-III NEW NATIONAL EXCELLENCE PROGRAM OF THE MINISTRY OF HUMAN CAPACITIES.

# **Belső udvarok légszennyezettségének modellezése különböző peremfeltételek és szélesebségek esetén városi környezetben**

*A simulation study to quantify concentration of air pollutant in urban environment – courtyards - using different boundary conditions and wind speed*

**Katalin Antalné Bökfı<sup>1</sup>, Tamás Varga<sup>2</sup>, Endre Domokos<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Institute of Environmental Engineering, Faculty of Engineering, University of Pannonia, 10 Egyetem St., Veszprem, Hungary H-8200*

<sup>2</sup>*Department of Process Engineering, Faculty of Engineering, University of Pannonia, 10 Egyetem St., Veszprem, Hungary H-8200*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

Manapság a légszennyezés az egyik legmeghatározóbb tényezője a városi környezetnek. A városi levegő minőségének alakulását számos tényező befolyásolja. Jelen tanulmány a közlekedési eredetű légszennyezők vizsgálatára fókuszál. Számos tanulmány foglalkozik utcakanyon modellek alkotásával, azonban a belső udvarok, melyre ebben a tanulmányban koncentrálnak, kiemelten fontos és kevésbé tanulmányozott részei a városi környezetnek. A belső udvarok főleg rekreációs célokat szolgálnak a háztömbök, iskolák és kórházak esetén. A COMSOL Multiphysics szoftver CFD (Computational Fluid Dynamics) modul alkalmazásával a légszennyezők terjedése és koncentrációja modellezhető. A legtöbb hasonló tanulmányban alkalmazott időátlagolt sebességprofil mellett a gravitációt és a magassággal csökkenő atmoszférikus nyomást is figyelembe vettük. Továbbá különböző szélesebséget alkalmazva is elvégeztük a szimulációt és vizsgáltuk a légszennyezők koncentrációjának értékét a vizsgált geometria kitüntetett pontjain. Ennek eredményeként megfigyelhető a légszennyezők koncentrációkülönbsége és ezen különbség alakulása, eltérő meteorológiai környezetben. A kutatómunka folytatásaként mérési adatok alapján a modell validálását, majd a már validált modellt eltérő valós, városi helyzetek szimulációját tervezzük elvégezni.

Nowadays in the urban living environment air quality is one of the most important focus of interest. Urban air quality is affected by many factors. Traffic emission in the streets is a large factor of pollutant concentration. This study focuses on air pollution generated by transport. Can be found many studies in literature about CFD (Computational Fluid Dynamics) modelling in street canyons. However, courtyards, which are the focus of this study are especially important and less studied area of modelling of air pollutant emission. Courtyards are usually used for recreation by residents between blocks of flats, schools, and hospitals. By performing simulations based on dispersion model, concentration of air pollutants could be predictable in these areas as well. Using a simulation software – COMSOL Multiphysics CFD module – dispersion and concentration of air pollutants can be calculated in complex 3D geometries. Beside the commonly used equilibrium boundary layer velocity profile, gravitation and decreasing atmospheric pressure by height were considered in the proposed model. Furthermore, concentrations in specific points of the investigated geometry were calculated in case of different wind speed. As a result, difference of concentration of the investigated air pollutant can be determined in case of different meteorology conditions. Continuing this work the most appropriate simulating method could be chose for modelling real situations using experimental data.

---

## **Introduction**

Since outdoor air pollution is a major environmental problem in the built environment, number of affected urban inhabitants are increasing mainly caused by transport, industry and heating [1]. Many studies can be found in literature which confirm the positive correlation between high atmospheric concentration of air pollutants and the increasing mortality [2][3]. In 2012 death of around 7 million people were caused by air pollution, which is now the largest environmental health risk in the world - published by WHO. [4]. Traffic emissions in these street canyons are a large contributor to local pollutant concentrations [5]. Additionally, inside of the cities and towns the emissions can be accumulated between buildings, especially where the building density is high which indicates an increase of the pollutants concentration because of reduced airflow [6]. In this point of view courtyards are especially important areas by their role as recreational locations for children playing

and people recovering, between blocks of flats, schools and hospitals. In spite of there are courtyards in most of the urban areas, only a few study focuses on investigating of air quality of these areas. Most of the studies focus on modelling temperature conditions, especially in hot climate areas [7].

The modelling methods used for near-field pollutant dispersion is characterized by the complex interaction between the atmospheric flow and the flow around buildings [8]. In the past decades, development of computer technology has contributed the spread of application of CFD (Computational Fluid Dynamics) models in several area for example modelling dispersion of outdoor pollution and accidents [9][10][11]. In the case of urban areas applying CFD models complex geometries could be investigated. In the aspect of modelling dispersion of air pollutants in courtyards, CFD models could be the most representative, which are used for modelling gas dispersion in many cases of street canyons [12][13].

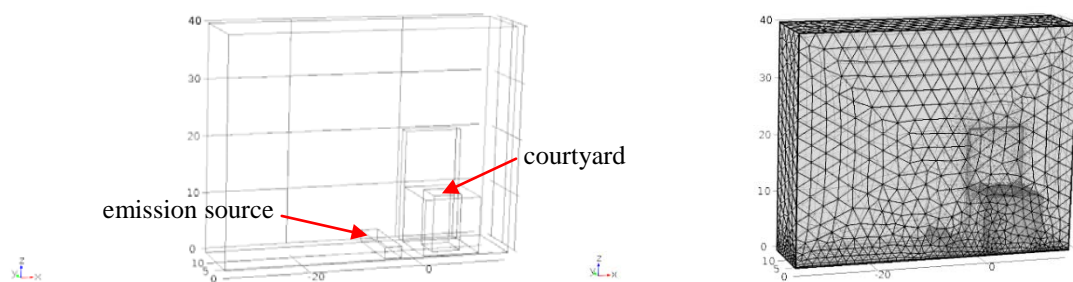
The aim of this study is to determine the concentration of air pollutant component in the simulated courtyard applying different boundary conditions. We analyse how the model complexity affects the pollutant accumulation in the courtyard. In the simplest model a fixed velocity and pressure are considered at the inlet and outlet boundaries. This model complexity is similar to those are usually applied in the modelling of air pollutants spreading in city environment. However, in our work the basic model is extended with velocity and pressure profiles respect to the height and also with gravitational force. The concentration of air pollutant is calculated using all the models to check how the model complexity improve the accuracy of the calculations.

## Methodology

Three-dimensional steady state simulations have been performed to study the air quality in a courtyard using CFD module in COMSOL Multiphysics software.

The applied Algebraic yPlus turbulence model is a simplified turbulence model based on the distance to the nearest wall. The local Reynolds number  $Re = Uy/v$  is formed with the local absolute value of the velocity and the distance to the nearest wall. This implicitly assumes that the main flow direction is parallel to the wall. The Algebraic yPlus turbulence model is consistent with a no slip boundary condition, that is  $u=0$ . This model is one of the least computationally intensive, but generally the least accurate turbulence model. Hence, Validation of the proposed courtyard model is crucial in our work.

The current analysis is mainly focused on the influence of the small scale geometry. Therefore, the computational domain is a hexahedron with dimensions 50 m by 12 m in the horizontal plane and 40 m in the vertical direction. The computational domain was built using tetrahedral elements with a coarse resolution. The final number of the computational cells used is 60 283.



**Figure 1.** The computational domain and the computational cells (Mesh)

As the inlet boundary condition an equilibrium boundary layer velocity profile (equation (1)) was applied in the simulations.

$$U(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \frac{z + z_0}{z_0}, \quad (1)$$

where  $U(z)$  is the average wind speed at the height ( $z$ ) above the ground,  $z_0$  (0.5) is the surface roughness,  $u_*$  (0.52) is the friction velocity and  $\kappa$  (0.40) is the von Karman's constant. Symmetry boundary conditions are specified on the top and lateral sides of the computational domain. A decreasing pressure by height ( $101\,325 - z \cdot 10$ ) as an outlet condition was considered as the outflow boundary in the S2 and S4. The influence of gravity on the flow pattern was also considered in the case of S3 and S4:  $F_y = -\rho$ . Different surface roughness values ( $z_0$ ) were applied in the last three simulations (Simulations: S5 and S7):

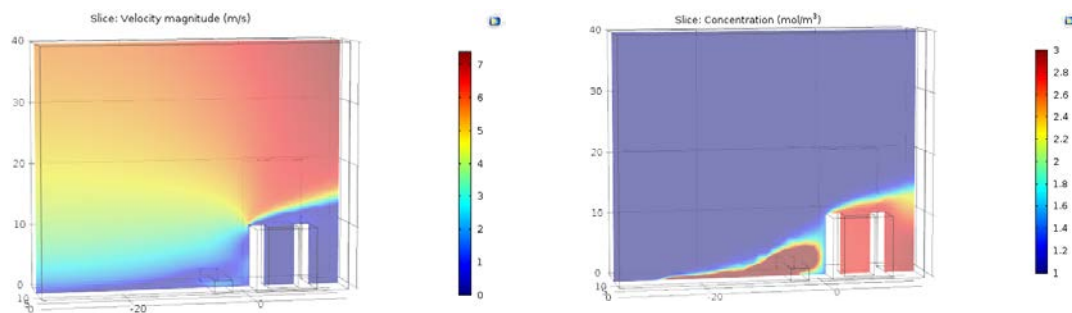
**Table 1.** Properties of the simulations (S1-S7)

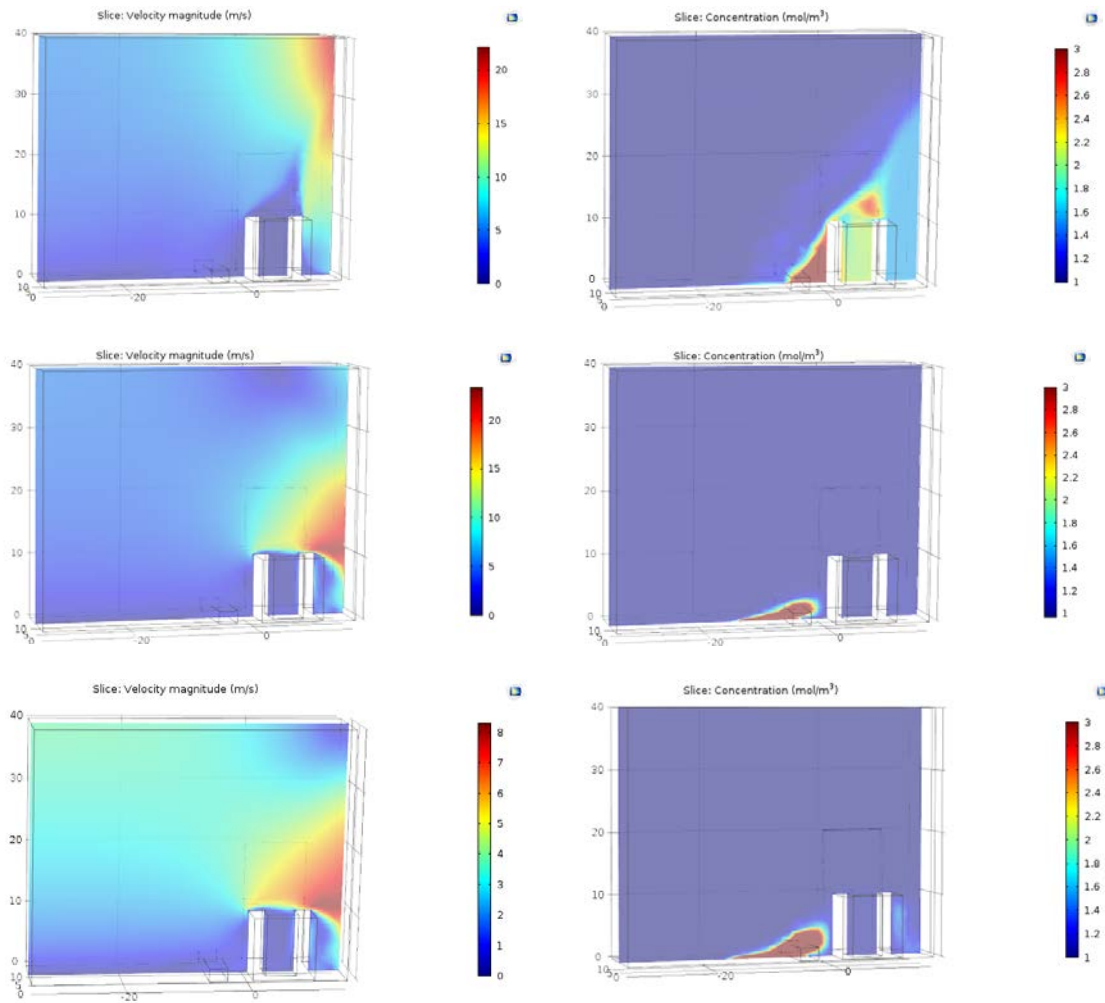
	$z_0$	outlet $p_0$ (Pa)	gravity	source ( $1.5 \text{ mol/m}^3 \cdot \text{s}$ )
<b>S1</b>	0.5	0	-	1.5
<b>S2</b>	0.5	$101\,325 \text{ Pa} - z \cdot 10$	-	1.5
<b>S3</b>	0.5	0	+	1.5
<b>S4</b>	0.5	$101\,325 \text{ Pa} - z \cdot 10$	+	1.5
<b>S5</b>	1.5	$101\,325 \text{ Pa} - z \cdot 10$	+	1.5
<b>S6</b>	2	$101\,325 \text{ Pa} - z \cdot 10$	+	1.5

## Results

The results from the simulations are illustrated in simulation images Figure 3. On the left side of the paper the figure represent the velocity values applying only the commonly used wind velocity profile (S1), using decreasing atmospheric pressure by height (S2), considering gravitational force (S3) and applying all these physical condition in one simulation (S4). Concentration values are represented in the right side images.

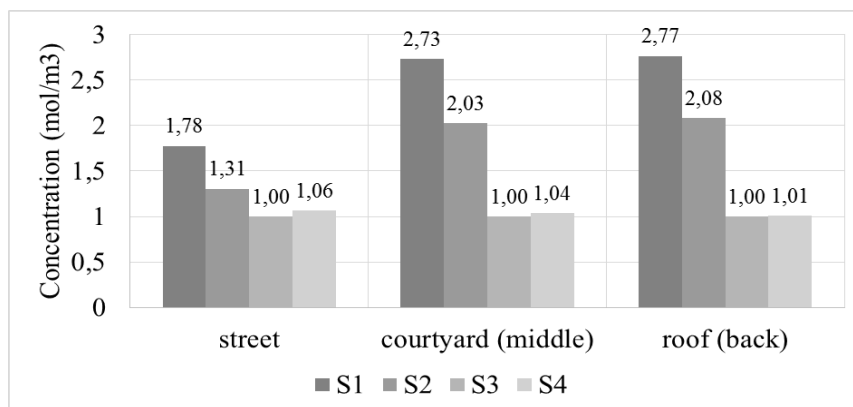
The outputs of the simulations represent a significant decrease in velocity magnitude from S1 to S4. The concentrations field of the pollutant are related to the velocity profile.





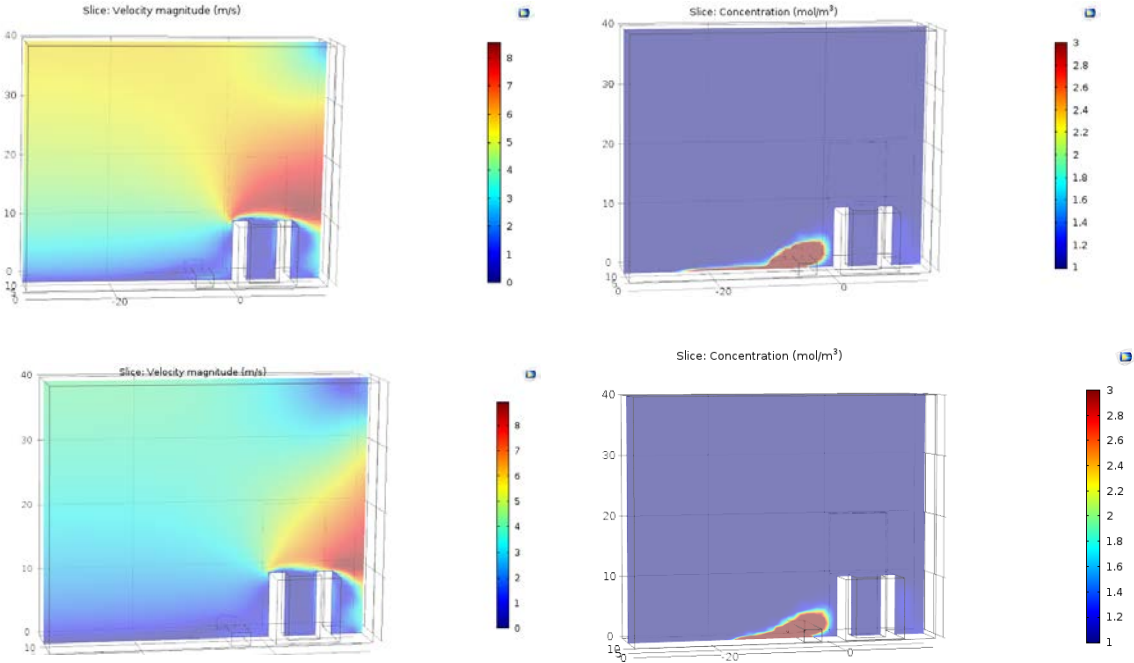
**Figure 2.** Simulations (S1-S4) of velocity magnitude (left) and concentration of pollutant (right) using different physical conditions

Effect of physical properties could be seen in the simulations (Figure 3.). In specific points of the model tendency of concentration level is similar, but in the S1 concentration is higher in each point followed by concentration values of the S4 and S2. Finally, in the case of S3 could be seen the lowest values of concentration. Difference between values of the commonly used S1 and the most realistic S4 is between  $0.72$  and  $1.76 \text{ mol/m}^3$ .



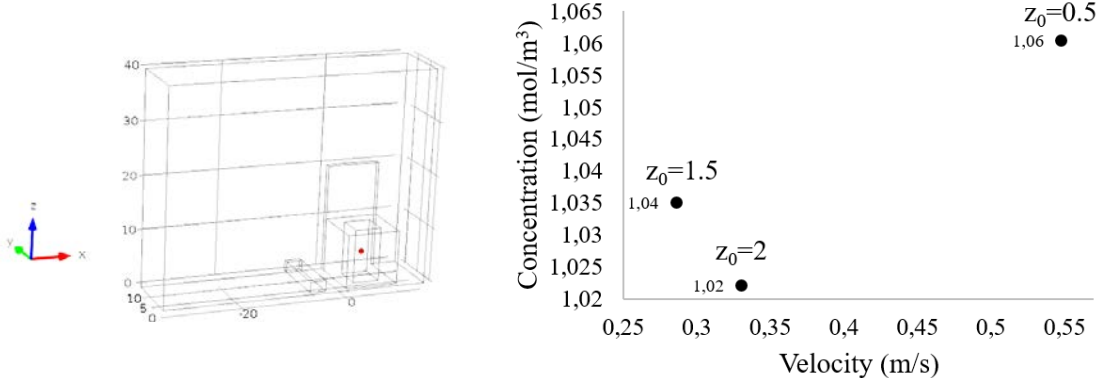
**Figure 3.** Concentration level in specific points of the simulations (S1-S4)

In the next two simulation (Figure 4.) concentration of gas was simulated by using different roughness values ( $z_0$ ). Except roughness value physical conditions are the same as in S4. In case of S5 a value ( $z_0=1.5$ ) and S6 ( $z_0=2$ ) were considered which are used for simulating velocity profile of a metropolitan area with higher buildings.



**Figure 4.** Simulations (S1-S4) of velocity magnitude (left) and concentration of gas (right) using different physical conditions

In Figure 5. differences of pollutant concentrations are represented in a specific point inside the courtyard. In case of S4 the velocity magnitude was the highest, and in case of S6 the lowest at the Inlet side. In spite of that, the lowest velocity magnitude is connected to S6 ( $z_0=1.5$ ). The expected tendency is represented in concentration values which follow the decreasing values of velocity magnitude at the Inlet side.



**Figure 5.** Values of concentration in specific points of the simulations depending on velocity magnitude



## Conclusion

Concentration of an air pollutant in the simulated courtyard could be determined in case of applying different boundary conditions. According to six different simulations applying the commonly used velocity profile may not specify the most realistic result. Concentration of pollutant is affected by different physical conditions. Pollutant concentration in a specific point inside the courtyard is strongly affected by wind speed and thus by the applied method. In the future studies applying more different velocity profile should be performed to examine the correlation between wind speed and concentration level. In the following studies the effect of wind direction could be considered. Continuing this work the most appropriate simulating method could be chosen for modelling real situations using experimental data. The accuracy of the computational method is highly depends on the number of computational cells which should be considered in the future studies. The applied CFD simulation methodology is potentially less expensive, less time-consuming than the common used wind tunnel tests.

## References

- [1] International Energy Agency: World Energy Outlook 2014.  
<https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/WEO2014.pdf>
- [2] Dehbi, H., Blangiardo, M., Gulliver, J., Fecht, D., Hoogh, K., Al-Kanaani, Z., Tillin, T., Hardy, R., Chaturvedi, N., L Hansell, A. Air pollution and cardiovascular mortality with over 25 years follow-up: A combined analysis of two British cohorts. *Environment International*, Available online (2016)
- [3] Chappie, M., Lave, L. The health effects of air pollution: A reanalysis, *Journal of Urban Economics*. 12 (3), 346-376 (1982)
- [4] World Health Organization: 7 million premature deaths annually linked to air pollution  
<http://www.who.int/mediacentre/news/releases/2014/air-pollution/en/>
- [5] Gerdes, F., Olivari, D. Analysis of pollutant dispersion in an urban street canyon. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 82 (1–3), 105-124 (1999)
- [6] Rock, B.A., Moylan, K.A. Placement of ventilation air intakes for improved IAQ. *ASHRAE Trans.* 105 (1), 1-9 (1999)
- [7] Ghaffarianhoseini, A., Berardi, U., Ghaffarianhoseini, A. Thermal performance characteristics of unshaded courtyards in hot and humid climates. *Building and Environment*, 87, 154-168 (2015)
- [8] Lateb M., Meroney R.N., Yataghene M., Fellouah H., Saleh F., Boufadel M.C. On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments – A review. *Environmental Pollution*, 208 (A), 271-283 (2016)
- [9] Gromke, C., Blocken, B., Janssen, W., Merema, B., Hooff, T. van, Timmermans, H. CFD analysis of transpirational cooling by vegetation: Case study for specific meteorological conditions during a heat wave in Arnhem, Netherlands. *Building and Environment*, 83, 11-26 (2015)
- [10] Tominaga, Y., Stathopoulos, T. Ten questions concerning modeling of near-field pollutant dispersion in the built environment. *Building and Environment*, 105 (15) 390-402 (2016)
- [11] Hanna, S. R., Hansen, O. R., Ichard, M., Strimaitis, D. CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas. *Atmospheric Environment*, 43 (2), 262-270 (2009)
- [12] Vardoulakis, S., Gonzalez-Flesca, N., Fisher, B.E.A. Assessment of traffic-related air pollution in two street canyons in Paris: implications for exposure studies. *Atmospheric Environment*, 36 (6), 1025-1039 (2002)
- [13] Vardoulakis, S., Fisher, Bernard E.A., Pericleous, K., Gonzalez-Flesca, N. Modelling air quality in street canyons: a review. *Atmospheric Environment*, 37 (2), 155-182 (2003)

# Új technológiák megtérülés becslése időszakonként változó erőforrások, igények, és tárolási lehetőségek mellett

*Estimation of the return of investment in new technologies regarding periodically changing demands, availability of resources, and storages*

**Bartos Anikó, Bertók Botond**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## **Összefoglaló**

Új technológiák megtérülésének becslésében kihívást jelent, ha időszakról időszakra változnak a felhasználási igények, a rendelkezésre álló erőforrások vagy nyersanyagok, ráadásul az időszakok egymástól nem függetlenek, mert tárolásra is lehetőség van. Előadásunkban példaként napkollektor beruházást vizsgálunk lakossági melegvíz előállítás céljára. Heti periódusban változik a felhasználása, éves ciklusban változik a napsütéses órák várható száma, és kis veszteséggel tudunk melegvizet tárolni. A kérdést kétszintű folyamatszintézis feladatként definiáljuk, ahol a felső szint a berendezések megvásárlása és méretezése, míg az alsó a berendezések időszakos hasznosítása. Az optimális és alternatív megoldásokban megismerhetjük a berendezés beruházások, és hasznosításuk időszakos pénzügyi hatásait, meghatározhatjuk a megtérülési időszakot. Végül bemutatunk egy célszoftvert, amelyet multiperiódusú folyamatok tervezéséhez készítettünk.

## **Summary**

Estimating the return of investment in a new technology can be challenging if the demands and resources changes periodically, moreover the periods are not independent, due to the potential storage capabilities between the periods. Investment in solar water heating panels serves as the example, where domestic hot water consumption changes during the days of the week, while the daily sunshine hours in annual cycles. The hot water can be stored with minimal energy loss. The question is formulated as a two stage process synthesis problem, where the upper part represents the investment and sizing, while the lower part models the periodical utilization of the equipments. The optimal and alternative solutions show periodical financial impacts of the investments in and utilization of equipments, and help determining the payback time. Finally, a software developed by us especially for the design of multiperiod systems is to be introduced.

---

## **Beke-Somfai Tamás**

*Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont  
1117 Budapest, Magyar tudósok krt.2*

### ***Investigating membrane activity of non-natural hydrophobic peptides***

---

#### ***Összefoglaló/ Summary***

Development of resistance by bacteria to antibiotics makes design of novel antimicrobial compounds increasingly important. As persistent cells often become slow-growing or dormant, strategies targeting their membrane are becoming more relevant. Toxic oligomers may assemble into hydrophilic or lipophilic sheet rich barrel constructs. However, this mechanism is not understood, greatly hindering rational development of similar compounds.

To approach this problem, we design and study foldamer and natural oligomer assemblies, such as the channel forming gramicidin. We hope to define the fundamentals of how peptide - lipid bilayer interactions govern formation of potentially toxic oligomers at a molecular level. This may be exploited for developing new antimicrobial compounds.

Foldamers are highly similar to natural peptides in terms of structural diversity, thus they are ideal model systems, in several cases showing antibiotic activity and enzyme resistance. The structures are studied using X-ray scattering methods (SAXS,WAXS), polarized light spectroscopy as well as theoretical (QM&MD) tools.

A mikrobák által okozott fertőző betegségek globális méretű fenyegetést jelentenek. A baktériumok gyorsan növekedő ellenállásának köszönhetően a jelenlegi antibiotikumok egyre kevésbé hatékonyak. Ezért kiemelten fontos olyan új vegyületek keresése és tervezése melyek a jövőben sikeresen pótolják a jelenlegi gyógyszereket. A természetben található toxikus oligomerek számos esetben hidrofil és hidrofób szerkezetekbe rendeződnek össze és úgy fejtik ki hatásukat. Ennek az önrendeződésnek a mechanizmusa azonban még nem feltárt, így a hasonló vegyületek tervezése akadályokba ütközik.

A fenti mechanizmus jobb megértéséhez nem természetes alapú (ún. Foldamer) peptidek, valamint természetes, ioncsatornát formáló peptidek (i.e. gramicidin) vizsgálatát végezzük. Célünk a peptidek és a sejtfalakat képző lipid kettősrétegek kölcsönhatásának jobb megértése molekuláris szinten. Az így szerzett tapasztalatok jelentősen hozzájárulhatnak új antimikrobiális vegyületek tervezéséhez.

A szerkezeteket modern számítógépes eszközökkel (kvantummechanikai QM, és molekuladinamikai MD módszerekkel) valamint polarizált fény spektroszkópiai és röntgen szórás módszerekkel vizsgáljuk.

---

# Homogenitás vizsgálata folyadéktartályokban

*Examination of homogeneity in liquid tanks*

**Bobek Janka, Rippelné Dr. Pethő Dóra**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém Egyetem u. 10.*

---

## **Összefoglaló**

A tartályokban tárolt folyadékok homogenitásának megítélése nehéz feladat. A tartályban tárolt folyadék koncentrációjának meghatározása céljából általában mintát vesznek folyadékból, majd a minta koncentrációjából következtetnek a tartály teljes tartalmának koncentrációjára. Ez azonban nem helyes eljárás, mivel gyakran egy pontból vesznek mintát, mely nem reprezentálja a tartály teljes tartalmát.

Egy fázisú rendszerek homogenizálása több módon megvalósítható: dinamikus keverő, statikus keverő, külső cirkuláltató szivattyú, pulzálás, vibráció, buborékoltatás.

Munkánkban a tartályok tartalmának homogenitását célzó vizsgálati eredményeinket mutatjuk be.

## **Summary**

Assessment of homogeneity in liquid tanks is a difficult task. To determine the concentration of liquid stored in a liquid tank is generally achieved by sampling the liquid at one point. The absolute concentration of liquid is inferred from this concentration data. However this procedure is incorrect because one point sampling is not representative.

Homogenization of one phase system could be realized in several ways: dynamic mixer, static mixer, external circulation pump, pulsation, vibration and bubbling.

The results for examination of homogeneity in liquid tank are represented in our work.

---

# **Tehéntej részleges sómentesítési technológiájának modellezése SuperPro Designer program alkalmazásával**

*Cow's milk partial demineralization - process modelling by Super Pro Designer*

**Attila Csighy, Andras Koris, Gyula Vatai**

*Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi Kar, Élelmiszeripari Műveletek és Gépek  
Tanszék, H-1118 Budapest, Menesi út 44*

---

A tej az elsődleges tápanyagforrás az emlősök számára, mivel nagy mennyiségben tartalmaz az emberi szervezet számára hasznos, esszenciális tápanyagokat. Ezen esszenciális komponensek közé tartoznak a fehérjék, zsírok, vitaminok és az ásványi anyagok. A tejben található ásványi anyagok (kálcium, magnézium) egy részének eltávolításával, mennyiségük csökkentésével, olyan funkcionális élelmiszerek állíthatók elő melyek ezen ásványi komponensekkel kerültek dúsításra. A leggyakrabban alkalmazott sómentesítési technológiák közé az ioncsere, elektrodialízis és a membránszeparációs eljárások, azok közül is a nanoszűrés tartozik. A kutatás során a tehéntej részleges sómentesítési technológiáját vizsgáltuk membránszeparációs eljárások (UF, NF) alkalmazásával és a technológia modellezésével. Az alkalmazott technológiát, a számított paraméterekkel együtt, SuperPro Designer program alkalmazásával került modellezésre, elvégezve a folyamat gazdasági és technológiai paramétereinek a meghatározását. A SuperPro Designert számos ipari területen alkalmazzák, ilyen technológiai területek a gyógyszeripari, biotechnológia és az élelmiszeripar. A sómentesítési technológia során alkalmazott berendezéseket és rendszereket a program által biztosított kezelőfelület segítségével telepítettük a gyártási folyamatba. A programba beépítésre kerültek különféle reaktor modellek, kémiai komponenseket és elegyeket tartalmazó adatbázisok, illetve költségbecslő függvények. Elemezve a működési paramétereket, a technológia megvalósíthatóságát vizsgáltuk. Az alkalmazott technológia eredményeit vizsgálva, arra a következtetésre jutottunk, hogy a sómentesítési technológia sikeresen modellezésre került, továbbá az alkalmazott működési paraméterekkel, a gyártási technológia megtérülése kevesebb mint két év.

---

Milk and dairy products contain numbers of biologically active compounds (proteins, lipids, vitamins and minerals), those are essential for the human nutrition. Among the most common procedures for demineralization are based on ion exchange, nanofiltration and electro dialysis-based technologies. In this study, the application of membrane filtration based partial demineralization of milk was investigated, and the technology was modelled. Using the developed design equations, the partial demineralization technology was designed and the economy of the technology was calculated. The modelling and simulation of the partial demineralization process was carried out with the SuperPro Designer program. SuperPro Designer is a widely used simulation program for the pharmaceutical, biotech, chemical and food industry. As the first step the unit operations of the demineralization technology was defined using the tools of the program. The Super Pro Designer has industrial tools section with reactor models, chemical components, mixtures database and price estimations. Analyzing the influence of the operation parameters, the feasibility of the proposed technology was investigated. From the results of the modelling it can be concluded that the partial demineralization technology can be successfully carried out, achieving the expected demineralization rates with relatively good payback period of 2 years.

---

# Programozható struktúra folyamatrendszerek modellezésére

## *Programmable structure for process systems modelling*

**Béla Csukás, Mónika Varga**

*Kaposvar University, Research Group on Process Network Engineering*

*40 Guba S, Kaposvar, 7400, Hungary*

---

### **Összefoglaló**

A többskálás, multidiszciplináris folyamatrendszerek mérnöki analízise, tervezése és irányítása a már kialakult, terület-specifikus modellezési és szimulációs eszközök mellett újjelvű, könnyen összekapcsolható modelleket is igényel. Egy további aktuális feladat a nemlineáris differenciál és algebrai egyenleteken alapuló, alapvetően funkcionális, illetve a hálózatelemzésen alapuló, alapvetően strukturális megközelítések közötti köztes megoldást biztosító híd kiépítése. Jelen munka egy ilyen köztes módszert mutat be, mely általánosan alkalmazható a folyamatrendszerek szimulációs modelljének generálására.

A módszer a hálózat struktúra és egy-egy általános rendeltetésű állapot és változás meta-prototípus alapján automatikusan generálja a szimulációs modell programozható struktúráját. A grafikus (GraphML) modellben a meta-prototípusok alapján lehet megszerkeszteni a lokális programokat tartalmazó aktuális prototípusokat. A kezdeti értékekkel és paraméterekkel kiegészített strukturális modell biztosítja a „modell specifikus megmaradási mértékeken” alapuló additív mértékek és a „felülírható” jelek együttes használatát. A megoldás támogatja a lehetőségtér (design space) illetve az értékelő célfüggvények elemeinek az állapot és változás elemekbe való beépítését. Az általános interpreter először generálja az esetfüggő deklaratív modell adatbázist, majd végrehajtja a dinamikus szimulációt, miközben együttműködhet külső optimálós algoritmusokkal. Az alkalmazott változás-orientált modell reprezentáció révén az egyes funkcionalitások összes következménye együttesen kezelhető. Ez a tulajdonság segíti a többskálás modellek robusztus számítását egy általános rendeltetésű alapprogrammal, illetve támogatja a mérleg alapú és szabály alapú részmodellek együttes generálását és végrehajtását.

A programozható struktúrák alkalmazását különféle (a sejtbiológiai rendszerektől és táplálékhálózatoktól kezdve, speciális műveleti egységeken át, a nagyméretű agrár-környezeti hálózatokig terjedő) folyamatokra teszteltük. Jelen előadásban a módszert egy olyan egyszerűsített, többskálás biológiai rendszer példán mutatjuk be, amely a p53/miR34a signalling rendszer mennyiségileg kezelt reakció- és hatáshálózatát kapcsolja össze egy esemény- és idő-vezérelt szabály alapú patológiai folyamattal, egy mennyiségi/minőségi csatoló modellen keresztül.

### **Summary**

In addition to the well developed, field-specific modelling and simulation tools, the engineering analysis, design and control of multidisciplinary and multiscale process systems require also non-conventional, easily connectable models. Another up-to-date challenge is building bridge (or rather finding a compromise solution) between the basically functional approach of non-linear differential and algebraic equations and the basically structural approach of network analysis. This work introduces a generally applicable "intermediate" methodology for generation of simulation models for process systems.

The method automatically generates programmable structures for the simulation models, from a network structure and from two general purpose meta-prototypes of the state and transition elements. In the graphical (GraphML) model the locally programmable prototypes may be edited from the meta-prototypes. The initialised and parameterised structural model is prepared for the common consideration of "model specific conservation law based" additive measures and of the "over-writable" signals. The structure supports the embedding of the possibility (design) space, as well as the evaluating objectives into the state and transition elements. The general interpreter first generates the case-specific declarative model database, next executes the dynamic simulation that may collaborate with optional external optimizers.

In the applied transition oriented model representation, all of the causally coordinated consequences of the functionalities may be processed together. This feature supports the robust execution of the multiscale models by a general purpose core program. It makes also possible the unified, common generation and execution of the balance-based and the rule-based sub-models.

The programmable structures have been tested for various processes from cellular biosystems and food webs, through special technological units, to large-scale agro-environmental networks. In this presentation the methodology is illustrated by a simplified multiscale biosystem model, combining the quantitative reaction and influence network of p53/miR34a signalling system with the event- and time-driven, rule-based pathological process, through a quantitative/qualitative coupling model.

**WMA gumibitumenek reológiai vizsgálata**  
*Rheological investigation of WMA rubber-bitumen*  
**Déri Zsófia<sup>1</sup>, Gergő Péter<sup>1</sup>, Perlaki Róbert<sup>2</sup>, Dr. Geiger András<sup>3</sup>, Dr.  
Holló András<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>*Pannon Egyetem*

*Veszprém, Egyetem u. 10., 8200*

<sup>2</sup>*Magyar Közút Nonprofit Zrt.*

*Veszprém, Mártírok u. 1., 8200*

<sup>3</sup>*MOL Nyrt.*

*Százhalombatta, Olajmunkás u. 2., 2440*

---

**Összefoglaló/ Summary**

Az aszfaltgyártás során a konvencionálisnak tekinthető magas hőmérsékletű (HMA) technológiák energiafelhasználása nagy. Ez különösen a módosított bitumenek, köztük a gumibitumenek esetében fontos, mivel ezek nagyobb viszkozitásukból eredően magasabb keverési hőmérsékletet igényelnek. Ennek csökkentésének legjelentősebb módja az aszfaltmixek keverési hőmérsékletének csökkentése, amelyet a felhasznált bitumen kötőanyag viszkozitásának csökkentésével lehet elérni. A viszkozitás csökkentésének megoldására fejlesztették ki az úgynevezett meleg technológiákkal előállított warm-mix keverékeket (WMA).

A kísérleti munka célja különböző WMA adalékok (Sasolwax C80, Evotherm WM-30, Rediset LQ-1102CE, CECABase Rt Bio 10) alacsony hőmérsékleten való viselkedésének, alkalmazhatóságának vizsgálata volt a MOL Nyrt. és a Pannon Egyetem által kidolgozott módosított nedves eljárással készült gumibitumenben. Az eredmények kiértékelése során kísérletet tettünk a vizsgálatba bevont minták közötti különbségek feltárására, továbbá a hazai éghajlati viszonyokat reprezentáló teljesítményelvű bitumenviselkedési fokozat követelményeinek való megfelelés tisztázására is.

A vizsgálatok során meghatároztuk dinamikus nyíróreométerrel (DSR) az aszfaltgyártás során felhasználásra kerülő bitumenes kötőanyagok fáradási élettartamát jellemző  $G^*\sin\delta$  paramétert különböző hőmérsékleteken. A vizsgálat célja a SHRP teljesítményelvű bitumen követelményrendszer fáradási kritériumához tartozó hőmérséklet meghatározása volt.

Emellett különböző hőmérsékleteken vizsgáltuk a bitumenes kötőanyagok kúszási hajlítási merevségét és mértékét hasábhajlító reométerrel (BBR). Ennél a vizsgálatnál célunk a SHRP követelményrendszer alacsony hőmérsékletű repedési hajlamát jellemző kritériumhoz tartozó hőmérséklet meghatározása volt.

Vizsgáltuk még ezeken kívül dinamikus mechanikai analizátorral (DMA) a bitumenes kötőanyagok frekvenciafüggését is alacsony hőmérséklettartományban, felvettük a minták mestergörbéjét idő-hőmérséklet szuperpozícióval.

During asphalt production, the considered conventional high temperature (HMA) technologies have high energy consumption. This is particularly important for the modified bitumen, including of rubber bitumen, due to its high viscosity higher mixing temperature is required. The most significant way of the decrease is the reduction of mixing temperature of asphalt mixes, which could be achieved with the reduction of bitumen binder's viscosity. For the solution of viscosity reduction was evolved the so-called warm-mix blends (WMA).

The aim of the experimental work was the investigation of the behaviour and applicability of various WMA additives (Sasolwax C80, Evotherm WM-30, Rediset LQ-1102CE, CECABase Rt Bio 10) at cold temperatures in rubber-bitumen which made by the modified wet process developed by MOL Plc. and University of Pannonia. During the evaluation of the results we have attempted to explore the differences between the analysed samples, and to clarify the compliance with the performance-based binder requirements which representing the domestic climatic conditions as well.

$G^*\sin\delta$  value (which representing the fatigue behaviour of bituminous binders in asphalt pavement construction) was investigated at different temperatures in a Dynamic Shear Rheometer (DSR) to determine the temperature according to fatigue criteria of the performance related bitumen grading system (SHRP).

Besides flexural creep stiffness and m-value of bituminous binders were investigated at different temperatures in a Bending Beam Rheometer (BBR) to determine the temperature according to criteria representing low temperature cracking behaviour.

Frequency dependence was also examined at low temperature range to determine the master-curve of the samples in a Dynamic Mechanical Analyser (DMA) using time-temperature superposition method.

---

## “Effect of honey on barley flour supplemented pretzel”

Vinod Dhaygude<sup>1</sup>, Ildikó Szedljak<sup>1</sup>, László Somogyi<sup>1</sup> and Vikas Nanda<sup>2</sup>

1. Department of Grain and Industrial Plant Technology, Faculty of Food Science, Szent Istvan University, Villányi út 29-43, H-1118, Budapest, Hungary. □

2. Department of Food Engineering and Technology, SantLongowal Institute of Engineering and Technology, Longowal 148106, Punjab, India.

Corresponding author [vinod.dhaygude05@gmail.com](mailto:vinod.dhaygude05@gmail.com)

---

### Summary

Pretzels are low caloric, nutritious, tasty, cooked and baked products made from wheat dough most commonly found in a unique knot-like shape and are popular snack foods in many developed countries. The present study was conducted to develop pretzel by supplementing with barley flour and honey as a natural sweetener. Barley (*Hordeum vulgare* L.) is fourth most important cereal in the world which is an excellent source of many valuable nutrients e.g. soluble and insoluble dietary fibers. Barley has the ability to promote good consumer health through its nutritional components. For pretzel experimental design with wheat flour (50-80g), barley flour (20-40g) and honey (20-40%), as independent variables produced 20 different combinations that were studied using response surface methodology. A Central Composite Rotatable Design (CCRD) for three variables at three levels was used for experimental combinations and optimization of the process. The optimum solution obtained by numerical optimization technique for pretzel was 59.77g wheat flour, 29.88g barley flour, and 29.44% honey. Corresponding to the optimum condition of independent variables for pretzels, the predicted values of were 4202.43g hardness, 57.50% antioxidant activity, 74.33µg/ml total phenolic content and 7.62 overall acceptability respectively. The bakery product prepared by addition of honey in wheat –barley flour blend will have a significance increase in antioxidant activity (AOA), total phenolic content (TPC). Honey used in pretzel formulation increase the overall quality of the product and improve dough. Because of the addition of honey in flour blend lower hardness of baked food. Pretzels prepared by incorporating barley and liquid honey are good for consumers which want alternatives to fried snack foods.

**Keywords:** Barley, Honey, Response surface methodology (RSM), Optimization.

---



# Többfázisú rendszerek matematikai modellezési lehetőségei

## *Mathematical modelling of multiphase systems*

**Egedy Attila**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém Egyetem u. 10.*

---

### *Összefoglaló/ Summary*

Matematikai modellek a mérnöki munka szinte minden területén előfordulnak. Az adott feladathoz megfelelő komplexitású matematikai modell kiválasztásával megkönnyíthető a technológiák és berendezések tervezésének, valamint fejlesztésének, optimalizálásának folyamata. Többfázisú rendszerek esetén többféle modellezési megközelítés alkalmazható. Természetesen az, hogy éppen melyik módszer a megfelelő, nagyban függ az anyagi rendszertől, valamint a berendezés komplexitásától is. Előadásomban két esettanulmányon keresztül mutatom be a többfázisú rendszerek matematikai modellezésének lehetőségeit. Az első példarendszer egy folyadék-folyadék diszperzer, melynek optimalizálását numerikus áramlástan szimuláció segítségével végeztük el, míg a második rendszer egy porsiló (szilárd-gáz rendszer), melynek részletes modellezéséhez numerikus áramlástan és diszkrét elemes módszereket használunk fel. Az előadás során rávilágítok az egyes módszerek előnyeire, hátrányaira, valamint az alkalmazhatósági korlátaira is.

**Kulcsszavak:** többfázisú rendszer, numerikus áramlástan, diszkrét elemes módszer, diszperzer, porsiló

Mathematical models are widely used in almost every engineering related field. The development, design and optimisation of technologies and devices can be supported with an adequate mathematical model. There are multiple modelling approaches, when a multiphase system is examined. The method depends on the complexity of the device, and the system. In my presentation I would like to show different modelling methods for multiphase systems using two different case studies. The first case study is a liquid-liquid disperser, where computational fluid dynamics was used for the optimisation of the device. The second case study is a silo, where discrete element and computational fluid dynamic methods were used. I will show the advantages and disadvantages and the application limits for each method too.

**Keywords:** multiphase system, computational fluid dynamics, discrete element method, disperser, silo

---

# BioJET komponensek előállítása különböző átmenetifém/hordozó katalizátorokon

*Production of BioJET components on different transition metal/support catalysts*

**Eller Zoltán, Hancsók Jenő**

*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, VMFI, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék*

*8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## Summary

Recent demands for jet fuels has a significant grow in the last decades. According to this, crude oil companies and different research groups start to handle, what are the possibilities of produce kerosene fraction able to drive jet engines from non-fossil sources. At the same time, production of modern, environmental friendly jet fuel with high energy content and proper working in the conditions of an operating jet engine with moderate modification of the existing refinery technologies according to the more stricting prescriptions.

There are many solutions to produce jet fuel from alternative sources, but confirmation of quality and performance properties and compatibility with the actual aircrafts and fuel supply systems of these alternative fuels is very important. We present an overview about the production and product properties of jet fuels from different sources (carbohydrates, lignocellulose, edible and non-edible vegetable oils, animal fats, wastes).

We studied production possibilities of alternative jet fuel components from different natural triglycerides and from their mixtures with kerosene on different transition metal/support catalysts in a great laboratorial, high pressure reactor system in continuous mode during our experiments. We studied the effects of process parameters (temperature: 280 – 380°C; pressure: 30 bar; liquid hourly space velocity: 1.0 – 3.0 h<sup>-1</sup>; H<sub>2</sub>/feedstock volume ratio: 400 – 600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>; triglyceride concentration of feedstock: 10-100%) to the yield, quality and performance properties of the target products (JET fuel, kerosene boiling point range fraction).

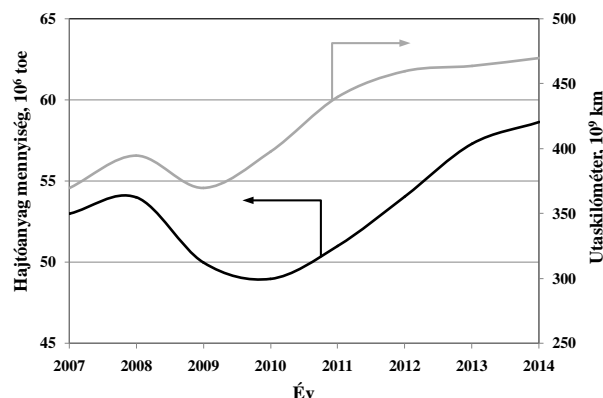
We determined based on the experimental results, the most suitable triglycerides for jet fuel production have fatty acids with the same carbon number than the kerosene fraction. Jet fuel blending components can be obtained from these triglyceride containing feedstocks with high yield (90-95%), what have low aromatic content, excellent combustion properties (smoke point >35 mm) and their combustion products damage the environment less.

---

## Bevezetés

A közlekedés és a szállítás energiaigénye 2040-ig 60%-kal fog növekedni az előrejelzések alapján. Ennek köszönhetően az IATA szerint a légi közlekedés is növekedni fog. Ehhez kapcsolódóan a sugárhajtómű üzemanyagok iránti igény is nőni fog. Ezen kívül a sugárhajtómű üzemanyagok minőségével szemben támasztott minőségi követelmények is szigorodtak. Ezt részben az egyre fokozódó környezetvédelmi előírások, részben pedig a növekvő teljesítmény jellemzők okozták. A jó égési tulajdonságú sugárhajtómű üzemanyagok előállítására ma már csökkentett aromástartalmú szénhidrogén frakciókat is használni kell [1,2].

A gazdasági világválságot követő években világszerte megnőtt a sugárhajtómű üzemanyagok iránti kereslet (1. ábra) [1,2]. Ennek oka a válság hatásának múlása, továbbá a légi személy- és áruszállítás egyre szélesebb körben való elterjedése. A légi közlekedés nemcsak a szállítás, hanem a világ gazdaság egészének egyik leggyorsabban fejlődő területe. Például a világ egyik leggyorsabban növekedő gazdaságával rendelkező Kína a világ légi közlekedésének 11%-át teszi ki. A légi közlekedés 2012-ben az Egyesült Államok közlekedésében felhasznált energiaforrások 11,2 %-át használta fel, és ez egyúttal a közlekedés által okozott üvegházhatású gáz kibocsátás 8,3 %-át jelentette [2,3,4].



**1. ábra** Európa sugárhajtómű üzemanyag igénye és a világon légi közlekedéssel megtett utaskilóméterek mennyisége

Az Európai Unió a korábbi években már irányelveket fogalmazott meg a közúti közlekedés károsanyag kibocsátásának csökkentésére, valamint a megújítható forrásból származó motorhajtóanyagok alkalmazására. Ezek folytatásaként a közelmúltban az EU és az IATA (Internatioanl Air Transport Association) direktívákat fogalmazott meg a légi közlekedés energiahatékonysága, és a biosugárhajtómű üzemanyag(ok) felhasználásának növekedése érdekében. Ezen direktívák meghatározó pontjai a következők [1-4]:

- IATA direktívák:
  - 1,5%/év energiahatékonyság növekedés a sugárhajtómű üzemanyagok terén
  - 50 %-os károsanyag-kibocsátás csökkentés 2050-re
  - $2 \cdot 10^6$  t/év bioeredetű sugárhajtómű üzemanyag felhasználás az Európai Unióban 2020-ra.

A fentiek alapján célszerű olyan kutatásokat végezni, amelyek megújítható forrásból származó, tisztán égő és nagy energiataralommal rendelkező sugárhajtómű üzemanyagok előállítására irányulnak. Környezetbarát (kis kén- és aromástartalmú) sugárhajtómű üzemanyagok előállíthatóak például [5-11]:

- Kőolajokból:
  - desztillációval és hidrogénezéssel (kéntelenítés)
  - nehézzolaj frakciók hidrokrakkolásával (pl.: vákuum gázolaj)
- Megújítható alapanyagból:
  - természetes/hulladék trigliceridek/zsírsavak katalitikus krakkolásával
  - természetes/hulladék trigliceridek speciális hidrokrakkolásával (hidrogénezés)
  - bioeredetű szintézisgázokból Fisher-Tropsch szintézissel
  - lignocellulózokból származó egyszerű cukrok hidrogénezésével, stb.

A légi közlekedésben biztonsági okokból lényegesen nagyobb az ellenállás az alternatív forrásokból származó hajtóanyag felhasználásával szemben a közúti közlekedésben használatos alternatív hajtóanyagokhoz képest. Ezt elsősorban a repülés során fennálló rendkívüli körülmények okozzák (nagyon alacsony hőmérséklet, nagy távolságok megtétele egy felszállással). Ezen kívül az alternatív hajtóanyagoknak összeférhetőnek kell lenniük a hagyományos hajtóanyagokkal, hogy ne okozzanak problémákat a repterek logisztikájában. Természetesen az alternatív forrásból származó hajtóanyagoknak összeférhetőnek kell lenniük a jelenlegi sugárhajtóművekkel és az érintkező szerkezeti anyagokkal is. Napjainkban a sugárhajtómű üzemanyagokat

különböző eredetű kőolajokból állítják elő. A növekvő kereslet miatt azonban egyre több alternatív alapanyagforrást is figyelembe kell venni [8, 12].

A sugárhajtómű üzemanyagok előállításánál törekedni kell a nagy hidrogén/szén arányú komponensek előállítására, tehát az n- és izoparaffinok, valamint cikloparaffinok előállítására. Az izoparaffinok a legalacsonyabb fagyáspontúak, és – a n-paraffinokkal együtt – tisztán égnek. A cikloparaffinok hidrogén-szén aránya ugyan kisebb, de energiatartalmuk egyes esetekben meghaladja az n- és i-paraffinokét. Ezen komponensek jó égési tulajdonságokkal rendelkeznek és alkalmasak nagy magasságokban való repülésre anélkül, hogy kristályokat képeznének. A kis hidrogén/szén arányú komponensek, mint az aromás szénhidrogének koncentrációját csökkenteni kell a sugárhajtómű üzemanyagokban rossz lángjellemzőik miatt, amely lerakódást okoz a hajtóműben. A hagyományos sugárhajtómű üzemanyagok nagy mennyiségű aromás szénhidrogéneket tartalmazhatnak ( $\leq 25\%$ ), továbbá kéntartalmuk 3000 mg/kg lehet. Ezen komponensek rontják a sugárhajtómű üzemanyagok minőségét lerakódás képzési tulajdonságaik, továbbá a repülőgépek károsanyag kibocsátásához való nagymértékű hozzájárulásuk miatt [8, 12].

### **Kísérleti tevékenység**

Kísérleti munkánk célja biokomponens-tartalmú sugárhajtómű üzemanyag előállítása volt hulladék kókuszolaj és kőolajeredetű petróleumfrakció heterogén katalitikus együttes feldolgozásával. A kísérletek során vizsgáltuk a különböző részarányban hulladék trigliceridet tartalmazó petróleumfrakciók átalakíthatóságát, továbbá a műveleti paraméterek hatását a cseppfolyós termékek hozamára és minőségére.

### **Kísérleti berendezés, alkalmazott anyagok**

A hidrogénező heterogén katalitikus kísérleteinket egy olyan reaktorrendszerben végeztük, amely tartalmazta azokat a legfontosabb készülékeket és gépegységeket, amelyek az iparban egy hidrogénező üzem reaktorkörében is megtalálhatóak. A reaktor középső szakaszába  $80 \text{ cm}^3$  katalizátort töltöttünk [8].

A következőkben bemutatásra kerülő kísérletek során az iparban is alkalmazott, nagy hidrogénező aktivitással rendelkező, szulfidált állapotban aktív katalizátorokat  $[\text{Co}(2,9\%)\text{Mo}(13,5\%)/\text{Al}_2\text{O}_3, \text{Ni}(2,2\%)\text{Mo}(15,2)/\text{Al}_2\text{O}_3]$  alkalmaztunk. Ezeket a katalizátorokat több, különböző összetételű katalizátoron végzett előkísérletek eredményei alapján választottuk ki. A szulfidálást „in situ” módon, kéntartalmú alapanyag felhasználásával végeztük el.

A triglicerid alapanyag kiválasztása során fontos szempont, hogy a triglicerid láncokból a lehető legkisebb veszteséggel keletkezzen a sugárhajtómű üzemanyagok szénatomszámtartományába eső paraffin. Így a kísérleteink során indonéz eredetű hulladék kókuszolajat alkalmaztunk, mivel ennek zsírsavösszetétele jellemzően főleg az elvárt szénatomszám tartományba esik (1. táblázat). A hidrogénezés során 10%, 30% és 50% hulladék kókuszolajtartalmú petróleum frakciót (2. táblázat) használtunk fel alapanyagként.

**1. táblázat.** Az alapanyagként alkalmazott kókuszolaj jellemző zsírsavösszetétele és tulajdonságai.

Minőségi jellemzők	Kókuszolaj
Sűrűség (15°C), g/cm <sup>3</sup>	0,9231
Kinematikai viszkozitás, 40°C, mm <sup>2</sup> /s	27,83
Víztartalom, mg/kg	647,8
Zsírsavösszetétel, %	
C8:0	7,73
C10:0	6,08
C12:0	46,98
C14:0	17,90
C16:0	8,86
C18:0	2,88
C18:1	6,46
C18:2	1,63
Egyéb	1,47
Oxigéntartalom (számított), %	14,57

**2. táblázat.** A felhasznált petróleum főbb minőségi jellemzői.

Minőségi jellemzők	Kéntartalmú petróleum
Sűrűség, g/cm <sup>3</sup>	0,7956
Kéntartalom, mg/kg	1182
Kristályosodási pont, °C	-60
Aromástartalom, %	
egy-gyűrűs	20,5
kétgyűrűs	2,9
Engler-desztillációs görbe, °C	
Kezdőforráspont	166
10 v/v%	177
30 v/v%	182
50 v/v%	189
70 v/v%	198
90 v/v%	213
Végforráspont	221
Paraffinösszetétel, % (GC)	
C10	2,73
C11	21,63
C12	34,29
C13	28,17
C14	13,18

A kísérletek során a katalizátor szulfid állapotának fenntartása érdekében az alapanyaghoz annyi – a reakciók körülményei között könnyen bomló – dimetil-diszulfidot adagoltunk, hogy a petróleum frakció kéntartalmával együtt az alapanyagok kéntartalma 1000 mg/kg legyen.

Az alapanyag összetétel hatásán kívül vizsgáltuk a műveleti paramétereknek cseppfolyós termékhozamot- és minőséget befolyásoló hatását ( $T = 280\text{--}380^\circ\text{C}$ ), LHSV: 1,0 – 3,0 h<sup>-1</sup>). A H<sub>2</sub>/alapanyag térfogatarány 600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup> volt, amely értéket úgy választottuk meg, hogy az meghaladja az elméleti érték kétszeresét, míg a nyomást (30 bar) az ipari petróleum hidrogénező üzemek nyomástartományába eső értékének választottuk.

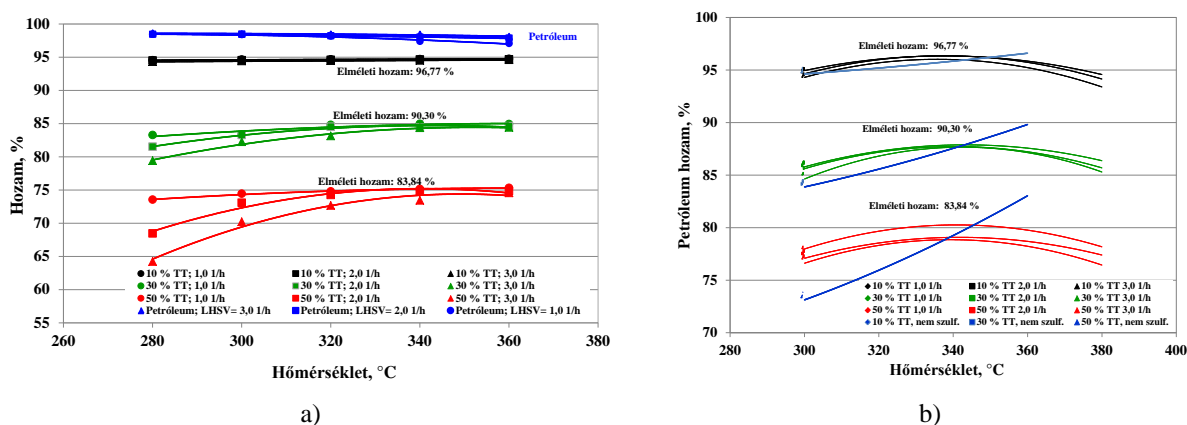
### Kísérleti eredmények és értékelésük

A következőkben bemutatjuk és értékeljük a heterogén katalitikus hidrogénezés során előállított cél- és melléktermék hozamait, valamint a céltermék minőségi jellemzőit a műveleti paraméterek változásának függvényében.

A hőmérséklet növelésének hatására valamennyi kísérletsorozat során nőtt a céltermék petróleumfrakció hozama, mivel egyre nagyobb mennyiségű triglicerid/zsírsav alakult át a hidrogénezés hatására, melynek során

főként petróleum forrásponntartományba eső paraffinok keletkeztek. Az alapanyag triglicerid tartalmának növelésével a céltermék frakció mennyisége ugyanakkor csökkent. Ennek oka, hogy a kókuszoilajból nemcsak petróleum, hanem gázolaj frakció is keletkezik, továbbá a HDO és DCOx reakciók jelentős tömegvesztéssel is járnak ( $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $C_3H_8$  keletkezés). A műveleti paraméterek szigorításával azonban valamennyi különböző trigliceridtartalmú alapanyag esetén nőtt a céltermék frakció hozama.

A hozamértékek a  $NiMo/Al_2O_3$  (2/a). ábra) és  $CoMo/Al_2O_3$  (2/b). ábra) katalizátorokon, kókuszoilajtartalmú alapanyagokkal végzett kísérletsorozatok közül enyhébb műveleti paraméterek esetében a  $NiMo/Al_2O_3$  katalizátoron keletkezett nagyobb mennyiségű céltermék, ami a már ezen körülmények között jelentősebb mértékben lejátszódó HDO reakciók következménye. Szigorúbb műveleti paramétereknél a  $CoMo/Al_2O_3$  katalizátoron nagyobb céltermékhozamot értünk el.



2. ábra Céltermékek hozamának változása a műveleti paraméterek függvényében

(P: 30 bar,  $H_2$ /alapanyag térfogatarány:  $600 \text{ Nm}^3/\text{m}^3$ , TT: trigliceridtartalom)

Az eddig tárgyalt frakción kívül jelentős mennyiségben keletkezett benzin- és gázolaj forrásponntartományba eső cseppfolyós termék is mindkét katalitikus rendszer esetében (3. Táblázat). A táblázat adatai alapján megállapítható, hogy a hőmérséklet növelésével a könnyűtermék hozama valamennyi esetben növekedett. Ennek oka a hosszabb szénláncú vegyületek krakkolódása. A gázolaj frakció hozama az átmenetifém/hordozó katalizátorok esetében szintén nőtt, bár ezen frakció legnagyobb koncentrációban  $340^\circ\text{C}$ -on volt jelen,  $360^\circ\text{C}$ -on már a krakkolóadás miatt enyhe csökkenést mutatott.

3. táblázat A különböző kísérletsorozatok során elért könnyűtermék- és gázolajhozamok

Katalizátor	$NiMo/Al_2O_3$	$CoMo/Al_2O_3$
Hőmérséklet, $^\circ\text{C}$	280 → 360	280 → 360
Folyadékterhelés, $\text{h}^{-1}$	3,0 → 1,0	3,0 → 1,0
Könnyűtermék hozam, %	0,3 – 1,3	1,0 – 3,5
Gázolaj hozam, %	0,5 – 4,3	0,5 – 3,1

Vizsgáltuk a termékek fontosabb alkalmazástechnikai jellemzőit is, a kristályosodási pontot és a nemkormozó lángmagasságot. A  $NiMo/Al_2O_3$  és  $CoMo/Al_2O_3$  katalizátorok esetében az alapanyag trigliceridtartalmának növelésével a keletkezett petróleumfrakciók kristályosodási pont értékei növekedtek. Ennek oka, hogy a nagyobb mennyiségű trigliceridből nagyobb koncentrációban keletkeztek n-paraffinok a hidrogénezés során, amelyek fagyáspontja magas. A keletkezett termékeket izomerizálni kell, amely eredményeképpen már megfelelő minőségű termék állítható elő.

A nemkormozó lángmagasság értékei az égési tulajdonságokra adnak felvilágosítást, és szoros összefüggésben állnak az aromástartalommal. A keletkező n-paraffinoknak és cikloparaffinoknak, amelyek egyrészt a trigliceridek hidrogénezéséből, másrészt az alapanyag aromástartalmának telítődéséből származnak, nagyon magas nemkormozó lángmagasság értékeik vannak. Az átmenetifém/hordozó katalizátorokon nagy (>30 mm) nemkormozó lángmagasságú termékeket sikerült előállítani, amelyek megfelelnek az MSZ 10870:2012 szabvány előírásának.

**4. táblázat** A különböző kísérletsorozatok során nyert petróleumfrakciók alkalmazástechnikai tulajdonságai

Katalizátor	NiMo/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CoMo/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MSZ 10870:2012
Alapanyag trigliceridtartalma, %	10 → 50	10 → 50	-
Hőmérséklet, °C	360 → 280	360 → 280	-
Kristályosodási pont, °C	-40 – (+5)	-42 – (+4)	max. -47
Nemkormozó lángmagasság, mm	29 – 43	28 – 44	min. 25

## Összefoglalás

Kísérleti munkánk során biokomponenstartalmú sugárhajtómű üzemanyag előállítási lehetőségeit vizsgáltuk különböző átmenetifém/hordozó katalizátorokon, hulladék kókuszolaj trigliceridek/szabad zsírsavak (10, 30, 50%) és kőolajeredetű petróleum (90, 70, 50%) elegyeinek heterogén katalitikus hidrogénezésével. Az előállított termékelemek nagy részarányban (90% felett) tartalmaztak sugárhajtómű üzemanyag forrásponttartományba eső paraffin szénhidrogéneket, kéntartalmuk jelentősen csökkent, egyes esetekben 10 mg/kg-nál is kisebb érték volt. A kedvező műveleti paraméter tartományban (340°C, 30 bar, 1,0-2,0 h<sup>-1</sup>, 10-30% trigliceridtartalom, 600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>) nemkormozó lángmagasság értékeik (30 – 45 mm) megfelelnek a szabványban előírtaknak, a kristályosodási pont értékek alapján a keletkezett céltermékeket azonban még izomerizálni kell az alacsonyabb, legfeljebb -47°C elérésére.

## Irodalomjegyzék

- [1] Eurostat pocketbooks – Energy, transport and environment indicators, 2011. p. 57.
- [2] IATA 2013 Report on Alternative Fuels, 8th edition, 2013 december
- [3] Directive 2009/28/EC of the European Parliament and of the Council, 2009, Official Journal of the European Union, (2009), L 140/16-61.
- [4] E. Nygren, K. Aleklett and M. Höök “Aviation fuel and future oil production scenarios” Energy Policy, vol. 37, pp. 4003-4010., 2009.
- [5] S. Blakey, L. Rye, C. W. Wilson “Aviation gas turbine alternative fuels: A review”, in Proc. Combustion Institute, 2011, pp 2863-2885.
- [6] X. Hui, K. Kumar, C-J. Sung, T. Edwards, D. Gardner: “Experimental studies on the combustion characteristics of alternative jet fuels” Fuel, 2012, 98, 176-182
- [7] M. Rumizen „Qualification of Alternative Aviation Fuel”, ICAO Aviation and Sustainable alternative fuels workshop, Montreal, Canada, October 18-20., 2011.
- [8] Eller, Z., Papp, A., Hancsók, J.: „Production of Jet Fuel from Alternative Source”, 9<sup>th</sup> International Colloquium Fuels, January 15-17. 2013., Germany, Stuttgart/Ostfildern, In Proceedings (ISBN 98-3-943563-04-7), 543-550.
- [9] Eller Z., Varga Z., Hancsók J.: „Production of Jet Fuel from Renewable Source Material”, Chemical Engineering Transactions, 35(2) (2013), 1057-1062.
- [10] P. Kallio, A. Pasztor, M.K. Akhtar, P. R. Jones, Renewable jet fuel, Current Opinion in Biotechnology, 26 (2014), 50-56.
- [11] Hancsók, J., Krár, M., Magyar, Sz., Boda, L., Holló, A., Kalló, D.: „Investigation of the production of high cetane number biogasol from pre-hydrogenated vegetable oils over Pt/HZSM-22/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>”, Microporous and Mesoporous Materials, 101(1-2) (2007), 148-152.
- [12] C. J. Chuck, J. Donnelly, The compatibility of potential bioderived fuels with Jet A-1 aviation kerosene, Applied Energy, 118 (2014), 83-91.

# **Frukto-oligoszacharidok kvantitatív analízise mesterséges neuronhálóval kiegészített spektroszkópiás módszerrel**

*Monitoring the production of fructo-oligosaccharides by UV spectrophotometry coupled with artificial neural networks*

**Erdős Balázs<sup>1</sup>, Maarten Grachten<sup>2</sup>, Kovács Zoltán<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Élelmiszeripari Műveletek és Gépek Tanszék, Szent István Egyetem,  
Budapest, Hungary

<sup>2</sup>Department of Computational Perception, Johannes Kepler Universität,  
Linz, Austria

Egyre növekvő igény figyelhető meg a prebiotikummal dúsított élelmiszerek iránt. A frukto-oligoszacharidok (FOS) prebiotikus hatású szénhidrát polimerek, melyek előállítására ipari körülmények közt főként szacharózból, enzimreakción keresztül történik. Az előállított termék szénhidrát összetételének meghatározását jellemzően laboratóriumi HPLC berendezések segítségével végzik, amelyek nagy pontosságúak és robusztusak, azonban az analízis időigénye jelentős. A komplex biológiai eljárás miatt, szükség van egy olyan szénhidrát összetétel meghatározó módszerre, amely ipari környezetben gyorsan, akár valós időben szolgáltat információt a termék kompozíciójáról. Így, lehetőség nyílna a folyamat valós idejű nyomon követésére. A jelen munkában egy FOS összetétel meghatározására képes gyorsmódszer fejlesztését végeztük el, amely gyorsan és könnyen mérhető UV spektrum mesterséges neuronhálóval történő feldolgozásán alapszik. A neuronháló tanításához szükséges minta adathalmazt enzimes membrán reaktor működtetésével generáltuk. Mértük a minták szénhidrát összetételét és UV spektrumát, majd az így nyert adathalmazból neurális hálózat tanításán keresztül modellt építettünk. A modellt ismeretlen minták segítségével validáltuk. Eredményeink alapján a fejlesztett módszer sikeresen alkalmazható FOS termelés on-line nyomon követésére.

There is a growing need for commercially available fructo-oligosaccharides (FOS) to be used in food products. FOS are produced via enzyme reactions, and thus require strict supervision to stay productive. Currently, saccharides determination is carried out by chromatographic methods that are very accurate and reproducible, but also convey considerable delay from sampling to acquiring the results. Due to the use of complex biological procedures in FOS production, a more rapid, possibly on-line method is needed to trace the course of the enzyme reaction. The development and evaluation of an artificial neural network (ANN) assisted spectrophotometric method for FOS determination was carried out in this work. Samples to be used for training an ANN were generated through operating an enzyme membrane reactor. Saccharides composition and UV spectra of the generated samples were recorded, and a two-layer feedforward neural network was designed in Matlab environment to find and learn the relation between saccharides composition and UV spectra. The trained network was then validated by using new observations that were not involved in the training. According to the results, the proposed method has a great potential to be implemented as an on-line monitoring tool in FOS production.

## **Acknowledgement**

The preparation of this work was supported by the Marie Skłodowska-Curie grant of the EU FP7 Framework Programme (PCIG11-GA-2012-322219) and the Bolyai Scholarship Programme of the Hungarian Academy of Sciences.



# Vegyes élesztőkultúra és néhány fermentációs eljárás hatása a tejsavópor alapú etanol előállítására

*Effect of co-culture and different fermentation processes on cheese-whey powder based ethanol production*

**Farkas Csilla, Kerepesi Veronika, Schubert Bianka, Rezessyné Szabó Judit, Nguyen Duc Quang**

*Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi Kar, Sör- és Szeszipari Tanszék  
1118 Budapest, Ménesi út 43-45.*

---

## Összefoglaló/ Summary

A sajt-, a túró- és a kazein gyártás során éves szinten nagy mennyiségben keletkező, és jelentős szárazanyag tartalommal (elsősorban laktóz) rendelkező tejsavó, illetve tejsavó permeátum hasznosítására számos alternatív, értéknövelt technológia áll rendelkezésre. Jelen kutatómunka a termotoleráns laktóz-pozitív *Kluyveromyces marxianus* NCAIM Y.00659 élesztő törzs és a Levuline Fb típusú szárított *Saccharomyces cerevisiae* fajélesztő társíthatóságának vizsgálatára, illetve a szakaszos, rátáplálásos és folytonos erjesztési eljárások hatékonyságának összehasonlítására irányult. A szakaszos erjesztési eljárásoknál a két élesztő törzs 3:1 arányú társítása mellett a kezdeti 17,5 (m/v) % édes tejsavópor laktóz tartalmának közel 72 %-a alakult át etanollá. A cefre etanol tartalma 57,2 g/L volt az erjesztés 144. órájában. Az erjesztési hatékonyság további növekedését eredményezte a 15 (m/v) % szubsztrátum rátáplálása, illetve a laktóz-pozitív élesztő törzs szaporító közegének 0,5 (m/v) % édes tejsavóporral történő kiegészítése. Ezen esetben az etanol koncentráció elérte a 64,7 g/L értéket. A vegyes élesztőkultúra időben eltöltött rátáplálása hatékonyabb laktóz hasznosítást eredményezett, a vegyes élesztőkultúra a laktóz tartalom 88%-át hasznosította, az etanol koncentráció 70,2 g/L volt. A folytonos erjesztési eljárás modellezése során a laboratóriumi méretű töltött ágyas bioreaktor hordozói: a SIRAN Sikug® 035/xx/300/A porózus gyöngy és az előkezelt sörtörköly, a vegyes élesztőkultúrát hatékonyan rögzítették, az eddig elért maximális produktivitás 4,1-5,6 g/Lh között alakult 0,14 1/h hígítási sebesség és 10 (m/v) % tejsavópor koncentráció mellett.

Whey or whey permeate is a nutrient-rich co-product of cheese making and casein manufacture in the dairy industry, which could be utilized as a valuable source for biotechnology, food and pharmaceutical products. The aim of this study was to examine the effects of mixed culture fermentation of cheese whey powder (CWP) in batch, fed-batch and continuous fermentation process. Mixed culture of thermotolerant lactose-positive *Kluyveromyces marxianus* NCAIM Y.00659 and Levuline Fb type dried *Saccharomyces cerevisiae* in ratio of 3:1 reached 72.3 % of lactose conversion and 57.2 g.L<sup>-1</sup> of ethanol content at 17.5 %, w/v of CWP concentration at 144 hours of batch fermentation. Further increase was observed in ethanol content (64.7 g.L<sup>-1</sup>) at a frequency of 24 hours fed-batch process with 15 %, w/v CWP concentration and supplementation of inoculum with 0.5 %, w/v CWP solution. When different mixed culture inoculation procedures were investigated instead of substrate feeding, the highest ethanol content was about 70.2 g.L<sup>-1</sup>, while lactose conversion was 88 %, approximately. During continuous fermentation, the bioreactor was filled with immobilized yeast cells on two carriers: SIRAN Sikug® 035/xx/300/A porous beads and pretreated spent grains. The maximum productivity was about between 4.1 g.L<sup>-1</sup>h<sup>-1</sup> and 5.6 g.L<sup>-1</sup>h<sup>-1</sup> at 10 % (w/v) CWP solution in continuous feed at a dilution rate of 0.14 h<sup>-1</sup>.

# Szabályozott hatóanyagleadású biokompatibilis és biológiailag lebontható interferon-béta tartalmú kompozit részecskék fejlesztése

Development of interferon-beta loaded biocompatible and biodegradable nanocomposites for sustained release

Fodorné-Kardos Andrea<sup>a,b</sup>, Feczko Tivadar<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup>Pannon Egyetem MIK Műszaki Kémiai Kutatóintézet, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

<sup>b</sup>MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag-és Környezetkémiai Intézet, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

<sup>c</sup>Department of Medicine I, Goethe University Frankfurt, Theodor-Stern-Kai 7, 60590, Frankfurt am Main, Németország

---

## Összefoglaló

A nyújtott hatóanyagleadású parenterális készítmények alkalmazása a gyógyszerek dózisének és ezzel együtt az injekciók gyakoriságának jelentős csökkenését eredményezheti, ami a mellékhatások és a toxicitás jelentős mérséklésével együtt a betegek kényelemérzetét növelheti. A szabályozott hatóanyagleadású biokompatibilis és biológiailag lebontható interferon-béta tartalmú kompozit részecskék előállítása a szklerózis multiplex kezelésében alkalmazott formátumok hatékonyságának javítását célozta meg. Az interferon béta csökkenti a relapszusokkal-remissziókkal járó definitív szklerózis multiplexes betegek tüneteit.

A munka kezdeti szakaszában előkísérleteket végeztünk bovin szérum albumin modellfehérjével olyan <200 nm átlagos méretű kompozit részecskék előállítására, amelyek megfelelő kapszulázási hatékonysággal zárják magukba a fehérjét. A részecskék abban az esetben képesek hosszabb ideig elkerülni a makrofágokat és a véráramban keringeni, amennyiben a méretük nem haladja meg a 200 nm-t. A fehérjék mikrokapszulázása az egyik leghatékonyabb előállítási eljárással, az összetett emulziós-oldószer elpárologtatásos/diffúziós módszerrel történt. Három különböző molekulatömegű poli(tejsav-glikolsav) (PLGA) hordozó polimer, ill. két különböző pegilált poli(tejsav-glikolsav) (PEG-PLGA) jelenlétében készítettünk nanorészecskéket. Vizsgáltuk a kapszulázó polimer koncentrációjának, az ultrahangos kezelés körülményeinek (pl. a geometriának, az ultrahang erősségének és az idejének) és az emulgeáló oldat koncentrációjának az átlag szemcseméretre gyakorolt hatását. A megfelelő átlag szemcseméretű minták esetében meghatároztuk a nem kapszulázott fehérje mennyiségét mikro BCA módszerrel, amelyből számítottuk a kapszulázási hatékonyságot. A kapszulázási hatékonyság 28%-tól 95%-ig változott. A kísérletek során alkalmazott polimer koncentrációk esetében összefüggést állapítottunk meg a mikrokapszulák szemcsemérete és a kapszulázási hatékonyság között. A fenti paraméterek változtatásával optimalizáltuk a kísérleti körülményeket. A modellkísérletek alapján mind PLGA, mind PEG-PLGA polimerrel sikeresen, 80-90% kapszulázási hatékonysággal állítottunk elő aktív hatóanyagot, humán interferon-bétát tartalmazó 160-170 nm átlag szemcseméretű részecskéket. A mikrokapszulák in vitro hatóanyagleadási kinetikáját vérplazmában 37°C hőmérsékleten vizsgáltuk. A fenti eredményeket felhasználva az in vivo leadási kinetika vizsgálatokhoz patkány interferon-béta mikrokapszulázását irányoztuk elő. Mindezen tapasztalatok alapot jelentenek további új típusú biokompatibilis és biológiailag lebontható polimer hordozók alkalmazhatóságának vizsgálatára.

## Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetet mondanak a Richter Gedeon Nyrt. (Richter 2015 RG-IPI-2015-TP9/015 témapályázat) és a GINOP-2.3.2-15-2016-00017 számú GINOP program támogatásáért.

---

# **NAD<sup>+</sup> kofaktor elektrokémiai regenerálása**

*Electrochemical regeneration of NAD<sup>+</sup> cofactor*

**Frank Tamara, Tóth Gábor, Nemestóthy Nándor**

*Pannon Egyetem, Biomérnöki Membrántechnológiai és Energetikai Kutató Intézet  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## **Összefoglaló**

A NAD<sup>+</sup> kofaktor számos oxido-reduktáz enzim működéséhez elengedhetetlen, mint például az alkohol-dehidrogenáz. A kofaktor függő enzimekatalizált reakciók ipari megvalósításához alapvetően szükséges ezen kofaktorok regenerálása. Az elektrokémiai regenerálás ígéretes alternatívának tűnik a probléma megoldására.

A kutatás során a szén-dioxid metanollá történő átalakítását vizsgáltuk, amely teljes egészében megvalósítható enzimek által katalizált rendszerben is. A konverzió megvalósítását egy háromlépéses, biokatalizált reakció sorozat végzi, amelyben a szén-dioxid formiát és formaldehid köztitermékeken keresztül alakul metanollá, formiát dehidrogenáz (FateDH), aldehid dehidrogenáz (AldDH) és alkohol dehidrogenáz (ADH) enzim segítségével. A három részlépés mindegyikéhez a nikotinamid-adenin-dinukleotid kofaktor redukált formája (NADH) szükséges.

A NAD<sup>+</sup> kofaktor redukálásához az elektrokémiai regenerálást tanulmányoztuk, ahol egy elektrolizáló cella segítségével kívántuk visszaalakítani NADH-vá. A folyamat megvalósításához célunk volt egy ön alapú elektród kialakítása, illetve a NADH kofaktor elektrokémiai tulajdonságainak a megismerése, köztük a ciklikus voltammogramjának a felvétele.

## **Summary**

NAD<sup>+</sup> cofactor is essential for functioning of many oxido-reductase enzymes, such as alcohol dehydrogenase. For the industrial application of cofactor-dependent, enzyme-catalyzed reactions it is necessary the regeneration of these cofactors. The electrochemical regeneration seems a promising alternative to solve the problem.

In this research the conversion of carbon dioxide to methanol was studied, which can be completed by enzymes in a three step series via formate and formaldehyde by using formate dehydrogenase, aldehyde dehydrogenase and alcohol dehydrogenase. All of the three steps need the reduced form of nicotineamide adenine dinucleotide cofactor (NADH).

For the reduction of NAD<sup>+</sup> electrochemical regeneration in an electrolysis cell was studied. Our aim was to construct a special tin electrode for the regeneration, moreover to learn the electrochemical behaviour of NADH cofactor by a cyclic voltammetric method.

---

## **Köszönetnyilvánítás**

Szeretnék köszönetet mondani az Emberi Erőforrások Minisztériumának hogy az Új Nemzeti Kiválóság Program keretein belül támogatta a kutató munkámat.

# Szakaszos folyamatok ütemezése P-gráf módszertannal: Közbülső tárolás modellezése

*Batch process scheduling by P-graphs: Modeling intermediate storages*

**Frits Márton, Bertók Botond**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## *Összefoglaló/ Summary*

Korábbi munkánk során megmutattuk, hogy szakaszos folyamatok ütemezése leírható időkorlátos folyamathálózat-szintézis feladatként, ahol a folyamat lépéseiként reprezentáljuk egy berendezés feladathoz rendelését ugyanúgy, mint egy feladat végrehajtását és a berendezés szabaddá válását a feladat végrehajtása után. Az összes lehetséges hozzárendelés és feladatok közti váltás megadásával egy olyan szuperstruktúrához jutunk, mely részeként tartalmazza az összes lehetséges műveleti sorrend egyértelmű leírását. Időkorlátos folyamatszintézis szoftverrel pedig kiszámítható az optimális ütemezés a tevékenységek pontos kezdési és befejezési idejével. Jelen munkában azt ismertetjük, hogy mennyiben változik a folyamathálózat leírás és a kapcsolódó matematikai programozási modell, ha egyes tevékenységek között van köztes tároló, nincs köztes tároló, vagy az egymást követő műveletek között korlátot adunk a várakozási időre. A tároló modellek alkalmazásának eredményét példákkal szemléltetjük.

In our previous work we have shown that batch process scheduling can be formulated as time constrained process network synthesis (TCPNS) problem, where the assignment of an equipment to a task is represented as a process step, as well as the execution of the task, and release of the equipment after completing the task. Defining each potential assignment and changeovers leads to a superstructure, which includes all the plausible execution orders, as its parts. Moreover time constrained process network synthesis software can compute the optimal scheduling together with the exact starting and finishing times of the tasks. In the current work it is to be introduced, how the intermediate storage, lack of intermediate storage, or limited waiting times between tasks, effect the process description and the related mathematical programming model. Results of the application of storage models will be demonstrated by examples.

---

# Acélok kén-hidrogén okozta korróziójának vizsgálata gázolaj és biomassza elegyben

*Hydrogen sulphide corrosion of engineering steels in gas oil and biomass mixtures*

**Gergely András, Kristóf Tamás**

*Pannon Egyetem, Kémia Intézet, Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## Összefoglaló

Az olajfinomítóknak felhasznált acél ötvözetek gázolajban és gázolaj-biomassza keverékekben bekövetkező hidrogén-szulfid korrózió intenzív károsodást okozhat a katalitikus hidrogénező finomítói eljárások berendezéseiben. A lehetséges korróziós károsodások és a fellépő folyamatok sebességének és mechanizmusának ismerete fontos a berendezés karbantartások gyakoriságának és az üzembiztos működési élettartam megállapítása szempontjából.

A katalitikus hidrogénező finomítói eljárás laboratóriumi modellezésére nyers, kis kén-tartalmú gázolajjal, 250°C hőmérsékleten, 20 és 90 bar nyomás-tartományban, 0,2-8 mol% kén-hidrogén tartalmú hidrogénatmoszférában végeztünk kísérleteket. Szénacél és ötvözött ausztenites acél próbatesteket használtunk a finomítói berendezések szerkezeti anyagainak modellezésére. A korróziósebességet a fém és közegek összetétele függvényében szabványos méretű kuponok tömegvesztésével állapítottuk meg, kiegészítve a fém-szulfid bevonatképződési hajlam vizsgálatával.

A kísérletek eredménye szerint a szénacélok korróziója erősen asszociatív átmeneti állapotban keresztül játszódik le, és sebessége jelentős mértékben függ a fő reaktáns fluidum koncentrációjától, a gázfázisú komponens parciális nyomásától. A sebességi együttható nyomás növelésével együtt járó csökkenése a felületi vas adatok koncentrációjának jelentős, aktivitásának részleges csökkenésével értelmezhető. Kisebb reakciósebesség esetén a felületi fématomokból a vas-szulfid képződése nem teljes, és a határfelülettől a tömbfázisba irányuló, kristályközi szulfidesedéssel párhuzamosan megy végbe. Száraz gázfázisban a vas-szulfid képződésének sebessége minden ötvözet esetén alig gyorsul, vagy változatlan a nyomás növelésével (állandó hidrogén:kén-hidrogén arány mellett). Ezzel párhuzamosan a sebességi együttható jelentősen csökken, a felhalmozódó felületi fém-szulfid mennyisége szélsőértékhez tart, és 67 bar körül maximumális bevonatképzési hajlamot mutat. Ez a határfelületi szilárdfázisú reakció bimolekuláris jellegével és az átmeneti állapot komponenseinek disszociatív gátlásával értelmezhető. Az adszorbeált kén-hidrogén és annak disszociációja a hidrogén:kén-hidrogén arány egy nagyságrenden belüli változtatása esetén csak kevésbé befolyásolja az eredő reakciósebességet. Hasonló hatást tapasztalható közepes nyomáson a kén-hidrogén részarány növelésével, azzal az eltéréssel, hogy ekkor az ötvözött rozsdamentes anyagok nagyobb reakciósebesség-változást mutatnak. Állandó hidrogén:kén-hidrogén aránynál tehát a vas-szulfid képződése kevésbé gátolt az adszorbeált kén-hidrogén disszociációjára nézve. Az adszorbeált kén-hidrogén csökkenő mértékű disszociatív gátlása valószínűleg együtt jár a króm-szulfidok kisebb mértékű képződésével, sejtve ezzel a reakció termodinamikai affinitásának és sebességének összefüggését is. A sebességi együtthatónak a kén-hidrogén fugacitásával való növekedése mellett tapasztalt csekélyebb mértékű csökkenése ugyancsak a disszociatív gátlás csökkenésével és a felületi fém adatok aktivitásának, diffúziójának növekedésével van összefüggésben. Ezt látszik alátámasztani az is, hogy a fém-szulfid bevonatok tömege egyenesen nőtt (szélsőérték nélkül) a H<sub>2</sub>S résznyomás növelésével, és a meredekségi tényező szemléletesen mutatja a bevonatok fizikai védőképesség-különbségeit. A gázolajban és gázolaj-biomassza elegyben végzett kísérletek nyomásfüggése minden acélötvözzel 70 bar nyomás körül reakciósebesség-minimumot mutatott, cseppfolyós fluidum jelenlétében, de kén-hidrogén nélküli hidrogénatmoszférában is. Ugyanezen pontban maximális bevonatképzési hajlamot kizárólag a rozsdamentes acélok mutattak. Az acélok korróziójának globális minimumot mutató jellege önmagában is repedezett, töredezett és erősen pórusos bevonatra enged következtetni. A kén-hidrogén fugacitásának növelésekor bekövetkező korróziósebesség-változás mértéke a cseppfolyós fázisnak csak enyhe reakciómechanizmust módosító hatására enged következtetni. 85 bar teljes nyomás mellett a kén-hidrogén parciális nyomásának nagyságrendi növelése (gázolaj-biomassza keverékben) egyenes reakciósebesség-növekedést okozott a fém-szulfid képződésében (minden ötvözzel), a sebességi együttható hasonló mértékű csökkenésével. 50 bar nyomáson, nyers gázolajban a sebességi együttható arányos csökkenése volt tapasztalható, ha a kén-hidrogén részaránya nőtt. Az egyszeri és többszöri reaktánsfeltöltéssel végzett reaktorkísérletek időfüggés-vizsgálata feltárta a reakció molekularitásra vonatkozó jellemzőit és a sebességet meghatározó lépés típusát. Ezzel lehetővé vált az időbeli meredekségi tényező és a parabolikus sebességi együttható meghatározása, mely minőségi mutatója a szilárd határfelületi reakció jellegének, és a korróziós bevonat fizikai védőképessége hatékonyságát is jellemzi.

---

# Hulladék elasztomerek alkalmazhatósága polipropilénben

*Application of waste elastomers in polypropylene*

**Greczula Enikő, Simon-Stöger Lilla, Dr. Varga Csilla**

*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, MOL*

*Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék*

*H-8200, Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

## **Összefoglaló**

Kísérleti munkánk célja olyan kompatibilizáló adalék alkalmazása, amely javítja a hulladék elasztomert és polimert tartalmazó blendék mechanikai tulajdonságait, ezáltal is fejlesztve az újrahasznosítás lehetőségét. Polimer mátrixként polipropilént (PP) használtunk, benne az etilén-propilén-dién gumi (EPDM) a dinamikus igénybevétellel szembeni kedvező hatása kutatásokkal alátámasztott. Az elasztomer fázist a hulladék EPDM őrlemény és gumiabroncsból származó hulladék őrlemény adta, amelyeket különböző arányban alkalmaztunk. A gumi fázis befolyásolhatja az EPDM által kedvezőnek vélt tulajdonságokat a PP-ben, amelyre azonban csekély kutatási eredmény található. Ezért ennek hatását vizsgáltuk úgy, hogy a PP megolvasztása után a gumi és EPDM fázisokat magas hőmérsékleten homogenizáltuk, majd a préselést követően a mintákon különböző mechanikai vizsgálatokat végeztünk. Az összeférhetőség javítására kereskedelmi és kísérleti kompatibilizáló adalékanyagokat alkalmaztunk, melynek hatásait ütőállóság és szakítószilárdsági mérések révén vizsgáltunk a különböző mintákon. Sikertelenül olyan kísérleti adalékot találni, amelynek hatására akár a nagy (30%) elasztomertartalmú PP blendben húzó- és ütő igénybevétellel szembeni ellenálló képessége is jelentősen javult. Több esetben a kereskedelmi forgalomban kapható, PP alapú blendekhez fejlesztett kompatibilizáló adaléknál is kedvezőbb hatást tapasztaltunk.

---

# Elgázosító reaktor hidrodinamikai modellezése

## *Hydrodynamic Modelling of a Gasification Reactor*

Gyurik Livia<sup>a</sup>, Egedy Attila<sup>a</sup>, Jun Zou<sup>b</sup>, Miskolczi Norbert<sup>a</sup>, Ulbert Zsolt<sup>a</sup>,  
Haiping Yang<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Pannon Egyetem 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

<sup>b</sup>*Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074, China*

---

### Összefoglaló

Tanulmányunkban egy két betáplálási és egy elvételi ponttal rendelkező elgázosító reaktor hidrodinamikai viselkedését vizsgáltuk tartózkodási idő eloszlás analízis segítségével. Megalkottuk a reaktor numerikus áramlástani (CFD) modelljét a reaktor impulzus és komponens mérlegegyenleteinek megoldásához. A tartózkodási idő eloszlás analízis céljából az áramlási egyenletek kiegészülnek egy komponensmérleggel. A szimulátorral történő megoldás hálófüggését a hibaráta számításával és a megoldáshoz szükséges idővel határoztuk meg. A tartózkodási idő eloszlás meghatározásához és a reaktoron belüli áramlási viszonyok jellemzéséhez impulzusszerű jelzőanyag betáplálást szimuláltunk. Egy jelzőanyagot tápláltunk a reaktorba 1 s-on keresztül egyidejűleg mindkét bemeneten 100 mol/m<sup>3</sup> koncentrációval, majd a jelzőanyag koncentráció adatait a reaktor kilépő felületén kiolvastuk a numerikus megoldásból. A CFD alkalmazásával történő vizsgálatok mellett egy cellás modellt is kidolgoztunk a reaktor áramlástani szerkezetének modellezésére, amit összevetettünk a CFD modellel kapott eredményekkel.

### Summary

In our study the hydrodynamic behavior of a gasification reactor with two inlets and an outlet was numerically examined by the method of residence time distribution. We developed a Computational Fluid Dynamics (CFD) model of the reactor to solve the momentum and component balance equations of the system. The component balance equation was implemented to support the residence time distribution calculation. The mesh dependency of the CFD solution was checked by the error rate and calculation time. In order to characterize the mixing and flow within reactor pulse experiments were performed numerically. A tracer impulse was introduced for 1 s to both inlets at the same time with concentration 100 mol/m<sup>3</sup> approaching the Dirac delta function and tracer concentration at the outlet boundary of system was recorded. A compartment model in order to model the hydrodynamic structure of the reactor was also developed and compared to the results obtained by CFD model.

## 1. Introduction

Biomass gasification is an environment protecting technology as it consumes waste and turns them into energy or new valuable products. A gasification reactor burning biomass and producing energy modelled in this study [1]. There are several options to convert biomass into energy and fuels. The gasification reactor is usually constructed as fixed bed or fluidized bed reactor [2]. The production of biofuels by green technologies gives an alternative to fossil fuels aiming environment protection. Researches have already showed different ways of producing syngas from various components. As gasifying agents air, oxygen, steam or carbon dioxide can be used, all having different advantages [3]. There are two major groups of biomass, virgin and waste. They can be divided into subclasses i.e. terrestrial biomass, aquatic biomass as virgin biomass, municipal waste, agricultural solid waste, forestry residues and industrial wastes as waste biomass. Feedstock material can be wood, straw, sawdust, rice husk, algae, water plant, leaves, black liquor, waste oil and so on [4]. In our system cellulose was used as primary model component [5], and a laboratory scale reactor was constructed.

Computational Fluid Dynamics (CFD) is a widely used tool for modelling various systems. Using CFD we can effectively model and simulate the hydrodynamic behavior of systems by help of computers. Computer simulation allows analyzing and optimizing the behavior of real system without influencing it physically any way. Compartment models can be used to describe the hydrodynamic structure of complex systems using a set of elements of ideal reactor models, mixers and distributors. In our work we suggest a compartment model to model

the gasification reactor by applying a sequence of plug-flow reactors, continuous stirred-tank reactors, mixers and distributors. Kong et al. also researched the use of compartment models in case of gasification reactors [6]. While they built a detailed, complicated model, we defined a simpler model which was compared with our CFD model. We used MATLAB software for data processing and compartmental modelling, furthermore COMSOL Multiphysics software was used for CFD modelling.

## 2. Modelling approach

CFD methods use differential equations to describe and solve a time-spatial problem for a given geometry. In our case a gasification reactor with two inlets and one outlet was defined (Figure 1.a). The flow field was calculated with a laminar flow model using the momentum equation (Eq 1) and the continuity equation (Eq 2).

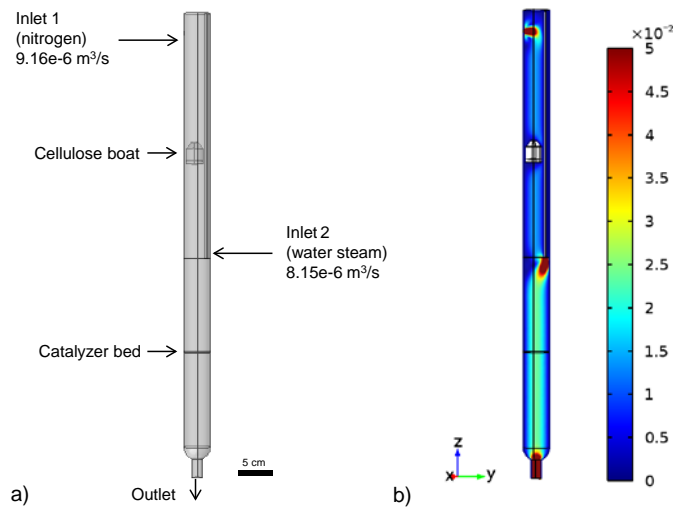
$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{1} + \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F} \quad (1)$$

$$\rho\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

The volume flow of steam and nitrogen were defined as boundary conditions at the inlet and outlet. The outlet was defined as a pressure boundary. All the other boundaries were treated as no momentum flux walls. First a stationary solution was calculated, the convective part of the component balance equation was calculated using the velocity field (Figure 1.b) obtained by solving the momentum balance equation.

In the further study we characterized the hydrodynamic behavior of reactor using residence time distribution analysis. For this reason we completed the Navier-Stokes equation with a component model (Eq 3). Simulating a tracer pulse experiment we introduced a tracer impulse for 1 s to both inlets at the same time with concentration  $100 \text{ mol/m}^3$  and solved the component balance equation transiently. In general form of component balance equation the source term  $R$  was set to 0 in this simulation, but in the future researches the source term can be replaced by the chemical reaction or other sources. The wall boundaries are defined as no component flux boundaries.

$$\nabla \cdot (-D_i \nabla c_i) + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = R_i \quad (3)$$



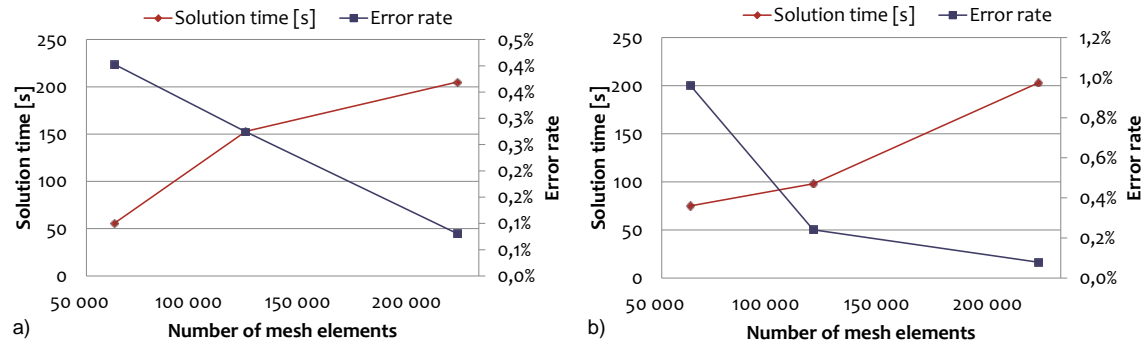
**Figure 1.** a) Inlets and flow rates of the gasification reactor. b) Velocity field contours of gasification reactor [m/s].



### 3. Results and discussion

#### *Mesh independence study*

In the mesh independence study we defined the 3D geometry of the reactor in the CFD software, and generated a calculation mesh with different qualities. In the case of mass balance increasing number of elements caused decreasing error rate but also increasing running time (Figure 2.a). Predefined meshes with 11.9 mm, 7.74 mm and 5.96 mm maximum element size were applied. Application of finer meshes resulted a relatively long computational time on a computer with 4 core 2.67 GHz processor and 16 GB RAM.

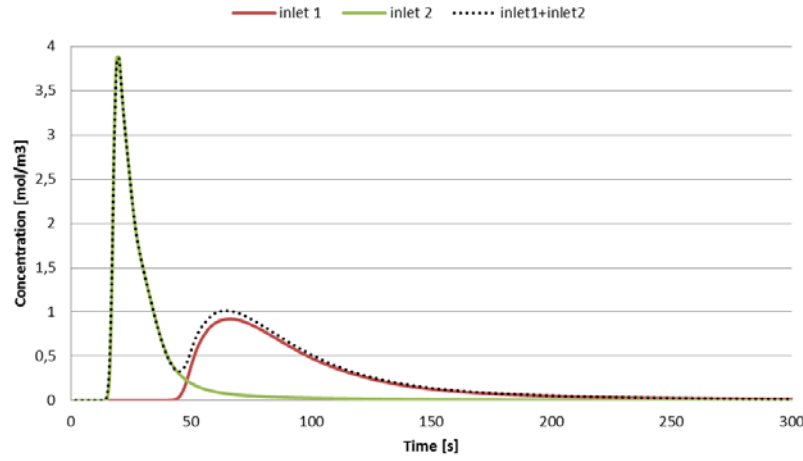


**Figure 2.** Effect of number of mesh elements on solution time and error rate in case of a) mass balance and b) component balance.

In the case of component balance similar correlation can be seen as Figure 2.b shows. Error rate is calculated as the absolute value of the difference between the inlet and outlet component mass divided by the inlet mass in percent. The mesh independence study shows that applying higher mesh quality increases the computational time. We selected the finest mesh of the examined three meshes, because this gives the best result in accuracy with reasonable solution time.

#### *Residence time distribution analysis*

Using the previously calculated velocity field of calculation domain we performed a pulse experiment by changing the inlet concentration in time to both inlets approaching a Dirac delta function. The tracer injection was applied as a rectangle function with  $100 \text{ mol/m}^3$  for 1 s long duration. Figure 3 shows the residence time distribution function of the system detected at the outlet boundary. The red line is the component originated from the upper inlet (inlet 1, nitrogen), while the green curve represent the component originated from the lower inlet (inlet 2, water steam). Time delay in case of inlet 1 is longer since its origin located further from the outlet. Water steam reaches the outlet earlier as it is shown by the narrow peak section of the residence time distribution.



**Figure 3.** Residence time distribution of the system.

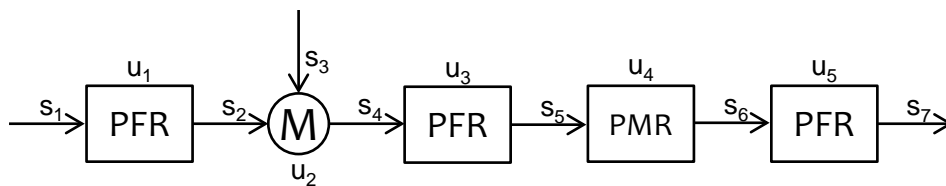
#### Compartment model

A system could be described by a sequence of compartments as plug flow reactor (PFR), continuous perfectly mixed reactor (PMR), mixer (M) or distributor (D) [7]. Developing a compartment model of reactor it was supposed that mixers and distributors have no volumes. Distributors have only one parameter to define, the percentages of inlets as its shown by equations (Eq 4–5) [8]:

$$F_{out,1} = \alpha F_{in} \quad (4)$$

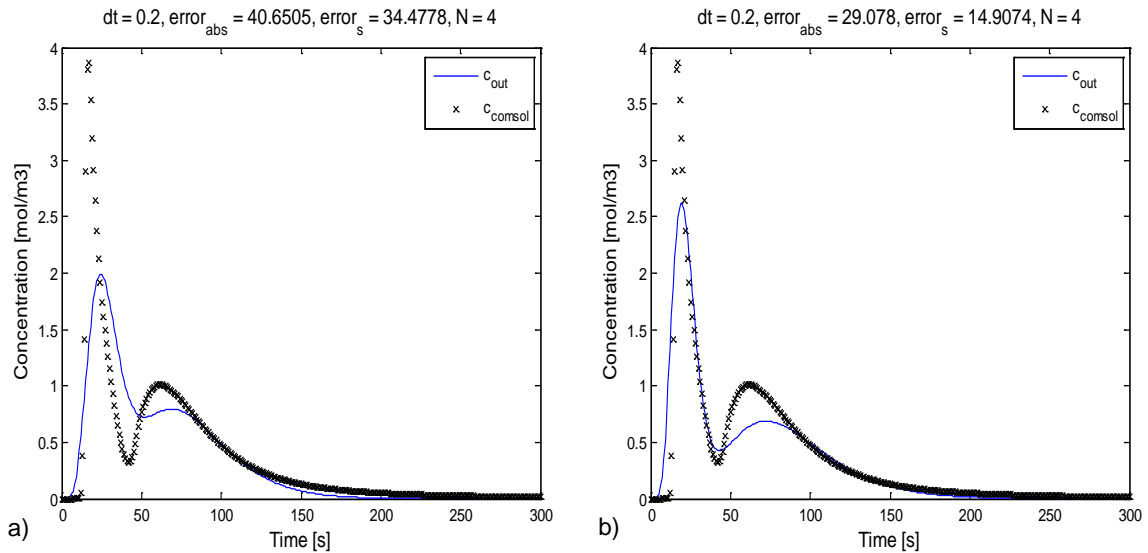
$$F_{out,2} = (1 - \alpha) F_{in} \quad (5)$$

Following the structure of the real gasification reactor we constructed a compartment model shown in Figure 4. The proportion of compartments volumes applied in calculations was determined in two ways. First, the proportion of compartments volumes in the compartment model used in calculations (50%, 25%, 0.32%, 24.68%) were chosen correspondingly to the volume of the four main real reactor section (Figure 1a).



**Figure 4.** Compartment model of the reactor consisting of unites  $u_1$ – $u_5$  and streams  $s_1$ – $s_7$ .

Figure 5a shows the comparison of residence time distribution obtained by CFD model and compartment model. We calculated an absolute and a squared error to characterize the difference between the results by the two models. In the case of compartment model the ideal plug flow reactors are approximated by a cascade of continuous perfectly mixed reactor. The time step of calculation was set to 0.2 s. The number of cascades in the calculation of plug flow reactor was set to 4 because we get the lowest absolute and squared error in this case. In the second case the proportion of compartments volumes was determined by application of an optimization tool (Particle Swarm Optimization [9], MATLAB) which resulted even less error (Figure 5.b).



**Figure 5.** Residence time distributions of CFD and compartment model. a) volume of compartments are determined from the reactor structure; b) volume of compartments are obtained by using optimization algorithm.

The parameters and results are summarized in Table 1. The main difference can be seen in the case of first plug flow reactor, where the optimized algorithm provided a higher proportion of reactor volume at the first half of the reactor and the volume proportion of catalyst bed (unit 4) in which case the optimization tool gives a much higher proportion of compartments volume.

**Table 1.** Compartment model parameters and simulation results.

	<b>real volume ratio of compartments</b>	<b>optimized volume ratio of compartments</b>
<b>cascade number in PFR model (N)</b>	4	4
<b>time step</b>	0.2 s	0.2 s
<b>absolute error</b>	40.6505	29.078
<b>squared error</b>	34.4778	14.9074
<b>Volume proportion of <math>u_1</math></b>	50%	60.08%
<b>Volume proportion of <math>u_3</math></b>	25%	17.74%
<b>Volume proportion of <math>u_4</math></b>	0.32%	4.44%
<b>Volume proportion of <math>u_5</math></b>	24.68%	17.74%

#### 4. Conclusion

A gasification reactor was examined in hydrodynamic point of view. The momentum and component balances of the reactor with prescribed geometry and operation parameters were solved by a CFD tool. The residence time distribution analysis was performed to characterize the hydrodynamic of reactor based on results calculated by CFD model. In addition to CFD modelling we approximated the system with a compartment model built up from ideal reactor models, mixers and distributors. The proportion of compartments volumes was determined in two ways: first using the real reactor structure, secondly an optimization tool was used to select

the optimal volumes of the compartments. In both cases the residence time distribution was calculated. The optimized compartment model shows a better agreement with the residence time distribution calculated by CFD model. Further development in the applied models research is planned by implementing chemical reaction kinetics into the component balance equation.

### Acknowledgments

Authors thank to the National Office for Research and Innovation, within the framework of support for Hungarian-Indian (KTIA-DST) R&D&I co-operation program (TÉT\_13\_DST-1-2014-0003). This project has also received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program under the Marie Skłodowski-Curie grant agreement No. 643322 (FLEXI-PYROCAT).

### References

- [1] Demirbas, M.F., Balat, M., Balat H., *Energy Convers. Manag.*, 50 (7), 1746–1760 (2009)
- [2] Anca-Couce A., *Prog. Energy Combust. Sci.*, 41–79 (2016)
- [3] Sansaniwal, S.K., Pal, K., Rosen, M.A., Tyagi, S.K., *Renew. Sustain. Energy Rev.*, 363–384 (2017)
- [4] Bhavanam, A., Sastry, R.C., *Int. J. Chem. Eng. Appl.*, 2 (6), 425 (2011)
- [5] Zou, J., Yang, H., Zeng, Z., Wu, C., Williams, P.T., Chen, H., *Int. J. Hydrog. Energy*, 41 (25), 10598–10607 (2016)
- [6] Kong, X., Zhong, W., Du, W., Qian, F., *Energy Convers. Manag.*, 202–211 (2014)
- [7] Claudel, S., Fonteix, C., Leclerc, J.-P., Lintz, H.-G., *Chem. Eng. Sci.*, 58 (17), 4005–4016 (2003)
- [8] Egedy, A., Varga, T., Chován, T., *Math. Comput. Model. Dyn. Syst.*, 19 (2), 115–132 (2013)
- [9] Kennedy J., Eberhart, R., *Neural Netw. 1995 Proc. IEEE Int. Conf. On.*

# Synthesis of drug containing nanoparticles

## Gyógyszer hatóanyagot tartalmazó nanorészecskék előállítása

### **Hegedüs Imre<sup>1</sup>, Meiczinger Mónika<sup>1</sup>, Kasza György<sup>2</sup>, Iván Béla<sup>2</sup> and Nagy Endre<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Chemical and Biochemical Operations Research Group, Research Institute of Biotechnology and Chemical Engineering, University of Pannonia;*

*H-8200 Veszprém, Egyetem u. 10, Hungary; e-mail: nagy@mukki.richem.hu*

<sup>2</sup>*Polymer Chemistry Research Group, Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences  
H-1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2, Hungary*

---

#### **Summary**

Our goal is to prepare and investigate multifunctional nanoparticles which can effectively carry different target molecules, e.g. drug molecules. Various drug carrier nanoparticles have been synthesized and followed by comparing their properties in the framework of our project. The carrier molecules of multifunctional nanoparticles used by us were poly(amidoamin) (PAMAM) dendrimers, functionalized magnetic nanoparticles, hyperbranched polymers, etc. These nanoparticles can carry numerous molecules binding them by strong chemical bonds on the surface of the carrier. Multifunctional nanoparticles may contain numerous, even three-four different molecules with different functions. These molecules can be used as pharmaceutical drugs, sensor molecules (e.g., fluorescent molecules or MRI contrast agents) or target molecules which recognize specific biological patterns (e.g., antibodies or folic acid), etc. Multifunctional nanoparticles in medicine can be utilized as targeted therapeutic and/or diagnostic agents, e.g., folate molecules conjugated to drug containing PAMAM dendrimer can recognize specifically some types of cancer diseases. Dendrimer carrier with the bound anticancer drug and cancer cell recognizing molecule, e.g. folic acid, finds and enters the cancer cell and destroys it [1]. The detection of the cells can also be realized by folic acid containing carrier molecules containing MRI agents conjugated with e.g., gadolinium-DOTA complex [2]. Synthesis and experimental investigations of single enzyme nanoparticles with different polymers and magnetic nanoparticles were also studied. This investigation is connected to our previous works with the aim to enhance the enzyme stability and to insure the repeated use of the immobilized enzyme.

---

#### **Acknowledgement**

This work was supported by the BIONANO\_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 project.

#### **Literature**

[1] Majoros, I.J.; Thomas, T.P.; Mehta, C.B.; Baker Jr., J.R. *J. Med. Chem.* 48, 5892-5899 (2005)

[2] Swanson, S.D.; Kukowska-Latallo, J.F.; Patri, A.K.; Chen, C.; Ge, S.; Cao, Z.; Kotlyar, A.; East, A.T.; Baker, J.R. *Int. J. Nanomedicine* 3, 201-210 (2008)

# Integration of the fouling description into models of osmotically driven membrane processes

**Endre Nagy<sup>a</sup>, Imre Hegedüs<sup>a</sup>, Emily W. Tow<sup>b</sup>, John H. Lienhard V<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Research Institute of Chemical and Process Engineering, University of Pannonia, Egyetem u. 10, H-8200, Veszprém, Hungary*

<sup>b</sup>*Rosenow Kendall Heat Transfer Laboratory, Department of mechanical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, USA*

---

## Summary

The osmotic separation processes as forward (FO) and pressure retarded (PRO) osmosis can be significantly affected by membrane fouling due to the accumulation of deposited suspended particles, colloids, organic macromolecules, inorganic solutes, microorganisms, etc. in a mass transfer boundary layer adjacent to the membrane surface. Dissolved molecules accumulating at the surface reduce the solvent (here water) activity and this reduces the solvent flow through the membrane. Question arises how can be modelled the mass transfer through a fouling layer and how can it involved in the description of the osmotically driven membrane processes as FO and PRO processes. Recently Tow and Lienhard [1] developed a mass transfer rate equation for quantifying porous foulant accumulation on semipermeable membranes in terms of two parameters that capture both osmotic and hydraulic causes of flux decline. Applying the salt transfer rate given for every single mass transfer layer [2], including that for the fouling layer [1], the overall salt flux, and the water flux, as well, will be defined which involves the effect of five transfer layers, namely selective and sponge layers, external boundary layers and the fouling layer. Accordingly, the effect of the fouling on the membrane performance can be predicted by a relatively simple manner. Two operating modes will be discussed in this presentation: (i) the feed is facing the selective membrane layer (FO process) and (ii) the draw solution is facing the selective layer (PRO mode). The fouling layer is building up on the feed-facing side during FO process, while on the sponge side during PRO process. This latter case can cause additional problem because the foulant can accumulate in the sponge layer as well inducing its increasing resistance. The model results will then be compared with experimental data.

---

## Acknowledgement

The National Development Agency grant, Hungarian Research Fund (OTKA 116727) greatly acknowledged for the financial support. This work was also supported by TÉT\_15\_IN-1-2016-0094 project.

## Literature

- [1] Tow, E.W., Lienhard, V.J.H. Quantifying osmotic membrane fouling to enable comparison across diverse processes. *J. Membr. Sci.*, 511, 92-107 (2016)
- [2] Nagy, E. A general, resistance-in-series, salt- and water flux models for forward osmosis and pressure retarded osmosis for energy generation, *J. Membr. Sci.*, 460, 71-81 (2014)

# Hulladék gumiőrlemény alkalmazása polietilén alapú blendekben

*Application of waste crumb rubber in polyethylene based blends*

**Heller Balázs, dr. Varga Csilla, dr. Bartha László**

*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, MOL*

*Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék*

*H-8200, Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

## **Összefoglaló**

Napjainkban a műanyag és gumi hulladékok újrahasznosítása egyre nagyobb szerepet kap, amelynek hatására várhatóan fokozódik az igény az értékes, műanyag hulladékokból előállított termékek iránt. A különböző megoldások között az egyik lehetséges módszer a mechanikai újrahasznosítás, amellyel mi is foglalkozunk.

Célunk, hogy hulladék gumiabroncsból származó őrlemény felhasználásával megfelelő szilárdságú termékeket állítsunk elő polietilén alapú blendekből. Ennek alapvető feltétele az összeférhetőség javítása mind a blendet alkotó polimerek, mind a műanyag és gumiőrlemény között. A minták homogenizálására hengerszékes valamint extruderés bekeverést választottunk, amelyekből préseléssel, valamint fröccsöntéssel állítottuk elő a mechanikai vizsgálatokhoz szükséges próbatesteket. Az alkalmazott kompatibilizáló adalékok a MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék kísérleti fejlesztésű olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú vegyületei, amelyeknek hatását kereskedelmi forgalomban kapható, ugyancsak kompatibilizáló hatású adalékkal hasonlítottunk össze. A mechanikai tulajdonságok közül különböző hőmérsékleteken Charpy-féle ütőszilárdságot, húzószilárdságot, szakadási nyúlást, illetve húzómoduluszt határoztunk meg.

Sikerült olyan adalékot előállítani, amelynek alkalmazása révén a komponensek összeférhetősége javult, ezáltal a blendek mechanikai tulajdonságaiban is javulás volt tapasztalható.

---

**Kulcsszavak:** hulladék gumiőrlemény, polietilén blend, kompatibilizáló adalék, ütőszilárdság, húzószilárdság

# Mágneses folyadékok válaszidejének meghatározása mágneses szuszceptibilitás mérés alapján

*Response time measurement of magnetic fluids*

**Horváth Barnabás, Szalai István**

*Pannon Egyetem Fizika és Mechatronika Intézet*

*8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

## *Összefoglaló*

Az intelligens anyagokhoz tartozó mágneses folyadékok egyes makroszkopikus tulajdonságai (pl. viszkozitás, mágneses szuszceptibilitás) külső mágneses térrel megváltoztathatóak, amelynek hátterében a folyadék reverzibilis szerkezeti átalakulása áll. A mágneses folyadékok gyakorlati (pl. gépjárműipari) alkalmazása szempontjából kiemelkedő fontosságú a folyadék ún. válaszideje, ami általában az 1-10 ms nagyságrendbe esik. Kutatásaink különböző mágneses folyadékok (magnetoreológiai (MR) fluidumok és ferrokolloidok) szerkezeti változásának követésére, és a reakcióidő mágneses szuszceptibilitás alapján történő mérésére irányultak. Egy olyan mérőrendszert fejlesztettünk, amely a mágneses folyadék szuszceptibilitását méri az idő függvényében, külső mágneses tér hatásideje alatt. A folyadék válaszidejét az időfüggő mágneses szuszceptibilitás alapján kapjuk meg. Ennél a módszernél a szuszceptibilitás meghatározását egy LC oszcillátor frekvenciaváltozásának mérésére vezetjük vissza. Az induktív tag (légmagos mérőtekercs) belsejében helyezkedik el a vizsgálandó minta, így ha annak mágneses szuszceptibilitása megváltozik, az a rezonanciafrekvencia eltolódását vonja maga után, amit egy frekvencia moduláció analízátor detektál. A külső homogén mágneses teret egy Helmholtz tekercspár állítja elő, amelyet egy teljesítmény erősítőből és egy jelgenerátorból álló áramgenerátor hajt meg. Meghatároztuk különböző ferrokolloidok és MR folyadékok válaszidejét, és a válaszidő mágneses térerősségtől való függését. A kísérletek során szerves közegben, valamint biokompatibilis, vizes közegben stabilizált nanoméretű (~10 nm átmérőjű) magnetit részecskéket tartalmazó ferrokolloidokat vizsgáltunk. Az MR folyadékok (Lord MRF-122EG) szénhidrogén hordozóközgeből és az abban diszpergált néhány  $\mu\text{m}$  átmérőjű vas részecskékből álltak.

## *Summary*

Magnetic liquids are so called intelligent fluids, because some macroscopic properties (e.g. viscosity, magnetic susceptibility) of these materials can be changed by an external magnetic field. This is caused by reversible structural transition. One of the most important property of a magnetic fluid is the response time, which is typically in the range of 1-10 ms. We investigated the dynamics of structural change and the response time of different magnetic liquids (magnetorheological (MR) fluids and ferrocolloids). We developed a measurement system which can determine the time-dependent magnetic susceptibility of these fluids in the presence of an external magnetic field. The response time is extracted from the dynamic magnetic response (change of susceptibility versus time). The susceptibility is determined from the frequency change of an LC oscillator. The sample is placed inside a solenoid, and any change in the susceptibility of the sample causes a shift in the resonant frequency, which is measured by a modulation domain analyzer. The external magnetic field is created by a Helmholtz coil pair driven by a power amplifier and a function generator. We measured the response time of various ferrocolloids and MR fluids. Furthermore, we investigated the magnetic field strength dependence of the response time. In our experiments we used hydrocarbon-based, and biocompatible, water-based ferrocolloids, where nano-sized (~10 nm in diameter) magnetite particles are stabilized in the carrier liquid. The MR fluids (Lord MRF-122EG) consisted of  $\mu\text{m}$  sized iron particles dispersed in a hydrocarbon liquid.

---



# **Funkcionalizált flagellin variánsok létrehozása érzékelőrétegek kialakításához**

*Development of Functionalized Flagellin Variants for Sensing Layers*

**Jankovics Hajnalka, Tompa Éva, Kakasi Balázs, Tóth Éva, Szekér Patrik, Vonderviszt Ferenc**

*Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Pannon Egyetem  
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

A baktériumok mozgásszervei a flagellumok, amelyek egy sejtmembránba ágyazott nanomotorból és a hozzá kapcsolódó propellerként forgatott helikális filamentumból állnak. A flagelláris filamentumok a flagellin fehérje több ezer példányából épülnek fel. A flagellin önszerveződésre képes, megfelelő körülmények között kívánt méreteloszlású nanocsövek építhetők belőle. Korábbi kutatásaink során megmutattuk, hogy a flagellin hipervariábilis D3 doménje, ami a filamentumok felületén helyezkedik el, a polimerizációs képesség megzavarása nélkül módosítható, eltávolítható, vagy helyére más fehérjék beépíthetők. A D3 domén helyére génszintézis módosítással már ismert specificitású kisméretű kötőfehérjéket, nehézfémkötő oligopeptideket illetve sejt felszíni receptorok kötőmotívumait beépítve olyan flagellin variánsokat tudunk létrehozni, amelyek képesek egy adott célmolekula felismerésére és hatékony megkötésére. Ezek a flagellin variánsok alkalmasak lehetnek bioszenzor érzékelőrétegek létrehozására. A módosított flagellinekből a polimerizációs folyamat precíz kontrollálásával kívánt méretű, nagy felületi kötőhely sűrűségű nanorudakat is építhetünk, amelyekből hullámvezető szenzorok felületén érzékelő réteget hozhatunk létre. Ezekben a receptor rétegekben a célmolekula kötődése miatt bekövetkező változások optikai úton valós időben egyszerűen detektálhatók.

Az előadás összefoglalja a különféle nehézfém és arzénkötő variánsok ill. a sejtadhéziós motívumokat hordozó változatok fejlesztésével és vizsgálatával kapcsolatos eredményeinket.

Környezetanalitikai alkalmazásokhoz a flagellin fehérjét úgy módosítottuk, hogy az szennyező nehézfémionok (pl. Ni(II)), illetve arzén megkötésére, és ezáltal kimutatására alkalmas legyen. A variábilis domén módosításával vagy cseréjével olyan oligopeptid motívumokat, vagy akár teljes fehérje láncokat építettünk be a flagellinbe, melyekről feltételezhető, hogy erősen, sőt bizonyos esetekben szelektíven képesek megkötni egy adott nehézfém szennyezőt. Az előállított variánsok kötőképességét izotermális titrációs kalorimetriával jellemeztük.

Sejtadhézió tanulmányozásához különböző sejt felszíni receptor kötőmotívumokat (pl. ILDVP, GRGDS, KQAGDV, PHSRN, IKVAV, KDGEA) építettünk be a flagellin D3 doménjének helyére. A sejtadhézió hatékonyságának növelése érdekében olyan polipeptid linkereket használtunk, melyek lehetővé teszik a szenzor felületén rögzített flagellin variáns sejt kötő motívumának – a sejtek számára – optimális térbeli orientációját. Az így módosított flagellin monorétegek sejtmegkötő tulajdonságainak feltérképezése számos területen használható, előrelépést jelenthet pl. a rákterápiában, biomimetikus anyagok, implantátumok fejlesztésében, gyógyszerfejlesztésben, bioszenzorok készítésében.

Kutatásainkat a BIONANO\_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 és az OTKA NN117849 projekt támogatta.

# Adhéziós motívumokkal rendelkező flagellin variánsok létrehozása sejtadhéziós vizsgálatokra

*Development of adhesion motif displaying flagellin variants for cell adhesion studies*

**Kakasi Balázs<sup>1</sup>, Kovács Boglárka<sup>2</sup>, Tóth Éva<sup>1</sup>, Jankovics Hajnalka<sup>1</sup>,  
Horváth Róbert<sup>2</sup>, Vonderviszt Ferenc<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Pannon Egyetem, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Bio-Nanorendszerek Kutatólaboratórium*

<sup>2</sup> *Magyar Tudományos Akadémia Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, Nanobioszenzorika Lendület Kutatólaboratórium*

---

A sejtadhézió minden többsejtes élőlény esetében alapvető fontosságú folyamat. A sejtadhézió, a sejtkitapadás és a sejt-szubsztrátum kontaktzóna tulajdonságainak és mechanizmusainak megismerése nagy jelentőséggel bír, hiszen az ismeretanyag segítségével számos speciális biomimetikus anyag állítható elő, fontos bioszenzorikai, orvosi biológiai alkalmazásai vannak (pl.: gyógyszerfejlesztés, implantátumok) és megeremti a szövet mérnökség alapjait.

A baktériumok flagelláris filamentumait a négy doménből felépülő flagellin fehérje több ezer példánya alkotja. A filamentumok felszínén elhelyezkedő hipervariábilis D3 domén a flagellin polimerizációs képességének megzavarása nélkül módosítható, de helyére akár más fehérjék vagy specifikus kötőmotívumok is beépíthetők. A flagellin variánsok filamentumokat formálnak a sejtek felszínén, ahonnan könnyen leválaszthatók, az alkotó aleggységek nagy mennyiségben, egyszerűen izolálhatók.

Munkánk során a flagellin fehérjét sejtadhéziót elősegítő rövid peptid motívumokkal ruháztunk fel génszabózási módszerek segítségével. Az NT045 jelű pKOT plazmid MCS (multi cloning site) helyén az AgeI-SacI restrikciós enzim vágóhelyek közé illesztettük be a sejtadhéziót elősegítő rövid peptid motívumokat (ILDVP, PHSRN, KQAGDV, KDGEA) kódoló DNS inzerteket, melyeket aztán kompetens *E. coli* TOP10 törzsbe transzformáltunk. Az létrehozott helyes szekvenciájú plazmidokat tisztítás után flagellin deficiens *Salmonella typhimurium* SJW2536 törzsbe elektroporáltuk. Az ily módon létrehozott törzsből egyszerű laboratóriumi rutin eljárásokkal preparálható az új flagellin variáns.

A tisztított fehérje variánsokat biomimetikus felületek kialakítására használjuk úgy, hogy hidrofób felületekre monoréteget adszorbeálunk oly módon, hogy a funkcióval ellátott oldalukkal a közeg felé orientálódnak. Az így létrehozott felületeket jelölés nélküli optikai bioszenzorok (OWLS, EPIC BT) segítségével rákos sejtek adhéziójának és migrációjának vizsgálatára használunk fel.

Kutatásainkat a BIONANO\_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 az OTKA NN117849, az ERC\_HU és Lendület projektek támogatásával végeztük.

# Biofilm növekedés a mikrobiális üzemanyagcellákban

## *Biofilm growth in the microbial fuel cells*

**Keller Enikő, Bakonyi Péter, Nemestóthy Nándor**

*Pannon Egyetem, Biomérnöki Membrántechnológiai és Energetikai Kutató Intézet  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

### **Összefoglaló**

Az üzemanyagcelláknak számos típusát fejlesztették ki és alkalmazzák jelenleg is. Az egyik legtöbbet kutatott terület az ún. mikrobiális üzemanyagcella, melyekben baktériumok segítségével biomassza lebontásából termeltetünk elektromos áramot. A különböző mikrobiális üzemanyagcella (MÜC) technológiák jelentik a legújabb megközelítést a megújuló elektromos energia, a „bioelektromosság” termelésben.

A kutatás során a mikrobiális üzemanyagcellákban kialakuló biofilm növekedését vizsgáltuk. Az anódoteret a zalaegerszegi kommunális szennyvíztisztítóból származó, valamint a kaposvári cukorgyári szennyvíztisztítóból származó beoltó iszappal töltöttük fel, szubsztrátként egyrészt acetátot, másrészt az ún. préselt alkalmaztuk. Az általunk használt MÜC-ben egy speciális anódkialakítás megvalósításával könnyen elvégezhetővé váltak a mintavételezések.

A mintavételek során meghatároztuk a szénszálon kialakuló biofilm össztömegét, a fehérje mennyiséget Folin-reagenssel, illetve mértünk dehidrogenáz aktivitást is, mely azon a megállapításon alapszik, hogy minden élő sejt termel dehidrogenáz enzimet; a szerves anyagok eloxidálásakor  $H^+$ -ionok keletkeznek, melyek az aerob légzés során az elektrontranszport-láncon keresztül a végső elektron akceptorhoz (oxigén) szállítódnak. A szintelen trifenil-tetrazólium-klorid (TTC) egy alternatív elektron akceptor, ami a légzés során vörös színű, vízzeloldhatatlan trifenil-formazánná redukálódik, ennek megjelenése, illetve intenzitása alapján is jellemezhető az aktivitás.

A biofilm növekedéssel párhuzamosan mértük a mikrobiális üzemanyagcella által termelt áram mennyiségét is, hogy egyértelműen összefüggésbe hozható-e a megtermelt áram mennyisége a biofilm növekedés intenzitásával.

### **Summary**

Several types of fuel cells have been developed and are being used currently. One of the most intensively studied fields is the so-called microbial fuel cell (MFC), which are able to produce electricity from biomass using bacteria. Microbial fuel cell technologies are the latest approaches in generation of renewable electricity, "bioelectricity".

In this research the biofilm growth was studied in the MFC. The anode chamber was filled with sludge from the communal waste-water treatment in Zalaegerszeg and the waste-water treatment of sugar factory in Kaposvár, respectively. As a substrate, acetate and a special organic liquid derived from a pressed biofraction of a solid waste treatment were applied. In the MFC used the samples have been easily taken by a special anode design.

During samplings, the total weight of biofilm on the carbon fiber and the amount of protein using the Folin reagent was determined and also the dehydrogenase activity was measured, which is based on the principle that dehydrogenase enzymes are produced by all living cells. This enzyme group oxidizes organic matter while  $H^+$  ions are generated and during the aerobic respiratory electrons and hydrogen are transported through a chain of intermediate electron carriers to a final electron acceptor (oxygen). The colourless triphenyl tetrazolium chloride (TTC) is an alternative electron acceptor which is reduced to red-colour water insoluble triphenyl-formazan during the respiratory, so dehydrogenase activity may be characterized by its appearance and its intensity.

In parallel with the biofilm growth, the amount of generated power by the microbial fuel cell was measured, to decide if the amount of generated power may be clearly associated with the intensity of biofilm growth.

---

### **Köszönetnyilvánítás**

A kutatómunkát a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 sz. pályázat támogatásával végeztük. Bakonyi P. köszönetet mond a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal – NKFIH, PD115640 támogatásáért.

# **Elektroaktív vékonyrétegek alkalmazása affinitás szenzorokban**

*Application of electroactive thin layers in affinity sensors*

**Keresztes Zsófia, Marek Tamás, Felhősi Ilona, Mészáros Gábor**

*MTA Természettudományi Kutatóközpont*

*1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

Célunk olyan monomolekuláris és polimer elektroaktív vékonyrétegek kialakítása, amelyek elektrokémiai affinitás bioszenzorokban történő alkalmazás során lehetővé teszik sejtfelszíni tumormarkerek azonosítását.

Our aim is to develop such monomolecular and polymeric electroactive thin films, which allow the identification of cell surface tumor markers in electrochemical affinity biosensors.

---

Affinitás szenzoroknak olyan típusú érzékelőket hívunk, ahol az érzékelő jelét a molekuláris felismerés és kapcsolódás következtében kialakuló fizikai változás adja. A detektált fizikai jel lehet optikai, mechanikai, illetve - mint vizsgálataink esetében is-, elektrokémiai.

Elektrokémiai affinitás szenzorok esetén a molekuláris felismerés eredményeképpen az elektródok felületén lévő alapréteg elektromos jellemzőiben változás következik be. A komplementer molekulák kapcsolódása révén más vezetési tulajdonságú réteg keletkezik. A változás megfelelő határok között arányosítható a molekuláris kapcsolódások számával, így a kapcsolódó molekulák koncentrációjával.

A felületi réteg elektromos vezetési tulajdonságai a rétegen kívüli, oldatfázisban lévő töltéshordozókkal szemben vizsgálhatók. A diffúzió hatását kiküszöbölő lehetőség az elektródon lévő felületi réteghez kötött töltéshordozók detektálása. Az elektroaktív réteg szerkezete megváltozik a molekuláris felismerés és kapcsolódás következtében, az elektromos jel információt nyújt a szerkezetváltozás, azaz a reakció mértékéről.

A GINOP "Bionanotechnológiai kutatások betegségek hatékony kimutatása, újfajta hatóanyagok kifejlesztése és bioinspirált intelligens nanoanyagok előállítása érdekében" projekt keretén belül olyan elektroaktív nanorétegeket fejlesztünk és vizsgálunk, amelyek affinitás szenzorokban történő alkalmazásával sejtfelszíni tumormarkerek meghatározása válik lehetségessé. Ferrocéntartalmú önszerveződő monorétegek és redox aktív polimer vékonyrétegek kialakításával olyan nanorétegeket állítunk elő, amelyek megfelelő módosításával sejtfelszíni specifikus kölcsönhatások számszerűsítését szeretnénk megoldani.

# ***Chlorella vulgaris* ülepedésének vizsgálata**

## ***Examination of sedimentation of Chlorella vulgaris***

**Kiss Bernadett, Németh Áron**

*BME, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

*H-1111 Budapest, Műegyetem rpt. 3.*

---

### **Összefoglaló**

Számos technológiát használnak algák tenyésztésére, bioüzemanyagok, kozmetikumok vagy például élelmiszer előállítására, de a feldolgozási technikák költségének csökkentése a mai napig kihívást jelent. A mikroalgák igen kis sejt méretűek és leggyakrabban egysejtes mikroorganizmusok, amely problémát okoz a feldolgozási lépésekben. Eltérő folyamatokat alkalmaznak attól függően milyen az alga sejt mérete, olajtartalma, a szuszpenzió sűrűsége vagy éppen a kívánt termék [1].

A centrifugálás az egyik legelterjedtebb technika az alga sejtek szeparálására, melynek több mint 90%-os a hatékonysága. Hátránya a nagy energia igénye, amely nagy léptékű reaktoroknál vagy medencéknél túl költséges. Egy kisebb üzemeltetési költségű eljárás a gravitációs üleptetés, viszont itt számolni kell az ülepedéshez szükséges idővel. Különböző üleptető medencékkel, adalékokkal és szeparátorokkal próbálják a hatékonyságot növelni. A koaguláció egy olyan downstream műveleti típus, mely során az iparban használnak baktérium-, gomba-, kémiai és alga eredetű koaguláló anyagokat, hogy aggregáció után elősegítsék a mikroalgák flotációját vagy üleptetését. [1-3]

Munkánk során mikroléptékű fermentációkat végeztünk 24 cellás microplate-n. A *Chlorella vulgaris* szuszpenzió egyedi gyártású RGB LED modullal volt megvilágítva, melynek egyes oszlopait külön tudtuk megvilágítani. Kísérletünkben három különböző intenzitású fehér fény hatását vizsgáltuk. Ebben a kutatásban a tenyésztés közbeni megvilágítás ülepedésre gyakorolt hatását vizsgáltuk.

### **Summary**

Lot of technologies are used for algae cultivation for example manufacturing of biofuels, cosmetics, food etc, but the cost efficient harvesting is a major challenge. Microalgae are very small and often unicellular microorganisms. These cause problem in the harvesting process. Different methods can be tailored toward each step depending on the algae size and type, the lipid content, cell density of algae suspension and the desired end product [1].

Centrifugation is one of the most common techniques to separate the algae cells, with recovery in excess of 90%. Energy consumption is high and may be too costly for large scale reactors or ponds. Gravity forced sedimentation has a lower operational cost but it takes a long time for the cells to be concentrated. Different sedimentation pond and separator are used to increase efficiency. Coagulation is another downstream operation, in which the industry use bacterial, fungal, chemical and algal coagulants aid in the flotation or settling of microalgae. [1-3]

In this research we made microscale fermentations in a 24 well microplate. *Chlorella vulgaris* suspension was lighted with an RGB LED module allowing regulation of the illumination of every single column. In this cultivation we used three intensity of white light. In this study we try to measure the effect of lighting on sedimentation during cultivation.

[1] Cheruvu, S., Van Ginkel, S., Wei, X., Zhang, X., Steiner, D., De Oliveira, S. R., Lee, H. J. (2016). Algae harvesting 13. Membrane Technologies for Biorefining, pp: 309-328

[2] Chatsungnoen, T., Chisti, Y. Harvesting microalgae by flocculation–sedimentation. Algal Research (2016) Vol.: 13, pp: 271–283.

[3] Sim, T. S., Goh, A., & Becker, E. W. (1988). Comparison of centrifugation, dissolved air flotation and drum filtration techniques for harvesting sewage-grown algae. Biomass, Vol.: 16(1) pp: 51-62.

---

# Lignin valorizálása katalitikus depolimerizálással

## *Lignin valorization by catalytic depolymerization*

Tamás I. Korányi<sup>a,b</sup>, Xiaoming Huang<sup>b</sup>, Emiel J.M. Hensen<sup>b</sup>

<sup>a</sup>MTA Energiatudományi Kutatóközpont, 1121 Budapest, Konkoly Th. M. út 29-33.

<sup>b</sup>Inorganic Materials Chemistry, Eindhoven University of Technology, P.O.Box 513, 5600 MB Eindhoven

---

### Összefoglaló / Summary

A fák és növények szerkezeti integritását adó lignin a cellulóz után második leggyakrabban előforduló biopolimer a Földön. Fenilpropán szerkezeti egységekből épül föl, amelyek egymáshoz C-C és C-O-C kötésekkel kapcsolódnak. Napjainkban a papíripar melléktermékeként képződő technikai lignineket legtöbbször elégetik. A lignin értékesebb aromás vegyszerekké (pl. benzol-, toluol- és xilol-származékokká) vagy bioüzemanyagokká alakítható katalitikus depolimerizációval. CuMgAl kevert oxid (CuMgAlO<sub>x</sub>) katalizátort alkalmazva depolimerizáltunk technikai lignint szuperkritikus etanolban 300-380°C-on és 86 súly% maximális lignin monomer hozamot értünk el [1-3]. A fa biomasszában előforduló természetes lignin több C-O-C éter kötést tartalmaz, mint a technikai lignin, ezért előbbi valorizálási kondíciói enyhébbek lehetnek. Kifejlesztettünk egy újszerű, egy reaktorban lejátszódó katalitikus folyamatot, amelyben a fa biomassza kisszámú mono-aromás vegyületté és folyékony üzemanyag komponenssé alakult (cellulózban gazdag szénhidrátok mellett). Egy tandem fém-triflát és Pd/C katalitikus rendszert és metanol oldószert használtunk alacsony (160-200°C) hőmérsékleten és 54 súly% maximális lignin monomer hozamot értünk el [4-5]. A lignin monomer származékok oxigén tartalmát tovább kell csökkenteni aromás jellegük megőrzése mellett. Ezt a célt úgy értük el, hogy a már bevált CuMgAlO<sub>x</sub> katalizátort Ni-tartalmú katalizátorokkal kombináltuk [6]. A CuMgAlO<sub>x</sub> – Ni<sub>2</sub>P/SiO<sub>2</sub> katalizátor keverék bizonyult a leghatásosabbnak; 340°C-on 53 súly%-os lignin monomer hozamot értünk el, ugyanakkor az aromás termékek oxigénmentesítése közel teljessé vált (83 % hidroxidoxigén szelektivitás mellett).

Lignin - after cellulose – is the second most abundant biopolymer on Earth derived from wood and plants and provides their structural integrity. It is composed of phenylpropane units linked to each other by C-C and C-O-C bonds. Currently most technical lignins are burned as by-products of the pulping industry. Lignin can be valorized by catalytic depolymerization to valuable aromatic chemicals (e.g. benzene, toluene and xylene (BTX) derivatives) or to biofuels. We effectively depolymerized technical lignin over a CuMgAl mixed oxide (CuMgAlO<sub>x</sub>) catalyst in supercritical ethanol at 300-380°C up to 86 wt% lignin monomers yield [1-3]. Native lignin in woody biomass consists of more C-O-C ether bonds than technical lignin, therefore its valorization conditions can be milder. We have developed a novel one-pot catalytic conversion of woody biomass into a limited number of mono-aromatics and liquid fuel components (beside cellulose-rich carbohydrates) by a tandem metal triflate and Pd/C catalyst system under mild (160-200°C) conditions in methanol solvent and reached up to 54 wt% lignin monomers yield [4-5]. It is desirable to lower the oxygen content of lignin monomers but keeping their aromatic character. We reached this goal by combining our CuMgAlO<sub>x</sub> catalyst with Ni-based co-catalysts [6]. Mixing CuMgAlO<sub>x</sub> with Ni<sub>2</sub>P/SiO<sub>2</sub> proved to be effective in increasing the lignin monomers yield to 53 wt% at 340°C, whilst at the same time we got nearly complete (83 %) hydrodeoxygenation selectivity of the aromatic products [6].

---

### Irodalomjegyzék

- [1] Huang, X., Korányi, T.I., Boot, M.D., Hensen, E.J.M., *ChemSusChem*, 7, 2276-2288 (2014)
- [2] Huang, X., Korányi, T.I., Boot, M.D., Hensen, E.J.M., *Green Chemistry*, 17, 4941-4950 (2015)
- [3] Huang, X., Atay, C., Korányi, T.I., Boot, M.D., Hensen, E.J.M., *ACS Catalysis*, 5, 7359-7370 (2015)
- [4] Huang, X., Zhu, J., Korányi, T.I., Boot, M.D., Hensen, E.J.M., *ChemSusChem*, 9, 3262-3267 (2016)
- [5] Huang, X., Morales Gonzalez, O.M., Zhu, J., Korányi, T.I., Boot, M.D., Hensen, E.J.M., *Green Chemistry*, 19, 175-187 (2017)
- [6] Korányi, T.I., Huang, X., Coumans, A.E., Hensen, E.J.M., *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, in press (2017)

# Aeroszol minták ökototoxicitásának vizsgálata az OECD Magasabrendű Növények Vegetatív Növekedésgátlás tesztprotokollja alapján

*Assessing ecotoxicity of aerosol samples adapting the OECD Terrestrial Plant Test:  
Vegetative Vigour Test*

**Nora Kováts\*<sup>1</sup>, Eszter Horváth<sup>1</sup>, Bettina Eck-Varanka<sup>1</sup>, Katalin Eszter  
Hubai<sup>1</sup>, Gábor Teke<sup>2</sup>, András Hoffer<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*University of Pannonia, Institute of Environmental Sciences*

*H-8200 Veszprém, Egyetem str. 10 (Hungary)*

<sup>2</sup>*ELGOSCAR-2000 Környezettechnológiai és Vízgazdálkodási Kft*

*H-8184 Fűzfőgyártelep, Hrsz. 1500/43*

\* Corresponding author: kovats@almos.uni-pannon.hu, +36-88-624317

---

## Összefoglaló/ Summary

A levegőszennyezés, illetve a levegőszennyező komponensek ökoszisztémákra gyakorolt káros hatását számos bioindikációs és biomonitoring vizsgálat támasztja alá. A terepen végzett felmérések ugyanakkor nem adnak információt arról, mekkora volt maga az ökológiai hatást kiváltó terhelés mértéke, ill. az expozíció időtartama sem adható meg. A Szárazföldi Növények Növekedésgátlásának vizsgálata c. 227. sz. OECD Szabványt eredetileg növényvédő szerek ökototoxicitásának, pontosabban fitotoxicitásának ellenőrzésére fejlesztették ki. Vizsgálataink során azt ellenőriztük, az OECD Szabvány alkalmazható-e aeroszol minták ökototoxicitásának becslésére. A vizsgálatokhoz Budapesten, a Gilice téren 2014.12.25 és 2015.01.07 között Digitel DHA-80 nagy térfogatú mintavevővel üvegszálás szűrőkre gyűjtött minták vizes kivonatát használtuk. A Szabvány szerint *Cucumis sativus L.* tesztnövényeket alkalmaztunk, a tesztanyagot a levelekre permetezve jutattuk ki. A Szabványban előírt 21 napos expozíciós idő után értékeltük a kontrollhoz képest a kezelt növények növekedési erélyét, ill. a látható elváltozásokat. Azt tapasztaltuk, hogy alacsonyabb koncentrációban az aeroszol mintában jelenlévő tápanyagok hatására a kontrollhoz képest erőteljesebb növekedés volt tapasztalható, a nagyobb koncentrációval történő kezelés ugyanakkor szemmel látható elváltozásokat (nekrotikus foltok) okozott.

A tanulmány elkészítését a a GINOP-2.3.2-15-2016-00017 azonosítószámú, „Bionanotechnológiai kutatások betegségek hatékony kimutatása, újfajta hatóanyagok kifejlesztése és bioinspirált intelligens nanoanyagok előállítására” című projekt támogatta. Hubai Katalin munkáját az „A Pannon Egyetem átfogó intézményfejlesztése az intelligens szakosodás elősegítése érdekében EFOP-3.6.1-16-2016-00015” projekt támogatta.

Deleterious effect of air pollution and airborne pollutants on ecosystems has been proven by numerous bioindication and biomonitoring studies. However, field studies do not give proper information on the magnitude of the stress triggering ecological impact, also, exposure remains unknown. The No. 227 OECD GUIDELINE FOR THE TESTING OF CHEMICALS: Terrestrial Plant Test: Vegetative Vigour Test was originally developed for assessing the phytotoxicity of plant protection products. Our study was aimed at assessing the applicability of the Guideline to evaluate the ecotoxicity of aerosol samples. For the tests, aqueous extract of PM10 aerosol samples collected at the main observatory of the Hungarian Meteorological Service (at Gilice square) in Budapest, between 25.12.2014 and 06.01.2015. Samples were collected by a high volume sampler Digitel (DHA-80) on glass fibre filters. As described by the Guideline, *Cucumis sativus L.* plants were sprayed with the extract. After the termination of the 21 exposure prescribed by the Guideline, growth rate of the test plants was assessed in comparison to the control. Also, visual symptoms were evaluated. Our results showed that the extract elucidated stimulatory effect the growth of the test plants, most possibly due to nutrients present in atmospheric aerosol. On the other hand, higher concentrations caused the development of visible symptoms such as necrotic spots.

---

# Dinamikus szimulátor fejlesztése: Fenol előállítása kumolból

*Development of dynamic process simulator: Phenol production from cumene*

**Alex Kummer, Tamás Varga**

*University of Pannonia, Department of Process Engineering  
10, Egyetem St. Veszprém, H-8200*

---

## Összefoglaló/Summary

Megbízható és biztonságos technológiák tervezése az egyik legfontosabb feladatuk a mérnököknek. Dinamikus folyamat szimulátorok fejlesztése segítheti a mérnököket, hogy a veszélyes állapotokat felmérjék, valamint ezek tapasztalatot nyújthatnak az üzemeltető operátoroknak is. Ilyen célból készítettük el egy fenol előállító rendszer dinamikus szimulátorát. Fenol előállítása kumolból egy intermedieren keresztül történik, ami a kumol-hidroperoxid (CHP). A CHP jelentős hőfejlődés közben bomlik, ami a reaktor elfutásához vezethet. Az elkészített dinamikus szimulátort a jövőben biztonsági elemek, megoldások tesztelésére, összehasonlítására és azok fejlesztésére tervezzük felhasználni.

Engineers' one of the most important task to design reliable and safe technologies. Development of dynamic process simulators can help engineers to identify hazard conditions, which can also give experience for operators. For this purpose a dynamic simulator of phenol production system has been developed. Phenol production from cumene happens through a formation of intermediate, called cumene-hydroperoxide (CHP). CHP can decompose easily in exothermic reactions resulting reactor runaway. In the future, the developed dynamic simulator will be used to test, compare and improve safety elements.

---

## Introduction

Chemical engineers' most crucial task is to design reliable and safe process systems to produce valuable chemical products. Usually, the biggest challenge in such a task is the optimal design of the conversion system, which starts with the characterization of the safety operating conditions to ensure the prevention of any undesirable situation.

Engineers have applied steady-state process simulators for years now to explore the operating regimes of optimal and hazard conditions. Nowadays process dynamic simulators (DPS) become more and more important, and it already has a widespread use. The major application of DPS is in the development of operator training simulators with the aim of training operational staff of chemical technologies. Process operators can learn:

- chemical plant start-up and shutdown situations;
- handling process interlocks and trips;
- steady-state operations at different operating points etc.

Dynamic simulators help to understand the chemical technology, plant control theory and operation. It provides confidence in normal and abnormal operations. Moreover, in dynamic simulations engineers are able to check and develop control systems before the actual start-up. Another possibility in dynamic simulator is designing, developing and testing safety systems to avoid any possible unsafe situations. Modified operating parameters can lead to malfunctions, and these can be prevented if the operators know well the behavior of the technology.

This work is about to develop a dynamic simulator of a hazard reactor system, on which we will be able to test the behavior of the system due to some possible malfunctions, and to design safety elements to decrease the risk of these malfunctions. As a case study, production of phenol was chosen based on cumene oxidation with air. CHP is an intermediate in this technology containing weak oxygen bonds, which can decompose upon exposure to acids, bases,



contaminants, heat etc. This highly exothermic decomposition can lead to development of reactor runaway, which can cause the exposition of reactor.

### Case study

Almost all used phenol is from synthetic processes. Hercules and BP Chemicals started to develop the cumene-hydroperoxide (CHP) route to phenol. Nowadays worldwide phenol production is based on this technology [1].

Phenol producing from cumene takes two reaction steps. The first reaction is the oxidation of cumene (1), where air bubbles through liquid cumene. The second reaction is cleaving CHP under acidic conditions to produce phenol as product and acetone as a co-product (2). Both reactions are highly exothermic.



Oxidation of cumene is auto-catalyzed by CHP, and proceeds via a free-radical mechanism. This mechanism causes many side-reactions which take place simultaneously. Quantity of by-products can be reduced by optimizing the process conditions. The main oxidation byproducts are dimethyl-benzil-alcohol (DMBA) and acetophenone (AP). Main byproducts are formed in the next reactions (3-4):



CHP concentration and temperature have positive effect on the quantity of byproducts. Therefore, the CHP concentration should be kept 25-30%, and the temperature is decreased as the CHP concentration increases [2]. The second main reaction is the acid-catalyzed cleavage of CHP to produce phenol and acetone. Many reactions occur as a result of free-radical mechanism. Primary side reactions here are forming DMBA from cumene and CHP, and forming acetophenone plus methanol from CHP [3].

For the purpose of developing dynamic simulator, a simplified reaction kinetic has to be identified. J.P. Fortuin carried out the oxidation reaction of cumene at 110 °C and 120 °C, and measured the concentration of CHP in function of time [4]. Hattori carried out the oxidation reaction at 120 °C temperature too, but with different initial CHP concentration [5]. Weber measured at 100 °C the concentration of main byproducts in function of time [6].

Reaction kinetics has been identified based on the above mentioned measurements and (1, 3-4) reaction steps considered as a part of the reaction mechanism. The fit of the model is shown in Figure 1. The following reaction rate equations characterize the kinetics. The identified kinetic parameters for oxidation reaction are shown in Table 1.

$$r_{ox} = k_{0,ox} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,ox}}{RT}\right) \cdot c_{cumene} \cdot c_{CHP}^{0.5} \quad (5)$$

$$r_{s1} = k_{0,s1} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,s1}}{RT}\right) \cdot c_{CHP} \quad (6)$$

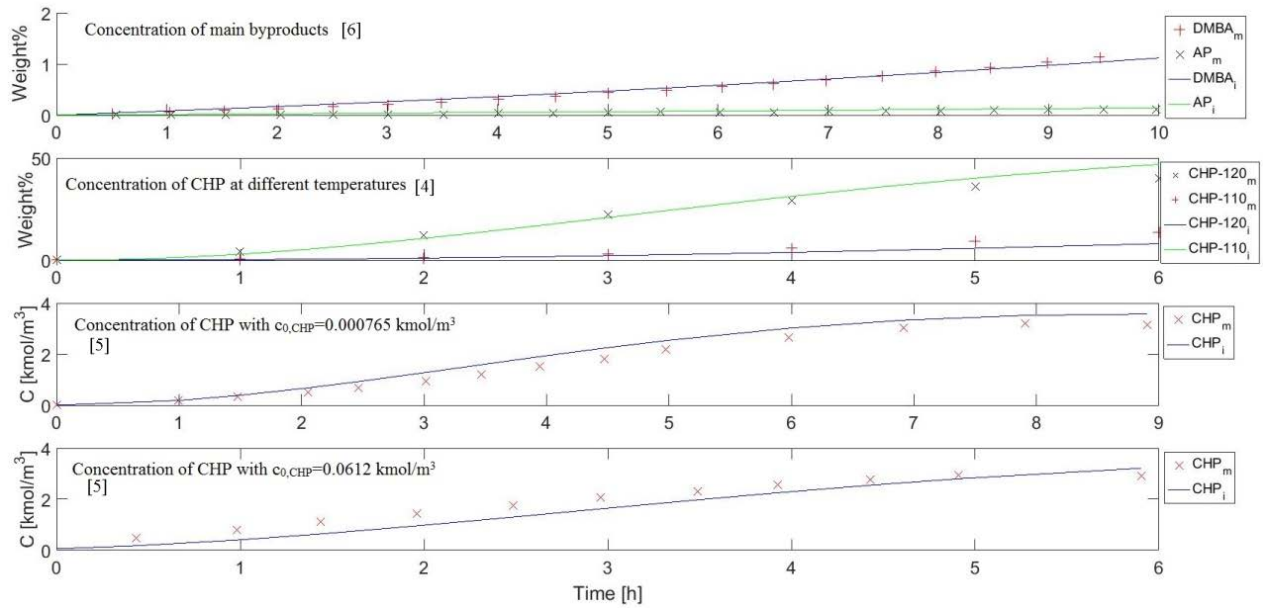
$$r_{s2} = k_{0,s2} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,s2}}{RT}\right) \cdot c_{CHP}^{0.5} \quad (7)$$

Cleavage of CHP occurs under acidic conditions. Beside the production of phenol, two side reactions take place, which are the same as in oxidation reaction. Levin measured that acidic conditions influence the reaction rates, therefore the by-side reactions have different reaction kinetic parameters and equations in oxidation and cleavage section. The following reaction rate equations characterize the kinetics, where  $m=126.7 \text{ m}^3/\text{kmol}$ . Levin identified the reaction kinetic parameters for the acid-catalyzed cleavage, which are shown in Table 1 [3].

$$r_p = k_{0,p} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,p}}{RT}\right) \cdot \exp(m \cdot c_{acid}) \cdot c_{acid} \cdot c_{CHP}^2 \quad (8)$$

$$r_{s3} = k_{0,s3} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,s3}}{RT}\right) \cdot c_{cumene} \cdot c_{CHP} \quad (9)$$

$$r_{s4} = k_{0,s4} \cdot \exp\left(-\frac{E_{A,s4}}{RT}\right) \cdot c_{CHP} \quad (10)$$



**Figure 1.** Fit of the kinetic model (continuous lines) to the measured data (markers)

**1. Table.** Reaction kinetic parameters for oxidation and cleavage

Reaction step		Pre-exponential factor ( $k_0$ )	Unit	Activation energy [kJ/kmol]
Oxidation section (identified)	(1) reaction	$7.4214 \cdot 10^{19}$	$[\text{m}^{4.5}/(\text{kmol}^{1.5} \text{ h})]$	$1.5650 \cdot 10^5$
	(3) reaction	$1.6119 \cdot 10^{18}$	[1/h]	$1.4607 \cdot 10^5$
	(4) reaction	$2.2752 \cdot 10^{18}$	$[\text{m}^{1.5}/(\text{kmol}^{0.5} \text{ h})]$	$1.5169 \cdot 10^5$
Cleavage section	(2) reaction	$2.8800 \cdot 10^{21}$	$[(\text{m}^3/\text{kmol})^2/\text{h}]$	$1.5100 \cdot 10^5$
	(3) reaction	$6.3000 \cdot 10^{15}$	$[\text{m}^3/(\text{kmol} \text{ h})]$	$1.1510 \cdot 10^5$
	(4) reaction	$5.2200 \cdot 10^{14}$	[1/h]	$1.2550 \cdot 10^5$

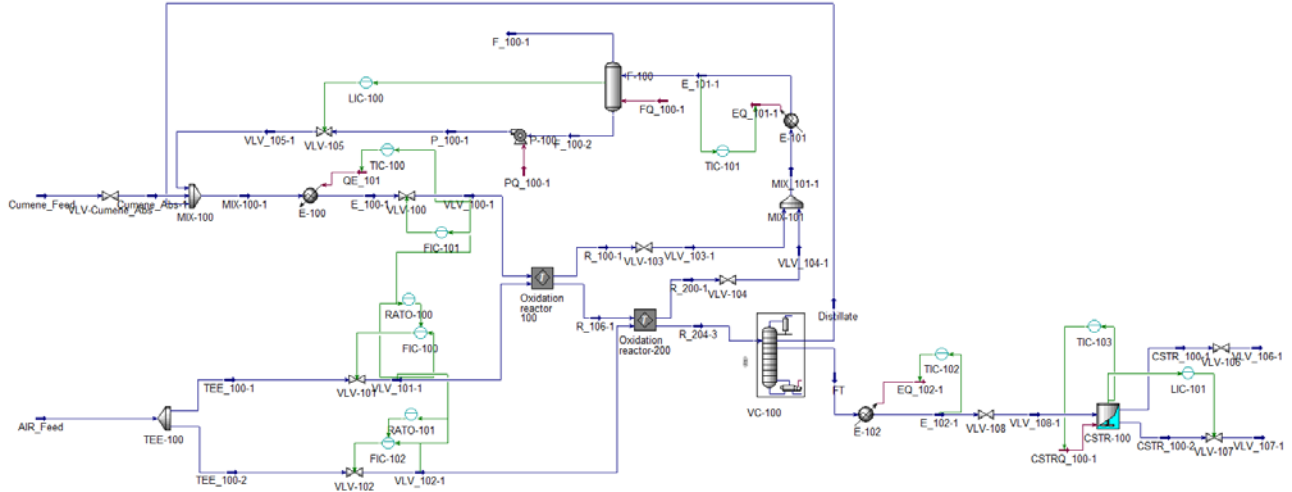
### Dynamic simulator of reactor system

Dynamic simulator of above mentioned reactor system has been developed in Aspen HYSYS. The major processing steps are the following:

- liquid-phase oxidation of cumene to CHP in series-flow bubble columns;

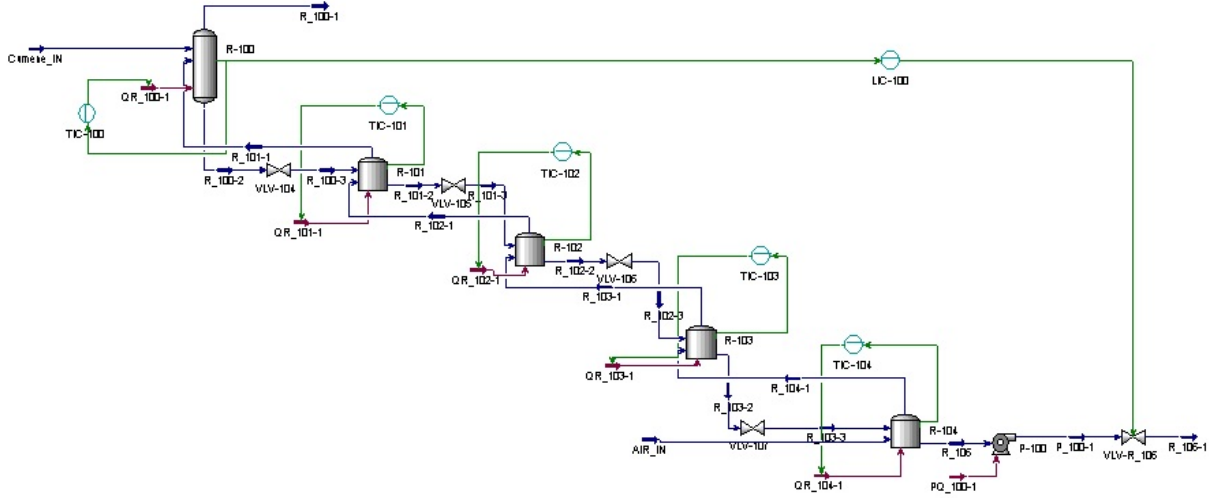
- concentration of CHP under vacuum;
- acid-catalyzed cleavage of concentrated CHP to produce phenol and acetone.

The dynamic simulator of investigated system is shown in Figure 2. The bubble columns have five sections, with inner cooler. The simulator of oxidation column was developed by four tank and a flash. All section is temperature controlled, and also the level of column is controlled. Air from oxidation columns contains cumene and CHP too, therefore this air stream is cooled down via E-101, and the liquid organic phase is separated from air in F-100 flash. Liquid phase is recycled to oxidation section.



**Figure 2.** Simulator of reactor system

In the oxidation section the fresh cumene with recycled cumene streams are pumped to bubble columns. Two oxidizers are in series with respect to cumene, but in parallel with respect to air. Cleaned atmospheric air is used for reaction. The residence time is between 5-6 hours overall. The dynamic simulator of the oxidation section is shown in Figure 3.



**Figure 3.** Simulator of oxidation sections

Concentration of CHP occurs under vacuum. Packed column is used to separate the cumene from CHP. Cumene comes as a distillate, and recycled to oxidation columns. Concentrated CHP (~60 w%) comes as bottom product, and flows to the cleavage section. Dynamic simulator of vacuum column is shown in Figure 4.

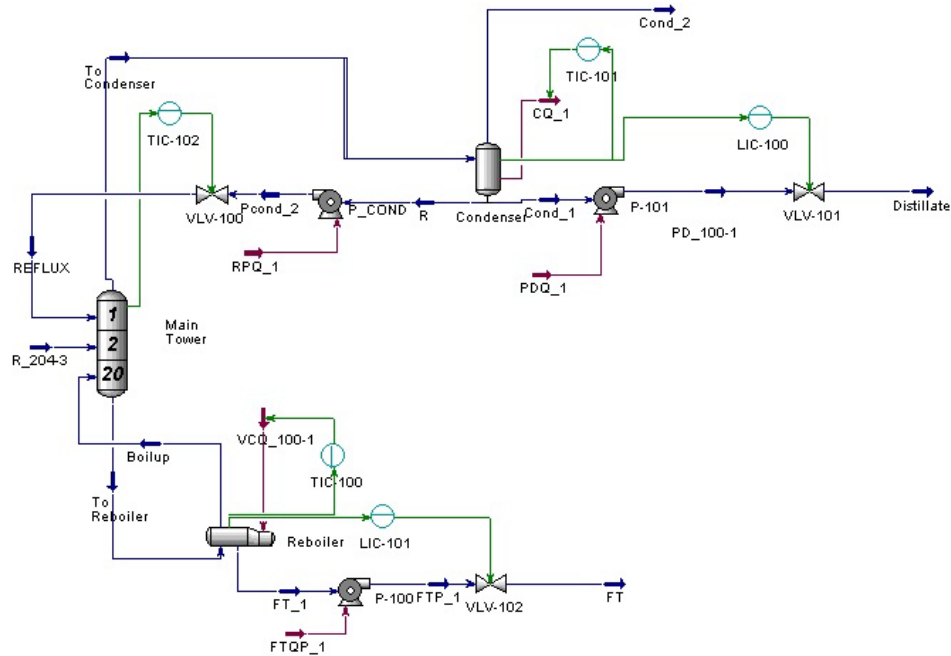


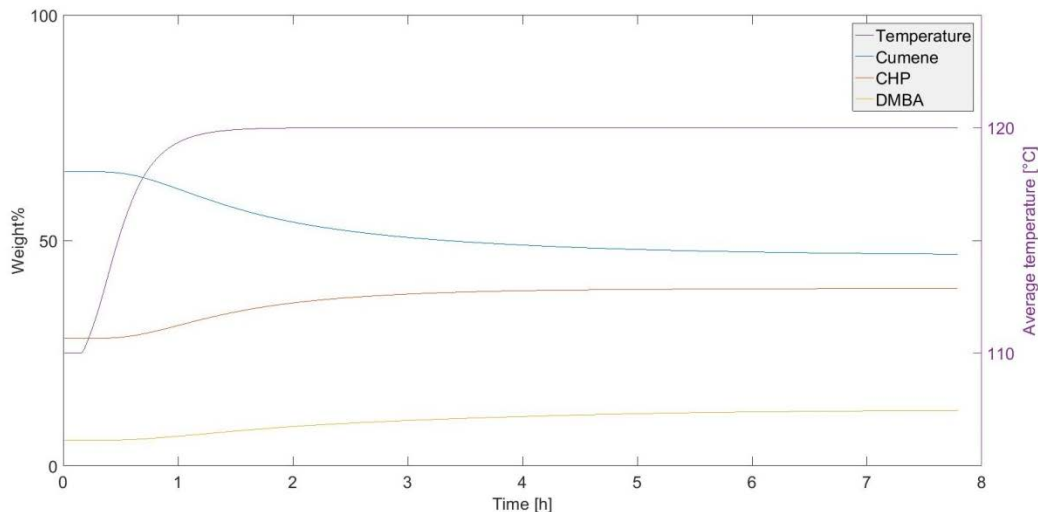
Figure 4. Simulator of vacuum column

Cleavage of CHP occurs in a continuous stirred tank reactor (CSTR). Beside the level controlling, temperature is need to be controlled due to highly exothermic reactions. Conversion and selectivity of oxidation sections, and also of the cleavage section is shown in Table 2.

2. Table. The calculated conversion and selectivity in the system

	Oxidation section 1.	Oxidation section 2.	Cleavage reactor
Conversion [%]	18.28	9.93	95.01
Selectivity of main product [%]	78.69	72.98	96.32

Effect of temperature increase in second oxidation section has been analyzed, where the setpoint of temperature controllers increased from 110 °C to 120 °C. As a result of temperature increase the concentration of cumene decreased, but the concentration of CHP and DMBA increased due to higher reaction rate, which is shown in Figure 4. Five temperature controllers operate here for the five column sections, but only one temperature is indicated in Figure 5., which is the average of present values with respect to time.



**Figure 5.** Cumene, CHP and DMBA concentration trajectories in the second oxidation section due to temperature increase

## Conclusion

In this paper simplified oxidation reaction kinetics has been identified based on measurements found in literature, and also the dynamic simulator of reactor system of phenol production technology has been developed in Aspen HYSYS. The simulator gives reliable results based on the identified reaction kinetics. Therefore, it is applicable to model operation malfunctions, hazard situations and safety elements. In the future, the gained experience during this work can be applied in the development of dynamic simulators including hetero-catalytic reactors, like the production of high hydrogen content (in molecular structure) fuels from vegetable oils by hydrocracking.

## Acknowledgement

We acknowledge the financial support of Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00053. The proposed results can be applied in the development of catalytic production of high hydrogen content (in molecular structure) fuels.

## References

- [1] E. Química, „Cumene oxidation to cumene hydroperoxide,” Universidade Técnica de Lisboa, 2009.
- [2] R. J. Schmidt, „Industrial catalytic processes - phenol production,” *Applied Catalysis A: General*, pp. 89-103, 2005.
- [3] M. E. Levin, N. O. Gonzales, L. W. Zimmerman, J. Yang, „Kinetics of acid-catalyzed cleavage of cumene hydroperoxide,” *Journal of Hazardous Materials*, pp. 88-106, 2006.
- [4] J. P. Fortuin, H. I. Waterman, „Production of phenol from cumene,” *Chemical Engineering Science*, pp. 182-192, 1958.
- [5] Kazuo Hattori, Yuji Tanaka, Hiroyuki Suzuki, Tsuneo Ikawa, Hiroshi Kubota, „Kinetics of liquid phase oxidation of cumene in bubble column,” *Journal of Chemical Engineering of Japan*, pp. 72-78, 1970.
- [6] M. Weber, „Large Bubble Columns for the Oxidation of Cumene in Phenol Processes,” *Chemical Engineering Technology*, pp. 553-558, 2002.

# **Ibuprofén rezolválása (S)-2-fenilglicinollal szuperkritikus széndioxid oldószerben**

*Resolution of ibuprofen with (S)-2-phenylglycinol in supercritical carbon dioxide*

**Lőrincz László<sup>1</sup>, Madarász János<sup>2</sup>, Sohajda Tamás<sup>3</sup>, Székely Edit<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék*

*1111 Budapest, Budafoki út 8.*

<sup>2</sup>*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*  
*1111 Budapest, Szent-Gellért tér 4.*

<sup>3</sup>*Cyclolab Kft*

*1097 Budapest, Illatos út 7.*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

A kiralitáscentrumot tartalmazó molekulák optikai izomerjeinek szétválasztása mind környezetvédelmi szempontból, mind pedig élettani szempontból fontos feladat. Az ibuprofén (IBU) egy kiralitáscentrumot tartalmazó gyulladáscsökkentő fájdalomcsillapító gyógyszer, gyakran racém formában forgalmazzák, viszont az (S) enantiomer hatása közel 100-szor erősebb. A racém ibuprofén rezolválásának egy zöld és környezetbarát lehetősége a szuperkritikus széndioxidban történő diasztereomer sóképzésen alapuló in situ módszer.

Az általunk vizsgált in situ eljárás lényege, hogy a szerves savat reagáltatjuk félmolekvalens mennyiségű enantiomertiszta szerves bázissal tiszta széndioxid oldószerben egy nyomásálló készülékben. Először szakaszos kevert reaktorként működtetve lezajlik a sóképzés, majd széndioxid átáramoltatásával folyamatos kevert tartályként üzemeltetve lezajlik az extrakciós lépés.

Munkánk során az ibuprofén (S)-2-fenilglicinollal (Phg) történő rezolválását vizsgáltunk szuperkritikus széndioxid reakció közegben. Jelentős hatása van a reakció időnek, mind az enantiomer tisztaságra, mind a termelés értékére, az általunk vizsgált 1-166 óra intervallumban. A reakció idő hatását részletesen vizsgáltuk 100-150-200 bar és 30-42,5-50 °C-on. A reakció időt növelve a raffinátum enantiomer tisztasága növekszik növekvő termeléssel, míg az extraktum enantiomer tisztasága is növekszik, csökkenő termeléssel, így az elválasztás jóságát jellemző Fogassy-féle F paraméter a reakció idő növelésével növekszik, körülbelül 24 óra után állandó értéket vesz fel. A raffinátumok egy részének pörörtöng felvételein jól kimutatható az (S)-fenilglicinol karbamát melléktermék.

A kutatómunkát az OTKA (K108979) támogatta.

The separation of optically active compounds is an important issue in an environmental and physiological point of view. Ibuprofen (IBU) is a widely applied analgesic compound with one chirality center, that is often marketed in racemic form. However, the bioavailability of pure (S)-IBU is 100 times higher than that of the racemic form. The resolution of racemic ibuprofen by using antisolvent crystallization based on in-situ diastereomeric salt formation is a green and environmentally friendly possibility.

In the studied in-situ process, a reaction is carried out between the organic acid and 0.5 molar equivalent enantiomer pure organic acid in pure CO<sub>2</sub> solvent in a high pressure vessel. First the salt formation is carried out, using the equipment as a batch reactor. Then, washing with CO<sub>2</sub>, the reactor operates as a continuous stirred tank reactor while the extraction is carried out.

In this work we studied the resolution of ibuprofen with (S)-2-phenylglycinol (Phg) in supercritical CO<sub>2</sub> solvent. It was found that the reaction time has significant effect on the enantiomeric purity and the yield in the range of 1-166 hours. The effect of reaction time was studied in details at 100-150-200 bar and 30-42,5-50 °C. The increasing reaction time causes increasing enantiomeric purity of the raffinate with increasing yield, while the enantiomeric purity of the extract also increases but its yield decreases, thus, the F parameter (according to Fogassy) marking the effectiveness of separation is increasing with the reaction time and after 24 hours it reaches a constant value. The (S)-phenylglycinol carbamate byproduct can be clearly detected on the x-ray powder diffractogram of some raffinate.

This work was supported by OTKA (K108979)

---

# Alifás és aromás karbonsavak nagyhatékonyságú elválasztása makrociklikus anioncsere-kromatográfiával

*High-performance separation of aliphatic and aromatic carboxylic acids with macrocycle-based anion chromatography*

**Lukács Diána, Horváth Krisztián, Horváth Ottó, Hajós Péter**

*Pannon Egyetem, Kémia Intézet  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## Összefoglaló

A különféle mintamatrixokban előforduló karbonsavak elválasztása és azonosítása számos kérdésre választ adhat a környezeti kémia, élelmiszer kémia, fotokémia, élettudomány, valamint a gyógyszeripar területén. Ezen gyenge elektrolitok hidrophil tulajdonságuk révén biológiai szempontból is kiemelt jelentőségűek.

Karbonsavak elválasztására jellemzően három különböző folyadékkromatográfiai technikát, az anioncsere, az ionkizárásos illetve a fordított fázisú kromatográfiát alkalmazzák [1, 2]. Az említett módszerek esetében az izokratikus elúció nem teszi lehetővé az eltérő szerkezetű alifás és aromás karbonsavak egyidejű, szelektív vizsgálatát. Szükség van tehát egy olyan módszerre, mely rövid analízisidő mellett biztosítja a többértékű gyenge szerves savak hatékony elválasztását.

A makrociklus alapú kromatográfia – összehasonlítva a korábban említett technikákkal - több előnyös tulajdonsággal is jellemezhető [3, 4]. Mivel a legtöbb makrociklikus molekula elektromosan semleges, a kation makrociklusba való komplexálódása révén egy pozitív töltésű funkcionális csoport jön létre, amely nagy szelektivitású anioncsereelőként viselkedik. Ezen rendszer esetében az eluens koncentráció változtatásával egyszerűen szabályozható a retenció, valamint az eluens kation (Li, Na, K) megválasztásától függően – az ioncserekapacitás változása révén – az oszlop szelektivitásának módosítására is lehetőség van.

Munkánk során retenciós modellt dolgoztunk ki, felhasználva 16 különböző karbonsav (ecetsav, tejsav, propionsav, piroszőlősav, oxálsav, malonsav, maleinsav, borostyánkősav, adipinsav, pimelinsav, fumársav, benzoésav, ftálsav, szalicilsav, trifluorecetsav, brómkloroecetsav) kovalensen kötött, n-decil-2.2.2 kriptand (D222) funkcionális csoporttal rendelkező, makrociklus alapú anioncsereelőn izokratikus hidroxid elúció és szupresszált vezetőképességi detektálás mellett mutatott retenciós tulajdonságainak szisztematikus vizsgálata során kapott eredményeket. Vizsgáltuk azon jellemző tulajdonságokat (alifás illetve aromás jelleg, mintakomponensek töltése, kriptand molekulákra jellemző komplexképződési, protonálódási és ioncsere egyensúly), melyek meghatározzák a karbonsavak makrociklikus ionkromatográfiában történő elválasztását. Leírtuk a különböző szerkezetű karbonsavak alkalmazott elúciós körülmények között mutatott retenciós viselkedését, mely eredmények hasznos gyakorlati információval szolgálhatnak egy új elválasztási módszer kidolgozásához.

## Irodalomjegyzék

- [1] Hajós, P., Nagy, L., *J. Chromatogr B*, 717, 27-38 (1998)
- [2] Sarzanini, C., Bruzzoniti, M., Hajós, P., *J. Chromatogr A*, 867, 131-142 (2000)
- [3] Bruzzoniti, M. C., Hajós, P., Horváth, K., Sarzanini, C., *Acta Chim. Slov.*, 54, 14-19 (2007)
- [4] Bruzzoniti, M. C., De Carlo, R. M., Horváth, K., Perrachon, D., Prella, A., Tófalvi, R., Sarzanini, C., Hajós, P., *J. Chromatogr. A*, 1187, 188-196 (2008)

## Köszönetnyilvánítás

A kutatást az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA PD104819), valamint a Magyar Kormány és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 azonosító számú projektek támogatták.

---

## Summary

Separation and identification of carboxylic acids in a wide variety of complex matrices had been used to determine the answers to several questions or to serve the environmental chemistry, food chemistry, photochemistry, life science and pharmaceutical industries. As hydrophilic weak electrolytes belong also to a class of compounds of high biological importance.

Carboxylic acids are separated usually by three different liquid chromatography: anion-exchange, ion-exclusion and reversed phase chromatography [1, 2]. However, these methods by isocratic elution cannot provide a complete chromatogram with high selectivity of the homologous series of aliphatic and aromatic carboxylic acids. Therefore a rapid method for separation of multiprotic weak organic acids is required.

Macrocyclic based anion chromatography offers several advantages over existing techniques [3, 4]. Since most macrocycles are neutral molecules, when the cation are complexed into the macrocycle a positively charged functional group is generated which then provides the site for anion exchange with high selectivity. The system provides a convenient control of retention by the eluent concentration and allows the selectivity control of the separation column capacity by the choice of eluent cation (Li, Na, K).

In our work we report a development of retention model based on a systematic investigation of retention behaviours of 16 carboxylic acids (acetic, lactic, propionic, pyruvic, oxalic, malonic, maleic, succinic, adipic, pimelic, fumaric, benzoic, phthalic, salicylic, trifluoroacetic and bromochloroacetic acids) on a macrocyclic based anion exchanger containing covalently bound n-decyl-2.2.2 cryptand (D222) using isocratic hydroxide elution and suppressed conductivity detection. The major factors that determine the separation ability of macrocyclic ion chromatography for carboxylic acids (the aliphatic or aromatic nature, charge of solutes, complexation, protonation and ion exchange equilibria of the cryptand molecules) are discussed. The study effectively characterizes the retention behaviour of wide range of different carboxylic acids under elution conditions of practical importance using a new separation method.

## References

- [1] Hajós, P., Nagy, L., *J. Chromatogr B*, 717, 27-38 (1998)
- [2] Sarzanini, C., Bruzzoniti, M., Hajós, P., *J. Chromatogr A*, 867, 131-142 (2000)
- [3] Bruzzoniti, M. C., Hajós, P., Horváth, K., Sarzanini, C., *Acta Chim. Slov.*, 54, 14-19 (2007)
- [4] Bruzzoniti, M. C., De Carlo, R. M., Horváth, K., Perrachon, D., PELLE, A., Tófalvi, R., Sarzanini, C., Hajós, P., *J. Chromatogr. A*, 1187, 188-196 (2008)

## Acknowledgement

The research was supported by the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA PD104819) and the GINOP-2.3.2-15-2016-00016 financed by the Hungarian Government and co-financed by the European Structural Fund.

---



*Description of selectivity of antisolvent fractionation based optical resolution using solubility parameters*

**Mihalovits Máté, Kemény Sándor, Lőrincz László, Székely Edit**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem*

*1111. Budapest, Műegyetem rakpart 3.*

---

**Összefoglaló**

Munkánk során az ibuprofen, alkoholokból történő királis elválasztását végeztük el (*R*)-1-fenil-etil-amin rezolválószer alkalmazásával, szén-dioxid antisolvens segítségével. A folyamat a szelektivitással jellemezhető, mely a hozam és a diasztereomer tisztaság szorzata. A folyamat műveleti paraméterei több módon is befolyásolják az elválasztást (oldhatóság, sűrűség, gócképződés, kristálynövekedés), ezen paraméterek hatásának megismerése sok kísérleti mérést igényel. Az antisolvens folyamat leírására a Hansen oldhatósági paramétereket használtuk fel. Először metanolos mérések eredményeire illesztettünk modellt, ahol azt találtuk, hogy szignifikáns hatása a szelektivitásra a hőmérsékletnek, nyomásnak és a Hildebrand oldhatósági paraméternek van. Az illesztett modell jóságát etanolos mérésekkel ellenőriztük. Az ellenőrző mérések körülményeinek meghatározásához kísérleti tervet készítettünk. Mindkét oldószerből végzett antisolvens frakcionáláson alapuló rezolválás jól leírható egy közös modellel melyben a hőmérséklet, nyomás és oldhatósági paraméterek szerepelnek, mint független változók. Egy, az antisolvens frakcionálásban újszerűnek számító megközelítéssel, csökkentve a kísérleti terv által meghatározott szükséges elvégzendő mérések számát vizsgáltuk a műveleti paraméterek hatásait. A kutatómunkát az OTKA (K108979) támogatta.

---

**Summary**

Optical resolution of ibuprofen with (*R*)-1-phenylethylamine resolving agent was performed by antisolvent fractionation from alcohols using carbon-dioxide as antisolvent. The process can be characterized by the selectivity which is calculated as the product of yield and diastereometric purity. The operational parameters (pressure, temperature, solvent-to-carbon dioxide ratio) affect the selectivity in the studied range, however it requires a large number of experiments to understand the nature of the effects, affecting through solubility, density, seed formation, crystal growth etc. The Hansen solubility parameters were used to build a model to describe the selectivity of the process. First a model was constructed for data that were gained in experiments with methanol as solvent. Hildebrand parameter, pressure and temperature were found to have significant effect on selectivity, thus selected as parameters of the model. The fitted model was verified by experiments in which ethanol was the solvent. For setting the experimental conditions of the verification experimental design was used. A common function was suitable to describe the selectivity as a function of solubility parameter, pressure and temperature regardless if ethanol or methanol were the solvent applied. Furthermore, the novel approach presented in this paper allows a significant reduction of the number of necessary experiments in antisolvent fractionation to map the effects of the operating parameters. This research work was supported by the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA K108979).

# Önszerveződéssel előállított nanorészecskék

*Nanoparticle formation by self-assembly*

Miskolczi Zsombor<sup>1</sup>, Harangozó József Gábor<sup>1</sup>, Biczók László<sup>1</sup>,

Véronique Wintgens<sup>2</sup>, Catherine Amiel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>MTA TTK Anyag és Környezetkémiai Intézet

<sup>2</sup>Systemes Polymères Complexes, ICMPE, CNRS

MTA Természettudományi Kutatóközpont

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2

---

## Összefoglaló/ Summary

A biokompatibilis 4-szulfonáto-kalix[6]arén (SCX6) és N-tetradecil-piridinium-bromid felületaktív vegyület vizes oldatának elegyítésével, a kísérleti körülményektől függően, jól meghatározott méretű és keskeny méreteloszlású nanorészecske (NP), vagy szupramolekuláris micella (SM) állítható elő. SCX6 hatására a kritikus micellaképződési koncentráció kb. 45-öd részére csökken 50 mmol dm<sup>-3</sup> NaCl vizes oldatában. Az SM fajlagos felülete nagyobb, mint az NP-é, így a hőmérséklet változtatásával előidézett szerkezeti átalakulással várhatóan hatóanyag felszabadulás érhető el.

Simple mixing of the aqueous solutions of the biocompatible 4-sulfonatocalix[6]arene (SCX6) with N-tetradecyl-pyridinium bromide surfactant led to thermodynamically stable nanoparticle (NP) with narrow size distribution or supramolecular micelle (SM). SCX6 promotes more than 45-fold critical micelle concentration diminution in 50 mM NaCl aqueous solution. Since the specific surface area of SMs is larger than that of NPs, the temperature-controlled SM-NP transition can be used for drug release.

A másodlagos kölcsönhatásokkal összetartott szupramolekuláris amfifilek nagy előnye a hagyományos felületaktív vegyületekkel szemben, hogy egyszerűen előállíthatók és sajátságaik könnyen szabályozhatók. A negatív töltésű 4-szulfonáto-kalix[n]arének (SCX<sub>n</sub>) az amfifil sajátságokkal rendelkező ionos folyadékok aggregálódását idézik elő [1,2]. Az SCX<sub>n</sub> polianionos karakterének köszönhetően nemcsak összeköti a protonált kitozán polimer láncait, hanem új kötőhelyet is biztosít hatóanyagok számára, ezáltal növelve az NP gyógyszerfelvevő képességét [3].

Az N-tetradecil-piridinium kation (C14Py) és 4-szulfonáto-kalix[6]arén (SCX6) közötti kölcsönhatást vizsgálva megállapítottuk, hogy a kísérleti körülmények gondos megválasztásával 65±15 nm átmérőjű nanorészecskék vagy szupramolekuláris micellák állíthatók elő. Izoterm kalorimetria mérésekkel feltártuk az NP és SM képződés termodinamikáját, meghatároztuk a moláris hőkapacitás értékeit. Megállapítottuk, hogy az SM minden vizsgált hőmérsékleten exoterm folyamatban keletkezik, míg az NP képződés 290 K alatti hőmérsékleten entalpia növekedéssel jár. A hőmérséklettel vezérelt SM–NP szerkezeti átrendeződés az SM és NP eltérő moláris hőkapacitásával van összefüggésben. Az SM csak NaCl só jelenlétében keletkezik, ami arra utal, hogy a polianion jellegű makrociklusok között fellépő elektrosztatikus taszítás meggátolja a (C14Py)<sub>n</sub>–SCX6 komplexek szupramolekuláris micellává rendeződését adalékmentes vízben.

## Irodalomjegyzék

- [1] Harangozó, J.G., Wintgens, V., Miskolczi, Z., Guigner, J.M., Amiel, C., Biczók L., *Langmuir* 32, 10651-10658 (2016)
- [2] Wintgens, V., Miskolczi, Z., Guigner, J.M., Amiel, C., Harangozó, J.G., Biczók, L., *Langmuir* 31, 6655-6662 (2015)
- [3] Harangozó, J.G., Wintgens, V., Miskolczi, Z., Amiel, C., Biczók, L., *Colloid and Polymer Science* 294, 1807-1814 (2016)

# **Szelektív kén-hidrogén abszorpció vizsgálata nátrium-hidroxid oldatban Jet reaktor alkalmazása esetén**

*Study of selective absorption of hydrogen sulphide in sodium hydroxide solution by using Jet reactor*

**Molnár Éva, Rippelné Dr. Pethő Dóra, Dr. Horváth Géza**

*Pannon Egyetem, Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## **Összefoglaló**

A földgázáramokat szállítás és felhasználás előtt a környezetvédelmi, gazdasági, egészségügyi és biztonságtechnikai problémák elkerülésének érdekében különböző módszerekkel kezelik. A földgáz egyik gyakori korrózív és mérgező kísérővegyülete a kén-hidrogén. A kén-hidrogén tartalom eltávolítására ma már számos technológia ismert, az iparban jellemzően fizikai és kémiai ab- és adszorpciós eljárásokat alkalmaznak.

Kutatási tevékenységünk a kén-hidrogén és a szén-dioxid között alkáli lúgokban lejátszódó kompetitív kemisorpció tanulmányozására irányult. Célunk egy szelektív kén-hidrogénmentesítésre alkalmas eljárás létrehozása volt. Mérésinket egy speciális konstrukciójú Jet reaktorban modell gázkeverékek alkalmazásával végeztük el. A vizsgált befolyásoló tényezők közé a kontaktidő, az abszorbens- és gáz-áram, a lúgkoncentráció, a gázösszetétel, illetve a felületképződés tartozott.

## **Summary**

Natural gas is treated before transportation and utilization to avoid environmental, economic, health and safety problems by applying different methods. Hydrogen sulphide is an often occurring undesirable compound in natural gas. It is corrosive and toxic. Nowadays several technologies are available for removal of hydrogen sulphide. Gas industry uses physical and chemical absorption and adsorption typically.

We have studied the competitive chemisorptions between hydrogen sulphide and carbon dioxide in alkali solution. Our aim was to create a selective procedure for removal of hydrogen sulphide. Our measurements were performed in a special Jet reactor by using model gas mixtures. We have studied effect of contact time, stream of absorbent and gas, concentration of absorbent, gas-composition and surface-formation.

---

# Heterotróf algatechnológiák – antimikrobiális hatóanyagok hatása

*Heterotrophic algal techniques – effects of antimicrobial agents*

**Nagy Balázs József, Dr. Németh Áron István**

*BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszertudományi Tanszék  
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

A zöldalgák laboratóriumi- és félüzemi léptékű heterotróf tenyésztése számos kihívással jár (axénikus kultúrák fenntartása és szaporítása), de hasonló nehézségekkel kell szembenézni az olyan fotobioreaktorok üzemeltetésénél is, ahol a zárt, steril körülmények nem biztosíthatók. Kísérleteinkben heterotróf, lombikos tenyésztési technológiákat alkalmazva vizsgáltuk a szennyvíztisztításból származó csurgalékvizben való algaszaporítás nehézségeit. Többféle antimikrobiális hatóanyag hatását vizsgáltuk mind a felszaporítani kívánt sejttömeg növekedésére, a vegyeskultúrák összetételének változására és a fertőző ágensek előfordulására.

There are many challenges in the heterotrophic laboratory- and pilot scale green microalgae biomass production (e.g. the maintenance and growing of axenic cultures) but it is no less difficult to operate open photobioreactors where sterility can not be achieved. In our experiments we investigated the difficulties of algae production on anaerobic digestion (AD) effluent from wastewater treatment, using heterotrophic growth techniques. We have also tested the effect of various antimicrobial agents on the growth of algae biomass, the composition of mixed cultures and the presence of infectious agents.

---

# Innovatív nagy áteresztő képességű fermentációs vizsgálatok

## *Innovative, High Throughput Fermentation Tests*

**Németh Áron**

*BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

*H-111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.*

---

### **Összefoglaló/ Summary**

A fermentációs tudomány régi, vissza-visszatérő problémája a folyamat nyomon követése. A klasszikus metodika szerint adott időközönként mintát kell venni, és abból szubsztrát, mikroba és termék analízist végezni. Ez egy részt ritkán eredményez real-time értékelést, amire a terjedő Quality-by-Design (QbD, Eltervezett minőség), és a Process Analytical Tools (PAT) koncepciók miatt is egyre nagyobb szükség volna, másrészt a ritka mintavételek okán nehéz sebességeket és fajlagos sebességeket meghatározni, hiszen ezekhez infinitézimálisan kicsi időnként kellene mintát venni.

Ezekre nyújthat megoldást egy különleges bioreaktor elrendezés: a litván Biosan cég Personal Bioreactora, amely reverse-spinning technology segítségével az odda-vissza forgó Falcon-csőben vékony folyadék filmet hoz létre, ami a gázanyagcserét is segíti, és az on-line turbiditás mérést is lehetővé téve programozható gyakorisággal határozza meg a sejtkoncentrációt.

A másik újításunk arra fókuszál, hogy a mikrobiológiai tisztaság mérésekre, telepszám meghatározásra kifejlesztett BacTrac készülék által felvett vezetőképességi görbékből fermentációs biomassza adatokat nyerhessünk ki. Mivel a készülék 40 párhuzamos cella mérésére képes, és a cella térfogat (5-10ml) kezdeti és végső analitikai mérést is lehetővé tesz, kb 40 rázatott lombik kiváltását tudja megvalósítani és online biomassza méréssel kiegészíteni.

A fenti két módszert a jól ismert *S. cerevisiae* fermentatív és respiratív anyagcseréjén keresztül próbáljuk bemutatni strukturális modell segítségével.

The old and often retaining challenge is the process monitoring in fermentation sciences. According to the classical methods, sample should be taken regularly in given time periods, and from the sample we should determine substrate, biomass, and product concentrations. These can result rarely real-time evaluation, which become more important with the spreading concept of Quality-by-Design and Process Analytical Tools. On the other hand, rare sample distribution hinder the determination of rates and specific rates, since sampling time is much more than infinitesimal time gap, which would be required for rate determinations.

To overcome this limitations the Biosan's Personal Bioreactor from Latvia can give solutions, applying reverse-spinning technology in rotating Falcon-tubes resulting thin liquid layer. This can enhance gas transfer and facilitate on-line biomass measurement with turbidity determination at programmable frequency.

Our next innovation focused on obtaining fermentation biomass data from conductivity curves taken by BacTrac, which was developed for detection and quantification of microorganism. Since our equipment can manage 40 parallel runs, and at the same time the volume of cells (5-10ml) allow the initial and final analysis as well, this can replace 40 shaking flask and supplement with online biomass determination.

The above two methods will be introduced with the help of the well-known fermentative and respirative metabolism of *S. cerevisiae* with the help of a structural model.

---

# **Pektin tartalmú támasztóréteges folyadékmembránok alkalmazása gázszeparáció céljából**

*Application of supported liquid membranes prepared with pectin for gas separation*

**Németh Zsófia, Lövitusz Éva, Nemestóthy Nándor**

*Pannon Egyetem, Biomérenöki Membrántechnológiai és Energetikai Kutató Intézet  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## **Összefoglaló**

A membrános gázszeparációs eljárás rendkívül nagy fontosságú kutatási terület. Napjainkban számos környezetvédelmi és ipari szabályozás van érvényben, melyekkel csökkenteni igyekeznek a légkörbe kerülő környezetszennyező gázok mennyiségét.

Kutatásom során pektin géllel stabilizált támasztóréteges folyadék membránokat készítettem, melynek pórusaiba szénsav-anhidráz enzimet rögzítettem. Az enzim az alábbi reakciót katalizálja:  $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3 \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{H}^+$ , rendkívül nagy gyorsasággal, így az általam készített pektin tartalmú támasztóréteges membránok alkalmasak lehetnek szén-dioxid megkötésére. Kiépítettem egy szakaszos működtetésű gázszeparációs rendszert, amelynek segítségével meghatároztam a membránok különböző tiszta gázokra (nitrogén, hidrogén, metán, és széndioxid), illetve kevert gázokra vonatkozó gázszeparációs tulajdonságait (permeabilitás, szelektivitás).

## **Summary**

The gas separation process with membranes is extremely important area of research. Today, a number of environmental and industrial regulation is in force, which are trying to reduce the amount of polluting gases into the atmosphere.

In this research, supported liquid membranes stabilized with pectin gel with carbonic anhydrase enzyme in the pores, were studied. The enzyme catalyzes the following reaction:  $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CO}_3 \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{H}^+$ , extremely fast, so the membrane I made, maybe suitable for capturing carbon-dioxide. A batch gas permeation and gas separation system was built, to study the gas separation properties (selectivity, permeability) of the membranes for pure nitrogen, hydrogen, methane and carbon dioxide, and mixtures of these gases.

---

## **Köszönetnyilvánítás**

Szeretnék köszönetet mondani az Emberi Erőforrások Minisztériumának, hogy az Új Nemzeti Kiválóság Program keretein belül támogatta a kutató munkámat.

# Azonos területen termesztett kölesfajták egyes fitonutreinseinek összehasonlítása

*Comparison of phytonutrients of millets cultivated at the same area*

**Peczenová Noémi<sup>1</sup>, Andrea Brunori<sup>2</sup>, Palkó Magdolna<sup>1</sup>, Vinod Dhaygude<sup>1</sup>, Szedljk Ildikó<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Department of Grain and Industrial Plant Technology, Faculty of Food Sciences, Szent Istvan University, Hungary, 1118 Budapest, Villányi út 29-43.*

<sup>2</sup>*ISSPT-BIOAG-PROBIO, CR Casaccia, ENEA, Via Anguillarese, 301, 00123 Santa Maria di Galeria, Roma, Italy*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

A kölest, mely manapság Ázsia és Afrika egyik fő gabonaféléje, Magyarországon XIX. század közepéig széles körben használták élelmiszerként, egészen addig míg a kukorica, a burgonya és rizs megjelenése vissza nem szorította és mindössze állati takarmányként került felhasználásra. Manapság az új táplálkozási trendek megjelenésével a köles is a többi alternatív gabonaféléhez hasonlóan kezd újonnan elterjedni a fogyasztók körében. Ugyanis kedvező tápérték összetétele mellett, termesztési körülményei is megfelelnek a gazdaság elvárásainak.

Vizsgálatainkhoz San Polo Mateseben (Olaszország) termesztett 37 kódolt, színjellemzőiket tekintve nagy eltérést mutató *Setarica italica* L. (Olasz muhar), valamint *Panicum miliaceum* L. (Termesztett köles) mintát, melyek összpolicfenol tartalmát (TPC), valamint antioxidáns kapacitását mértük vasredukáló képességen alapuló módszerrel (FRAP). Az egyes minták FRAP illetve TPC meghatározása után statisztikai kiértékeléshez Kruskal-Wallis tesztet használtunk, egzakt p-érték kiszámolásával ( $\alpha=0,05$ ), majd Dunn-féle páronkénti post hoc tesztet Bonferroni korrekcióval. A paraméterek közti kapcsolat meghatározására Spearman rang korrelációt ( $\alpha=0,05$ ) végeztünk. Az elemzéseket az XL-Stat szoftverrel (Addinsoft, 28 West 27th Street, Suite 503, New York, NY 10001, USA) hajtottunk végre (Lichtenthaler és Buschmann, 2001).

Mind a TPC (oldható), mind a FRAP (oldható) mérési eredmények alapján a kölesminták 11 csoportba voltak sorolhatók, amely csoportok közt szignifikáns eltérés is volt tapasztalható. A TPC és a FRAP mérési eredményeinek korrelációját vizsgálva, a korrelációs mátrix eredményei alapján viszonylag gyenge, nem szignifikáns együtt járást állapítottunk meg.

## **Summary**

Millet, which is nowadays a main cereal in Asia and Africa, was widely used as food in Hungary until the first half of the XIX. century, when the corn, potato and rice crowd it out, and people begun to use millet for feeding animals only. Currently, due to the new nutritional trends, millet as well as other alternative cereals beginning to become popular again among the costumers. It not only has good nutritional composition, but its growing conditions are meeting the expectations of the economy too.

We examined the total polifenol content (TPC) and the ferric reducing ability of plasma (FRAP) on 37 *Setarica italica* L. (Foxtail millet), and *Panicum miliaceum* L. (Proso millet) samples. These samples were cultivated in San Polo Matese (Italy). The colour difference between this samples was high. For statistic measuring the TPC

(soluble) and FRAP (soluble) we used the Kruskal-Wallis test by calculating the exact p-value ( $\alpha=0.05$ ), and the Dunn pair-wise post hoc test was carried out with Bonferroni correction. The relationship between the parameters was determined by the Spearman rang correlation ( $\alpha=0.05$ ) using XL-Stat software (Addinsoft, 28 West 27th Street, Suite 503, New York, NY 10001, USA) (Lichtenthaler and Buschmann, 2001).

Based on the TPC and the FRAP measurements the millet samples were divided into 11 groups. Significant differences between these groups were observed in some cases. Examining the correlation between the TPC and FRAP measurement results we noticed a relatively weak.

---



# **Finomítás – PetChem integráció**

## **C<sub>9</sub> mellékáram hasznosítás**

### ***Refining – PetChem integration***

#### ***C<sub>9</sub> side stream utilization***

## **Péter Monika, Koncsik József**

*MOL Nyrt. DS K+F Finomítói Termékfejlesztés*

*2440 Százhalombatta, Olajmunkás út 1.*

---

### ***Összefoglaló***

A MOL Petrolkémiai üzletága vizsgálja annak lehetőségét, hogy a termelési portfólióját egy sztírol kinyerő egységgel egészítse ki. Egy lehetséges konfigurációban az egyik termelő üzem a monomer céltermék mellett előállítana egy mellékáramot, melyet C<sub>9</sub> áramként határoztunk meg. Munkánk célja annak meghatározása volt, hogy ennek a kevésbé értékes mellékáramnak a hasznosíthatóságát megvizsgáljuk, a projekt megtérülésének javítása céljából.

Elsődlegesen arra törekedtünk, hogy megvizsgáljuk ennek az anyagáramnak a benzín keverőkomponensként való felhasználhatóságát. A lehetőség feltárásához laboratóriumi léptékű desztillációkat végeztünk, melynek során kinyertük a jövőbeni C<sub>9</sub> frakciót (160 – 205°C forráspont tartományban) a rendelkezésre álló termékáramból. Főbb kihívások a következők voltak: a C<sub>9</sub> áram speciális összetételéből adódóan a hozzávetőlegesen magas kéntartalom és a magas aromás tartalom. A várható C<sub>9</sub> mellékáram sűrűség tartománya szintén optimális fölötte volt nevezhető.

Különböző hidrogénezési eljárásokkal mini-reaktoron végzett tesztekkel, kereskedelemben elérhető katalizátorokon vizsgáltuk, hogy milyen mértékben tudjuk a terméktulajdonságait javítani. Ezt követően a kinyert terméknek benzín keverőkomponensként való felhasználhatóságát tanulmányoztuk.

A fenti tevékenységek mellett azonban további technológiai lehetőségeket is megvizsgáltunk annak érdekében, hogy a kevésbé értékes C<sub>9</sub> mellékáramból értékesebb terméket hozzunk létre.

### ***Summary***

The MOL Petrochemical Plant is evaluating the option to equip its production own processing line with a Styrene recovery unit. In one potential configuration, the new production subunit would provide a new stream beside the targeted monomer streams, this would be stream is called C<sub>9</sub> side stream. The objectives of our work was to identify the utilization alternatives of this less valuable C<sub>9</sub> side stream and finally to improve the return on investment of the whole project.

Our ambitions was/ to figure out that whether this stream may be used as a gasoline blending component. To explore this opportunity, we performed lab-scale distillations and extracted the would-be C<sub>9</sub> fraction (boiling range 160°C-205°C) from the available product stream. The main challenges were the followings: the specific composition of the C<sub>9</sub> side stream, such as the slightly high amount of sulphur and the high aromatics content. The would be C<sub>9</sub> sidestream`s density range was also above the optimum.

We applied different hydrotreating tests in lab-scale reactors, on commercially available catalysts, to explore that in which extent could be improved the characteristics of the product. Then we investigated the gasoline blending properties of the treated product.

Beside these activities, we analysed and compared further technology options to utilize the components of the less valuable C<sub>9</sub> side stream producing more valuable product.

---

# Biogén nanokristályok mágnességének vizsgálata és egydimenziós mágneses nanostruktúrák létrehozása biomimetikus szintézissel

## *Magnetic properties of biogenic nanocrystals, and biomimetic synthesis of one-dimensional magnetic nanostructures*

Pósfai Mihály<sup>1</sup>, Bereczk-Tompa Éva<sup>1</sup>, Kovács András<sup>2</sup>, Rafal Dunin-Borkowski<sup>2</sup>, Tóth Balázs<sup>3</sup>, Vonderviszt Ferenc<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Pannon Egyetem, Föld és Környezettudományi Intézet, Veszprém*

<sup>2</sup>*Ernst Ruska-Centre for Microscopy and Spectroscopy with Electrons and Peter Grünberg Institute, Forschungszentrum Jülich, Germany*

<sup>3</sup>*Pannon Egyetem, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Veszprém*

---

### Összefoglaló

A mágneses baktériumok sejtjeiben változatos méretű, alakú és elrendeződésű mágneses vas-oxid (magnetit, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) nanokristályok képződnek. Emiatt a sejtek olyan modell rendszereknek tekinthetők, amelyekben a nanokristályok mágneses tulajdonságai bármilyen szintetikus rendszernél mélyrehatóbban tanulmányozhatók. Célunk a nanokristályok mágnességét meghatározó, egymással versengő hatások – doménméret, alak-anizotrópia, kristálytani anizotrópia, a kristályok közötti kölcsönhatások – hierarchiájának meghatározása az elektronholográfia módszerével. Egyes baktériumok különleges alakú, hosszúkás-csúcsos kristályokat szintetizálnak, amelyek többé-kevésbé rendezett láncokba rendeződnek a sejtekben. Ezen sejtek vizsgálata alapján megállapítottuk, hogy a nanokristályokban a mágneses indukció irányát elsősorban a lánc konfiguráció, azaz a kristályok közötti magnetosztatikus kölcsönhatások, majd másodsorban az alak-anizotrópia határozza meg. Mindkét tényező a láncsal párhuzamos mágneses momentum kialakulását segíti. A kristálytani anizotrópia nem befolyásolja jelentősen az indukció irányát.

A mágneses baktériumok nemcsak a nanokristályok mágnességének megértéséhez, hanem a biomimetikus kristálysintézishez is alkalmas modellt adnak. A baktériumokban a kristályképződés genetikailag meghatározott, a magnetit nanokristályok a „magnetoszóma membrán” felületén, mint templáton válnak ki. Ismertek olyan magnetoszóma membránfehérjék (MamI, Mms6), amelyek feltételezhetően kiváltják a magnetit kristálycsírák kicsapódását a membránon. Ezen fehérjék funkcionális részét génszintézis technikákkal az önszerveződésre képes, filamentumokat alkotó flagellin fehérjébe építettük. A létrehozott fúziós fehérjéket flagellin gént nem hordozó *Salmonella* gazdasejtekben termeltettük, ezáltal olyan módosított filamentumokat létrehozva, melyek felületükön tartalmazzák a specifikus magnetitkötőhelyek ezreit. A mutáns filamentumokon kétféle eljárással – előre szintetizált magnetit nanokristályok hozzáadásával, illetve vas ionokat tartalmazó oldatból a magnetit kristálycsírák kicsapásával – magnetit nanorészecskéket kötöttünk meg. A létrehozott mágneses nanoszálak tulajdonságainak vizsgálata folyamatban van.

### Summary

Magnetotactic bacteria synthesize in their cells magnetic iron oxide (magnetite, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) nanocrystals with various shapes and arrangements, making them excellent model systems, unmatched by any synthetic system, for the study of nanocrystal magnetism. We wished to understand the hierarchy of competing effects on magnetism – exerted by particle size, shape anisotropy, magnetocrystalline anisotropy and magnetostatic interactions between particles – by obtaining magnetic induction maps using electron holography. We analyzed cells that produce chains of elongated, pointed magnetite nanocrystals, and found that interparticle interactions are most important, followed by particle shapes, in determining the direction of magnetic induction within the crystals. Both effects contribute to aligning the magnetic moment of the crystals parallel to the chain direction. Magnetocrystalline anisotropy plays a minor role in magnetite nanoparticle magnetism.

Magnetotactic bacteria are also useful as models for the biomimetic synthesis of magnetic nanostructures. Magnetite formation is under genetic control in magnetotactic bacteria, the crystals nucleate on the magnetosome membrane that serves as a template. Certain magnetosome membrane proteins are known (MamI, Mms6) to play a role in the controlled nucleation of magnetite. We created functionalized flagellar filaments with thousands of magnetite-binding sites on their surfaces by genetically engineering flagellin subunits to display the functional parts of MamI and Mms6. The mutant filaments were used for the templated nucleation and attachment of magnetite nanoparticles, resulting in magnetic nanofibers with special magnetic properties.

---

Ez a munka az ERA-CHEMISTRY NN-117642 és a BIONANO-GINOP-2.3.2-15-2016-00017 projekt támogatásával készült./ This research was supported by grants ERA-CHEMISTRY NN-117642 and BIONANO-GINOP-2.3.2-15-2016-00017.

# Kukoricarost alapú biofinomító folyamat technológiai-gazdaságossági modellezése AspenTech programokkal

*Techno-economic assessment of a corn-fibre-based biorefinery process with AspenTech software*

**Gergely Rácz, Anna Aszalós, Csaba Fehér, Zsolt Barta**

*Budapest University of Technology and Economics  
Department of Applied Biotechnology and Food Science  
1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4., Hungary*

---

## Összefoglaló/ Summary

A biofinomító olyan létesítmény, amely biomassza felhasználásával állít elő különféle értékes termékeket, valamint hőt, elektromos áramot és/vagy üzemanyagokat. A kukoricarost a kukorica nedves őrléses feldolgozása során keletkező melléktermék, amely hazánkban nagy mennyiségben áll rendelkezésre, és megújuló természete miatt biofinomító üzemek alapanyagául szolgálhat. A kukoricarost hemicellulóz tartalmának savas frakcionálásával jelentős mennyiségű arabinóz és xilóz szabadítható fel a kukoricarostból. Az arabinóz az élelmiszeripar által használt édesítőszer egyéb felhasználási módjai mellett. A xilózból előállítható xilit napjaink gyakori édesítőszer, mely cukorbeteg számára is fogyasztható. Az általunk modellezett üzem évi 100 000 tonna kukoricarost szárazanyag feldolgozására alkalmas, amelyből xilózt, arabinózt, valamint biogázt állít elő. A kukoricarost frakcionálása két lépésben történik a modell szerint. Az első savas hidrolízis során a nyersanyag arabinóz tartalmának oldatba vitele a cél, majd az oligomerek hidrolízise után *Candida boidinii* élesztőgombával az arabinózt kísérő szénhidrátok mennyiségét csökkentjük, majd további tisztítási lépéseket követően az arabinóz kristályosítható az oldatból. A szilárd maradékban található xilán oldatba vitele a második savas hidrolízis során történik. A xilóz xilitté történő fermentációja az arabinóz biotisztítása során keletkezett élesztősejttömeggel történik. Tisztítási lépések után a xilit az oldatból kristályosítható. A második savas hidrolízis során keletkezett szilárd maradékban főként cellulóz található, amely biogáz előállítására alkalmas. A biogáz a szerves anyagok anaerob emésztése során mezofil körülmények között keletkezik, majd ezt elégetve egy kazán segítségével hőenergia keletkezik, amelyet a folyamat energiaigényének fedezésére fordítunk. Az arabinóz eredő hozama a nyersanyag arabinóz tartalmára vonatkoztatva 45,4%, a nyersanyag tömegére vonatkoztatva 61,8 g/kg kukoricarost szárazanyag. A xilit esetében ezek a hozamok 19,3%, valamint 41,7 g/kg kukoricarost szárazanyag. A gazdaságossági számítások egy részét Aspen Economic Analyzer segítségével, másik részét árajánlatok alapján végeztük. Az arabinóz 11,9 EUR/kg áron történő értékesítése során a xilit minimális eladási ára 0 EUR/kg, tehát bármilyen alacsony áron értékesítjük a xilitet, abból profitunk származik. Az arabinóz 11,9 EUR/kg ára kedvező, hiszen jelenlegi piaci ára elérheti akár a 60 EUR/kg értéket, a xilit jelenlegi piaci ára közelítőleg 6 EUR/kg, így profit realizálása mellett is alacsonyabb áron tudjuk értékesíteni a xilitet.

The biorefinery is a facility that produces various value-added products and heat, electric power and/or fuels using biomass as raw material. Corn fiber is a by-product formed during the wet milling process of corn, which is available in large amounts in Hungary, and because of its renewable nature, it can serve as a potential raw material of a biorefinery. By acid fractionation of its hemicellulose content, considerable amounts of xylose and arabinose can be liberated from corn fiber. Arabinose is a sweetener used by the food industry among other applications. Xylitol is a common sweetener derived from xylose, which can also be consumed by people with diabetes. In our work the modeled biorefinery can process 100000 tonnes of corn fiber dry matter and produces arabinose, xylitol and biogas. The fractionation of corn fiber occurs in two steps in our model. The aim of the first acid hydrolysis is to solubilize the arabinose content of the raw material, then after the hydrolysis of the oligomers, bio-purification with *Candida boidinii* yeast is carried out. After further purification steps, arabinose can be crystallized from the solution. In the second hydrolysis the xylan content of the solid residue is solubilized. By using the yeast mass from the bio-purification process, xylose is fermented into xylitol. After purification xylitol can be crystallized from the solution. The solid residue after the second hydrolysis contains mainly cellulose, and is fed to the anaerobic fermenter, where biogas is produced from the organic materials at 37°C. The biogas is incinerated to cover the heat demand of the biorefinery plant. The overall yield of arabinose is 45.4% of the arabinose content of the raw material, and 61.8 g/kg corn fiber dry matter. These values for xylitol are 19.3% and 41.7 g/kg dry matter, respectively. Economic calculations were performed using Aspen Economic Analyzer and vendor quotations. If arabinose is sold with a price of 11.9 EUR/kg, the minimum selling price of xylitol is 0 EUR/kg, therefore selling xylitol with any price leads to profit. The 11.9 EUR/kg selling price of arabinose is favorable, as the current market price can reach 60 EUR/kg. The current price of xylitol is around 6 EUR/kg, thus xylitol can be sold under the market price while realizing profit.

# Kapilláris elektroforézis alapú vizsgálat a prosztata-specifikus antigén glikánszerkezetének prosztatarák által okozott lehetséges változásaira

*Capillary electrophoresis based analysis of the possible alterations in prostate-specific antigen glycoforms caused by prostate cancer*

**B. Reider, G. Járvas, M. Szigeti, A. Guttman**

*MTA-PE Translational Glycomics Research Group, MUKKI, University of Pannonia  
Veszprém, Hungary*

---

## **Összefoglaló**

Világszerte a prosztatarák az egyik leggyakrabban diagnosztizált rákfajta a férfiakban. A betegség jelenleg használatos biomarkere a szérum prosztata-specifikus antigén (PSA), ami széles körben használt a prosztatarák korai szűrésére és a kórlefutás nyomon követésére. Azonban a módszer szelektivitás- és specificitásbeli hátrányai túldiagnosztizáláshoz és felesleges kezelésekhez (pl biopszia) vezetnek, így felmerült az igény új biomarkerek kutatására. Felfedezték, hogy mint sok másik rákos megbetegedés esetén, a fehérjék, jelen esetben a PSA, glikán szerkezete megváltozhat, és ennek nyomon követésére különböző analitikai módszereket fejlesztettek.

Munkánk során a PSA glikán szerkezetét vizsgálatuk kapilláris elektroforézis segítségével (CE-LIF).  $\alpha$ 2-3 specifikus szialidáz alkalmazásával azonosítottuk a PSA szénhidrát struktúráján a szialsav kötési helyeit. A mintaelőkészítési módszert optimalizáltuk a glikán struktúrák PNGaseF enzimátikus emésztéséhez és fluoreszcens jelöléséhez. A mintaelőkészítés fontos részét képezi a rendkívül alacsony PSA koncentrációjú vizelet illetve szérum mintákból a PSA kinyerése. Ehhez egy-doménes antitesteket használunk mágneses mikro-gyöngyökhöz rögzítve. Az előadásban bemutatásra kerülő eljárás végső célja a PSA glikán szerkezetének szialsavakban bekövetkező változásának kimutatása prosztatarák és jóindulatú prosztata megnagyobbodás esetén.

---

## **Summary**

Prostate cancer is one of the most commonly diagnosed cancer in men worldwide. Serum prostate-specific antigen (PSA) is a currently used biomarker for this disease, and frequently used for prostate cancer screening or monitoring disease progression. However, the lack of selectivity and sensitivity of this method often leads to over-diagnosis and over-treatment (i.e., biopsy), therefore the discovery of new biomarkers is of high importance. It was reported earlier that prostate cancer - like many other tumor diseases - modified the glycan profile of certain proteins. Alteration of the PSA glycoforms can be detected using highly sensitive analytical methods.

In this study the glycan structure of standard PSA was analyzed utilizing capillary electrophoresis with laser induced fluorescent detection (CE-LIF). Sialidase ( $\alpha$ 2-3) digestions were performed for identifying sialic acid binding positions on the glycan structure. Sample preparation method was developed and further optimized including the PNGaseF enzymatic digestion and the fluorophore labeling. PSA capture from low-concentration biological samples like urine or serum is essential part of the proposed method. Single-domain anti-bodies immobilized to micro-beads were utilized for improved efficiency PSA capture. The sialic acid isomers in the PSA glycan structure can be specific early stage markers of prostatic hyperplasia and prostate cancer.

---

# Felületkezelt szén nanocsövek vizsgálata inverz gázkromatográffal

*Investigation of surface treated carbon nanotubes with inverse gas chromatograph*

**Rieder Norbert, Varga Csilla, Dallos András**

*Pannon Egyetem*

*Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## Összefoglaló

A szén nanocső erősítésű polimer kompozitokat széleskörűen alkalmazzák a műszaki életben. Szén nanocső polimer mátrixba való beágyazásával speciális mechanikai tulajdonságú, vezetőképes kompozit készíthető. A szén nanocsövek felületi energetikai tulajdonságai kedvezőtlenek, hajlamosak az aggregációra, nehézkesen ágyazhatók be a polimer mátrixba. A MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék különböző olefin-maleinsavanhidrid alapú kopolimereket fejlesztett a szén nanocsövek felületi energetikai tulajdonságainak módosítására.

Munkám során kezeletlen és különböző kopolimerrel felületkezelt szén nanocső mintát vizsgáltam inverz gázkromatográffal. Céлом a felületkezelés hatásának bizonyítása és kvantitatív minősítése volt. A normál alkánok nettó retenció térfogatát felhasználva kiszámítottam a felületi energia diszperziós komponensét a Dorris-Gray módszert használva. Poláros anyagok (diklórmetán, etil-acetát, kloroform, toluol) retenció adatainak segítségével meghatároztam az adszorpciós szabadentalpia változásukat a polarizációs módszer segítségével, majd kiszámítottam a felületi energia specifikus komponensét. A kísérleteket több felületi borítottságon végeztem el, így meghatároztam a diszperziós és specifikus felületi energia profilokat és annak a pontról pontra történő integrálásával a felületi energia eloszlás függvényeket.

A munka az Emberi Erőforrások Minisztériuma Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.



---

## Summary

Carbon nanotube reinforced polymer composites play an important role in technical applications. Special mechanical properties of the composites can be accomplished by binding carbon nanotubes to polymer matrix. The surface energy properties of carbon nanotubes are disadvantageous, it is inclinable to aggregation, hard to embed it to polymer matrix. The Institutional Department of MOL Hydrocarbon and Coal Processing developed various olefin-maleic anhydride copolymers to modify the surface energy properties of carbon nanotube.

During this work untreated and surface treated carbon nanotube samples were investigated with inverse gas chromatography. Our purpose was to measure the effect of the surface treatment quantitatively. By using the data of specific retention volumes of normal alkanes the dispersive component of surface energy was calculated with the help of the Dorris-Gray method. The specific adsorption free energy changes were determined from the retention data of polar probe molecules (dichloromethane, ethyl acetate, chloroform, toluene) with polarization method. Using these data the specific component of surface energy was calculated. The experiments were carried out at various surface coverages to determine the dispersion and specific surface energy profile and the distribution of surface energies obtained by a point-by-point integration of the surface energy profiles.

This work was supported through the New National Excellence Program of the Ministry of Human Capacities.



**Szerelősor gyártósor kiegyenlítés konvejer állásidők  
figyelembevételével**  
*Assembly line balancing with conveyor stoppages in wire harness industry*  
**Ruppert Tamás, Abonyi János**  
*Pannon Egyetem*  
*8200 Veszprém Egyetem u. 10.*

---

**Összefoglaló**

A termelési sorrend optimalizálásával elérhetővé válik a több-termékes gyártási sorok kapacitásának növelése, abban az esetben is, ha a termékek változása magas gyakorisággal előfordul és a termékek között szignifikáns különbségek vannak. A probléma akkor válik igazán érdekessé, ha a szerelési idők bizonyos eloszlással bírnak, tehát sztochasztikus jellegűek az emberi erőforrásból kifolyólag. Munkánk során első lépésként a ciklusidő optimalizására fókuszáltunk a vizsgált speciális konvejer rendszer miatt.

A kábelköteget gyártó összeszerelő konvejer rendszer manuális munkahelyeket (szerelőtáblákat) tartalmaz, magán a konvejer pályán. Ezek a szerelőtáblák minden egyes ciklusban tovább lépnek egyet a pálya mentén. A sztochasztikus jelleg összetett, köszönhetően annak, hogy minden egyes operátor befejezheti a munkáját a ciklusidő lejáta előtt. Természetesen fordított esetben le is maradhat, ekkor az operátor mozog a táblával együtt és a következő ciklus lekezdésén igyekszik ledolgozni a lemaradását. Abban az esetben, ha ez nem sikerült, akkor a szerelőtáblákat leállítják. A kutatás során alkalmaztuk az úgynevezett dolgozói-mozgás diagramokat a leállások elemzéséhez. Az algoritmus megbecsüli a szerelési időket a Brownian eloszlási modell alapján és meghatározza az optimális ciklusidőt, amellyel garantálja, hogy az operátor szerelési idejének elmaradása ne haladja meg a kritikus értéket.

Egy valóságos és reprodukálható esettanulmányon keresztül bemutatjuk a fejlesztett algoritmus működését. A példák bemutatják, hogyan integrálható a bizonytalanságelemzés a gyártási ütemezésbe.

**Summary**

The capacity of multiproduct production lines can be optimised by determining the optimal production order when changeovers frequently occur and the products have significantly different complexity. The problem becomes difficult when the operation times show significant stochastic nature due to the variation of the performance and skills of the human operators. In our case, firstly we focused on the cycle time because of the special conveyor system.

A wire harness assembly conveyor line consists of manual workstations (tables) linked by a conveyor. The tables are rotating in each cycle. The stochastic nature of the activity times makes difficulties since the operators have to finish their operations before the cycle time. Although minor delays can be handled as the workers can temporarily follow the table to work off their backlogs, the conveyor has to be stopped when the accumulated delays achieve a certain limit. The aim of the adaptation of the cycle time is to minimise the risk of stopping the process. We applied the worker-movement diagram for the stoppages analysing. The algorithm estimates the activity times based on a Brownian motion model and calculates the cycle time that guarantees that the delay of the operators will not exceed a certain limit.

We demonstrate the applicability of the proposed method in realistic and reproducible examples. These examples illustrate how the integrated analysis of uncertainties should production scheduling.

The research has been supported by the National Research, Development and Innovation Office - NKFIH, through the project OTKA-116674 (Process mining and deep learning in the natural sciences and process development)

---

# Nagy hozzáadott értékű dízelgázolaj-keverőkomponensek előállítása

*Production of high value added diesel fuel blending components*

**Sági Dániel, Hancsók Jenő**

*Pannon Egyetem, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék  
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

## Összefoglaló

Az Európai Unióra jellemző dízelizáció folyamata (a dízelgázolajok iránti igény arányaiban egyre nagyobb a motorbenzinekhez képest) kb. 25 éve kezdődött és a tetőzése a közeljövőben várható. Az európai kőolajfinomítók számára, hogy képesek legyenek kielégíteni ezeket az igényeket, egyre fontosabb termékszerkezetük megváltoztatása a középpárlatok javára. A fluidkatalitikus krakkoló (FCC) központú kőolajfinomítók azonban a gázolajhozamot és főleg annak minőségét tekintve kevésbé rugalmasak. Az FCC üzem gázolaj forrásponstartományú terméke a könnyű ciklusolaj (LCO) egy kis értékű cél- vagy kísérőtermék, amelyet gyenge minősége (kis cetánszám  $\leq 25$ , nagy aromástartalom  $70\% < \text{stb.}$ ) miatt jellemzően fűtőolajokba keverve értékesítik. Ebből következőleg az LCO dízelgázolaj-keverőkomponensként történő felhasználása jelentős hozzáadott értéket képvisel és hozzájárul a kőolajfinomítói rugalmasság növeléséhez. Dízelgázolaj-keverőkomponensként történő felhasználásukhoz azonban minőségjavításokra van szükség.

Kísérleti munkánk során finomítatlan gázolaj és könnyű ciklusolaj elegyeinek (100/0; 95/5; 90/10; 85/15; 80/20; 70/30) minőségjavítását vizsgáltuk heterogén katalitikus hidrogénezéssel egy kereskedelmi, szulfidált állapotú NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátoron. A kísérletek során tanulmányoztuk az alapanyagok összetételének és a műveleti paramétereknek a cseppfolyóstermékek hozamára és minőségére gyakorolt hatását. A kísérleti eredményeink alapján megállapítottuk, hogy az alapanyag LCO tartalmát előnyösen 10-15%-ig lehet növelni, hogy az így előállított dízelgázolaj-keverőkomponens jó égési tulajdonságú (cetánindex: 51,9-53,3), nagy hozzáadott értékű legyen. Ezek a kísérleti eredmények hozzájárulhatnak a kőolajfinomítói rugalmasság növeléséhez.

---

## Summary

The dieselization (the demand for diesel fuels are proportionally higher compared to gasolines) of the European Union has started about 25 years ago and the peak is expected in the near future. It is getting more and more important for the European refineries to shift their product yields towards distillates to satisfy this increased demand. The fluid catalytic cracker (FCC) based refineries are not so flexible from diesel fuel yield and quality point of view. The diesel fuel boiling range product of FCC is the light cycle oil (LCO), which is a low value product/by-product due to its low quality (low cetane number  $\leq 25$ , high aromatic content  $> 70\%$  etc.). Usually it is blended to heating oils. Thus, using the LCO as diesel fuel blending component represents high value addition and increases the flexibility of the crude oil refinery. However, the quality improvement of it is needed to use the LCO as a diesel fuel blending component.

During our research work the quality improvement of blends of unrefined gas oil fraction and light cycle oil (100/0; 95/5; 90/10; 85/15; 80/20; 70/30) by heterogenous catalytic hydrogenation on a commercial, sulphidated NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst was investigated. The effects of feed compositions and process parameters on the quality and quantity of the main product (gas oil fraction) were investigated. Based on the results, we concluded that the feedstock's LCO content advantageously can be increased up to 10-15%. The products have good burning characteristics (cetane index: 51.9-53.3) and they are high value added diesel fuel blending components. These results can contribute to the flexibility increasing of refineries.

---

## Bevezetés

Az Európai Unióra (EU) jellemző dízelizáció folyamata (a dízelgázolajok iránti igény arányaiban egyre nagyobb a motorbenzinekhez képest) kb. 25 éve kezdődött és 2020-2025 fog tetőzni [1,2]. Az adókedvezményekkel ösztönzött dízelizáció hatására napjainkban Európában jelentősen csökkent a kereslet a motorbenzinek iránt, míg dízelgázolajból hiány alakult ki. Az európai kőolajfinomítók számára, hogy képesek legyenek kielégíteni ezeket az igényeket, egyre fontosabb termékszerkezetük megváltoztatása a középpárlatok javára. Jelenleg ez a nagy dízelgázolaj igény csak importtal fedezhető (főleg Oroszországból és Észak-Amerikából) [3]. Ugyanis Oroszországban és Közel-Keleten bővítik a kőolajfinomítói kapacitásokat, képessé válnak/váltak ezen térségek kőolajfinomítói nagyon kis kéntartalmú gázolajok előállítására is, illetve olcsóbban tudnak üzemelni (kisebb energiaköltségek, kevésbé szigorú környezetvédelmi előírások stb.). További hátrányos tényező, hogy Európa motorbenzin-feleslegének a felvevő piacon – Észak-Amerika – csökken az importbenzin iránti igény [3,4], amit azonban kompenzálhat Kína erőteljes igénynövekedése.

Az előzőekben említett okok miatt, számos új kőolajfinomítóban fő konverziós egységként hidrokrakk üzemet építettek fluidkatalitikus krakk (FCC) üzem helyett, mivel hidrokrakkolással nagymennyiségű és kiváló minőségű gázolajat lehet előállítani. A meglévő FCC központi kőolajfinomítók azonban a gázolajhozamot és főleg annak minőségét tekintve kevésbé rugalmasak. Ennek következtében különböző alternatív megoldásokat kell alkalmazniuk a középpárlatok mennyiségének növelésére [5]. A különböző megoldások közül az FCC üzem könnyű ciklusolaj (LCO) hozamának növelése az egyik legegyszerűbb és legköltséghatékonyabb megoldása lehet, ha nem igényel jelentős módosításokat [6]. Hagyományosan ez a kőolajfinomítói áram egy kis értékű cél- vagy kísérőtermék, amelyet gyenge minősége (kis cetánszám  $\leq 25$ , nagy aromástartalom  $70\% < \text{stb.}$ ) miatt jellemzően fűtőolajokba keverve értékesítik [7]. Ebből következőleg az LCO dízelgázolaj-keverőkomponensként történő felhasználása jelentős hozzáadott értéket képvisel, és hozzájárul a kőolajfinomítói rugalmasság növeléséhez. Dízelgázolaj-keverőkomponensként történő felhasználásukhoz azonban minőségjavításukra van szükség, ami többféle képen is történhet pl.: LCO és gázolaj elegyek együttes minőségjavítása katalitikus hidrogénezéssel, aromástelítés egy- vagy kétlépéses eljárással, szelektív gyűrűnyitás, enyhe hidrokrakkolás [5].

Az említett minőségjavítási megoldások közül a kísérleti munkánk során egy finomítatlan gázolajfrakció (UGO) és könnyű ciklusolaj (LCO) elegyeinek heterogén katalitikus hidrogénezését vizsgáltuk. A kísérleti munkánk célja az volt, hogy nagy hozzáadott értékű dízelgázolaj-keverőkomponenst állítsunk elő az LCO alapanyagként történő felhasználásával. Ehhez szükséges az alapanyagunk az azt a kedvező UGO-LCO arányt meghatározni – adott műveleti paraméter tartomány alkalmazása esetén – amelyből kedvező tulajdonságú dízelgázolaj keverőkomponens állítható elő. A cél az, hogy a termék minél inkább közelítse meg, illetve érje el a dízelgázolaj termékszabvány (MSZ EN 590:2013) megfelelő értékeit.

## Kísérleti munka

Kísérleti munkánk során finomítatlan gázolaj és könnyű ciklusolaj elegyeinek (100/0; 95/5; 90/10; 85/15; 80/20; 70/30) minőségjavítását vizsgáltuk heterogén katalitikus hidrogénezéssel. A kísérletekhez egy kereskedelmi, szulfidált állapotú NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátort használtunk. A vizsgálatok során tanulmányoztuk az alapanyagok összetételének és a műveleti paramétereknek a cseppfolyóstermékek hozamára és minőségére gyakorolt hatását.



A kísérleteket egy 100 cm<sup>3</sup> hasznos térfogatú csőreaktort tartalmazó nagylaboratóriumi berendezésben végeztük. Ez tartalmazta az összes olyan főbb készüléket és gépegyiséget, amelyek egy ipari heteroatomeltávolító üzemben is megtalálhatók [7]. A kísérleteket folyamatos üzemmódban végeztük a következő műveleti paraméterek mellett: P=70 bar, T=320-380 °C, LSHV=1.0 h<sup>-1</sup>, hidrogén/alapanyag arány=600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. Az alapanyagok és a termékek analitikai és alkalmazástechnikai jellemzőinek meghatározását az MSZ EN 590:2013 dízelgázolajokra vonatkozó termékszabványban előírt módszerekkel végeztük. A szénhidrogén-összetételt gázkromatográfiai vizsgálatokkal határoztuk meg (Shimadzu GC 2010). Az alapanyagok jellemzőit az 1. táblázatban adtuk meg.

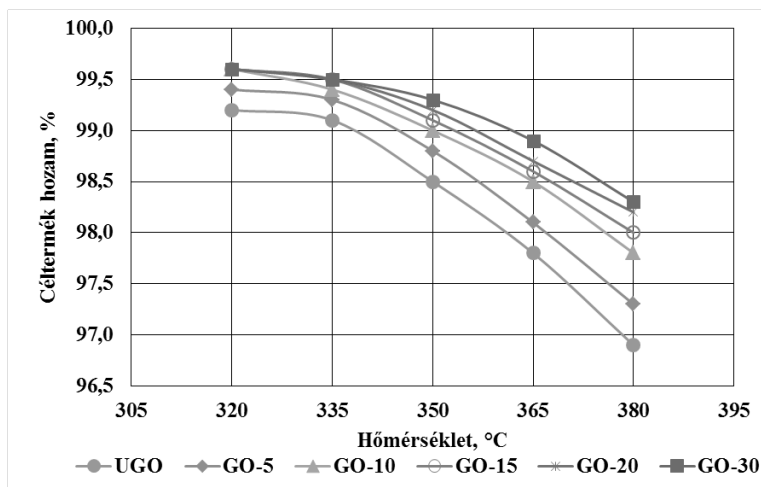
1. táblázat. Felhasznált alapanyagok jellemzői

Jellemzők	LCO	UGO	GO-5	GO-10	GO-15	GO-20	GO-30
Finomítatlan gázolaj, %	0	100	95	90	85	80	70
Könnyű ciklusolaj, %	100	0	5	10	15	20	30
Sűrűség, 15,6 °C, g/cm <sup>3</sup>	0,9583	0,8504	0,8535	0,8586	0,8651	0,8699	0,8800
Kéntartalom, mg/kg	220	8790	8362	7933	7505	7076	6219
Összes aromástartalom, %	87,2	29,2	32,1	35,0	37,9	40,8	46,6
Egygyűrűs	21,8	21,7	21,7	21,7	21,7	21,7	21,7
Többgyűrűs	65,4	7,5	10,4	13,3	16,2	19,1	24,9

#### Kísérleti eredmények és értékelésük

A kísérletek során keletkezett termékek a reaktorrendszer fázisszevátor egységében gáz- (H<sub>2</sub>, C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> szénhidrogének, H<sub>2</sub>S, NH<sub>3</sub>) és folyadékfázisra (C<sub>5</sub><sup>+</sup> szénhidrogének) váltak szét. A cseppfolyós termékekből a benzín forrásponttartományba eső frakciót 180 °C-ig történő, atmoszférikus desztillációval választottuk el a célterméktől, a gázolajfrakciótól (180-360 °C).

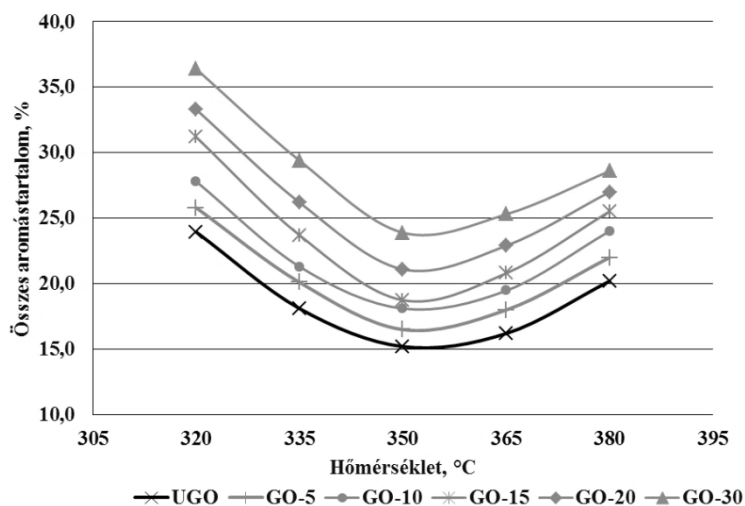
Az alapanyagokból nagy hozammal (96,9-99,6%) keletkezett gázolaj forrásponttartományú céltermék. A hidrokrakk reakciók lejátszódása viszonylag kismértékű volt a kísérletek során, csak 350 °C-on és felette vált jelentősebbé (1. ábra). Az LCO-nak az UGO alapanyagba történő bekeverésével nem változott számottevően a céltermékek hozama, csak kismértékű hozamnövekedés volt megfigyelhető. Ennek oka, hogy az LCO-val nagymennyiségű aromás vegyület került az alapanyagba, amiknek a hidrogénezésével hidrogén épült be a molekulák szerkezetébe.



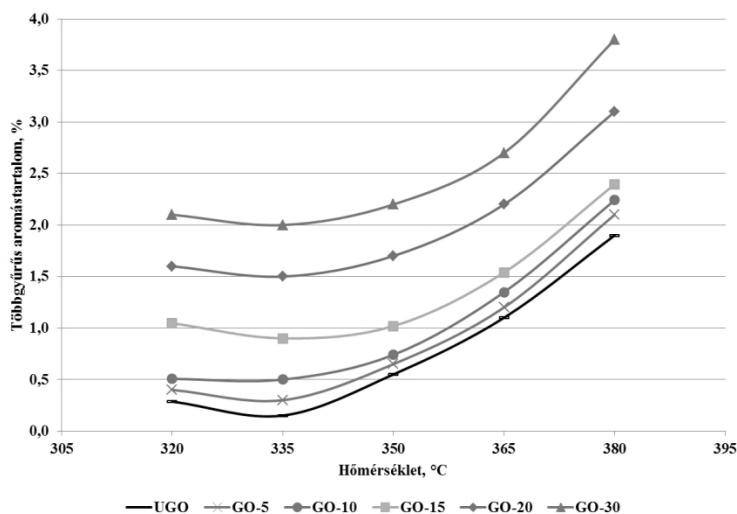
1. ábra. Céltermékek hozamának változása az alapanyagok és hőmérséklet függvényében (P=70 bar, LSHV=1.0 h<sup>-1</sup>, hidrogén/alapanyag arány=600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>)

A céltermékek összes aromástartalma a hőmérséklet függvényében egy minimum görbe szerint változott (2. ábra), amelynek a szélsőértéke 350 °C-on volt. Ez azzal magyarázható, hogy az aromások telítése exoterm egyensúlyi reakció. Ezért alacsonyabb hőmérsékleteken a kinetikai gátlás jelensége figyelhető meg (<350 °C), de a hőmérsékletet tovább növelve termodinamikai gátlás lépett fel. Az LCO-nak az UGO alapanyagba történő bekeverésével a céltermékek aromástartalma nőtt a UGO-ból előállított termékekéhez képest. Ennek oka az volt, hogy a vizsgált katalizátoron és műveleti feltételek között az alapanyagkeverékeknek erősen megnövekedett az aromástartalma csak részben hidrogéneződött.

A dízelgázolaj termékszabvány (MSZ EN 590:2013) csak a többgyűrűs aromástartalmat korlátozza ( $\leq 8,0\%$ ). Ez az érték a hőmérséklet függvényében 0,2-3,8% között változott (3. ábra). A többgyűrűs aromás vegyületek telítése majdnem teljes mértékben lejátszódott (maradó többgyűrűs aromástartalom: 0,2-2,1%) 320 és 335 °C hőmérsékleten. A többgyűrűs aromások telítése szempontjából a legkedvezőbb hőmérséklet 335 °C volt, mert ennél magasabb hőmérsékleten már termodinamikai gátlás lépett fel.



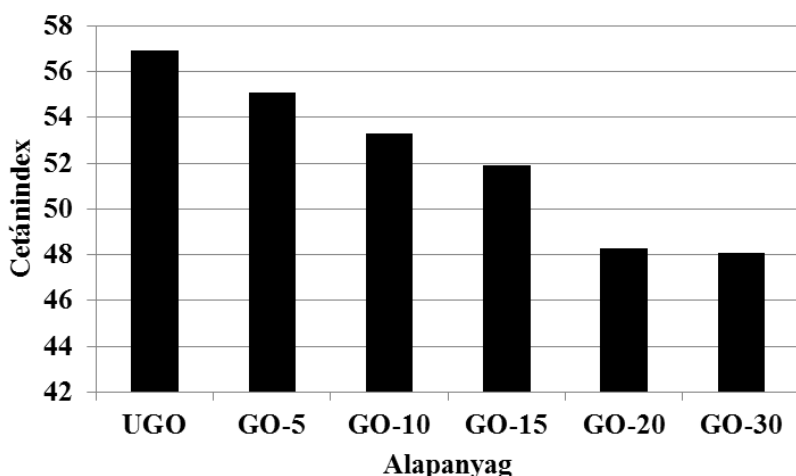
2. ábra. Céltermékek összes aromástartalmának változása az alapanyagok és hőmérséklet függvényében (P=70 bar, LSHV=1.0 h<sup>-1</sup>, hidrogén/alapanyag arány=600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>)



3. ábra. Céltermékek többgyűrűs aromástartalmának változása az alapanyagok és hőmérséklet függvényében (P=70 bar, LSHV=1.0 h<sup>-1</sup>, hidrogén/alapanyag arány=600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>)

A két kondenzált gyűrűt tartalmazó aromások első gyűrűjének hidrogénezési sebessége nagyobb, mint az egygyűrűsökké, mint az utóbbiak hidrogénezése nafténekké. Ennek megfelelően az összes aromástartalom alakulását főleg az egygyűrűs aromások határozták meg. Az előzőeket az is alátámasztja, hogy a 350 °C-on előállított céltermékekben volt a legkisebb az egygyűrűs aromások koncentrációja (15,2-23,9%).

A céltermékek cetánindexének változását az alapanyagok függvényében a 4. ábrán mutatjuk be a 350 °C-on elvégzett kísérletek esetében. Az összes céltermék cetánindexe (48,1-56,9) a dízelgázolaj termékszabványban előírt (legalább 46,0) értéknél nagyobb volt. Jól látható azonban, hogy az alapanyagok LCO-tartalmának növelésével jelentősen csökkent a céltermékek cetánindexe. Ennek magyarázata, hogy az LCO-nak az alapanyagba történő bekeverésével jelentősen megnőtt az alapanyagok aromástartalma. Ezek hidrogénezésekor keletkező céltermékekben a visszamaradó aromások mennyisége is nőtt. Ugyancsak emiatt e céltermékek sűrűsége is kevésbé csökkent, ami a cetánindex értékekkel közvetlen összefüggésben van. A dízelgázolaj termékszabványban (0,8200-0,8450 g/cm<sup>3</sup>) megfelelő sűrűségű céltermékeket viszont csak a legfeljebb 15% LCO-t tartalmazó alapanyagokból kaptunk.



**4. ábra.** Céltermékek cetánindexének változása az alapanyagok függvényében (P=70 bar, T=350 °C, LSHV=1.0 h<sup>-1</sup>, hidrogén/alapanyag arány=600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>)

## Összefoglalás

Kísérleti munkánk során finomítatlan gázolaj és könnyű ciklusolaj elegyeinek (100/0; 95/5; 90/10; 85/15; 80/20; 70/30) minőségjavítását vizsgáltuk heterogén katalitikus hidrogénezéssel egy kereskedelmi, szulfidált állapotú NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátoron. A vizsgálatok során tanulmányoztuk az alapanyagok összetételének és a műveleti paramétereknek a cseppfolyóstermékek hozamára és minőségére gyakorolt hatását.

A kísérleti eredmények alapján megállapítottuk, hogy a kedvezőnek ítélt műveleti paraméterek mellett (P=70 bar, T=350 °C, LSHV=1.0 h<sup>-1</sup>, hidrogén/alapanyag arány=600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>) nagy céltermék hozammal (96,5-99,6%) lehet előállítani nagy hozzáadott értékű dízelgázolaj-keverőkomponenseket a vizsgált alapanyagokból. Az alapanyag LCO tartalma előnyösen legfeljebb 10-15% lehet, hogy az a dízelgázolaj termékszabványban megfelelő minőségű termékeket kapjunk, illetve azok gyakorlatilag a többgyűrűs aromásvegyületektől mentesek legyenek (<1,0%). Az így előállított dízelgázolaj-keverőkomponens jó égési tulajdonságú (cetánindex: 51,9-

53,3), nagy hozzáadott értékű (alapanyag LCO tartalma: 10-15%). Ezek a kísérleti eredmények hozzájárulhatnak a kőolajfinomítói rugalmasság növeléséhez.

### **Köszönetnyilvánítás**

A kutatómunka a GINOP-2.3.2-15-2016-00053: Molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalmú, cseppfolyós üzemanyagok kifejlesztése (hozzájárulás a fenntartható mobilitáshoz) projekt részeként az Európai Unió támogatásával valósul meg.

### **Irodalomjegyzék**

[1] FuelsEurope Statistical Report 2016

[2] Hancsók, J., Eller, Z., Sági, D., *Korszerű motor és sugárhajtómű üzemanyagok II. Dízelgázolajok*. Pannon Egyetem, Veszprém, 1-655 (2016)

[3] Six, S.: „Russia’s Oil Export Strategy: Two Markets, Two Faces”, Clingendael International Energy Programme, Hollandia, 2015, 30-36

[4] Bartelloni, A.: „EU Refining Industry: Ensuring Competitiveness & Environmental Improvements Go Hand-in-Hand”, ERTC Energy Efficiency Conference, Brüsszel, 2013. április 18.

[5] Niccum, P. K.: „Maximize diesel production in an FCC-centered refinery, Part 1”, Hydrocarbon Processing, 2012. szeptember 1.

[6] Yung, Y., Do, M.P., Florez, F.: “ptq & a diesel production specialist”, Petroleum Technology Quarterly, Q4, 27-28 (2010)

[7] Guiérrez, A., Arandes. M. J., Castano, P., Olazar, M., Bilbao, J.: „Enhancement of aromatic hydro-upgrading on a Pt catalyst by promotion with Pd and shape-selective supports”, Fuel Processing Technology, 101, 64-72 (2012)

[8] Varga, Z., Hancsók, J., Nagy, G., Pölcsmann, Gy.: „Quality improvement of heavy gas oils on NiMo and CoMo catalysts”, 7th International Symposium MOTOR FUELS 2006, Slovakia, Tatranské Matliare, 2006. június 19-22., Proceedings (ISBN 80-968011-3-9), 328-339.

# Szilikon membránok vizsgálata, kén-hidrogén eltávolítása

## *Investigation of silicon membranes, removal of hydrogen sulphide*

**Salekovics Alexandra, Nemestóthy Nándor**

*Pannon Egyetem, Biomérnöki, Membrántechnológiai és Energetikai Kutatóintézet  
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

### **Összefoglaló**

A biogáz alapú energiatermelés és hasznosítás részaránya napjainkra több országban is számottevővé vált. A gáz többkomponensű, kb. 60%-ban tartalmazza értékes alkotóként metánt, 35%-ban szén-dioxidot, de mellette előfordulnak még egyéb szennyezők is, mint például a kén-hidrogén ( $H_2S$ ). A  $H_2S$  megjelenése a gázáramokban gondot okoz, mivel korrozív, és mérgező tulajdonságokkal rendelkezik. Ezért eltávolítása szükségzerű. Megvalósítására többféle technológiákat alkalmaznak, ide értve: fizikai, kémiai, biológiai eljárásokat. Viszont megvalósítható az eliminálás membrántechnológiai módszerekkel is, melyek szelektív szeparáción keresztül tisztítják meg a rajtuk átvezetett gázáramot. Alkalmazhatóságának lehetőségét mutatja a konstrukció egyszerűsége, könnyű szabályozhatósága, és léptéknövelhetősége.

Ezért munkám során a ppm koncentrációjú  $H_2S$  szén-dioxidtól ( $CO_2$ ) és hidrogéntől ( $H_2$ ) való szelektív eltávolítását vizsgáltam, az erre kifejezetten alkalmas, adott geometriájú kapilláris szilikon membránmodulokon. A membrán anyagát képező poli-dimetil-sziloxán (PDMS) kedvező tulajdonságokkal rendelkezik a szeparáció hatékonyságára. P. Bakonyi és munkatársai korábban kutatást végeztek a  $H_2S$ , mint szennyező komponens szelektivitásokra gyakorolt hatásának vizsgálatára. Így a  $H_2S$  elimináción túl, ezen cikk eredményeinek feldolgozása és a  $H_2S$  hatásának minél pontosabb meghatározása volt a célom. Ehhez adott nyomásérték és térfogatáramok mellett különböző % $(V/V)$ -os összetételű, kétkomponensű  $CO_2/H_2$  és háromkomponensű  $CO_2/H_2/H_2S$  gázelegyeket vizsgáltam. A gázösszetétel változást, mind a permeátum, retentátum és betáplálás oldalon gázkromatográf segítségével követtem. A  $H_2S$  megjelenését az egyes gázáramokban pedig Dräger detektor csövek és Dräger multigáz detektor beépítésével mértem és igazoltam. Majd kiemelten a  $H_2S$  különböző ppm koncentrációinak  $CO_2/H_2$  szelektivitásra gyakorolt hatásának vizsgálatát végeztem el a permeabilitás és szelektivitás értékek meghatározását és összehasonlítását követően.

### **Summary**

Nowadays the rate of biogas-based energy production and utilization has become considerable in several countries. The gas itself is multicomponent, containing the valuable components of methane (about 60%) and carbon dioxide (about 35%), beside these it contains also other contaminants such as hydrogen sulphide ( $H_2S$ ). The appearance of  $H_2S$  in gas flows causes problems for it is corrosive and has toxic attribution. For this reason its removal is necessary. To achieve it multiple technologies are used, such as physical-, chemical- and biological processes. This elimination can be accomplished with membrane technological methods, too, that purifies the gas flow running through them with selective separation. The simplicity, the ease of controllability and scale-up of the design shows the possibility of its adaptability.

During my investigation I have studied the selective removal of ppm  $H_2S$  from carbon dioxide ( $CO_2$ ) and hydrogen gas ( $H_2$ ) by specific geometrical hollow fiber membranes, suitable for this kind of work. Poly-(dimethylsiloxane) (PDMS) – the material of the membrane has great attributes to be effective for separation. Bakonyi P. and his colleagues have earlier studied the effect on selectivity of  $H_2S$  as a contaminant component. Elimination of  $H_2S$  and determination of the effects of  $H_2S$  was my main goal. The measurements were performed with different vol.% composition, binary  $CO_2/H_2$  and ternary  $CO_2/H_2/H_2S$  gas mixtures with given pressure values and volumetric flow rates. The changes in the gas composition in the permeate, retentate and feed sides were followed by gas chromatography. The appearance of  $H_2S$  in the different gas flows was measured with built-in Dräger detector tubes and Dräger multi gas detector. Afterward the effect of the different concentrations of ppm  $H_2S$  on the selectivity of  $CO_2/H_2$  was investigated after determining and comparing the values of selectivity and permeability.

---

### **Köszönetnyilvánítás**

Nemestóthy N. köszönetet mond az Új Nemzeti Kiválóság Program (Emberi Erőforrások Minisztériuma) támogatásáért.

# Hulladék elasztomer-tartalom növelésének hatása hulladék polietilénben

*Effects of increasing waste elastomer content in waste polyethylene*

**Simon-Stöger L., Greczula E., Varga Cs., Bartha L.**

*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, MOL*

*Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék*

*H-8200, Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

## **Összefoglaló**

A mobilitás iránti lankadatlanul fokozódó igény eredményeképpen az évente keletkező gumiabroncs hulladék mennyisége világszerte folyamatosan nő. Emellett számottevő mennyiségben keletkezik műszaki gumihulladék (pl. EPDM) is. A hulladékgazdálkodás számára jelentős kihívást okozó hulladék elasztomerek együttes felhasználása hulladék poliolefinok töltőanyagaként potenciális lehetőséget kínál a feladat megoldására. A bekeverés hatására azonban a blend mechanikai jellemzőinek leromlása elkerülhetetlen, mértéke a bekevert elasztomer mennyiségével fokozódik. Kitűzött célunk korábbi sikeres eredményeink alapján a hulladék elasztomer-tartalom növelése a hulladék polietilénben, egyfajta határérték keresés és optimalizálás mellett, elsődlegesen a blend kedvező mechanikai jellemzőinek megtartása, valamint javítása. A tulajdonságjavítás elsődleges eszközeként kísérleti olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú kompatibilizáló adalékok szolgáltak, amelyek egyfajta hídépítő elemként kapcsolódhatnak be az addig gyenge határfelületi adhézióval rendelkező polimer mátrix és töltőanyag közé.

---

# Gyógyszeripari alapanyagok polimer csomagolóanyagokon keresztül való mérése különböző optikai elrendezésű NIR spektrofotométerekkel

*Measuring of pharmaceutical raw materials via polymer packages  
by NIR spectrophotometers using different optical arrangements*

**Slezsák János, Szabó Éva, Gergely Szilveszter**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék  
NIR Spektroszkópia Csoport  
1111 Budapest, Szent Gellért tér 4.*

---

## Summary

In many cases, drug companies intend to check the identity of delivered raw materials, additives and active ingredients without breaking the packaging. For this purpose, vibrational spectroscopic methods including near infrared (NIR) and Raman spectroscopy can be used successfully.

In this research near infrared spectrophotometers with different optical arrangements (DS: dispersive, FT: Fourier-transformed, DA: detector-array) were used to measure the diffusely reflected electromagnetic radiation of different types of pharmaceutical raw materials in polymer packaging. The conditions of measurements were optimized depending on the quality of pharmaceutical ingredients and packaging materials.

The detected ('as is') and mathematically transformed (normalization, scatter correction, smoothed differentiation etc.) NIR spectra were processed with multivariate chemometric methods. In this matter of unsupervised methods, like principal component analysis (PCA) and cluster analysis (CA) were used which techniques do not require prior information and reference measurements.

The control authorities of pharmaceutical production have already recognized the special benefits of NIR-based analytical techniques, therefore NIR spectroscopy is accepted in process and quality control as alternative method. These advantages should be tested under laboratory conditions before they can be successfully implemented as effective PAT device in pharmaceutical industry.

---

## 1. Bevezetés, célkitűzés

Napjainkban a gyógyszeripari szereplők többsége a QbD (*quality by design*) minőségirányítási koncepciót alkalmazza, melynek lényege, hogy a termelési folyamatok tudományos megértésével és kézben tartásával, szabályozásával a végtermékbe építhető a minőség. Az ezt lehetővé tevő, QbD-be illeszkedő folyamatkövető (vagy folyamatelemző) eljárások, technikák (*process analytical technologies*, PAT) közül kiemelkedik többek között a közeli infravörös (*near-infrared*, NIR) spektroszkópia, elsősorban gyorsaságának, könnyű kivitelezhetőségének köszönhetően, illetve nagy átteresztőképességű (*high throughput*) mivolta okán. [1]

A gyógyszeripari alapanyagok minőségellenőrzése során a rutinszerűen alkalmazott minőségellenőrzési és azonosság-tesztelő vizsgálatok elvégzéséhez majdnem minden esetben szükséges a beszállítóktól érkező nyersanyagok (alap-, segéd- vagy hatóanyagok) csomagolásának megbontása, és az abból történő mintavétel, ami számos hátránnyal, illetve kockázattal járhat (időigény, veszélyes anyagok mérése, reklamációk kezelése stb.).

Kutatásaink során kísérletet tettünk arra, hogy megmutassuk, a közeli infravörös spektroszkópia segítségével a gyógyszeripari anyagok minősítése kivitelezhető a csomagolás megbontása nélkül is, vagyis az egyes anyagok közötti különbségtétel lehetséges a csomagolóanyagokon keresztül felvett NIR spektrumok alapján, és ehhez – a korábbi vizsgálatokkal szemben [2-4] – több készüléktípust is felhasználtunk. A mérési paraméterek optimalizálását követően a kiválasztott gyógyszeripari anyagok NIR spektrumait 5 különböző vastagságú polietilén (PE) fólián

keresztül vettük fel, majd a fóliák hatásának maszkírozására a spektrumok adatpontjai alapján különböző matematikai-kemometriai, illetve spektrumkezelési technikákat alkalmaztunk.

## 2. Anyagok és módszerek

### 2.1. A vizsgált minták és fóliák

A mérésekhez felhasznált 8 vegyület kiválasztását több szempont befolyásolta. A gyógyszeriparban gyakran használt alap- illetve segédanyagokat választottunk ki, amelyek kémiai változatosságán túl hasonlóságukat is szem előtt tartottuk. Így széles körben, számos vegyülettípusra tudtuk tesztelni a módszerünket, másrészt pedig a technika érzékenységéről is információkhoz juthattunk, például rokon, akár csak néhány funkciós csoportban eltérő vegyületek elkülönítésével a fóliákon keresztül felvett spektrumok alapján. Ezen szempontok figyelembe vételével választottuk ki a következő 8 vegyületet: *keményítő, laktóz, glükóz, carbopol (poliakrilsav), aszkorbinsav, citromsav, cetil-sztearil-alkohol, talkum*. Ezek spektroszkópai mérését elvégeztük a standard mintakezelési protokollok szerint, illetve 5, különböző vastagságú ( $19 \mu\text{m}$ ,  $30 \mu\text{m}$ ,  $35 \mu\text{m}$ ,  $60 \mu\text{m}$ ,  $70 \mu\text{m}$ ) polietilén csomagoló fólián keresztüli spektrumfelvétellel is.

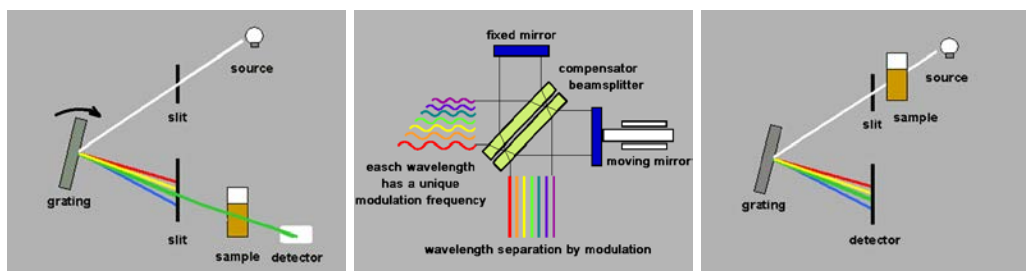
### 2.2. Alkalmazott készülékek

A spektroszkópai méréseket laboratóriumunkban 3, különböző optikai elrendezésű NIR spektrofotométerrel végeztük, diffúz reflexiós mérési elrendezéssel. A diszperziós (*dispersive*, DS) méréseket *FOSS NIRSystems 6500* spektrométerrel végeztük el 1100-2500 nm hullámhossztartományban 2 nm-es lépésközzel, PbS detektorral. A Fourier-transzformációs (*Fourier-transform*, FT) mérésekhez *PerkinElmer Spectrum 400* készüléket használtunk *Near-Infrared Reflectance Accessory* mintakezelő egységgel,  $2 \text{ cm}^{-1}$  lépésközzel, *InGaAs* detektorral (mérési hullámhossztartomány: 1000-2500 nm). Emellett detektorsoros (*detector-array*, DA) optikai konfigurációjú készülékkel is felvettük a minták spektrumait (*Perten DA 7250 NIR Analyzer*, *InGaAs* detektorsor, 950-1650 nm-es hullámhossztartomány 2 nm lépésközzel). A három készüléktípus összehasonlítását az 1. táblázat, optikai konfigurációikat pedig az 1. ábra szemlélteti.

1. táblázat. A felhasznált készüléktípusok összehasonlítása.

Optikai konfiguráció	Előny	Hátrány
diszperziós (DS)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- a legjobb jel-zaj arány</li> <li>- széles hullámhossz-tartomány (pl. NIR mellett VIS is)</li> <li>- prediszperzív elrendezés esetén a minta felmelegedése csekély</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- mérés során belső standardok letapogatása is szükséges a megfelelő hullámhossz pontosságához, így hosszabb idejű a spektrumfelvétel</li> <li>- kis felbontás</li> </ul>
Fourier-transzformációs (FT)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- a legjobb hullámhossz pontosság, így a spektrumok könnyen transzferálhatók</li> <li>- nagy felbontás, mely azonosításhoz kiváló, de a mennyiségi mérésekhez nem esszenciális</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- rázkódásra a legérzékenyebb</li> <li>- kis hullámhosszaknál a legrosszabb jel-zaj aránnyal bír</li> <li>- a posztdiszperzív elrendezés miatt a minta felmelegedhet</li> </ul>
detektorsoros (DA)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- a legrobustusabb: rázkódásra érzéketlen kialakítás</li> <li>- rövid idejű spektrumfelvétel, így a minta (pl. granulátumok, pelletek) mozgásaira toleránsabb</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- kompromisszum: szűkebb mérési tartomány a megfelelő jel-zaj arány érdekében</li> <li>- a posztdiszperzív elrendezés miatt a minta felmelegedhet</li> </ul>





**1. ábra.** A három készülék vázlatos optikai elrendezése  
(bal oldalon: diszperziós, középen: Fourier-transzformációs, jobb oldalon: detektorsoros). [5]

### 2.3. Felhasznált programcsomagok

A spektrumok kiértékelése során a *Statistica 64<sup>®</sup> 13.1* (Dell Inc., Tulsa, OK, USA), a *The Unscrambler<sup>®</sup> X 10.3* (CAMO Software, Oslo, Norvégia) és a *Microsoft<sup>®</sup> Excel 2013* (Microsoft Corporation, Redmond, WA, USA) programcsomagokat használtuk fel.

### 2.4. Matematikai műveletek

#### *Spektrum előkezelések*

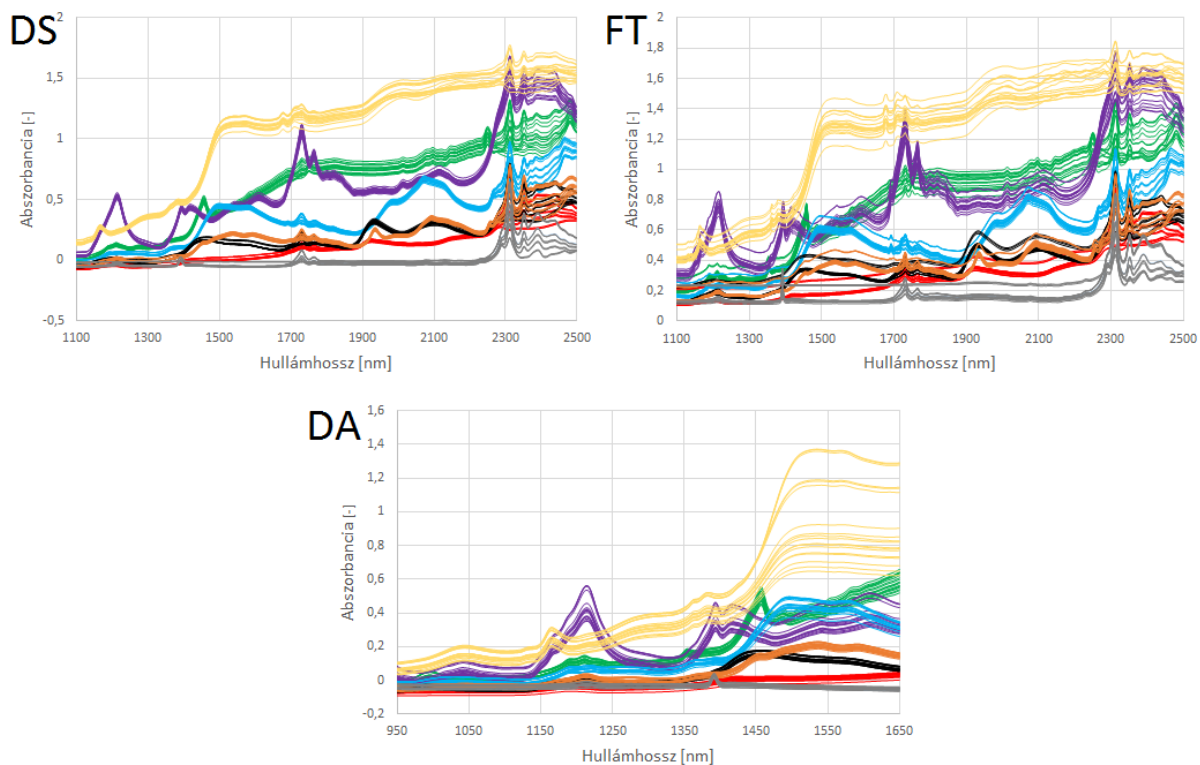
Az alapvonal-korrekció elvégzésére kétféle módszert alkalmaztunk, a standard normál változó (*standard normal variate*, SNV) és a többszörös szórás-korrekció (*multiple scatter correction*, MSC) módszerét. Emellett egyes spektrumok esetében simítással kombinált deriválást is végeztünk, hogy az egyes anyagok NIR spektrumai jobban elkülöníthetőek legyenek.

#### *Főkomponens-elemzés és klaszterelemzés*

Az adatredukciós, kemometriai módszerek közül a főkomponens-elemzést (*principal component analysis*, PCA) és a klaszterelemzést (*cluster analysis*, CA) alkalmaztuk, előbbi esetben az első 3 főkomponenst vettük figyelembe, a klaszterelemzés során pedig két távolságfüggvény (euklideszi távolság, Pearson-távolság) és két távolságképző algoritmus (Ward-távolság módszer, illetve egyszerű lánc, azaz *single linkage* módszer) kombinációit használtuk fel. [6]

## 3. Eredmények

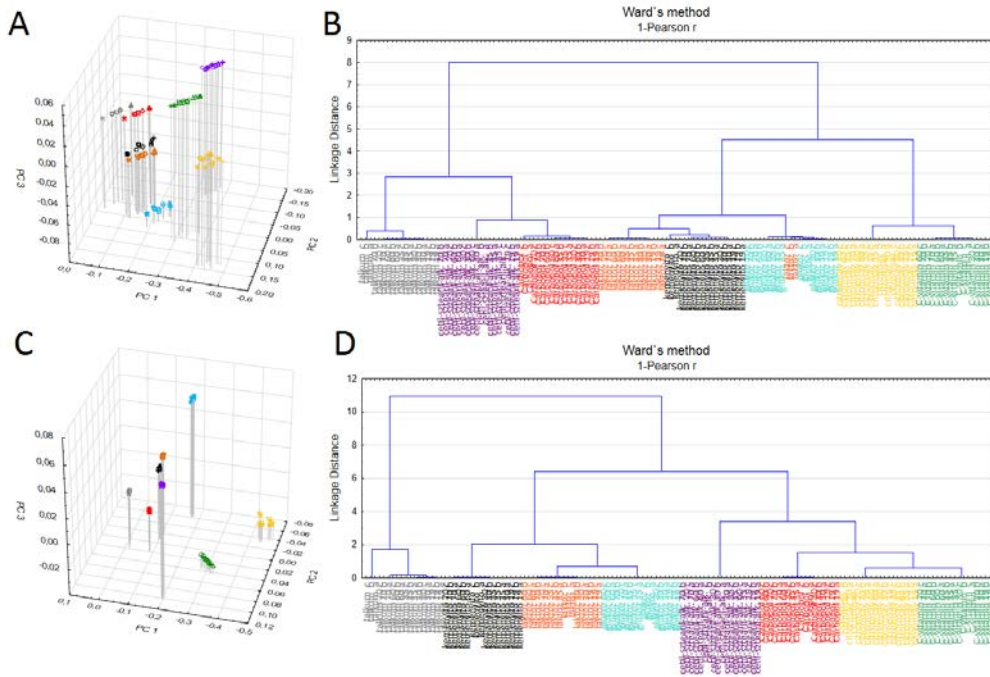
A mérési paraméterek (mintatartók, hullámhossztartományok) optimalizálását követően a vizsgált vegyületek NIR spektrumait a három készüléssel, az öt különböző vastagságú PE fólián keresztül vettük fel, majd a felvett spektrumokból spektrumkönyvtárat hoztunk létre. A 2. ábrán láthatóak azok a spektrumok, amelyeket az 5 különböző vastagságú PE fólián keresztül vettünk fel a három készüléssel. A spektrumok alapján elmondható, hogy az anyagok jellemző NIR karakterisztikája megmarad, a vizsgált vegyületek jellemző spektrumot adnak akkor is, ha a NIR méréseket csomagolóanyagokon keresztül végezzük el. Ez alól egyedül a 2270 nm-nél magasabb hullámhosszú tartományok jelentenek kivételt, ebben a tartományban a spektrumok szórása megnövekedett, ami minden bizonnyal a PE fóliák hatásából adódik, ugyanis ebben a tartományban jelentkeznek a polietilénben megtalálható C–C és C–H kötések kombinációs rezgései. [7] Értelemszerűen a DA készülék esetében a másik két készülékétől eltérő (alacsonyabb) mérési hullámhossztartomány miatt ez a hatás nem jelentkezik.



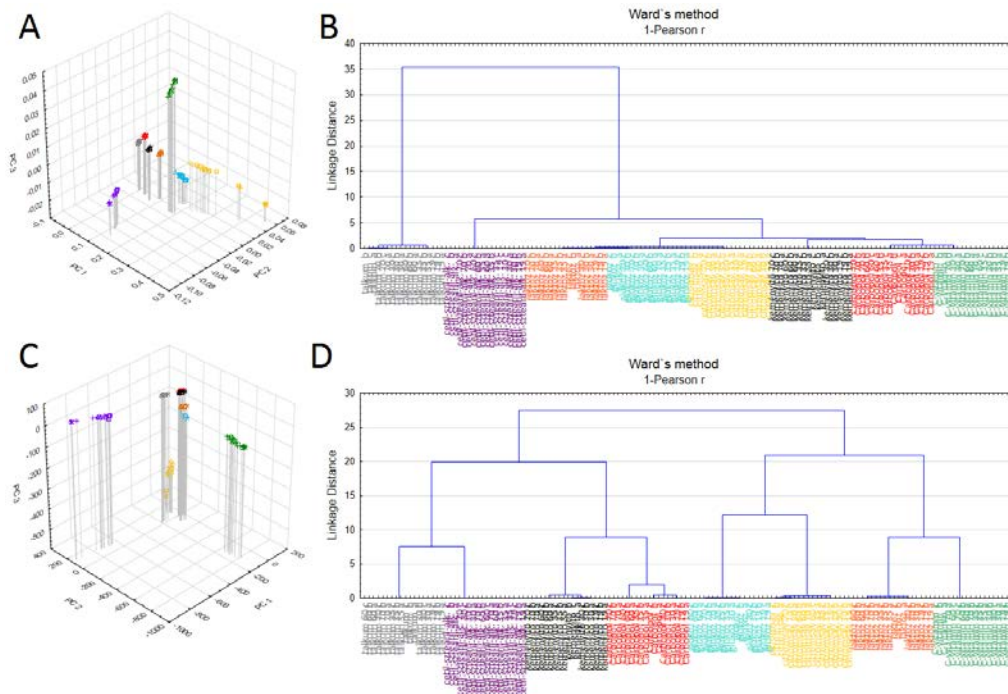
**2. ábra.** A PE fóliákon keresztül rögzített NIR spektrumok. A spektrumok színezése a következő: keményítő, **carbopól**, **aszcorbinsav**, **citromsav**, **cetil-sztearil-alkohol**, **glükóz**, talkum, **laktóz**.

A fóliákon keresztül felvett spektrumok alapján végeztük el a főkomponens-elemzést és a klaszterelemzést, mégpedig úgy, hogy egyes esetekben az elemzésekből kihagytuk azon hullámhossztartományokat, melyekben a PE fóliák elnyelési sávjai dominálnak. Ennek eredményeit szemlélteti a DS készülék példáján a 3. ábra. Ezáltal az egyes vegyületek NIR spektrumok alapján történő elkülöníthetősége javult. A teljes hullámhossztartományra (1100-2500 nm) végzett PCA (3/A ábra) esetében a fóliák vastagságával összefüggő vonalas trend figyelhető meg az első 3 főkomponens szerinti score-ábrákon. A klaszterelemzés során (3/B ábra) a legjobb eredményeket a Pearson-távolság Ward-módszer alapján történő mérésével kaptuk, azonban még ez az algoritmus is tökéletlen csoportosítást eredményezett. A hullámhossztartomány szűkítésével azonban (1100-2270 nm) a PCA kimeneti ábráin (3/C ábra) sokkal koncentráltabbá váltak a spektrumokat reprezentáló pontok, a CA eredményeit szemléltető dendrogramon (3/D ábra) pedig megfigyelhető, hogy mind a csoporttávolság, mind a csoportosítás szempontjából jobb eredményeket értünk el, mint a teljes hullámhossztartományra végzett elemzésekkel. Hasonló eredményeket kaptunk az FT készülékkel nyert adatok elemzésével is (melyeket itt nem tárgyalunk részletesebben).

A DA készülékkel nyert spektrumokon különböző spektrumkezelési módszerek elkülönítésre gyakorolt hatását vizsgáltuk (4. ábra), a vizsgált spektrumkezelési módszerek közül a simítással kombinált deriválással javítható volt az elkülönítés. A PCA az eredeti spektrumok adataihoz (4/A ábra) képest a derivált spektrumok adatai alapján (4/C ábra) jobb elkülönítést eredményezett, ám a simítással kombinált deriválás nem szüntette meg teljesen a fóliák miatt jelentkező trendeket. A klaszterelemzésnél jobb eredményeket értünk el, az eredeti spektrumok alapján képzett dendrogramhoz (Pearson-távolság, Ward-módszer, 4/B ábra) képest a simítással kombinált második derivált spektrumok alapján történő klaszterezés (4/D ábra) során a csoportok távolsága megnőtt, tehát az elkülönítésük javult.



**3. ábra.** A főkomponens-elemzés (A, C), illetve klaszterelemzés (B, D) eredményei a teljes hullámhossztartományra (1100-2500 nm, A-B), illetve a PE fóliák elnyelési sávjait nem tartalmazó redukált hullámhossztartományra (1100-2270 nm, C-D). Színek jelentése: lásd a 2. ábrán.



**4. ábra.** A DA készülékkel felvett spektrumok eredményei: az eredeti spektrumok alapján végzett PCA (A) és CA (B) kimeneti ábrái, illetve a spektrumok simítással kombinált második deriváltjai alapján kapott PCA (C) és CA (D) kimenetek. Színek jelentése: lásd a 2. ábrán.

#### 4. Konklúzió

Kutatásaink során a cél az volt, hogy a NIR spektroszkópia PAT eszközként való felhasználási lehetőségeinek bővítéséről szerezzünk tapasztalatokat, vagyis kísérletet tegyünk a kiválasztott vegyületek csomagoló PE fóliákon keresztül rögzített NIR spektrumai alapján történő elkülönítésére, és ezt több, eltérő optikai konfigurációjú készüléktípusra is elvégezzük. Az egyes minták molekuláris jellemzőiből fakadóan viszonylag széles körben teszteltük a módszert, azonban az érzékenységről is információkhoz juthattunk (rokon vegyületek – pl. glükóz és laktóz – elkülönítésével). Az anyagok elkülönítése a kemometriai eszköztár segítségével, a PCA és CA alkalmazásával sikeres volt, ehhez egyes esetekben szükséges volt a spektrumok előkezelése, illetve az elemzésekhez felhasznált hullámhossztartomány redukciója – a PE elnyelési tartományok elhagyásával. Összefoglalásként elmondható, hogy a csomagolóanyagokon keresztüli, közeli infravörös spektroszkópián alapuló anyagminősítés – a készüléktípusok, a vizsgált hullámhossztartományok, az alkalmazott spektrumkezelés és a kemometriai módszerek megfelelő kombinációjával – megvalósítható a csomagolás megbontása nélkül is, ezek alapján tehát lehetséges egy működőképes, ipari folyamatokba implementálható folyamatkövető rendszer létrehozása.

#### 5. Irodalomjegyzék

- [1] C. F. Mandenius, K. Graumann, T. W. Schultz, A. Premstaller, I. M. Olsson, E. Petiot, C. Clemens, M. Welin: Quality-by-design for biotechnology-related pharmaceuticals. *Biotechnology Journal* (2009) 4(5): 600-609.
- [2] M. Ulmschneider, E. Pénigault: Using near-infrared spectroscopy for the noninvasive identification of five pharmaceutical active substances in sealed vials. *Analisis* (1999) 27: 854-856.
- [3] M. Ulmschneider, E. Pénigault: Direct identification of key intermediates in containers using Fourier-transform near-infrared spectroscopy through the protective polyethylene primary packaging. *Analisis* (2000) 28(2): 136-140.
- [4] O. Y. Rodionova, Y. V. Sokovikov, A. L. Pomerantsev: Quality control of packed raw materials in pharmaceutical industry. *Analytica Chimica Acta* (2009) 642(1-2): 222-227.
- [5] H. V. Andersen, H. Wedelsbäck, P. W. Hansen: NIR spectrometer technology comparison. A white paper from Foss. *P/N 1026672, Issue 1, November 2013*.
- [6] I. E. Frank, R. Todeschini: The data analysis handbook. *Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands* (1994).
- [7] D. L. Snavely, J. Dubsky: Near-IR spectra of polyethylene, polyethylene glycol and polyvinylethyl ether. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry* (1996) 34(13): 2575-2579.

# **Műanyag hulladékok krakkolása szakaszos reaktorban: klórtartalmú alapanyag hatása a lejátszódó folyamatokra**

*Pyrolysis of waste plastics: the effect of the chlorine containing raw material to the product properties*

**Sója János, Miskolczi Norbert**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## **Összefoglaló**

Az emberiség lélekszámának növekedése, a fogyasztói szokások változása és a GDP növekedése következtében a megújuló energiaforrások szerepe egyre inkább felértékelődik. A hulladékáramokból történő energia előállítás („waste to energy”) napjaink egyik aktuális kutatási területe. Az ún. kémiai újrahasznosítással (pirólízissel/krakkolással) a polimer hulladékokból értékesebb termékek állíthatók elő, melyek előnyösen alkalmazhatóak többek között energia, vagy vegyipari alapanyagok előállítására. A krakkolás során keletkezett termékek további hasznosítására többféle lehetőség van, így például a bomlástermékekből újra műanyag gyártható, vagy azok más vegyipari folyamatokban használhatók fel: olajfinomításban a kőolajszármazékokkal együtt vegyipari alapanyag vagy motorhajtóanyag készíthető belőle.

A kémiai hasznosítás gazdaságossága érdekében kulcsfontosságú az ún. illékony termékek megfelelő hozammal történő előállítása. A krakkolás alapanyagaként számos műanyag típus kerülhet szóba, de közülük a további hasznosítás szempontjából legjobb tulajdonságokkal a poliolefinek és a polisztirol rendelkeznek.

A műanyagok fajtaszelektív gyűjtése költséges és nehezen kivitelezhető, ezért fontos megvizsgálni, hogy milyen folyamatok játszódnak le a különböző típusú műanyagokat tartalmazó keverékek feldolgozása esetén. A kiindulási anyagban lévő PVC vagy poliamid a termékek szennyezőanyag tartalmának növekedését eredményezi. Másrészt viszont egyes műanyagok jelentősen megkönnyíthetik más műanyagok degradációját. Általában a kisebb aktiválási energiájú bomlási folyamatok eredményeznek olyan instabil fragmentumokat, melyek elősegítik a kiindulási elegyben lévő más műanyagok degradációját. Például a PVC krakkolásakor első lépésben keletkező klórtartalmú gyökök is iniciálhatják a polietilén (PE) további bomlását.

Jelen kutatómunkánk során PE, PVC és szennyezett PE alapanyagok adott arányú keverékének termo-katalitikus degradációját vizsgáltuk. A kísérleteket szakaszos reaktorban, inert atmoszférában hajtottuk végre különböző hőmérsékleteken. A hőmérséklet növelése és a katalizátorok alkalmazása leginkább az illékony termékek hozamát növelte. Emellett a katalizátor, a PVC és a felületi szennyezés jelentősen befolyásolta a látszólagos aktiválási energia értékét.

---

## **Summary**

Owing to the increasing in the global population, the changes in the consumer habits and the GDP growth the role of renewable energy sources has high interest. Nowadays the production of energy from waste („waste to energy”) is an important research area. More valuable products can be produced from the waste polymers by chemical recycling (pyrolysis/cracking) which are suitable for energy production or should be used as petrochemical feedstocks. There are many possibilities for the further utilization of the pyrolysis products, such as polymer production, or they should be used in other industrial processes, for instance in oil refinery or petrochemical processes.

To maximize the volatile yield is a key factor. Many kind of plastics can be raw material of the cracking. However, polyolefins and polystyrene have the best properties for further utilization of pyrolysis products.

The selective collection of the waste is very expensive and hardly implement therefore important to investigate what happen in the case of mixed polymer processing which contain difference type of plastics. PVC or polyamide containing raw material, result products with high level of unfavoured compounds. On the other hand some plastic can be significantly affecting the degradation of other plastics. Generally, decomposition processes with lower activation energy result unstable fragments, which can promote the degradation of other polymers. For example chlorinated radicals obtain in the first step of PVC pyrolysis, which can also initiate the further degradation of PE. The goal of this work was to investigate the thermo-catalytic pyrolysis of PE, PVC and contaminated PE. Experiments were carried out in a batch reactor, in inert atmosphere at different temperatures. Increasing the temperature and the use of catalysts could increase the yield of volatile products. In addition, the catalyst, the PVC and the surface contamination were also significant effect to the apparent activation energy.

---

## **Köszönetnyilvánítás**

A szerzők köszönetüket fejezik ki a Nemzeti Kutatási és Innovációs Hivatal, Magyar-indiai (KTIA-DST) K+F+I együttműködési program (TÉT\_13\_DST) keretében nyújtott támogatásért (TÉT\_13\_DST-1-2014-0003).

---

# Shimadzu ICP-MS 2030 bemutatása és alkalmazása a környezetanalitikában.

Somfai Attila

Simkon Kft

1163 Budapest Színház utca 30.

Az előadás során egy rövid áttekintést kívánok nyújtani a spektroszkópai nagyműszeres analitikai megoldásokról. Az elemanalízises technikákat a kimutató határaik alapján összehasonlítom és megpróbálom pár példán keresztül szemléltetni, hogy egyes berendezéseket hol érdemes és lehet használni.

Az ICP-OES és az ICP-MS elméleti hátterének áttekintésével össze kívánom hasonlítani a két ICP technikát azok működési elvét és, hogy milyen segítséget nyújt a Shimadzu a felhasználóknak a készülék használatához, hogy az „easy to use” szlogen ne csak szlogen legyen, hanem valóság, és milyen megoldásokat kínál a költségek csökkentéséhez.

Az előadást az ICP-MS 2030 készülékkel készült applikációk bemutatásával zárom, ahol szemléltetni kívánom, hogy milyen különböző területen lehet a készüléket használni.



# **Extracelluláris vezikulák orientálhatóságának vizsgálata polarizált fény spektroszkópiával**

## *Characterization of extracellular vesicles orientation using polarized light spectroscopy*

**Szigyártó Imola**

*MTA Természettudományi Kutatóközpont*

*Anyag- és Környeztekémiai Intézet*

*1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2.*

---

### **Összefoglaló/ Summary**

Az extracelluláris vezikulák (EV) olyan biológiai eredetű nanorészecskék, amelyek a sejtek közötti kommunikációban vesznek részt. Ezen felül számos élettani folyamatban játszanak szerepet, emiatt potenciális diagnosztikai szereppel is bírnak.

A lipidrendszerek bio-fizikai jellemezésénél használt módszerek alkalmasak lehetnek és ezáltal közelebb visznek minket az extracelluláris vezikulák tanulmányozásához. Kimutattuk, hogy a vörösvértest eredetű extracelluláris vezikulák vizsgálhatóak polarizált fény spektroszkópiai módszerekkel. Az áramlásos lineáris dikroizmus spektroszkópia segítségével információt kapunk az EV-k deformálhatóságáról, valamint betekintést nyújthat az orientált makromolekulák szerkezetébe. UV-látható, valamint cirkuláris dikroizmus spektroszkópiai mérésekkel kiegészítve a membránhoz kötött makromolekulák szerkezeti változásait is nyomon követhetjük.

Extracellular vesicles (EVs), these biological nanoparticles, are important mediators of intracellular communication. Moreover, they are involved in many physiological conditions, so they may serve as potential therapeutic targets.

Our knowledge may rapidly increase on EVs if these systems could be the subject of additional structural methods used commonly for lipids systems. We have demonstrated that polarized light spectroscopy techniques can be used in characterization of red blood cell derived EVs. Flow-linear dichroism measurements can carry information about EVs deformation and can give insight into properties of oriented macromolecules. Additional UV-visible and circular dichroism measurements can provide the possibility to track alterations of this bio-macromolecular complexes present in EVs.

---

# **Bioolaj nehéz maradék vizsgálata gumibitumen rendszerben**

*Investigation of biooil heavy residue containing rubber bitumen*

**Tálosi Gréta<sup>1</sup>, Gergő Péter<sup>1</sup>, Dr. Geiger András<sup>2</sup>, Dr. Hancsók Jenő<sup>1</sup>,  
Dr. Holló András<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

<sup>2</sup>*MOL Nyrt., 2440 Százhalombatta, Olajmunkás u. 2.*

---

## **Összefoglaló**

A bitumen elsődleges forrása a kőolaj, mindazonáltal a finomítók átalakítása bitument von ki a piacról a nagyobb részarányú, közlekedési motorhajtóanyag gyártása miatt. Emellett, az utakkal szemben támasztott követelmények szigorodása magával hozta új, nagyobb teljesítményű, de drága kötőanyagok felhasználását is. Ennek lehetséges megoldása az alternatív, olcsóbb, de nagyteljesítményű kötőanyagok (pl. gumibitumen) alkalmazása. Másrészt a nem fosszilis eredetű alternatív alapanyagok használata lehet az egyik hosszú távú megoldás a kőolaj eredetű bitumen részleges helyettesítésére.

Számos kutató vizsgálta a biomasszát, mint alternatív alapanyagot a motorhajtóanyagok és különböző vegyipari alapanyagok előállításánál. Lignocellulóz gyors pirolízisével értékes pirolízis folyadék nyerhető. Azonban ennek nagy oxigén- és víztartalma (az oxigéntartalom akár 45% is lehet) korlátozza felhasználhatóságát. Ennek minőségjavítása során olyan nehéz, aszfalténes szerves frakció is keletkezik, amelynek hasznosítása nem megoldott. Mostanában a kutatók tanulmányozták ezen termékek felhasználásának lehetőségét az útépitési bitumen gyártása során, mint alternatív nyersanyag.

A bioolajok nehéz maradékát eddig elsősorban útépitési- és hagyományos polimerrel módosított bitumenekhez keverték minőségjavítás céljából. Ezért kutató munkánk során fenyőfa pirolíziséből származó bioolaj minőségjavításából nyert nehéz frakció gumibitumenbe történő bekeverését végeztük el. Célul tűztük ki, hogy tanulmányozzuk ezen frakció kötőanyagra gyakorolt tulajdonságmódosító hatását. Elsősorban a folyási tulajdonságok változását vizsgáltuk, melyet a MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszéken végeztünk dinamikus nyíróreométer (DSR) segítségével.

## **Summary**

The bitumen is derived primarily from crude oil, nevertheless the modification of refinery configurations aimed at producing more transportation fuels decreased the quantity of bitumen being available at the market. Additionally, the tightening requirements to be implemented in the road construction induced the use of new and high performance, but expensive binders. One of the possible solutions to overcome this challenge is the use of alternative, less expensive, high-performance binders (e.g. rubber bitumen). On the other hand, the use of alternative materials derived from non-fossil sources can be a long-term option for replacing partially the fossil-derived bitumen.

Many researchers investigated the biomass as an alternative source in the production of transportation fuels and of various chemical products. E.g. valuable pyrolysis liquid products can be obtained from fast pyrolysis of lignocellulosic materials. However, their considerable oxygen and water contents (the oxygen content is up to 45%) limits their application. In the quality improvement process of bio-oils, a heavy and asphaltene-rich organic phase is also formed, which utilization is not solved. Recently, researchers studied the possibility to use these products for road bitumen production as an alternative raw material.

Until now, heavy residues of the biooil were added to road bitumen and polymer modified bitumen in order to improve the quality. Therefore, the aim of our research work was to investigate the addition of biooil (from pinewood pyrolysis) heavy fraction obtained from mild HDO process to rubber bitumen. Our main objective was to examine the effects of biooil fractions on the characteristics of the binder. First of all, the change of the rheological properties was investigated by using a dynamic shear rheometer (DSR) available at the Department of MOL Hydrocarbon and Coal Processing.

---



# **Pszeudokomponensekből álló reakcióhálózat kinetikai azonosítása vákumgázolaj hidrokrakkolása során**

*Kinetic identification of reaction network consisting chemical lumps for vacuum gas oil  
hydrocracking*

**Till, Zoltán; Varga, Tamás; Chován, Tibor**

*University of Pannonia, Department of Process Engineering  
10, Egyetem St. Veszprém, H-8200*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

A hosszú szénláncú, nagy szénatomszámú szénhidrogének, mint például a finomítói vákuum lepárlási maradék, különböző növényi olajok vagy a használt sütőolaj hidrokrakkolásával hasznosítható motorhajtóanyagok, elsősorban biogázolajok állíthatók elő. Ezért ezen alapanyagok felhasználása környezetvédelmi és gazdasági szempontból is előnyös. Az alkalmas technológia kifejlesztéséhez szükség van a lejátszódó folyamatok modellezésére, ez azonban a nagyszámú lejátszódó reakció miatt gyakran nehézségekbe ütközik. Gyakran alkalmazott egyszerűsítésként lehetőség van nem az egyes kémiai komponensek, hanem a technológiai igényeknek megfelelő komponenscsoportok koncentrációváltozását leíró mérlegegyenleteket felírni. Ezen ún. lumped modellek alkalmazása elterjedt módszer a hidrokrakkolás modellezése során, azonban a modellek felírása gyakran próbálgatással, a lehetséges reakcióutak heurisztikus vizsgálatával történik.

Munkánkban egy olyan algoritmus fejlesztését kezdtük el, amely alkalmas lehet arra, hogy a komponenscsoportokat összekötő összes lehetséges reakció útvonal között keresve azonosítsa azt a legkisebb számú reakciót, melyek figyelembe vételével a csoportok koncentrációjának alakulása még megfelelő mértékben leírható. Az itt bemutatott módszer félig tekinthető automatizáltnak, azonban jelenlegi formájában is hatékonyan képes viszonylag nagyméretű reakcióhálózatok modell redukcióját elvégezni.

Through hydrocracking of long-chained hydrocarbons such as vacuum distillation residue from refineries, vegetable oils or waste cooking oil it is possible to produce serviceable fuels, mainly bio-gasoil with high quality. Therefore, utilization of these feedstocks is advantageous from both environmental and economical point of view. In order to develop a suitable production technology, it is necessary to model the processes taking place, yet this often meets difficulties because of the large number of reactions. A simpler and often adequate approach is to calculate concentration changes of certain component groups instead of individual components. The application of these so-called lumped models is a frequently used method during modeling of the hydrocracking process; however the construction of these models is often carried out with trial and error methods, investigating the possible reaction pathways using a heuristic approach.

In our work we started the development of an algorithm that would be capable to identify the smallest number of reactions that is necessary to describe concentration changes of lumps properly while searching among all possible reaction pathways. The method presented here is considered as a semi-automated one; nevertheless it is capable to carry out model reduction of reaction networks consisting of a fairly high number of possible pathways.

---

## **Introduction**

Hydrocracking process, which involves catalytic cracking of long-chained hydrocarbon molecules, has a growing importance in oil industry. Important nonconventional feedstocks such as vacuum gas oil, various vegetable oils or even waste cooking oil can be utilized to produce fuels, mainly bio-gasoil with high quality [1].

Regardless of feedstock, its complexity and the several possible reactions that can take place during hydrocracking make the detailed kinetic modeling extremely difficult. Nonetheless, there are attempts present in the literature that deal with individual components. Zhang et al. studied hydrocracking of vacuum gas oil, modeling individual reactions while estimating the rate coefficients based on the structure of the species, applying quantum chemical and group contribution methods [2]. Browning et al. formulated a detailed kinetic model taking 217 lumps into consideration; still, the required number of kinetic parameters to be identified was

reduced to 17 with similarity considerations and probability matrices. This distribution approach raised some further interest recently, e.g. [3; 4].

Lumped models provide an alternative that does not require a detailed reaction network. Instead, macro scale information can be used as a starting point, usually the distillation curve of the system investigated. Based on that, various lumps can be formulated. One might consider “classical” oil fractions such as kerosene or gasoline, but lumping is possible in a greater degree as well resulting for example components with greater than 400°C normal boiling point. Both the advantage and disadvantage of this approach lie in its simplicity, as very little information is needed to calculate yields of relatively pure components, but the identified mechanism for the transition processes between individual lumps (often called reactions for the sake of simplicity) are specific to the feedstock and conditions present in the experimental system therefore cannot be simply transferred to other systems and ought to be identified for every system. The vast number of studies presented in literature supports this assumption. For example, Puro et al. developed a four-lump kinetic model to describe hydrocracking of vacuum residue from Maya crude oil [5]. 10 different reaction networks with increasing complexity were identified. Rate equation coefficients were reported in case of the most complex model. A similar model can be found for waste cooking oil feedstock [6]. Comparing this kinetic model with the former, it can be seen that while the chemical lumps are similar, different reaction pathways were taken into consideration, therefore it is not possible to compare the rate coefficients from obtained from the two cases. Additionally, in neither case the kinetic parameters followed strictly the Arrhenius equation. Hence, for lumped kinetic models it is often advantageous to determine the reaction rate coefficients at different temperatures independently and then calculate the frequency factor and activation energy of the reaction separately in a second regression step. This method explicitly covers the uncertainties of the temperature dependence of the reactions. However, this is not a necessity as there are modeling approaches with the limitation of rate equations following Arrhenius’ law present in the literature. e.g. [7; 8].

In this study a six-lump kinetic model was applied for modeling of vacuum gas oil hydrocracking process. The aim of our work is to thoroughly investigate the reaction network and reduce the number of kinetic parameters needed to be identified to describe concentration changes of the lumps without significantly decreasing model accuracy. In the following sections we present the complete reaction network and our developed algorithm for model reduction. The results show that the complete network can effectively be reduced without losing significant amount of information.

### **Investigating the complete reaction network**

Here we consider the simulation of a single-tube reactor. Sadighi et al. reported measurement data for vacuum gas oil hydrocracking in a pilot scale single tube fixed bed reactor [7]. Six lumps were formed, namely Vacuum gas oil (VGO), Diesel (D), Kerosene (K), Heavy Naphtha (HN), Light Naphtha (LN) and Gas (G). This gives us a slightly realistic approach for modeling the hydrocracking process as the lumps broadly represent the desired products of the actual hydrocracking process. Experiments were carried out at four temperature values (380 °C, 400 °C, 410 °C and 420 °C) and four different LHSV values (0.5 h<sup>-1</sup>, 1 h<sup>-1</sup>, 1.5 h<sup>-1</sup> and 2 h<sup>-1</sup>), resulting 16 experimental conditions for each lump (96 in total). Model of the pilot scale reactor is present in [8]. For the sake of simplicity, here we re-publish the six-lump kinetic model (including all forward reaction pathways, shown in Figure (1)) and governing equations as follows:

$$\frac{d(\underline{c} \cdot V)}{dz} = \eta \cdot \varepsilon \cdot \underline{A} \cdot \underline{c} \quad (1)$$

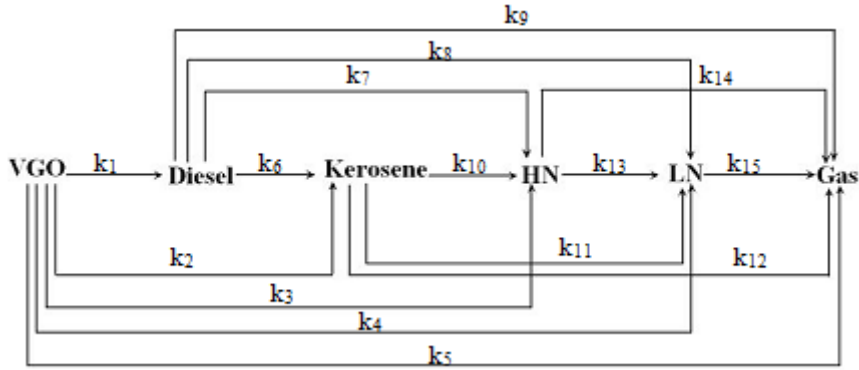
$$\underline{A} = a_{ij} = \begin{cases} -\sum_{l=1}^m k_{il}, & \text{if } i = j \\ k_{ji} & \text{if } i \neq j \end{cases} \quad (2)$$

$$k_i = k_{0,i} \cdot \exp\left(\frac{-E_{a,i}}{RT}\right) \quad (3)$$

$$\underline{c} = [c_F \ c_D \ c_K \ c_{HN} \ c_{LN} \ c_G]^T \quad (4)$$

Where  $\eta$  is the effectiveness factor of the heterocatalytic reactions,  $\varepsilon$  is the catalyst volume fraction,  $A$  is the conversion matrix of the reaction system,  $k_0$  is the pre-exponential factor and  $E_a$  is the activation energy of the reaction,  $R$  is the gas constant and  $T$  is the temperature of the reactor in K. The values of  $\eta$  and  $\varepsilon$  are 0.8 and 0.264, respectively.

In short terms, the diagonal elements of the conservation matrix contain the negative sum of reaction rate coefficients for the reactions acts as a sink for the  $i^{th}$  component ( $m$  in total) and the off-diagonal elements contain the  $k$  values of reactions that produce the  $i^{th}$  component.



**Figure 1.** Complete six-lump reaction network.

In their work, Sadighi et al. identified the 30 parameters of the reaction network shown in Figure (1), namely the pre-exponential factor and activation energy for each reaction. It was shown that some reaction pathways are negligible (as the kinetic constants are relatively small), therefore a reduced network was defined manually and its parameters identified in a second parameter identification step.

Alternatively, we would like to discuss a somewhat more sophisticated approach for kinetic parameter identification and model reduction. The complete reaction network contains 15 reactions; however, not all reaction pathways are necessarily needed to model the concentration changes in the reactor at various conditions. This consideration leads to a Mixed Integer Nonlinear Program (MINLP). There are three variables assigned to each reaction, a binary existence variable, and the associated pre-exponential factor and activation energy, the latter two normalized between 0 and 1, accordingly:

$$\underline{x} = \left[ \underline{e} \underline{x} \underline{s}^T \quad \underline{k}_0^{lin T} \quad \underline{E}_{a,a}^{lin T} \right] \quad (5)$$

$$\underline{x}^{actual} = \underline{x} \circ (\underline{u}_b - \underline{l}_b) + \underline{l}_b \quad (6)$$

The notation “ $\circ$ ” stands for the Hadamard-product of the two vectors. The lower and upper bounds for kinetic constants determined after some preliminary simulations as no a priori data is available for the system are

summarized in Table 1. Squared error between the measured and calculated concentrations summed up for each component at each temperature and LSHV value (Eq. (7)) was used as objective function:

$$f(x) = \sum_T \sum_{lump} \sum_{LHSV} (y_{meas} - y_{calculated})^2 \quad (7)$$

A linear inequality (Eq. (8)) was defined for numerical reasons stating that at least one reaction should be present in the reaction system:

$$\begin{bmatrix} -e_{xy}^T & 0 \cdot \underline{k_0}^{lin T} & 0 \cdot \underline{E_a}^{lin T} \end{bmatrix} \cdot \underline{x} \leq -1 \quad (8)$$

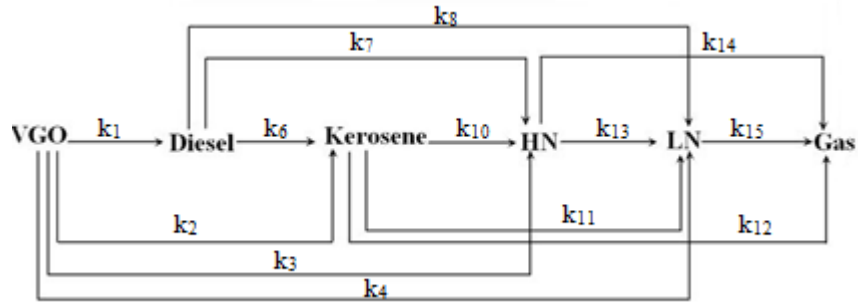
**Table 1.** Lower and upper bounds for kinetic constants.

Reaction		$k_0 [\text{m}^3 \text{h}^{-1} \text{m}_{cat}^{-3}]$		$E_a [\text{kcal mol}^{-1}]$	
		$\underline{l}_b$	$\underline{u}_b$	$\underline{l}_b$	$\underline{u}_b$
1.	VGO $\rightarrow$ D	$5 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^5$	0	100
2.	VGO $\rightarrow$ K	$10^{13}$	$10^{14}$		
3.	VGO $\rightarrow$ HN	0	1		
4.	VGO $\rightarrow$ LN	$5 \cdot 10^{10}$	$5 \cdot 10^{11}$		
5.	VGO $\rightarrow$ G	10	$10^3$		
6.	D $\rightarrow$ K	$10^{10}$	$10^{11}$		
7.	D $\rightarrow$ HN	0	1		
8.	D $\rightarrow$ LN	10	$10^3$		
9.	D $\rightarrow$ G	10	$10^3$		
10.	K $\rightarrow$ HN	$10^6$	$10^7$		
11.	K $\rightarrow$ LN	10	$10^3$		
12.	K $\rightarrow$ G	10	$10^3$		
13.	HN $\rightarrow$ LN	$10^4$	$10^5$		
14.	HN $\rightarrow$ G	0	1		
15.	LN $\rightarrow$ G	$5 \cdot 10^4$	$5 \cdot 10^5$		

Model of the hydrocracking reactor was implemented in MATLAB 2011b as a set of ordinary differential equations (component balances). Component yields at the outlet of the reactor were computed for each LHSV and temperature values using a modified Rosenbrock formula of order 2 for stiff problems (ode23s) [9]. The optimization problem was formulated using the OPTimization Interface (OPTI) Toolbox [10], and solved with the supplied NOMAD (Nonlinear Optimization by Mesh Adaptive Direct Search) solver capable of handling binary constraints [11].

The obtained kinetic model is shown in Figure 1. It is clearly visible that only two from the 15 reactions could be eliminated using this algorithm. This may be explained by numerical issues, as the value of the objective function can be further reduced with increasing number of reactions. One way to overcome this is to include the number of existing reactions in the objective function using some weighted method; furthermore focusing on other indicators of the importance of a certain pathway.

The values of the actual reaction rate coefficients would appear a suitable indicator. The values of the obtained  $k_0$  and  $E_a$  values are summarized in Table 2. Some of the estimated parameters reached the upper or lower bounds of the search space; however specifying the correct bounds is rather difficult as these pathways are not actual reactions. Furthermore, the performance of the optimization algorithm severely decreases when stretching the boundaries; therefore it was decided not to modify these limits. The reaction rate coefficients were calculated at the mean temperature and were compared to the largest  $k$  value in  $k_{rel}$ . This investigation suggests that while some of these 13 reactions do exist, their contribution to the changes in yields of various lumps are so small that they can be eliminated.



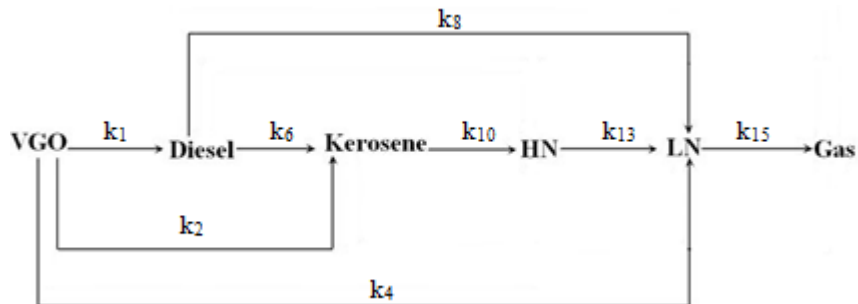
**Figure 2.** Reaction network solution of the MINLP problem.

**Table 2.** Identified kinetic parameters in the MINLP problem.

Reaction	$k_0$ [ $\text{m}^3 \text{h}^{-1} \text{m}_{\text{cat}}^{-3}$ ]	$E_a$ [ $\text{kcal mol}^{-1}$ ]	$k$ (at $T_{\text{mean}}$ ) [ $\text{m}^3 \text{h}^{-1} \text{m}_{\text{cat}}^{-3}$ ]	$k_{\text{rel}}$ [-]
1. VGO $\rightarrow$ D	$2.58 \cdot 10^5$	13.54	10.67	0.073
2. VGO $\rightarrow$ K	$8.92 \cdot 10^{13}$	40.78	5.59	0.038
3. VGO $\rightarrow$ HN	0.87	1.49	0.29	0.002
4. VGO $\rightarrow$ LN	$3.54 \cdot 10^{11}$	33.60	4.66	0.032
6. D $\rightarrow$ K	$9.97 \cdot 10^{10}$	31.62	5.78	0.040
7. D $\rightarrow$ HN	0.98	0	0.98	0.007
8. D $\rightarrow$ LN	771.25	8.26	1.63	0.011
10. K $\rightarrow$ HN	$10^7$	19.13	6.4	0.044
11. K $\rightarrow$ LN	10.07	67.20	$1.74 \cdot 10^{-21}$	$1.19 \cdot 10^{-23}$
12. K $\rightarrow$ G	808.15	85.19	$2.12 \cdot 10^{-25}$	$1.45 \cdot 10^{-27}$
13. HN $\rightarrow$ LN	$10^5$	14.40	2.17	0.015
14. HN $\rightarrow$ G	1	0	1	0.007
15. LN $\rightarrow$ G	$5.06 \cdot 10^4$	7.83	146.21	1

### Model reduction and comparison

Consequently, reactions where  $k_{\text{rel}}$  was less than the threshold value 0.01 were eliminated from the reaction network. The derived kinetic model is shown in Figure 3. It can be seen that only eight reaction steps remains when using this particular threshold, resulting in a much simpler kinetic model. The accuracy of the reduced model was quantitatively evaluated by determining the correlation factor between the measured and calculated values (Eq. (9)). The calculated correlation factors for each component and the complete system are listed in Table 3.



**Figure 3.** Reduced reaction network.

The accuracy of the model varies highly in case of different lumps. It can be considered as accurate in case of VGO, K and G lumps, while the accuracy is only moderate for D and HN and the identified kinetic parameter set was unable to predict the yield of LN. A possible solution for this problem is the modification of the objective

function in order to address the concentration changes more accurately for all components that need further consideration.

**Table 3.** Pearson correlation factors between measured and calculated values.

	VGO	D	K	HN	LN	G	Overall
Complete kinetic model	0.8934	0.4268	0.9597	0.7746	0.0441	0.8472	0.9333
Reduced kinetic model	0.8952	0.4068	0.9570	0.8494	0.0440	0.8474	0.9343

### Conclusions and future work

In this study, we have presented the results of a development phase algorithm that would be capable to reduce kinetic networks automatically in case of lumped models describing hydrocracking process. This problem, where not only the kinetic parameters but also the existence of a reaction is a variable in the objective function, leads to the field of reaction network engineering. Solving the inverse problem, where the time series profiles of some components are known and the objective is to reconstruct the chemical reaction network, is a well-known technique that has its applications mainly in biochemistry and bioinformatics. However, those methods have not yet been applied in case of lumped models. Therefore it would be beneficial to thoroughly investigate the possible connections between the two fields of research, e.g. compute the sparsest realization of the chemical network, or apply an extended Kalman-filter to find the suitable kinetic parameters.

### Acknowledgement

We acknowledge the financial support of Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00053. The proposed results can be applied in the development of catalytic production of high hydrogen content (in molecular structure) fuels.

### References

- [1] Sahu, R., Song, B.J., Im, J.S., Jeon, Y.P., Lee, C.W., *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 27, 12-24 (2015)
- [2] Zhang, T., Leyva, C., Froment, G.F., Martinis, J., *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54 (3), 858-868 (2015)
- [3] Browning, B., Afanasiev, P., Pitault, I., Couenne, F., Tayakout-Fayolle, M., *Asia Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress 2015: APCCChE 2015, incorporating CHEMECA 2015*, 2360 (2015)
- [4] Becker, P. J., Serrand, N., Celse, B., Guillaume, D., Dulot, H., *Fuel*, 165, 306-315 (2016)
- [5] Puron, H., Arcelus-Arrillaga, P., Chin, K. K., Pinilla, J. L., Fidalgo, B., Millan, M., *Fuel*, 117, 408-414 (2014)
- [6] Meier, H. F., Wiggers, V. R., Zonta, G. R., Scharf, D. R., Simionatto, E. L., Ender, L., *Fuel*, 144, 50-59 (2015)
- [7] Sadighi, S., Ahmad, A., Irandoukht, A., *Journal of chemical engineering of Japan*, 43 (2), 174-185 (2010)
- [8] Sadighi, S., Zahedi, G.Z., *Bulletin of Chemical Reaction Engineering & Catalysis*, 8 (2), 125-136 (2013)
- [9] Shampine, L. F., Reichelt, M. W., *SIAM journal on scientific computing*, 18 (1), 1-22 (1997)
- [10] Currie, J., Wilson, D. I., *Foundations of computer-aided process operations*, 24, 32. (2012)
- [11] Le Digabel, S., *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 37 (4), 44 (2011)

# Szén-dioxid leválasztás aminos és ammóniás abszorpcióval

*Carbon dioxide capture by amine and ammonia absorption*

**Tóbel Kitti, Hégy László, Láng Péter**

*BME, Épületgépészeti és Gépészeti Eljárás Technika Tanszék*

*1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3-9.*

---

## Összefoglaló/ Summary

*A legígéretesebb megoldás a CO<sub>2</sub> leválasztására a vizes aminos oldatokkal történő kémiai abszorpció. A leggyakrabban alkalmazott oldószer a vizes monoetanolamin oldat, amely egy abszorber-deszorber rendszerben kering. Azonban más anyagok, például az ammónia is alkalmas lehet oldószerként. Munkánk során egy széntüzelésű erőmű CO<sub>2</sub> kibocsátásának kémiai abszorpcióval történő csökkentését vizsgáltuk professzionális folyamatszimulátorral (ChemCAD). A két oldószer hatékonyságát és jellemzőit hasonlítottuk össze.*

*For the capture of CO<sub>2</sub>, the most promising method is the chemical absorption in aqueous amine solutions. The most common solvent recycled in the absorber-stripper system is aqueous monoethanolamine (MEA). However, other materials such as ammonia are also considered as potential suitable solvent. The reduction of the CO<sub>2</sub> emission of a coal fired power plant by absorption is studied by simulation with a professional flow-sheet simulator (ChemCAD). The effectiveness and the characteristics of the two solvents are compared.*

---

## 1. Bevezetés

A globális felmelegedés legfőbb oka az üvegházhatású gázok egyre növekvő kibocsátása. A klímaváltozás szoros kapcsolatban áll a légkörben található üvegházhatású gázok koncentrációjával, ezen belül is a szén-dioxidéval, aminek a kibocsátása erőteljesen függ az energiatermeléstől. A különböző primer energiaforrások közül még ma is igen nagy jelentőséggel bírnak a fosszilis energiahordozók, amelyek elégetésével hő- és villamosenergiát nyerünk. Az egyik megoldási lehetőség a szén-dioxid kibocsátásának csökkentésére a CCS (Carbon Capture and Storage) technológiák tökéletesítése és az iparban történő alkalmazása. Ezen technológiák lényege, hogy megakadályozzák a szén-dioxid légkörbe jutását a tüzelőanyag elégetése előtt (pre-combustion), vagy a tüzelés után (post-combustion) [1].

A tüzelés utáni ammóniás leválasztási eljárás az elmúlt évek során egyre nagyobb figyelmet kapott az ammónia igen kedvező tulajdonságai miatt. Előnyei közé tartozik globális rendelkezésre állása, így az anyagköltségek alacsonyak [2]. Az ammónia érzéketlen az oxigénre és a füstgázban található különböző szennyező anyagokra, ellentétben a monoetanolamminnal (MEA), amelynél az oxigén jelenléte oxidációs bomláshoz vezet. Emellett a MEA a különböző szennyezőkkel reakcióba lépve a környezetre és a berendezésekre egyaránt káros vegyületeket is képez [3]. Az NH<sub>3</sub> stabil molekula, így a szolvens degradálódásától nem kell tartanunk.

Munkánk során a tüzelés utáni kémiai abszorpcióval történő leválasztást vizsgáltuk. Az első esetben a jól ismert és több tesztelőműben is alkalmazott MEA szolvenszt alkalmaztuk. A második esetben a hűtött ammóniás leválasztási eljárást tanulmányoztuk. A számításokat a ChemCAD folyamatszimulátorral végeztük el.

## 2. Kiindulási adatok a szimulációk elvégzéséhez

A szimulációhoz az adatokat egy korábbi esettanulmányból vettük át, illetve ennek eredményeit reprodukáltuk [1]. Ebben egy 400 MW-os széntüzelésű szubkritikus erőmű szerepelt. Az erőműben lejátszódó termodinamikai folyamatokat GateCycle hőszámítói szoftverrel modellezték. A kilépő füstgáz adatokat is így határozták meg, melyek az 1. és 2. táblázatokban láthatók.

**1. táblázat:** A nyers füstgáz jellemzői

Tömegáram [kg/s]	Nyomás [bar]	Hőmérséklet [°C]
395,46	1,0124	95,88

**2. táblázat:** A nyers füstgáz összetétele

O <sub>2</sub> [mol%]	N <sub>2</sub> [mol%]	H <sub>2</sub> O [mol%]	CO <sub>2</sub> [mol%]	Ar [mol%]
1,76	72,57	9,79	14,91	0,86

A szimuláció során 85 %-os leválasztási határfokkal számolunk, amely mindkét esetben meghatározza az abszorberbe belépő híg szolvens mennyiségét. A CO<sub>2</sub> termék előírt tisztasága 97,85 mol%-os (99,1 tömeg%-os).

### 3. A MEA-s leválasztási eljárás és szimulációja

A beérkező előkezelt füstgázt először az abszorber hőmérsékletszintjére (40-50 °C) hűtjük érintkeztető hűtő alkalmazásával. Ezután kompresszor segítségével nyomását megnöveljük, hogy az abszorber nyomásesését fedezni tudjuk. Az atmoszférikus nyomáson üzemelő abszorberben megtörténik a szén-dioxid elnyelése a füstgázból. A kezelt füstgáz az abszorberben a kilépés előtt mosószakaszon halad át a MEA visszatartása érdekében. A kolonnából távozó dús szolvens nyomását megemeljük, majd kereszt hőcserélőben a sztripperből távozó regenerált szolvens segítségével előmelegítjük. A sztripperben a CO<sub>2</sub> termikus deszorpciója történik meg. A dús szolvens CO<sub>2</sub> tartalmát kiforraljuk, azaz a MEA és a szén-dioxid közötti kötéseket felszakítjuk. Az ehhez szükséges energiát egy visszaforraló segítségével gőz formában visszük be a rendszerbe. Az innen távozó regenerált szolvens a kereszt hőcserélőben, majd az utóhűtőben az abszorber hőmérsékletszintjére hűl. A távozó CO<sub>2</sub> víztelenítés és komprimálás után a tárolókba kerül.

A szimuláció során a fázisegyensúlyi- és entalpia számításokat a ChemCAD AMINE modelljével végezzük. A füstgáz hűtésének modellezésére FLASH egységet alkalmazunk. Az abszorber és sztripper kolonnákat SCDS modul segítségével modellezzük. Az abszorber 15 elméleti tányérral rendelkezik, melyből 2 tányér a mosószakasz. A mosóvíz (126,88 kg/s) betáplálása a legfelső tányérra, a híg szolvensé (980,6 kg/s) a harmadikra, míg az előkezelt füstgázé a legalsóra történik. A belépő híg szolvens MEA 30 tömeg%-os vizes oldata, amely 4,47 tömeg% CO<sub>2</sub>-t (0,2 mol CO<sub>2</sub>/mol MEA) is tartalmaz, belépő hőmérséklete pedig 50 °C. Az abszorber fejnyomása 1,013, fenéknyomása 1,1 bar. A deszorber 12 elméleti tányérral rendelkezik, melyből az első tányér a parciális kondenzátor, az utolsó pedig a visszaforraló. A dús szolvens betáplálása a második tányérra történik. A deszorpciót magasabb nyomáson végezzük, mint az abszorpciót, mivel csak így tudjuk biztosítani a megfelelő hőmérsékletszintet. Ezek alapján a fejnyomás 2, a fenéknyomás pedig az deszorber nyomásesése miatt 2,1 bar.

A zárt láncú szimulációt nyílt láncú előzte meg, melyben a főbb paraméterek (pl.: híg szolvens mennyisége) könnyebben meghatározhatók. A híg szolvens mennyiségét a 85 %-os leválasztási határfoknak (13,167 kg/s CO<sub>2</sub> távozhat a füstgázzal) megfelelően állítjuk be. Az abszorberből távozó dús szolvenst a kereszt hőcserélőbe a regenerált szolvens segítségével előmelegítjük, melynek hőteljesítménye 225,7 MW-nak adódott, 10 °C-os  $\Delta T_{\min}$  feltételezésével. A deszorberben a kondenzátor hőmérsékletét adjuk meg (30 °C), illetve a fenéktermékben távozó szén-dioxid móláramát, ami 0,995 kmol/s.

A kondenzátorban elvonandó számított hőáram 67,15, a visszaforralóban közölt pedig 251,5 MW. A CO<sub>2</sub> kihajtás számított fajlagos energiaigénye 3,36 MJ/kg CO<sub>2</sub>. A folyamat során jelentkező összes külső hűtési energiaigény (kondenzátor, utóhűtő) 133,5 MW.



## 4. A hűtött ammóniás leválasztási eljárás szimulációja

### 4.1 Az eljárás

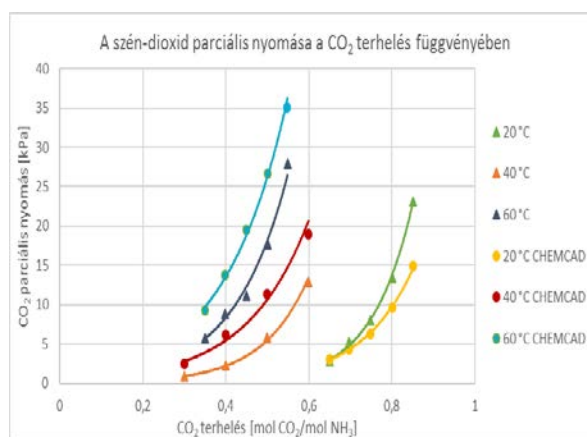
A folyamatot 4 fő részre oszthatjuk, melyek a következők: a füstgáz hűtése, a szén-dioxid abszorpciója, az ammónia visszanyerése és a szén-dioxid deszorpciója. A füstgáz hűtése két lépésben történik. Az első hűtés érintkeztető hűtőben (25 °C-ig), a második pedig hűtő hőcserélőben történik 5 °C-ig. Az alacsony hőmérsékletre az abszorber optimális hőmérséklettartománya (1-10 °C) miatt van szükség, így elkerülhető az ammónia abszorberből való nagyobb mértékű kiszökése. Mivel az abszorberben lejátszódó kémiai reakciók exoterm folyamatok, ahhoz, hogy az abszorberben tartani tudjuk az optimális hőmérsékletszintet, hűtésre van szükség: a távozó fenéktermék egy részét lehűtve visszakeringtetjük az oszlop egyik tányérjára, valamint az egyes tányérokról is vonható el hő [4]. Az abszorpció ebben az esetben is környezeti nyomáson megy végbe. A CO<sub>2</sub>-ban szegény gáz a torony tetején távozik, viszont ennek az ammónia tartalma jóval a környezeti határérték (500 mg/m<sup>3</sup>) felett van [6]. Emiatt ez a gáz először vizes mosó egységen halad át, melyben visszanyerik a füstgáz által elvitt szolvenst. Ez a berendezés két részből áll, az első a mosó, a második pedig a víz regenerálására és a kimosott NH<sub>3</sub> visszanyerésére szolgáló deszorber. Az NH<sub>3</sub> deszorberből távozó ammóniát így újra felhasználhatjuk a folyamat során, a fenéktermékként távozó vizet pedig a mosóban hasznosíthatjuk, így csökkentve a pótvíz mennyiségét.

Az abszorberből kilépő dús szolvens a torony alján távozik, mely nemcsak folyadék-, hanem szilárd fázist (NH<sub>4</sub>HCO<sub>3</sub>) is tartalmaz. Nyomását egy szivattyú segítségével 30 bar-ra emeljük, amely a CO<sub>2</sub> kompressziójának energiaigényét is csökkenti. Az abszorbert elhagyó dús szolvenst kereszt hőcserélőben előmelegítjük a deszorberből kilépő regenerált oldószerrel. Ha ebben nem oldódik fel a szilárd fázis teljes mennyisége, akkor egy másik hőcserélőre is szükség van [4]. Az előmelegített dús szolvens a deszorber tetején lép be, melyben a hőmérsékletszint 120-160 °C. A kisztrippelt CO<sub>2</sub> a torony tetején távozik, majd hűtés után a kompresszorba kerül, ahol körülbelül 110 bar-ra komprimálják. A híg szolvens a kereszt hőcserélőben lehül, majd a visszanyert ammóniával összekeverve, koncentrációjának beállítása után 1 °C-ra hűtve visszatér az abszorberbe.

### 4.2 A szimuláció paraméterei és eredmények

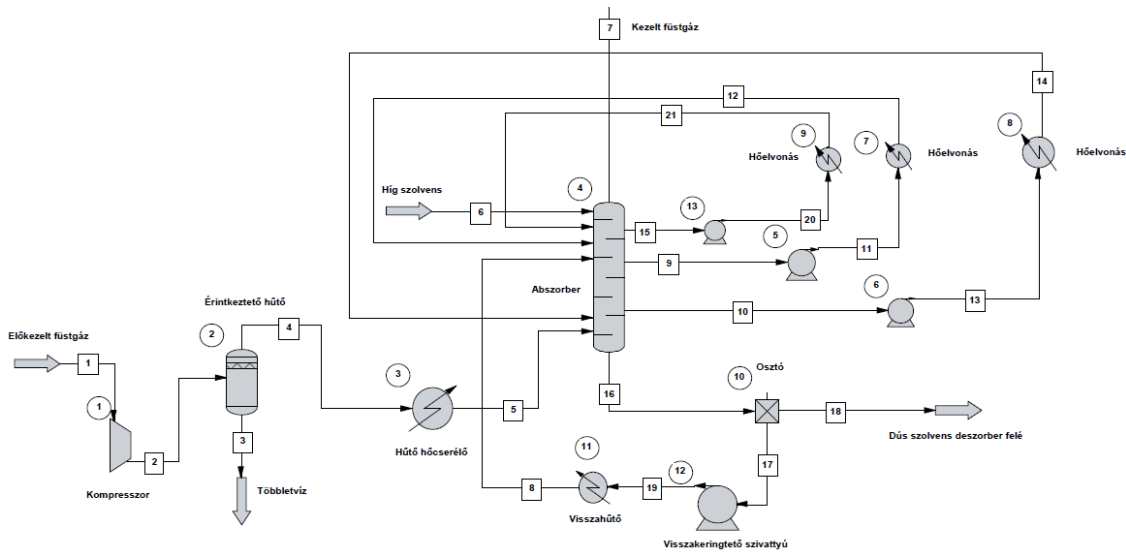
A fázisegyensúlyi számításokra a program Electrolyte-NRTL modelljét használtuk, melyet szakirodalmi mérési adatokkal hasonlítottunk össze (1. ábra). A 20 °C-os mérési adatok és az általunk számolt értékek esetében a legkisebb az eltérés (átlagosan 19,4 %). A hűtött ammóniás eljárás szerint a híg szolvens szén-dioxid terhelése 0,25-0,67 mol CO<sub>2</sub>/mol NH<sub>3</sub> között van,

így a 20 °C-os mérésnek is csak az első pár mérési pontja releváns a mi szempontunkból [4]. Az első mérési pont esetében az eltérés + 6,7 %, míg a másodikban -18,7 %. Az E-NRTL modell képes kezelni az ionokat, így a szilárd ammónium-bikarbonát (NH<sub>4</sub>HCO<sub>3</sub>) kiválást is a rendszerben, viszont a képződés reakcióegyenletét hozzá kellett adni az egyensúlyi modellhez  $NH_4^+(aq) + HCO_3^- \leftrightarrow NH_4HCO_3(s)$ . B értékét -3480,63 Kelvinnek adtuk meg ( $\ln K = B/T$ ) [5].



1. ábra: Összehasonlítás a szakirodalmi értékekkel

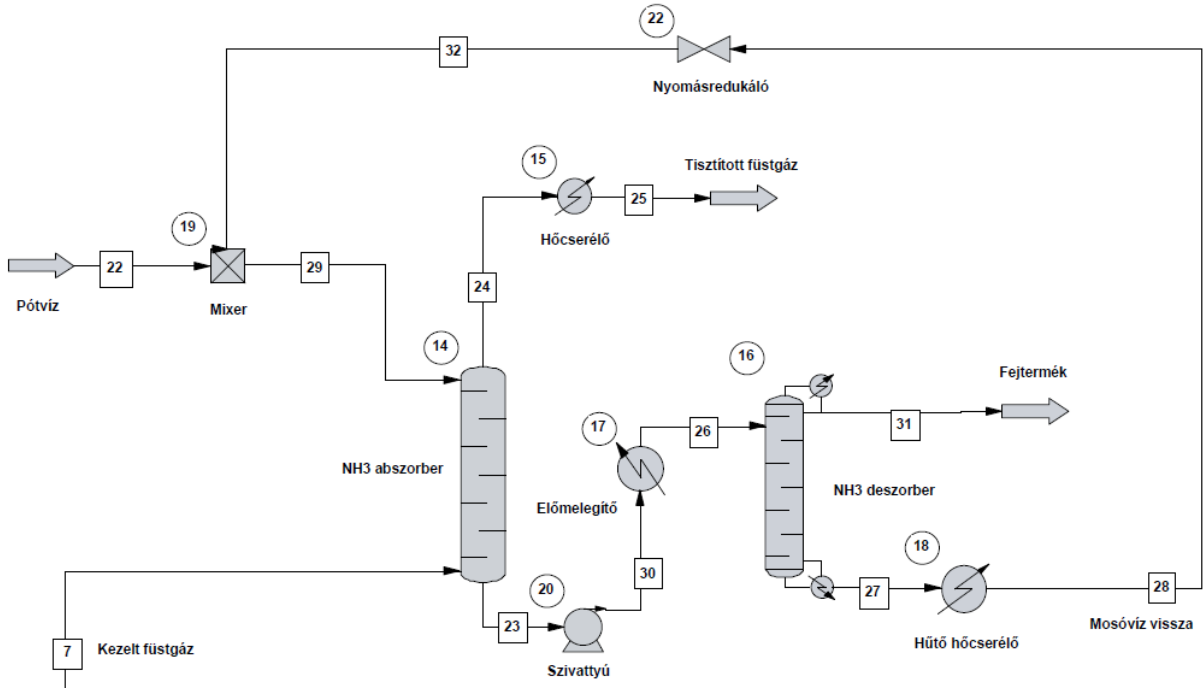
A számításokat „true species” beállítással végezzük el, mely szerint, az oldatban az egyes komponenseket a tényleges megjelenési formájukban vesszük figyelembe. Az abszorbert ebben az esetben is 15 tányéros SCDS kolonnával modellezzük. A belépő híg szolvens (10 tömeg%-os  $\text{NH}_3$  vizes oldata, 0,3 mol  $\text{CO}_2$ /mol  $\text{NH}_3$  széndioxid terheléssel) 1 °C-osan az első tányérra, míg a füstgáz 5 °C-osan az utolsóra lép be. A fenéktermék 50 %-át 1 °C-osra hűtve a 7. tányérra tápláljuk vissza, míg a 2., 6. és 8. tányérról összesen 90 MW-nyi hőáramot vonunk el. A tányérok hűtését úgy modellezhetjük, hogy az egyes tányérokban lévő folyadék fázis felét kivesszük, majd lehűtve (- 5 °C-ra) visszatápláljuk ugyanarra a tányérra, így az egyes tányérokra közel azonos hőmennyiség vonható el. Az abszorpció modellje a 2. ábrán látható.



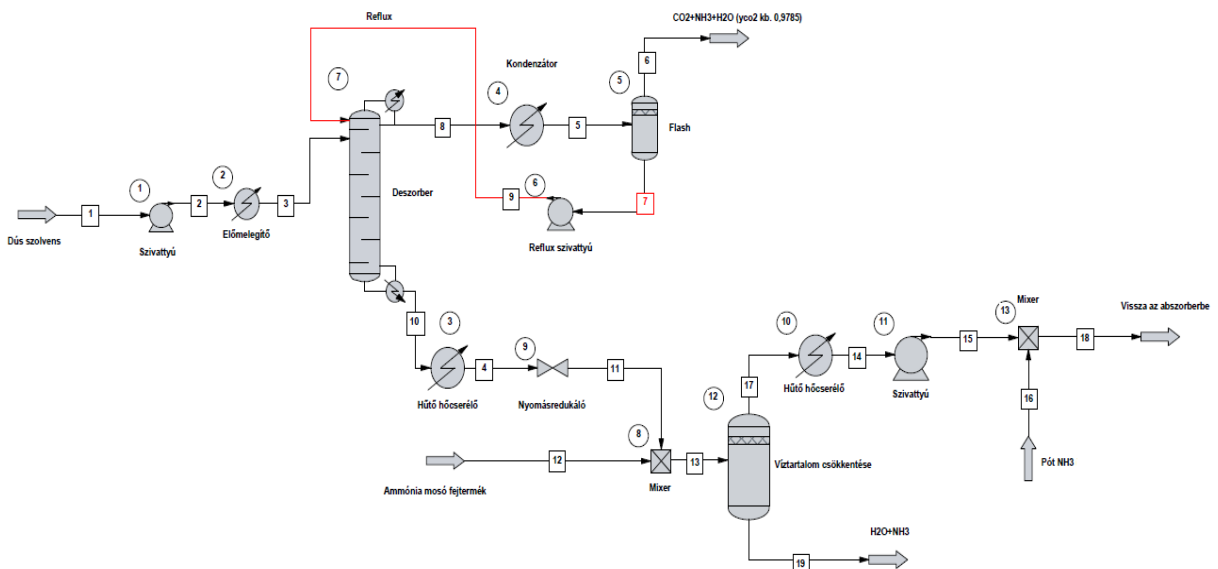
**2. ábra:** Az ammóniás abszorpció modellje

Az abszorpció teljes hűtési energiaigénye az ammónia mosó egységgel együtt 284,6 MW-nak adódott. Az  $\text{NH}_3$  abszorbert 10 tányéros SCDS kolonnával, az  $\text{NH}_3$  sztrippert pedig 12 tányéros SCDS modullal modellezhetjük. Az abszorberbe belépő mosóvíz tömegárama 97,24 kg/s. A sztrippernél a refluxarányt (3) és a fenéktermék anyagáramát (5,173 kmol/s) specifikáltuk. A mosóból távozó tisztított füstgáz ammóniatartalma így 7410 mg/m<sup>3</sup>-ről 460 mg/m<sup>3</sup>-re csökkent, ami már a megengedhető érték alatt van. Az ammónia visszanyerő egység modellje a 3. ábrán látható. Az abszorberből kilépő dús szolvens nyomását 30,2 barra emeljük, majd a kereszt hőcserélőben 100 °C-ra melegítjük elő. A deszorpció modellje az 4. ábrán látható. A deszorbert szintén SCDS modullal modellezzük, mely ebben az esetben 6 tányérral rendelkezik. A deszorberben a fenéktermék tömegáramát specifikáljuk (424,3 kg/s). A 85 %-os leválasztási hatásfoknak megfelelően a  $\text{CO}_2$  mennyisége 74,6 kg/s-nak adódik, így ez és a tisztaság alapján a desztillátum mennyisége (75,28 kg/s) meghatározható. A kondenzátorban beállítandó hőmérsékletet harmatpontszámítással határozzuk meg különböző ammónia koncentrációkra, úgy, hogy a kilépő gáz  $\text{CO}_2$  tartalma 74,6 kg/s legyen, ezek alapján ez 89 °C-nak adódott.

A regenerálás számított energiaigénye 4,1 MJ/kg  $\text{CO}_2$ , amely jelentősen magasabb, mint MEA esetében. A regenerált szolvens és az ammónia mosóból távozó fejtermék összekeverésével olyan oldatot kaptunk, amelynek vízmennyisége nagyobb, mint az abszorberbe belépő híg szolvensé. Ennek oka, hogy az abszorpció során a füstgáz víztartalmának egy részét (1,26 kg/s) is felveszi a szolvens, valamint a visszanyert ammóniával víz is távozik az  $\text{NH}_3$  deszorberből (2,53 kg/s).



3. ábra: Az ammónia visszanyerésének modellje



4. ábra: Az ammóniás deszorpció és a koncentráció beállító modellje

Ebből fedezni tudjuk a CO<sub>2</sub> gázzal távozó víz mennyiségét, viszont a megfelelő koncentráció beállításához a maradékot el kell távolítanunk egy FLASH egység segítségével ( $V/F = 0,993 \text{ mol/mol}$ ,  $T = 100 \text{ °C}$ ). Az eljárás végén az NH<sub>3</sub>-t pótolni kellett a veszteség miatt (0,426 kg/s).

## 5. Összefoglalás

Széntüzelésű erőmű füstgázából történő CO<sub>2</sub> leválasztást vizsgáltunk részletes modellező számításokkal, amelyeket a ChemCAD professzionális folyamatszimulátorral végeztünk. Két különböző szolvenst hasonlítottunk össze: MEA 30 tömeg%-os vizes oldatát, és NH<sub>3</sub> 10 tömeg%-os hűtött, vizes oldatát. A gőz-folyadék egyensúlyi viszonyok leírása az AMINE, illetve az Electrolyte-NRTL modellel történt. Az utóbbi modellt kiegészítettük a szilárd NH<sub>4</sub>HCO<sub>3</sub> képződésének leírásával, valamint a számított CO<sub>2</sub> és NH<sub>3</sub> parciális nyomásokat összehasonlítottuk mérési adatokkal. Azonos leválasztási határfok (85 %), és CO<sub>2</sub> tisztaság (0,9785 mol/mol) mellett a hűtött ammóniás eljárás hőigénye nagyobb (4,1 MJ/kg CO<sub>2</sub>) adódott, mint a MEA-s eljárásé (3,36 MJ/kg CO<sub>2</sub>). A szolvens áram nagysága a hűtött ammóniás eljárásnál 430 kg/s, a MEA-nál ennek több, mint kétszerese (980,6 kg/s). Az ammóniás eljárás során a 1730 MW-nyi hűtési energiaigény jelentkezik, melynek jelentős része a koncentráció beállító FLASH egységből távozó fejtermék kondenzálására és 1 °C-ra való hűtésére fordítódik (1110 MW). Ha más megoldással távolítanánk el a vizet a rendszerből, akkor ez a hűtési igény jelentősen csökkenne. Ezzel szemben a MEA-s eljárás esetén 133,5 MW a hűtési energiaigény. A fűtési és hűtési igények a paraméterek (sztripper nyomása, abszorpció hőmérséklete, híg szolvens ágens- és CO<sub>2</sub>-tartalma) változtatásával mindkét esetben csökkenthetők, ez azonban további vizsgálatokat igényel. A hűtött ammóniás eljárás mélyhűtést igényel, ami tovább emeli a költségeit. A szolvens megválasztásakor az energiaigényen túl más szempontokat is figyelembe kell venni. A hűtött ammóniás eljárás várhatóan nagyobb beruházási költséget von maga után, mivel az NH<sub>3</sub> kezelt füstgázból való visszanyerése egy második abszorber-sztripper rendszert igényel. Ugyanakkor a MEA esetében fellépő problémák (degradáció és korrozivitás) NH<sub>3</sub> esetén nem jelentkeznek, és a szolvens ára is alacsonyabb.

### Köszönetnyilvánítás

Jelen munkát az NKFIH-OTKA (projekt száma: K-120083) támogatta.

### Irodalomjegyzék

[1] Gács I., *Széndioxid leválasztás és eltárolás*, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (2012)

[2] Kozak, F., Telikapalli, V., Hiwale, R., Bollinger, R., CCS Project: Chilled Ammonia Process at the AEP Mountaineer Plant, COAL-GEN, (2011)

<http://www.alstom.com/Global/US/Resources/Documents/Chilled%20Ammonia%20CO2%20Capture%20Process%20at%20AEP%20Mountaineer.pdf>

[3] Stolten, D., Scherer, V., *Efficient Carbon Capture for Coal Power Plants*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, (2011)

[4] Anusha Kothandaraman: Carbon Dioxide Capture by Chemical Absorption: A Solvent Comparison Study, PhD értekezés, Massachusetts Institute of Technology, (2010)

[5] Qi, G., Wang S., Lu, W., Yu, J., Chen., C., Vapor-liquid equilibrium of CO<sub>2</sub> in NH<sub>3</sub>-CO<sub>2</sub>-SO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O system, *Fluid Phase Equilibria*, 386 47-55 (2014)

[6] 4/2011. (I. 14.) VM rendelet a levegőterheltségi szint határértékeiről és a helyhez kötött légszennyező pontforrások kibocsátási határértékeiről, [https://net.jogtar.hu/jr/gen/hjegy\\_doc.cgi?docid=a1100004.vm](https://net.jogtar.hu/jr/gen/hjegy_doc.cgi?docid=a1100004.vm)

# Nagy telített szénhidrogén tartalmú sugárhajtómű üzemanyag előállításának vizsgálata

*Investigation of the production possibility of saturated hydrocarbon rich JET fuel*

**Tomasek Szabina, Varga Zoltán, Hancsók Jenő**

*Pannon Egyetem, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék  
8200, Veszprém Egyetem utca 10.*

---

## Összefoglaló

Napjainkban a sugárhajtómű üzemanyagokat főként a kőolajból atmoszférikus desztillációval és hidrogénezéssel állítják elő. Az Európai Unió kőolajból jelentős importra szorul, így egyik fő célja a motorhajtóanyagok alternatív forrásokból pl. hulladékokból történő előállítása is. 2014-ben az Európai Unió, Norvégia és Svájc területén 25,8 millió tonna műanyag hulladék keletkezett, melynek kb. 1/3-át hulladéklerakó telepeken helyezték el. A műanyag hulladékok újrahasznosítása környezetvédelmi szempontból is fontos kérdés. A hulladékkezelési módok közül fontos azok kémiai újrahasznosítása is, melynek során különböző forráspon-tartományba eső szénhidrogének állíthatók elő. A hulladék műanyagok bontása során keletkező olefinben dús petróleum forráspon-tartományú frakció nagy olefin koncentrációja, és így rossz oxidációs stabilitása miatt közvetlenül nem használható fel a sugárhajtóművekben, azok további minőségjavítást igényelnek.

Ezért célunk hulladék polipropilén krakkolásakor keletkező petróleum forráspon-tartományú frakció minőségjavítása volt. Ennek keretében előkísérletek eredményei alapján célirányosan kiválasztott NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátoron tanulmányoztuk a műveleti paraméterek (hőmérséklet, tartózkodási idő) termékhozamra és termékjellemzőkre (olefintartalom, szénhidrogén összetétel, kristályosodási pont, stb.) gyakorolt hatását. A kedvezőnek talált műveleti paraméterek mellett (T=280-300°C, P=40 bar, LHSV=1,0 és 3,0 h<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/szénhidrogén arány=400 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>) gyakorlatilag olefinmentes, nagy energiataartalmú, molekulaszervezetében nagy hidrogéntartalmú, és így kiváló égési tulajdonságú, szabványnak megfelelő termékeket kaptunk. Ezek közvetlenül felhasználhatóak a jelenleg alkalmazott sugárhajtóművekben és a rendelkezésre álló hajtóanyag ellátó rendszerben.

---

## Summary

Nowadays JET fuels are mainly produced from crude oil by atmospheric distillation and hydrogenation of the straight run kerosene fraction. The crude oil import dependency of the European Union is significant thus one main goal is to produce fuels from alternative feedstocks such as wastes. In 2014, 25.8 million tonnes of plastic waste was produced in the European Union, plus Norway and Switzerland from which 30.8% went to landfill. The recycling of plastic wastes is an important issue due to the environmental considerations. Cracking is one promising process to recycle plastic waste and to produce hydrocarbons. The liquid hydrocarbon fractions derived from the cracking of plastic wastes cannot be used directly as a fuel due to the inadequate oxidation stability of olefin hydrocarbons, their additional quality improvement is required.

The aim of our experimental work was to study the quality improvement of kerosene fractions produced by the cracking of plastic waste blended with high sulphur JET stream. Catalytic tests were carried out on a commercially available NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst. We examined the effects of the process parameters (temperature, pressure, space velocity) on the yields and the properties of the products.

At the favourable process parameters (T=280-300°C, P=40 bar, LHSV=1.0 and 3.0 h<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/hydrocarbon ratio= 400 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>) practically olefin free, high energy and hydrogen containing products were produced which have excellent burning properties and meet the requirements of the JET fuel standard, and thus can be used in the applied engines and fuel supply infrastructure.

---

## Bevezetés

A sugárhajtómű üzemanyagok iránti kereslet – a légi személy- és áruszállítás egyre szélesebb körben való elterjedésének hatására – az elmúlt évtizedekben nagymértékben növekedett [1]. Ezzel párhuzamosan a minőségi követelmények is szigorodtak, melyet főként a légiközlekedés káros hatásainak csökkentésére irányuló környezetvédelmi és politikai szabályozások okoztak. A légiközlekedés a teljes szén-dioxid emisszió kb. 2%-áért felelős, ami az előrejelzések alapján a jövőben még nagyobb lesz [2]. A CO<sub>2</sub> emisszió utas- és tonnakilométerre vetített mennyisége a légiközlekedési szektorban a legnagyobb [3]. A káros hatások a sugárhajtóművek korszerűsítésén kívül kizárólag csak környezetbarát, nagy H/C arányú, és ez által kedvezőbb égési jellemzőkkel rendelkező sugárhajtómű üzemanyagok felhasználásával csökkenthetők.

A sugárhajtómű üzemanyagok fő komponensei a normál-, az izo-, a cikloparaffinok és az aromás szénhidrogének (pl. 23, 16, 43 és 18%). Ezek a hajtóanyag tulajdonságaira eltérően hatnak (**1. táblázat**) [4]. Az n- és izoparaffinok nagy H/C arányuk hatására kedvezőbb égési tulajdonságokkal rendelkeznek, mint a szerkezetükből adódóan kisebb H/C arányú cikloparaffinok és aromás szénhidrogének. Az aromás vegyületek égése kormozó, lánghőmérséklete magas, fűtőértéke kisebb a telített szénhidrogénekénél. A nagy repülési magasságokban, extrém időjárási körülmények között felhasznált sugárhajtómű üzemanyagok egyik legfontosabb jellemzője a kristályosodási pont, amit az elágazásokat nem tartalmazó n-paraffinok és az aromás szénhidrogének egyaránt kedvezőtlenül befolyásolnak. Az izo- és cikloparaffinok hasonlóan alacsony fagyáspontúak, a kristályosodási pontot csökkentik. Figyelembe véve az égési jellemzőket és az alacsony hőmérsékleti tulajdonságokat a sugárhajtómű üzemanyagok legkívánatosabb komponensei a ciklo- és izoparaffinok.

Nagy telített szénhidrogén tartalmú izoparaffinokban dús sugárhajtómű üzemanyag természetes/hulladék trigliceridek/zsírsavak speciális hidrokrakkolásával, olefinek oligomerizációjával és hidrogénezésével, Fischer-Tropsch szintézissel illetve a keletkező nagy molekulatömegű paraffin wax izomerizáló hidrokrakkolásával is előállítható. Ígéretes megoldás lehet továbbá a hulladék műanyagok krakkolása során keletkező petróleum forráspont-tartományú frakció minőségjavítása is. A hulladék műanyagok bontása során keletkező olefinben dús petróleum forráspont-tartományú frakció az olefinek rossz oxidációs stabilitása, gyantaképzési hajlama miatt közvetlenül nem használható fel a sugárhajtóművekben. Az irodalomban ennek ellenére szinte kizárólag csak az alapanyag típusának és a bontás körülményeinek krakktermék hozamra és összetételre gyakorolt hatásait vizsgálták [5-7]. A sugárhajtómű üzemanyag célú minőségjavításról – főleg folyamatos üzemmódban – csak nagyon kevés információt közöltek, ahogyan a cseppfolyós termékek főbb minőségi jellemzőit (pl. kristályosodási pont, kéntartalom, nemkormozó lángmagasság) sem határozták meg.

**1. táblázat.** Egyedi szénhidrogének néhány jellemző tulajdonsága.

Szénatomszám	Vegyület neve	Forrás-pont, °C	Fűtőérték		Kristályosodás-pont, °C
			MJ/dm <sup>3</sup>	MJ/kg	
C <sub>12</sub>	n-hexil-benzol	258	32,8	39,5	-42
	n-hexil-ciklohexán	254	36,5	45,0	-52
	n-dodekán	264	33,2	44,1	-10
	4-metil-undekán	205	33,2	44,1	-68

## Kísérleti tevékenység

Kísérleti munkánk célja a hulladék polipropilén termikus bontása során keletkező petróleum forráspont-tartományú frakció finomítatlan petróleummal alkotott elegyének (20% bontástermék tartalom) minőségjavítása volt Ni(2,3%)Mo(11,0%)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/P(2,3%) katalizátoron, hidrogén atmoszférában (T=200-300°C, P=40 bar, LHSV=1,0 és 3,0 h<sup>-1</sup>). Ennek során tanulmányoztuk a cseppfolyós termékek hozamát és összetételét, és meghatároztuk a termékek kéntartalmát, nemkormozó lángmagasságát és a kristályosodási pontját is. A 20% bontástermék tartalmú alapanyag és a finomítatlan petróleum fontosabb minőségi jellemzőit és összetételét a **2. táblázat** tartalmazza. A finomítatlan petróleum alapanyagként való átalakítására azért volt szükség, hogy meg tudjuk ítélni a bontástermék hatását a petróleum hidrogénezésére.

**2. táblázat.** A felhasznált alapanyag fontosabb minőségi jellemzői és összetétele.

Jellemzők	20% bontástermék tartalmú alapanyag	Finomítatlan petróleum
Kéntartalom, mg/kg	1600	2000
Aromástartalom, % (Egy-gyűrűs)	15,0 (13,9)	20,1 (18,6)
Olefintartalom, %	16,3	0,58
Jódszám, gI <sub>2</sub> /100g	32	<1
Nemkormozó lángmagasság, mm	25,8	25,7
Kristályosodási pont, °C	-58,8	-56,1

## Kísérleti berendezés és katalizátor

A kísérleteket egy nagylaboratóriumi, nagynyomású reaktorrendszerben folytattuk le, ami tartalmazta azokat a legfontosabb készülékeket és gépegységeket, amelyek egy ipari hidrogénező üzem reaktorkörében is megtalálhatóak. A kísérletek megkezdése előtt a reaktorba 80 cm<sup>3</sup> Ni(2,3%)Mo(11,0%)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/P(2,3%) katalizátort töltöttünk be. A kísérletsorozatot a katalizátor aktiválása, illetve a rendszer állapotának állandósulását követően, folyamatos üzemmódban végeztük.

## Vizsgálati módszerek

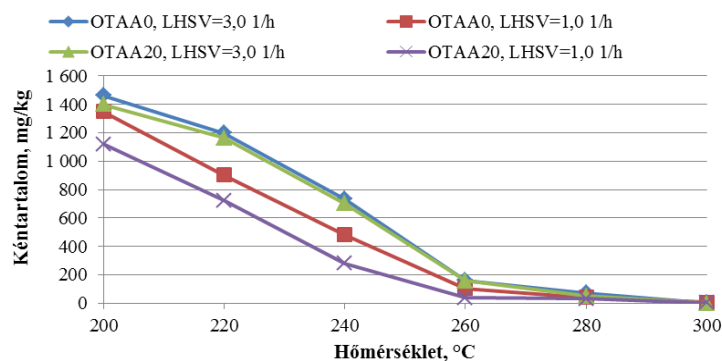
Az alapanyag, valamint a kísérletek során nyert cseppfolyós termékek minőségi jellemzőit a **3. táblázatban** megadott szabványos vizsgálati módszerekkel és az azokban meghatározott precizitással határoztuk meg. Az olefintartalmakat jódszám mérésével és gázkromatográfiás módszerrel (GC-MS) vizsgáltuk.

**3. táblázat.** Vizsgálati módszerek.

Jellemző	Szabványszám
Kéntartalom	MSZ EN 20846:2012
Aromástartalom	MSZ EN 12916:2016
Nemkormozó lángmagasság	ASTM D1322
Kristályosodási pont	ASTM D5972
Jódszám	MSZ EN 14111:2004
Olefintartalom	GC-MS módszer

## Kísérleti eredmények és értékelésük

A kísérletek során keletkező cseppfolyós termékek hozama 99,7-99,9% közötti volt. A cseppfolyós termékhozamok a hőmérséklet és a tartózkodási idő növelésével kisebbek lettek. A vizsgált hőmérséklettartományban hidrokrakkolódási folyamatok csak nagyon kismértékben játszódtak le, a hozamcsökkenést főleg a magasabb hőmérsékleten nagyobb mértékben lejátszódó C-S kötésfelhasadás és a nagyobb mértékű kén-hidrogén keletkezés eredményezte. A termékek kéntartalma 300°C műveleti hőmérsékleten a kimutathatósági határ alá csökkent (**1. ábra**).



**1. ábra.** A cseppfolyós termékek kéntartalmának változása a hőmérséklet és a folyadékterhelés függvényében (OTAA0: finomítatlan petróleum, OTAA20: 20% bontástermék tartalmú finomítatlan petróleum, P=40 bar).

A kéntelenítés mértéke (**4. táblázat**) a hőmérséklet és így a reakciósebesség növekedésével nagyobb lett. A bontástermék bekeverés hatására az átalakított kénvegyületek részaránya 200-240°C hőmérsékleten mindkét folyadékterhelésen kisebb lett, mint a finomítatlan petróleum esetén. Az alacsonyabb hőmérsékleten kapott termékek esetében a kéntelenítési hatásfokokat a katalizátor kisebb aktivitása, és így az olefin szénhidrogének alacsonyabb hőmérsékleten is erős adszorpciója, így a kéntelenítés és az olefintelítés között lejátszódó kompetitív folyamatok eredményezhették. 260-300°C hőmérsékleten a kéntelenítési hatásfokot az olefintartalom jelentős mértékben már nem befolyásolta a gyors olefintelítési reakciók miatt. Az olefinek 1,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen 260°C-on, 3,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen 280°C-on gyakorlatilag teljes mértékben telítődtek (**5. táblázat**); azokból izo- és n-paraffinok keletkeztek.

**4. táblázat.** Kéntávolítás mértéke (a: OTAA0, b: OTAA20 alapanyag, P=40 bar).

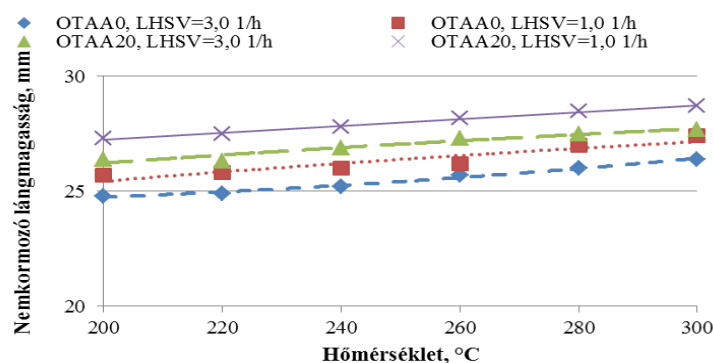
Hőmérséklet, °C	Folyadékterhelés, h <sup>-1</sup>	Kéntávolítás mértéke <sup>a</sup> , %	Kéntávolítás mértéke <sup>b</sup> , %
200	3,0	27	13
220	3,0	36	30
240	3,0	63	61
260	3,0	92	90
280	3,0	93	92
300	3,0	100	100
200	1,0	33	30
220	1,0	55	54
240	1,0	82	80
260	1,0	98	98
280	1,0	99	99
300	1,0	100	100



**5. Táblázat.** Olefintelítés mértéke (OTAA20 alapanyag, P=40 bar).

Hőmérséklet, °C	Folyadékterhelés, h <sup>-1</sup>	Olefintelítés mértéke, %
200	3,0	23
220	3,0	42
240	3,0	69
260	3,0	91
280	3,0	97
300	3,0	100
200	1,0	62
220	1,0	71
240	1,0	88
260	1,0	100
280	1,0	100
300	1,0	100

A hőmérséklet és a tartózkodási idő növelése – a vizsgált tartományokban – az exoterm hőszínezetű aromástelítési folyamatokat – hasonlóan a kéntelenítéshez és az olefintelítéshez – kedvezően befolyásolta. Az aromástelítés mértéke a 200-240°C hőmérséklettartományban kismértékű (0-13%) volt csak. 260°C hőmérsékleten, 1,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen a többgyűrűs aromás szénhidrogének koncentrációja a kimutathatósági határ alá csökkent. A többgyűrűs aromások telítéséhez 3,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen ennél magasabb hőmérsékletre, legalább 280°C-ra volt szükség. 300°C hőmérsékleten 1,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésnél az aromástelítési hatások 40 és 48%-ra növekedett. 3,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen az aromástelítési folyamatok lejátszódási mértéke kb. fele volt az 1,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésnél tapasztaltak. Az aromás szénhidrogének telítésével párhuzamosan a cseppfolyós termékek nemkormozó lángmagassága is nagyobb lett (**2. ábra**), a termékek paraffinosabb jellege miatt.



**2. ábra.** Nemkormozó lángmagasság változása a hőmérséklettel.

Az alapanyag kristályosodási pontja (-58,8°C) az izoolefinben dús bontástermék (kristályosodási pont < -60°C) bekeverésével kisebb lett. A termékek kristályosodási pontja a vizsgált hőmérséklet tartományban csak kismértékben változott. A cseppfolyós termékek kristályosodási pontjai az alapanyag összetételétől és az alkalmazott műveleti paraméterektől függetlenül teljesítették a sugárhajtómű üzemanyag szabványban rögzített legfeljebb -47°C értéket. A termékek lobbanáspontja és desztillációs jellemzői is megfeleltek a szabványos előírásnak (lobbanáspont: legalább 38°C, desztillációs jellemzők: 10%-os forrásponthoz tartozó legmagasabb hőmérséklet 205°C, végforráspont legfeljebb 300°C).

## Összefoglalás

A kutatómunkánk célja a hulladék polipropilén termikus bontásakor keletkező petróleum forráspont-tartományú frakció és a kőolajból desztillációval előállított finomítatlan petróleum elegyének (20% bontástermék tartalom) hidrogénező minőségjavítási lehetőségének vizsgálata volt. A kísérleteket nagy hidrogénező aktivitású NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/P katalizátoron 200-300°C hőmérsékleten, 40 bar nyomáson, 1,0 és 3,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen, 400 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup> hidrogén/szénhidrogén arány mellett folytattuk le. A kísérletek során vizsgáltuk a cseppfolyós termékek összetételét, kén- olefin- és aromástartalmának változását a műveleti paraméterek függvényében, valamint meghatároztuk a termékek kristályosodási pontját és a nemkormozó lángmagasságát. A cseppfolyós termékek kén- olefin- és aromástartalma a hőmérséklet és a tartózkodási idő növelésével kisebb lett. A kén- és olefintartalmak a 280-300°C hőmérséklettartományban jelentősen lecsökkentek, az izo- és n-olefinekből telített szénhidrogének, paraffinok keletkeztek. Az aromástelítés mértéke 200-240°C hőmérsékleten csak kismértékű (0-13%) volt. A többgyűrűs aromás szénhidrogének 260-280°C-on teljes mértékben telítődtek. A hőmérséklet további növelésével az aromástelítési hatások 21-48%-ra növekedett. Az olefin tartalmú alapanyag hidrogénezésekor nyert termékek kristályosodási pontja csak kismértékben változott. A kísérleteink során 280-300°C hőmérsékleten, 40 bar nyomáson, 1,0 és 3,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen, a célirányosan kiválasztott NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/P katalizátoron olyan kis kén- és olefintartalmú, csökkentett aromás szénhidrogéntartalmú, nagy H/C arányú sugárhajtómű üzemanyagot állítottunk elő 20% polipropilén bontástermékét tartalmazó finomítatlan petróleumból, melyeknek jellemzői megfelelnek az érvényes sugárhajtómű üzemanyag szabvány előírásainak.

## Köszönetnyilvánítás

A kutatómunka a Molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalmú, cseppfolyós üzemanyagok kifejlesztése (hozzájárulás a fenntartható mobilitáshoz) GINOP-2.3.2-15-2016-00053 jelű projekt részeként, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

## Irodalomjegyzék

- [1] IEA Oil Medium-Term Market Report, [www.iea.org](http://www.iea.org), (2016)
- [2] Zhang, C., Hui, X., Lin, Y., Sung, C-J., Renewable and Sustainable Energy Reviews, 54, 120-138 (2016)
- [3] Wise, M., Muratori, M., Kyle, P., Transportation Research, 52, 244-253 (2017)
- [4] Eller, Z., Varga, Z., Hancsók, J., Fuel, 182, 713-720 (2016)
- [5] Lopez, G., Artexte, M., Amutio, M., Bilbao, J., Olazar M., Renewable and Sustainable Energy Reviews, 73, 346-368 (2017)
- [6] Zhang, X., Lei, H., RSC Advances, 6, 6154-6163 (2016)
- [7] Zhang, X., Lei, H., Zhu, L., Qian, M., Yadawalli, G., Wu, J., Chen, S., Fuel, 188, 28-38 (2017)

# Gázolajok égési tulajdonságainak javítása alternatív komponensekkel

*Combustion properties improving of gas oils with alternative components*

**Tóth Orsolya, Visnyei Olivér, Holló András, Hancsók Jenő**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

The amount of bio-components used in engine fuels is continuously growing in Europe. The “Clean Energy For All Europeans” package of the European Commission (2016) establishes an EU-level obligation for fuel suppliers to provide a certain share (6.5% in 2030) of renewable fuels having low greenhouse gas emission and the decreasing maximum share of biofuels and bioliquids produced from food or feed crops starting from 7 e% (2021) to 3.8 e% (2030). Therefore it is important to produce new, e.g. waste-based, low carbon fuel components.

The amount of waste in the EU is circa 1828 kg/year per capita. The amount of plastic waste is 34 kg/capita, from which 40% is disposed in landfills. From the plastic waste processing technologies the chemical recycling can be used to produce hydrocarbons, which is currently takes place in case of 1% of the plastic wastes. The obtained highly olefinic hydrocarbon mixture cannot be used as engine fuel, quality improvement is needed. In this field there are only a few research data available.

The fatty acids are derived from renewable sources, they can be produced in large quantities. They can be a promising alternative fuel feedstock, as hydrocarbons can be produced from them by deoxygenation reactions. The deoxygenation reactions of fatty acids was studied mostly in inert atmosphere, or the processability of biodiesel was investigated. Limited literature available in the field of fatty acid hydrogenation, most of the researchers examining model compounds. Few have dealt with the co-quality improvement of fatty acids and refinery streams.

A key requirement of engine fuels besides their high energy content is that they capable of energy transfer among the specific circumstances of the internal combustion engines. In case of diesel fuels this property is measured by the cetane number and cetane index. With cetane number the compression ignition behaviour of a diesel fuel can be measured. With higher cetane number quicker ignition is enable and it leads to fewer cycles with incomplete or partial combustion during operation. The combustion stability is improving, the noise is lowering and less unburned hydrocarbon is released to the atmosphere. Cetane improver additives can affect the cetane number; by contrast, they can't improve the cetane index.

Therefore the aim of our work was the quality improvement of blends of fatty acid containing by-product, waste polyolefin thermal cracking originated and unrefined crude oil based gas oil fractions with high sulphur- and aromatic contents to produce diesel fuel component. During the experiments the hydrogenation of the instable olefins and the effect of olefins on the catalytic hydrogenation of fatty acids and on the aromatic saturation of gasoil were investigated. The effect of the process parameters (temperature: 300-360°C, pressure: 50 bar, liquid hourly space velocity: 1.0-3.0 h<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/hydrocarbon ratio: 600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>) in the presence of Ni(2.3%)Mo(11.0%)P(2.3%)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst on the combustion properties of the liquid products was studied.

It was found that the blending of PPGO had a beneficial effect on the products performance properties (eg. higher cetane index caused by the higher saturated hydrocarbon content). On the investigated catalyst suitable parameter combinations are established to each raw material combinations to obtain diesel gas oil blending component with excellent properties.

---

## **Bevezetés**

Európában folyamatosan nő a felhasznált alternatív komponensek mennyisége a motorhajtóanyagokban. Az EU Renewable energy Directive (2016) előírja a megújítható és alacsony szén-dioxid kibocsátású motorhajtóanyagok arányának növelését 1,5 e%-ról (2021) 6,5 e%-ra (2030), valamint az élelmiszer alapú bio-motorhajtóanyagok arányának csökkentését 7 e%-ról (2021) 3,8 e%-ra (2030) [1]. Ezért fontos új, hulladék eredetű keverőkomponensek előállítása.

Az Európai Unióban évente körülbelül fejenként 1828 kg hulladék keletkezik, amelyből 416 kg/fő lerakóba kerül [2]. Ebből az évi műanyag hulladék mennyiség 34 kg/fő, amelynek közel 30%-a lerakóba kerül [3]. A műanyag hulladék feldolgozó technológiák közül szénhidrogének előállításra a kémiai újrahasznosítás alkalmazható, amely jelenleg a hulladékok körülbelül 1 %-a esetén történik meg [4]. A kémiai újrahasznosítás során keletkező nagy telítetlen szénhidrogén tartalmú, és így instabilis szénhidrogén elegy közvetlenül motorhajtóanyag-célú felhasználásra nem alkalmas, minőségjavítása szükséges. Ezzel kapcsolatban kevés kutatási eredmény áll rendelkezésre [5].

A zsírsavak megújítható forrásból származnak, nagymennyiségben keletkeznek. Ígéretes alternatív motorhajtóanyag alapanyagok lehetnek, hiszen szénhidrogének állíthatóak elő belőlük oxigéneltávolító reakciókkal. A zsírsavak oxigéneltávolító reakcióit eddig főleg inert atmoszférában vizsgálták, illetve belőlük biodízel előállíthatóságát tanulmányozták. Zsírsav hidrogénezésről kevés szakirodalom áll rendelkezésre, a legtöbb kutatás modellvegyületek vizsgálatával foglalkozik [6]. Zsírsavak és kőolajfinomítói áramok együttes minőségjavításával kevesen foglalkoztak eddig.

A motorhajtóanyagokkal szemben támasztott egyik legfontosabb követelmény a nagy energiatartalmuk mellett, hogy a belsőégésű motorok speciális körülményei között alkalmasak legyenek energiaátadásra [7]. Dízelgázolajok esetén e tulajdonság meghatározására szolgál a cetánszám és a cetánindex. A cetánszám MSZ EN 590:2013 szabvány által előírt értéke legalább 51,0; míg cetánindex esetén ez az érték legalább 46,0. A nagyobb cetánszám lehetővé teszi a Diesel-motor gyorsabb indítását, így befolyásolja a hidegindítást, a károsanyag kibocsátást és az égési zajt. Mivel a nagyobb cetánszámú dízelgázolajnak jobb az égési tulajdonságai, így lehetővé teszi hogy a motorban kevesebb ciklus játszódjon le tökéletlen vagy részleges égéssel. Ez a menetstabilitás növekedéséhez és kisebb zajhoz vezet, valamint kevesebb elégetlen szénhidrogén kerül a kipufogógázba [8]. A gázolajok cetánszámának növelésére alkalmaznak adalékokat, a cetánindex értéke azonban nem javítható adalékolással [9].

Az előzőek értelmében kísérleti munkánk célja hulladék polipropilén termikus bontásából származó gázolaj forráspon-tartományú frakció, nagy zsírsav-tartalmú melléktermék és nagy kén- és aromástartalmú, finomítatlan lepárlási gázolaj együttes minőségjavításának vizsgálata volt dízelgázolaj keverőkomponens előállítására.

## **Kísérleti rész**

A kísérletek során a hulladék polipropilén termikus bontásából származó, nagy olefintartalmú frakciót (PPGO) 10, 20%-ban, és emellett a zsírsav-tartalmú hulladékáramot (FFA) 10, 20 és 30%-ban tartalmazó gázolaj elegyek katalitikus minőségjavítási lehetőségeit vizsgáltuk (hidrogénezéssel) kereskedelmi NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátoron. A kísérletek során vizsgáltuk a termikus bontás gázolaj frakciójában lévő instabilis olefinek hatását a zsírsavak katalitikus hidrogénezhetőségére. Tanulmányoztuk a műveleti paraméter kombinációk (hőmérséklet: 300-360°C, folyadékterhelés: 1,0-3,0 h<sup>-1</sup>, H<sub>2</sub>/szénhidrogén arány: 600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>, nyomás: 50 bar) hatását a cseppfolyós termékek égési tulajdonságaira.

### Kísérleti berendezés

A gázolajelegek hidrogénezésére egy 100 cm<sup>3</sup> hasznos térfogatú, visszakeveredésmentes csőreaktort tartalmazó berendezést alkalmaztunk. A berendezés tartalmazta az összes olyan főbb készüléket és gépegységet (szivattyúk, szeparátorok, hőcserélők, szabályzók), amelyek egy ipari hidrogénező üzemben is megtalálhatóak. A kísérleteket folyamatos üzemmódban végeztük, állandósult állapotú katalizátoron.

### Alapanyagok

A felhasznált gázolaj elegyek összetételét és főbb tulajdonságait az 1. táblázat tartalmazza.

**1. táblázat.** Az alapanyag elegyek főbb tulajdonságai

	TO GO 17	TO AA 10	TO AA 20	TO AA 30	TOFA 1
<b>PPGO tartalom, %</b>	0	10	20	30	10
<b>FFA tartalom, %</b>	0	0	0	0	10
<b>Sűrűség, g/cm<sup>3</sup></b>	0,8468	0,8423	0,8377	0,8337	0,8495
<b>Középátlagos forráspont, °C</b>	275	272	277	278	324
<b>Cetánindex</b>	49,9	50,9	53,4	54,9	56,5
	TOFA 2	TOFA 3	TOFA 4	TOFA 5	TOFA 6
<b>PPGO tartalom, %</b>	10	10	20	20	20
<b>FFA tartalom, %</b>	20	30	10	20	30
<b>Sűrűség, g/cm<sup>3</sup></b>	0,8574	0,8636	0,8448	0,8518	0,8588
<b>Középátlagos forráspont, °C</b>	262	243	209	239	270
<b>Cetánindex</b>	43,8	37,1	31,5	39,6	45,2
	TOFA 7	TOFA 8	TOFA 9	PPGO	
<b>PPGO tartalom, %</b>	0	0	0	100	
<b>FFA tartalom, %</b>	10	20	30	0	
<b>Sűrűség, g/cm<sup>3</sup></b>	0,8524	0,8612	0,8665	0,8023	
<b>Középátlagos forráspont, °C</b>	260	271	258	281	
<b>Cetánindex</b>	44,8	44,6	40,0	67,3	

### Vizsgálati módszerek

Mind az alapanyagok, mind a termékek analitikai és alkalmazástechnikai tulajdonságait a 2. táblázatban lévő szabványos vizsgálati módszerekkel, az azokban megadott precizitással határoztuk meg.

**2. táblázat.** Az alkalmazott vizsgálati módszerek

Vizsgált jellemző	Alkalmazott szabványos vizsgálati módszerek
Sűrűség 15,6 °C-on	MSZ EN ISO 12185:1998
Desztillációs jellemzők	EN ISO 3405:2011
Cetánindex	EN ISO 4264
Cetánszám	EN 15195(IP 498)

A cetán index értékeit az alábbi képlet segítségével határoztuk meg:

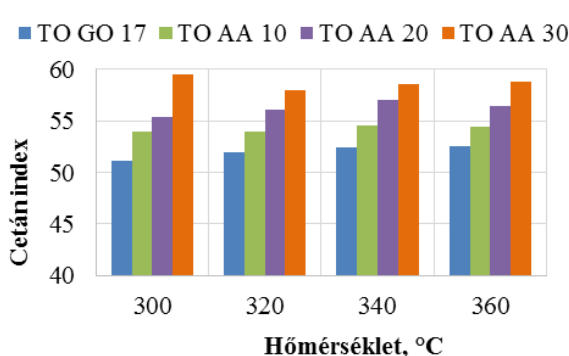
$$CI = 454.74 - 1641.4169\rho + 774.74\rho^2 - 0.554t + 97.803(\log t)^2$$

ahol  $\rho$  a 15°C-on mért sűrűség,  $t$  az átlagos forráspont.

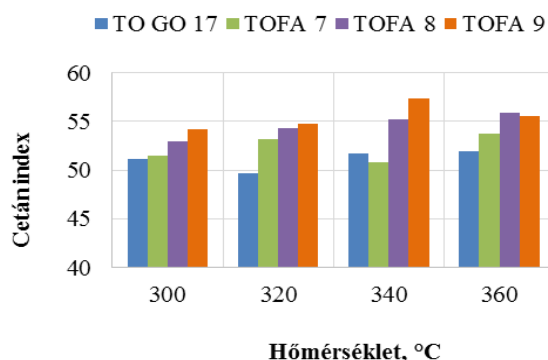
## Kísérleti eredmények és értékelésük

Az alternatív komponensek bekeverése már az alapanyagok esetén is jelentős hatást gyakorolt a cetánindex értékekre. A PPGO önmagában történő bekeverése kedvezően befolyásolta ezt a tulajdonságot, míg az FFA bekeverése csökkentette az elegyek cetánindex értékét. A két komponens együttes bekeverésének hatása felerősítette az FFA kedvezőtlen hatását, a mindkét komponenst tartalmazó elegyek cetánindexe csökkent a bekeverési arány növelésével.

Az 1-4. ábrán látható a különböző alapanyagokból előállított termékek cetánindex értéke az alapanyagok és a hőmérséklet függvényében. Minden esetben kismértékben változott ez a tulajdonság a hőmérséklet növelésével, ugyanakkor sokkal jelentősebb volt a bekevert alternatív komponens arányának hatása. Az 1. ábrán látható a csak PPGO komponenst tartalmazó alapanyagokból előállított termékek cetánindexe. Az alternatív komponenst nem tartalmazó gázolajéhoz képest nőtt a cetánindex a PPGO bekeverési arány növelésével. A szabványban előírt minimális követelményt messzemenően teljesítették a kapott termékek. A 2. ábra a csak FFA komponenst tartalmazó alapanyagokból előállított termékek esetén kapott cetánindex értékeket mutatja be. Itt is az előzőhöz hasonló tendencia látható, de az FFA-ból keletkező komponensek csak kisebb mértékben javították a termékek minőségét.



**1. ábra.** A cetánindex alakulása a hőmérséklet függvényében PPGO tartalmú alapanyagok esetén ( $p = 50$  bar,  $LHSV = 3,0$  h<sup>-1</sup>,  $H_2/CH = 600$  Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>)

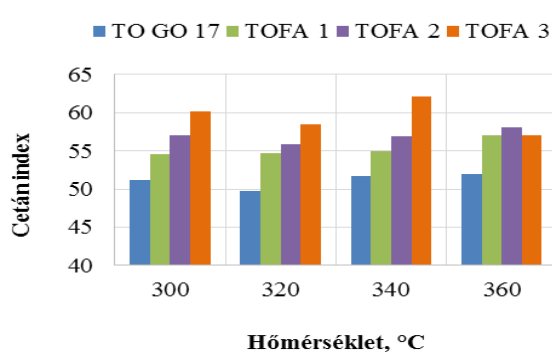


**2. ábra.** A cetánindex alakulása a hőmérséklet függvényében FFA tartalmú alapanyagok esetén ( $p = 50$  bar,  $LHSV = 3,0$  h<sup>-1</sup>,  $H_2/CH = 600$  Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>)

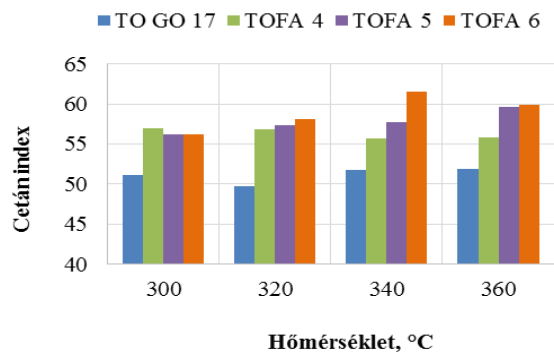
A 3. ábrán a 10% PPGO tartalom mellett növekvő FFA tartalommal rendelkező alapanyagokból előállított termékek cetánindexei láthatóak. Az alapanyagok alternatív komponens tartalmának növelése ebben az esetben is kedvezően hatott a termékek ezen minőségi jellemzőjére. A PPGO-t nem tartalmazókhöz képest itt jóval nagyobb cetánindexeket kaptunk; a növekedés mértéke 3-6 egység volt. Minél nagyobb volt a csak FFA tartalmú alapanyagok esetén kapott cetánindex, annál nagyobb volt a PPGO bekeverés hatására bekövetkező változás (növekedés) mértéke.

A 4. ábra a 20% PPGO és 10, 20, 30% FFA tartalmú alapanyagokból előállított termékek cetánindex értékeit mutatja be. Bár a tendencia itt is hasonló volt, azaz az alternatív komponens bekeverési arányának növelésével nőtt a termékek cetánindexe, a növekedés mértéke nem volt akkora, mint az előző esetben. A 10% PPGO

bekeverése esetén tapasztalt kedvező hatást kismértékben növelte csak a további 10% bekeverése. Minél kisebb volt a 10% PPGO tartalmú alapanyagok esetében mért cetánindex értéke, annál nagyobb mértékű volt a változás.

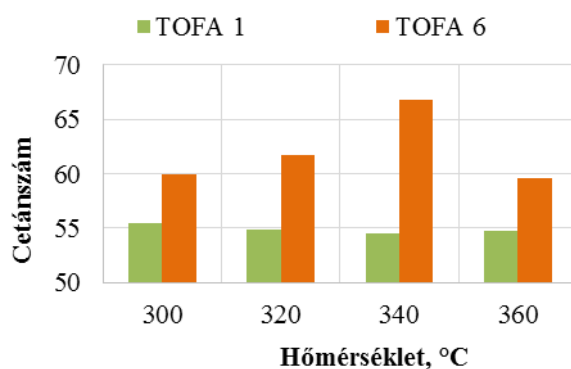


**3. ábra.** A cetánindex alakulása a hőmérséklet függvényében 10 % PP GO és különböző FFA tartalmú alapanyagok esetén ( $p = 50$  bar,  $LHSV = 3,0 \text{ h}^{-1} \text{ H}_2/\text{CH} = 600 \text{ Nm}^3/\text{m}^3$ )



**4. ábra.** A cetánindex alakulása a hőmérséklet függvényében 20 % PP GO és különböző FFA tartalmú alapanyagok esetén ( $p = 50$  bar,  $LHSV = 3,0 \text{ h}^{-1} \text{ H}_2/\text{CH} = 600 \text{ Nm}^3/\text{m}^3$ )

Az 5. ábrán látható a legkisebb és legnagyobb alternatív keverőkomponens tartalmú alapanyagból előállított termékek cetánszáma a hőmérséklet függvényében. Látható, hogy míg az összesen 20% alternatív komponens tartalmozó alapanyagból előállított termékek cetánszáma nagyon hasonló volt a cetánindex értékeikhez, addig az összesen 50% alternatív komponens tartalmozó alapanyagból nyert termékek esetén a cetánszám 4-5 egységgel nagyobb volt, mint a cetánindex.



**5. ábra.** A TOFA 1 és TOFA 6 alapanyag esetén kapott termékek cetánszámának alakulása a hőmérséklet függvényében ( $p = 50$  bar,  $LHSV = 3,0 \text{ h}^{-1} \text{ H}_2/\text{CH} = 600 \text{ Nm}^3/\text{m}^3$ )

## Összefoglalás

A kimerülő kőolajkészletek, Európa kőolajfüggőségének csökkentése és környezetvédelmi okok miatt nagyon fontos megfelelő minőségű, alternatív motorhajtóanyag keverőkomponensek előállítása. Az EU direktívák az élelmiszer alapanyagként is felhasználható alapanyagokból előállított motorhajtóanyagok

arányának csökkentését írják elő a megújítható forrásból származók arányának növelése mellett. Ezért fontos vizsgálni különböző hulladékok motorhajtóanyaggá történő átalakítási lehetőségeit, és bekeverésük hatását az analitikai és alkalmazástechnikai tulajdonságokra.

Kísérleti munkánk célja így hulladék polipropilén termikus bontásából származó gázolaj forráspont-tartományú frakció, nagy zsírsav-tartalmú melléktermék és lepárlási gázolaj együttes minőségjavításával előállított termékek égési tulajdonságainak vizsgálata volt. Összességében megállapítottuk, hogy az alternatív frakció alapanyagba történő bekeverése kedvezően befolyásolta a termékek cetánszám és cetánindex értékeit; az alternatív komponens arányának növelésével nőttek ezek az értékek a lepárlási gázolajból előállított termékekéhez képest. Ennek oka, hogy nőtt a termékek paraffinos jellege, és nőtt a n- és i-paraffinok részaránya a termékekben. A lepárlási gázolaj jelentős mennyiségű aromást (~33%) tartalmazott, amelyeknek kicsi a cetánszáma, míg a hulladék eredetű alapanyag komponensek már eleve gyakorlatilag kén- és aromásmentesek voltak. Az aromás vegyületek arányának csökkentésével javultak az égési tulajdonságok. Tehát mind a műanyag hulladék bontástermékeknek, mind a hulladék zsírsavnak az alapanyagba való bekeverése kedvezően hatott a gázolaj ezen tulajdonságára a vizsgált műveleti paraméterek esetén. A legkedvezőbb égési tulajdonságokkal rendelkező terméket a 20% PPGO és 30% FFA tartalmú TOFA 6 alapanyag felhasználásával kaptuk 340°C hőmérsékleten, 50 bar nyomáson, 3,0 h<sup>-1</sup> folyadékterhelésen, 600 Nm<sup>3</sup>/m<sup>3</sup> H<sub>2</sub>/szénhidrogén alapanyag arány esetén, ennek cetánindexe 61,6 cetánszáma pedig 66,9 volt.

### **Köszönetnyilvánítás**

A kutató munka a GINOP-2.3.2-15-2016-00053 jelű projekt részeként, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

### **Irodalomjegyzék**

- [1] DIRECTIVE OF THE EUROPEAN PARLIAMENT AND OF THE COUNCIL on the promotion of the use of energy from renewable sources (recast) [COM(2016) 767 final] (2016)
- [2] Waste generation and landfilling indicators, <http://ec.europa.eu/eurostat> (2015)
- [3] Plastics – the Facts 2016, An analysis of European plastics production, demand and waste data
- [4] Lopez, G., Artetxe, M., Amutio, M., Bilbao, J., Olazar, M., *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 73 346–368. (2017)
- [5] Hamad, K., Kaseem, M., Deri, F., *Polymer Degradation and Stability*, 98, 2801–2812. (2013)
- [6] Hermida, L., Abdullah, Z.A., Mohamed, R.A., *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 42, 1223–1233. (2015)
- [7] Hancsók, J., *Korszerű motor és sugárhajtómű üzemanyagok II. Dízelgázolajok*, Pannon Egyetem Kiadó, Veszprém (ISBN 978 963 396 041 7), 654 (2016)
- [8] European Automobile Manufacturers Association, *Worldwide Fuel Charter*, Fifth Edition (2013)
- [9] Srivastava, S. P., Hancsók, J., *Fuels and Fuel-Additives*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, (ISBN: 978-0-470-90186-1), 376 (2014)



# Finomhangolható Polaritású Poli(vinil-alkohol) (PVA) Bio-kopolimerek Szintézise Metatézis Polimerizációval

## *Synthesis of Well-Defined Polyvinyl Alcohol (PVA) Bio-copolymers via Metathesis Polymerizations*

Tuba Róbert

MTA Természettudományi Kutatóközpont *Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

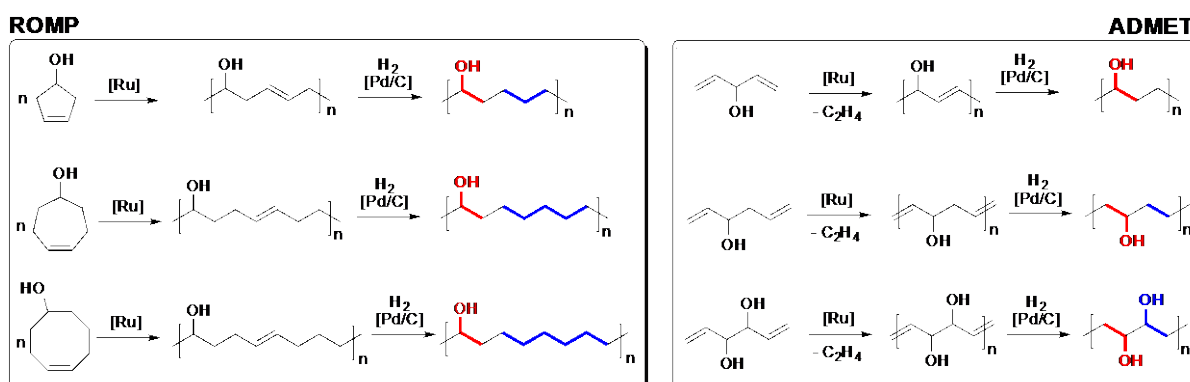
### Összefoglaló

A poli(vinil-alkohol) (PVA) kopolimereket széleskörben alkalmazzák különböző gyógyszeripari eljárásokban. A PVA kopolimer polaritását a láncon található hidroxil csoportok száma határozza meg, amelyek mennyiségének tetszőleges megváltoztatásával a polimer polaritása finomhangolhatóvá válik. A finomhangolható polaritású, PVA kopolimer alapú gyógyszerhordozók vagy implantátumok alkalmazásával a hatóanyag felszabadulás szabályozható és hosszan fenntartatható. Például a 5-fluorouracil (5-FU) vagy Adriamycin daganatellenes hatóanyagok felszabadulás sebessége könnyen szabályozható különböző molarányú vinil-alkohol és etilén kopolimer alkalmazásával. Ezeknek a polimer mátrixoknak az egyik alkalmazási területe a daganat terápiák során használt implantátumok, amelyekből a kemoterápiás hatóanyag előre programozható módon szabadul fel a rosszindulatú elváltozások környezetében és viszonylag hosszú ideig, alacsony dózis mellett fejtik ki hatásukat.

Az olefin metatézis új lehetőséget nyújt a funkcionált polimerek, különösen a PVA kopolimer alapú biopolimerek szintézisében. Különböző hidroxil csoportot tartalmazó cikloolefinek gyűrűnyitó metatézis polimerizációja (ROMP) vagy  $\alpha,\omega$ -diének aciklikus dién metatézis polimerizációja (ADMET) finoman hangolható polaritású, jól definiált szerkezetű PVA biokopolimereket eredményez (1. Ábra).

A ruténium alapú Grubbs katalizátor rendszerek nem csak széleskörű funkciós csoport toleranciával rendelkeznek, hanem kimagasló aktivitást mutatnak a lenti polimerizációs reakciókban is.<sup>4</sup> Különböző fázisjelzett katalizátorokkal az átmeneti fémek hatékony eltávolítása is egyszerűen megoldható, amely nagytisztaságú polimerek előállítását teszi lehetővé.

A kutatás során különböző polaritású PVA kopolimerek szintézise valósult meg. Ezek a polimerek akár kémiaailag kötött vagy egyszerűen csak fizikailag beágyazott hatóanyagokat is "hordozhatnak". A kísérletek során a hatóanyag felszabadulás kinetikája és a polimer polaritása közötti összefüggésre keressük a választ. A megfelelően "hangolt" polimerek alkalmazásával lehetőség nyílik precíziós - időben és térben meghatározott - célzott gyógyszerhatóanyag kijuttatásra.



1. Ábra. Jól definiált, finomhangolható polaritású PVA ko-polimerek szintézise.

---

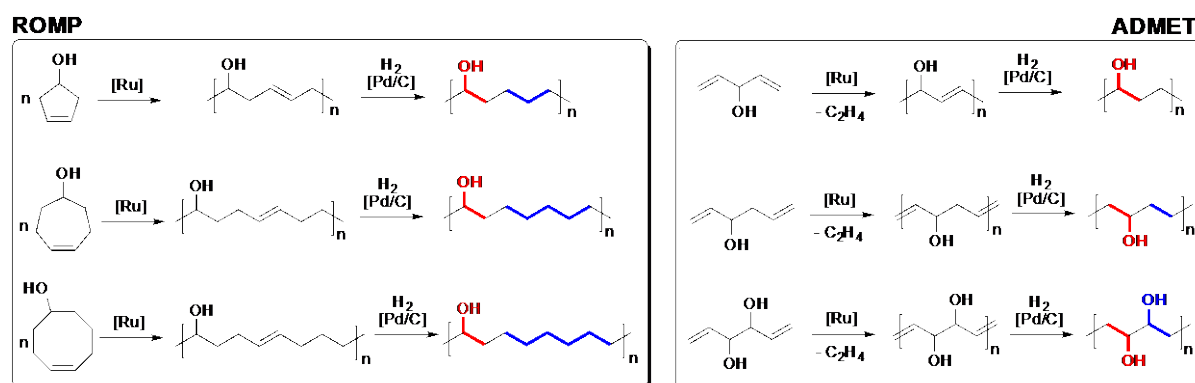
## Summary

Copolymers of polyvinyl alcohol (PVA) are widely used in many biomedical applications. The concentration of hydroxyl groups along the polymer chain determines its polarity; tuning of PVA copolymers' polarity in drug delivery applications can control targeted drug release. For example the 5-fluorouracil (5-FU) or Adriamycin anticancer agents release can be easily controlled by modifying the vinyl alcohol and ethylene proportions in the co-polymer chain. These polymer matrices can be used as tunable implanted delivery systems in cancer chemotherapy.

Olefin metathesis provides new opportunities for the synthesis of functionalized polymers, especially for the fabrication of well-defined PVA-based bio-polymers. The ring opening metathesis polymerization (ROMP) of OH functionalized strained cycloolefins or acyclic diene metathesis polymerization (ADMET) of hydroxyl group containing  $\alpha,\omega$ -dienes provides a wide range of PVA co-polymer based biomaterials with fine-tunable polarity (Scheme 1).

The ruthenium catalyst systems are not only highly active and have high functional group tolerances but they show exceptional activities in the polymerization reactions of the monomer depicted in Scheme 1. Moreover, the application of phase labelled catalyst make possible the synthesis of highly pure, metal free biopolymers.

The preliminary synthesis of PVA co-polymers has been completed. These polymers can “deliver” active pharmaceutical ingredients (API) either in blended or chemically grafted form. The kinetics of drug release vs. polymer polarity will be investigated in order to design “pre-programmable” drug delivery agents.



**Scheme 1.** Synthesis of PVA biopolymers having fine-tunable polarity via ring-opening metathesis polymerization

---

# **Szilikagél használatának a hatása a sör keresztáramú membránszűrésére**

*Effect of usage of Silicagel on Crossflow Membrane Filtration of Rough Beer*

**Varga Áron, Tóth Eszter, Márki Edit**

*Szent István Egyetem, Élelmiszeripari Műveletek és Gépek Tanszék  
Ménesi út 44, 1118 Budapest*

---

## **Összefoglaló**

A kutatás célja, hogy tanulmányozzuk a szilikagél használatának a hatását a sör kerámia membránnal történő keresztáramú membránszűrésére. A sör tükrösítése a termékminőség javítása, a hatékonyság, a környezetvédelmi előírások és a fenntartható fejlődés miatt fontos. A kovafölddel történő szűrés helyett alternatív megoldás a keresztáramú mikroszűrés. Egy lager típusú sört főztünk többlépcsős infúziós cefrézéssel standardizált recept alapján a szűrés kísérletekhez a Szent István Egyetem Sör- és Szeszipari Tanszékén. A szűrés kísérletekhez Stabifix W MF-et (Stabifix Brauerei-Technik KG, Németország) használtunk, ami egy finomra porított szilikagél legfeljebb 65% nedvességtartalommal és poliszulfon alapú membránokkal való keresztáramú szűrőkhöz tervezték. 2<sup>P</sup> típusú teljes faktoriális kísérleti tervet használtunk, a faktorok a következők voltak: szilikagél koncentráció, transzmembrán nyomáskülönbség, retentátum térfogatáram. A teljes faktoriális kísérleti terv válasza pedig a fluxus volt. Kifejlesztettünk egy membrántisztítási módszert és analitikai méréseket is végeztünk. Az előzetes eredmények alapján elmondható, hogy a méréspároknál (vagyis 0 és 80 g/hl szilikagél koncentrációkon, ugyanazon transzmembrán nyomáskülönbségeknél és retentátum térfogatáramoknál) a kezdeti fluxusok azoknál a szűréseknél, ahol szilikagélt használtunk többnyire kisebbek voltak, mint azoknál a szűréseknél, ahol nem használtunk szilikagélt. Azonban az állandósult fluxus értékek általában nagyobbak voltak. Az analitikai mérések eredményei azt mutatják, hogy a szilikagél használatának vannak előnyei.

## **Summary**

The scope of this research is to study the effect of usage of Silicagel on Crossflow Membrane Filtration of Rough Beer with tubular ceramic membrane. The clarification of Rough Beer is important, because of improving product quality, efficiency, environmental regulations and sustainability. The alternative process to conventional filtration with Kieselguhr is Crossflow Microfiltration. A standardized lager beer was brewed with Multi Step Mashing for the filtration investigations at Department of Brewing and Distilling, Szent István University. For the filtration investigations, we used Stabifix W MF (Stabifix Brauerei-Technik KG, Germany) that is a finely milled Silicagel with a moisture content up to 65% and designed for the use on Crossflow filters with polysulfone based membranes. 2<sup>P</sup> type full factorial experimental design were applied, the three factors were the following: Silicagel Concentration, Transmembrane Pressure and Retentate Flow Rate. Flux was considered as a response of the full factorial experimental design. A membrane cleaning method was developed and analytical measurements were also performed. According to the preliminary results, in the case of matched runs (i.e. 0 and 80 g/hl Silicagel Concentrations, same Transmembrane Pressures and Retentate Flow Rates), initial Fluxes of filtrations with usage of Silicagel were mostly lower than the values of the filtrations without usage of Silicagel, but steady-state Fluxes were mainly higher. The results of the analytical measurements show, that the usage of Silicagel has some benefits.

---

# Racém 1-feniletanol biokatalizált kinetikus resolválása termék-elválasztással

*Biocatalyzed kinetic resolution of racemic 1-phenylethanol followed by product separation*

**Varga Zsófia, Szécsényi Ágnes, Kmecz Ildikó, Székely Edit**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,  
Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék*

*1111, Budapest Műegyetem rkp. 3.*

---

## Összefoglaló/ Summary

Az enantiomertiszta vagy az egyik enantiomerben feldúsított termékek előállításának egyre nagyobb jelentősége van az enantiomerek eltérő biológiai aktivitásából adódóan. Szekunder alkoholok racém elegyből kiindulva a lipáz-katalizált kinetikus resolválás az egyik legrégebbi és legáltalánosabb módja a tiszta alkohol enantiomerek elérésének.[1] Hagyományosan szintetikus észterezőszerket, így vinil-acetátot, alkalmaznak észterező ágensként.[2] Környezetvédelmi szempontból viszont előnyösebbek a kevésbé illékony és nem toxikus észterező ágensek, így a glicerin észterezett származékai vagy növényi olajok, melyek hatékony észterezőszernek bizonyultak alkoholok resolválásában. [3,4] Kutatómunkánk során első lépésként szintetikus glicerinszármazékokat (glicerin-triacetátot, glicerin-tributirátot), majd szuperkritikus szén-dioxidos extrakcióval (p=45 MPa, T=50°C) kinyert kukoricacsíra-olajat alkalmaztunk észterezőszerként. Légköri nyomáson, szerves oldószer nélkül – az észterezőszer használva reakcióközegként – végeztünk kísérleteket; illetve szuperkritikus szén-dioxid közegben vizsgáltuk a kinetikus resolválást. Természetes olaj észterezőszer esetén vizsgáltuk a reakciót követő termék-szubsztrát elválasztás lehetőségeit. A termékek és a szubsztrát reakcióelegyből való kinyeréséhez és azok elválasztásához megfelelő nyomás-hőmérséklet beállítások meghatározásához oldhatósági és megoszlási hányados méréseket végeztünk. Enantiomer-elválasztás tekintetében az alkalmazott észterezőszer hatékonynak bizonyultak: az észter-termékre vonatkozóan  $\geq 99,5\%$ -os egyensúlyi enantiomerfelesleget értünk el 40-50%-os racém alkoholra vonatkoztatott konverzió mellett. Kukoricacsíra-olaj észterezőszerrel, szuperkritikus szén-dioxidban (10-20 MPa, 35-50 °C) kétfázisú rendszert kaptunk, mely lehetőséget adott a reakció lejárásáért követően az alkohol és az észter reakcióelegyből való kinyerésére szuperkritikus extrakció útján. A termék - kiindulási anyag elválasztáshoz két lépcsős nyomáscsökkentéssel alapuló rendszert hoztunk létre, melyből 10% alatti anyagvesztéssel visszanyerhető volt az alkohol és a termék 90 mol%-ot meghaladó tisztasággal.

A kutatómunkát az OTKA (K108979) támogatta.

There is a growing interest in the preparation of enantiopure or enantiomerically enriched products due to the different bioactivity of enantiomers. Kinetic resolution of racemic secondary alcohols is a well-known and efficient method to obtain optically active alcohols.[1] The most commonly used esterification agents are synthetic compounds, like vinyl acetate.[2] However, considering the environmental impact of the resolution, the non-volatile and non-toxic acyl donors, like derivatives of glycerol or vegetable oils, are favorable compared to the synthetic agents. Moreover, glycerol derivatives and oils, as acyl donors, can be applied efficiently as well in the resolution of alcohols.[3,4] In the presented work glycerol derivatives (glycerol triacetate, glycerol tributryrate) and corn germ oil obtained by supercritical fluid extraction (p=45 MPa, T=50°C) were applied as esterification agent. The kinetic resolution was investigated in neat acylating agent at ambient pressure and in supercritical carbon dioxide. Using corn germ oil as ester donor, the possibilities of the substrate-product separation was also examined. In order to determine the suitable pressure and temperature conditions for the extraction and separation of products and substrates, phase equilibrium measurements and distribution ratio determination were performed. Regarding the enantiomer separation, the applied ester donors were efficient:  $\geq 99,5\%$  enantiomeric excess of ester products and 40-50% conversion were obtained. In supercritical carbon dioxide (10-20 MPa, 35-50°C) using corn germ oil as esterification agent, two phase system was formed which allowed to extract the remaining alcohol and the products from the reaction mixture by means of supercritical fluid extraction following the reaction. For the substrate-product separation, a two-step system, based on sequential pressure drop, was designed. The designed system led to the recovery of the compounds with less than 10% material loss and the separation of the product and the remaining alcohol with over 90mol% purity.

This research work was supported by the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA K108979).

---

[1] Ghanem, A., *Tetrahedron*, 63 (8), 1721–1754. (2007)

[2] Wang, Y. F., Lalonde, J. J., Momongan, M., Bergbreiter, D. E., Wong, C. H., *J. Am. Chem. Soc.*, 110 (21), 7200–7205. (1988)

[3] Wolfson, A., Atyya, A., Dlugy, C., Tavor, D., *Bioprocess Biosyst. Eng.*, 33 (3), 363–366. (2010)

[4] Wolfson, A., Komyagina, N., Dlugy, C., Blumenfeld, J., *Green Sustain. Chem.*, 1 (1), 7–11. (2011)

# Ko-fermentációs tejsavóhasznosítás

*Whey utilization with co-fermentation*

**Vidra Aladár, Németh Áron**

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem*

*Budapest, Műegyetem rakpart 7-9.*

---

## Összefoglaló/ Summary

Az élelmiszeripar egyik legnagyobb mennyiségű mellékterméke a savó, amely a sajt, tej, kazein és joghurt gyártás során keletkezik. A világ savótermelése körülbelül 180 millió tonna volt 2013-ban. Fő összetevői a víz mellett a laktóz, tejsav, oldható fehérjék, lipidek, vitaminok és ásványi sók. Ezen értékes összetevők miatt számos fermentációs termék forrásaként lehet hasznosítani mintsem szennyvízként ártalmatlanítani. A propionsav előállítása *Propionibacterium*ok segítségével az egyik ilyen alternatíva. Számos irodalom számol be ilyen kísérletekről azonban egyikben sem követik nyomon egyidejűleg a tejsav és a laktóz időbeni alakulását. Fermentációs kísérletek során tapasztaltuk, hogy a laktóz és a tejsav hasznosítása során katabolit represszió jelensége lép fel, azaz a tejsav gyors hasznosulását követi a laktóz lassabb felhasználása és propionsavvá alakítása. Ennek elkerülésére a laktóztartalmat *Lactobacillus*ok által tejsavvá alakítottuk majd *Propionibacterium*okkal propionsavvá. A termelt propionsav kinyerése mellett a biomassát probiotikumként lehet hasznosítani.

Whey, the liquid residue of cheese, casein and yoghurt production, is one of the largest volume byproduct of the food industry. World whey output is at approximately 180 million tonnes in 2013. The main components of whey out of water are lactose, lactic acid, soluble proteins, lipids, vitamins and mineral salts. Because of these valuable components, whey can be utilized as a nutrient source for many industrial fermentation products rather than disposed as wastewater. Propionic acid production with *Propionibacteria* is one of the possible alternatives. There are several literature reports of these attempts, however, they did not follow the consumption of lactic acid and lactose over the fermentation time. In cultivation experiments we found catabolite repression effect that means the first quick utilization of lactic acid, followed by slow lactose consumption. To avoid this, lactose content was converted to lactic acid by a *Lactobacillus* and then converted to propionic acid by a *Propionibacterium*. In addition to the recovery of the produced propionic acid, also the biomass can be utilized as probiotics.

---

# Növelhető-e a heterogén fotokatalízis hatékonysága ózonizációval, ha a katalizátor Ag-TiO<sub>2</sub>?

*Can the efficiency of heterogeneous photocatalysis be improved by its combination with ozonation if the catalyst is Ag-TiO<sub>2</sub>?*

**Fónagy Orsolya, Szabóné Bárdos Erzsébet, Horváth Ottó**

*Pannon Egyetem, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## Összefoglaló/ Summary

Kutatócsoportunk az Ag-TiO<sub>2</sub> katalizátoros heterogén fotokatalízis ózonizációval való kombinálhatóságát vizsgálta. Eredményeink alapján a két módszer együttes alkalmazásával jó fotodegradációs eredmények érhetőek el, azonban a gyakorlati alkalmazás során figyelembe kell venni az ezüst átalakulását is.

We studied the potential of combining ozonation with heterogeneous photocatalysis if the catalyst is Ag-TiO<sub>2</sub>. Based on our recent investigation the previously mentioned two methods can be used together with great results, although in practical application the transformation and mobility of silver should be noted.

---

A heterogén fotokatalízis hatékonysága nemcsak a katalizátor felületi módosításával, hanem más nagyhatékonyságú oxidációs módszerek kombinálásával is növelhető. E lehetőségeket vizsgáltuk a benzolszulfonsav és a 4-hidroxi-benzolszulfonsav fotodegradációjával különböző kísérleti körülmények között, s meghatároztuk a modellvegyületek bomlási mechanizmusát is [1,2]. Ag-TiO<sub>2</sub> alkalmazásakor megnő a vizsgált vegyületek hidroxileződési sebessége, de a szerves széntartalom csökkenési sebessége nem változik, azaz a felületmódosítás hatására csak a hidroxilgyökök képződési sebessége nő meg, míg az aromás gyűrű felnyitásáért felelős aktív részecskéké nem. A heterogén fotokatalízis és az ózonizálás együttes alkalmazásakor mind a modellvegyületek hidroxileződése, mind pedig a köztitermékek bomlása gyors folyamat. Ésszerűnek tűnt az Ag-TiO<sub>2</sub>-os heterogén fotokatalízist ózonizálással kombinálni, ezáltal a módosított katalizátorral a köztitermékek képződése növelhető, míg az ózonizációval gyors lebontásuk is megvalósítható.

Eredményeink igazolták elképzeléseinket, ugyanakkor az eljárás korlátai is körvonalazódtak. Az oldat fázisban az elektrondonor vegyületek koncentrációjának lecsökkenésekor az ózon a katalizátoron megkötődött ezüstöt oxidálja, megnő az ezüstion-koncentráció a folyadékfázisban. A probléma könnyen kezelhető, ha a degradációs folyamat befejeztével a fémionokat bevilágítással újból leválasztjuk a katalizátor felületére.

A kutatás anyagi háttérét a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 és az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 pályázatok biztosították.

[1] Z. Zsilák, E. Szabó-Bárdos, O. Fónagy, O. Horváth, K. Horváth, P. Hajós, *Catal. Today*, 230, 55-60. (2014)

[2] Z. Zsilák, O. Fónagy, E. Szabó-Bárdos, O. Horváth, K. Horváth, P. Hajós, *Environ. Sci. Pollut. R.*, 21, 11126– 11134. (2014)

Kemény Sándor  
Budapesti Műszaki és Közgazdaságtudományi Egyetem, Kémiai és Környezeti  
Folyamatmérnöki Tanszék

Szerzőtársak:

Deák András, Lakné Komka Kinga, Kunovszki Péter

Kísérletek tervezése és értékelése

Typotex Kiadó, 2017, fő és kiegészítő kötet

- I. Valószínűségelméleti és matematikai statisztikai alapok
  - II. Lineáris regresszió
  - III. Varianciaanalízis (ANOVA)
  - IV. Faktoros kísérleti tervek
  - V. Minőségjavító kísérlettervezés
  - VI. Komplex alkalmazási példák
24. Gyógyszerkészítmények stabilitásvizsgálatának statisztikai értékelése
  25. Az analitikai validálás statisztikai eszközei
  26. Az ingadozás-források kvantitatív elemzése
  27. A kísérlettervezési eredmények további elemzése
  28. A split-plot terv-variánsok további elemzése

Sokszor a statisztikai elemzésnél arra koncentrálunk, hogy megfelelő választ találjunk a fölött kérdésre. Legalább ilyen fontos pedig, hogy a megfelelő kérdést tegyük föl (Peter Drucker: “the important and difficult job is never to find the right answer; it is to find the right question).

J. Tukey: többet ér a helyes kérdésre adott közelítő válasz, mint a rossz kérdésre adott precíz válasz „Far better an approximate answer to the right question, which is often vague, than the exact answer to the wrong question, which can always be made precise.”.

Do not put your faith in what statistics say until you have carefully considered what they do not say. ~William W. Watt

G. E. P. Box: minden modell rossz, de közülük egyesek jobban használhatók

Az egyponyos kalibráció alkalmasságának vizsgálata

Mi a szokásos és mi a releváns kérdés?

Az új részek és új hangsúlyok:

A statisztikai alapok témakörében

- az egyoldali próbák hangsúlyozása
- próba és konfidencia-intervallum ekvivalenciája ill. a táblázatból vett kritikus érték, kiszámított p, konfidencia-intervallum viszonya és használata
- TOST (két egyoldali t-próba, bár sajnos nincs minden kidolgozva, pl. ANOVA hiányzik)
- hibaterjedés: GUM-EURACHEM

Az ANOVA és a faktoros tervek témakörében

- több ingadozás-forrás figyelembe vétele
- split-plot, nehezen változtatható faktorok
- critical mix, rossz pont

# **Flotációs eljárás hatékonyságának fokozása a nyomtatott papír festékanyag tartalmának eltávolítására**

*Improvement of deinkability efficiency of printed paper using flotation process*

**Balla Noémi Szonja, Farkas Csilla, Nguyen Duc Quang**

*Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi Kar, Sör- és Szeszipari Tanszék  
1118 Budapest, Ménesi út 43-45.*

---

## **Summary**

Waste papers have big potential as raw materials for many applications such as for bio-ethanol production. However, the presence of contaminants such as ink on paper fibres generally have a negative effect on sugar conversion in enzymatic hydrolysis and alcoholic fermentation. Flotation de-inking process is one of a perspective method for removal of printed ink. In the present study, investigation of alcoholic de-inking flotation process on three different types of printed waste papers - pulped form and two different paper size: 0.5 x 0.5 cm and 2.0 x 2.0 cm – was aimed as well as flotation time, temperature and dosage of ethanol were also optimized. Results showed that the highest ink removal was 263.6 mg.L<sup>-1</sup> at 1%, w/v consistency of pulped paper, 50±0.2°C, 25 %, V/V of ethanol and 30 min, however the flotation losses were also high, it was 559.5 mg.L<sup>-1</sup>. Central composite design (CCD) was used to determine the optimal conditions and statistically analyzed the efficiency of ethanol and temperature on deinking process. The ink removal seems to be more effective at 55-60 °C and 25-35 %, V/V% ethanol dosage with about 280-300 mg.L<sup>-1</sup> ink removal. The ANOVA showed, that increased temperature strongly affected the ink removal and flotation losses than ethanol dosage. The results are still preliminary, though these can serve as a basis for further experiments to develop more economical flotation de-inking process.



# Biogázolaj előállítása, jellemzése

## *Preparation and characterization of bio-gasoil*

**Domokos Lajos, Dr. Halász János**

*Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar*

*Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék*

*6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

---

### Összefoglaló

A biomassza, bio-motorhajtóanyagok jellemzése, a biogázolaj. Elsődleges feladat a bio-motorhajtóanyagok bemutatásán keresztül jellemezni a biogázolajat, mint új típusú motorhajtóanyagot. A bio-motorhajtóanyagok és a biogázolaj előállítása, alkalmazott technológiai háttér, felhasználás. A szakirodalom által bemutatott eljárások, saját kísérleti eredmények összegzése, azokból levont konzekvenciák.

Az elvégzett kísérletek egyértelműen bizonyítják, hogy laboratóriumi körülmények között lehetőség van telítetlen növényi olajat telíteni, azt viszkózusabbá tenni, motorhajtóanyaggá alkalmasabbá tenni.

Alkalmazott eszközök, módszerek: Höppler viszkoziméter, Marcusson-féle készülék, MSZ 3259-85 számú szabvány, MSZ 19974-67 számú szabvány

Címszavak: biogázolaj, biodízel, hidrogénezés

### Summary

The biomass, characterization of bio-fuels, the bio-gasoil. Primary task is to characterize the bio-fuel oil as a new type of fuels through showing the bio-fuels. Preparation of bio-fuels and bio-gasoil, technological background, using. The described procedures by the literature, summary of own experimental results, consequences.

The experiment show that it is possible to saturate the unsaturated vegetable oil in a laboratory, to make it more viscous, to make it more suitable to use as fuels.

Used methods, instruments: Höppler-viscometer, Marcusson device, standard no. MSZ 3259-85 and MSZ 19974-67

Keywords: bio-gasoil, biodiesel, hydrogenation

---

### Bevezetés

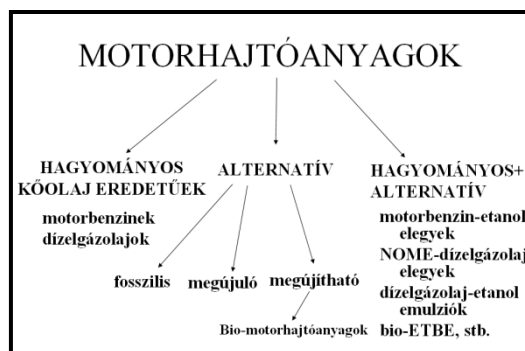
Bioüzemanyagnak tekint a szakirodalom bármely, biomasszából nyerhető üzemanyagot (1. ábra) [1]. Fő forrásai a speciálisan erre a célra termesztett növények vagy a mezőgazdaságból, erdészetből, egyéb iparágakból adódó hulladékok, melléktermékek. A biomassza – növényi és állati szervezetek által termelt szerves anyag – a napenergia átalakított, újratermelődő formája [2].



1. ábra: A biomassza motorhajtóanyagként történő felhasználásához természetesen technológiai lépések szükségesek

### Motorhajtóanyagok

A motorhajtó anyagokat 3 csoportba oszthatjuk: kőolaj eredetűek, alternatív, és ezek keverékei (3. ábra) [3]. A kőolajból előállított termékek döntő részét belsőégésű motorok meghajtására használják fel. A belsőégésű motoroknak 2 csoportjuk van: dugattyús motorok és gázturbinák. A dugattyús motoroknak is 2 nagy csoportjuk van: Otto-, és Diesel-motorok [4]. A továbbiakban a Diesel-motorok meghajtására alkalmas üzemanyagok előállításáról, jellemzéséről lesz szó.

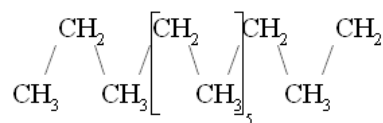


3. ábra: Motorhajtóanyagok csoportosítása

### Gázolaj

A gázolaj a kompressziós gyújtású motorok hajtóanyaga, a kőolaj atmoszférikus desztillációjának harmadik frakciója, forráspontjára 250-360°C között van. A gázolajat szivattyúkkal szállítják a befecskendezőbe, tehát fontos a megfelelő viszkozitás, a jó szivattyúzhatóság. Továbbá a dermedéspontjának alacsonynak kell lennie, hogy téli használatra is alkalmas legyen. A közvetlen lepárlású gázolaj dermedési pontja 0°C körül van, a téli gázolajsükségletet -15, -25°C alatti dermedésponttal rendelkező dízelolajjal kell biztosítani. A dízelgázolajok égési tulajdonságaival szemben támasztott követelmények ellentétben állnak a motorbenzinekével. Míg az Otto-motorok esetében fontos a kompressziótűrés, addig a Diesel-motorok esetében – mivel nincs szikragyújtás – az a követelmény, hogy a komprimált levegőbe befecskendezett gázolaj minél hamarabb elégjen, azaz ebben az esetben fontos tényező a termikus instabilitás, a minél nagyobb mértékű öngyulladás képesség. Az öngyulladás empirikus mértéke a cetánszám. A cetán 16 szénatomból álló normál paraffin (4. ábra). Mivel a cetán öngyulladási képessége a legjobb, ezért az a 100-as a skálán, a 0 értéket az  $\alpha$ -metil-naftalin képviseli, kis öngyulladási hajlama miatt. Az atmoszférikus kőolaj-desztilláció során nyert gázolaj cetánszáma kb. 50. Ez motorikus szempontból kielégítő, így ha egyéb tulajdonságai is megfelelőek, közvetlenül felhasználható motorhajtóanyagként.

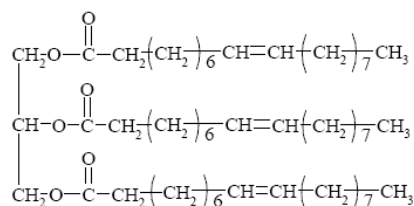
Környezetvédelmi megfontolásokból a nem tökéletes égés során keletkező nem kívánatos égéstermékek mennyiségét katalitikus utánégetővel, elektronikus gyújtásszabályzókkal, illetve új motorkonstrukciókkal próbálják csökkenteni [1].



4. ábra: Dízelgázolaj (n-hexadekán) szerkezeti képlete

### A növényolajok

A növényolajokat döntően az ún. trigliceridek alkotják, azaz egy glicerinnegyestől és általában 3 olajsavból/zsírsavból álló észterek (5. ábra).



5. ábra: egy növényolaj molekula szerkezeti képlete

A növényolajok önmagukban történő motorhajtóanyagként való alkalmazásához kedvez, hogy a természetben élő mikroorganizmusok viszonylag rövid idő alatt lebontják. Környezetvédelmi szempontból ez a tulajdonság előnyös, viszont tárolási problémákat vet fel, ugyanis az oxidációs hajlam könnyen használhatatlanná teszi a növényi olajat.

#### **Növényolajok fontosabb tulajdonságai, melyekben eltérnek a dízelgázolajoktól:**

- nagyobb sűrűség
- nagyobb viszkozitás, tehát rosszabb porlaszthatóság
- kisebb cetánszám, tehát rosszabb gyulladási hajlam
- nagyobb hidegsűrhetőségi hőmérséklet
- szabad savtartalom, korrozív
- nagy jódszám, rosszabb hő- és oxidációs stabilitás
- könnyebb biológiai lebonthatóság, ez tárolás során hátrányt is jelent

A növényolajok tulajdonságai tehát rosszabbak a dízelgázolajokénál. Alternatívát jelenthet egy új, növényolaj üzemeltetésű motor kifejlesztése, de ez drága, és így gazdaságilag versenyképtelen volna.

A megoldást tehát az jelenti, hogy a növényolajok szerkezetét kell megváltoztatni, a gázolajéhoz minél hasonlóbbá tenni. Ez kétféleképpen érhető el:

- növénynevelés: speciális olajos növények termesztése, ill. a műszaki feltételek megoldása.
- a növényolajok kémiai átalakítása

#### **Növényolajok felhasználásának előnyei:**

- független a kőolaj árártól
- sokkal jobb a kenőképessége, mint a kis S-tartalmú dízelgázolajoknak
- biológiailag könnyebben bomlik a gázolajnál, így környezetvédelmi szempontból előnyösebb
- elégetésekor keletkező CO<sub>2</sub> a növény újratermelésekor abba újra beépül
- mivel a növényolajok S-mentesek, így nem okoznak savas esőt
- a növényolajok átészterezésekor a nyert biodízel energiatartalmának kb. 30%-át be kell fektetni, ez nem jelentkezik a növényolajok közvetlen felhasználásakor.
- A növényolajok energiatartalma kb. 10%-kal nagyobb, mint a belőlük előállítható biodízeleké.

#### **Növényolajok kémiai átalakítása motorhajtóanyagokká**

##### **Átészterezés**

A növényolajok trigliceridjeit kisebb molekulatömegű és kis telítettségű vegyületekké kell alakítani. Erre az egyik lehetőség a különböző mértékű hidrogénezés, a másik a növényolajok egy értékű alkohollal való átészterezése (6. ábra). Így keletkeznek a biodízelek [10].



6. ábra Növényolajok átészterezése

### Hidrogénezés

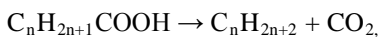
A növényolajok kedvezőtlen tulajdonságainak javítására szolgál a hidrokrakkolás. Az eljárásnak olyannak kell lennie, hogy a heteroatom eltávolító, illetve hidrogénező reakciók teljesen, míg a hidrokrakkoló reakciók részben menjenek végbe. Ezzel az eljárással nő a cetánszám, csökken a sűrűség, a viszkozitás kismértékben romlik, a fűtőérték nem változik, a hidegszűrhetési határhőmérséklet magasabb lesz [7].

### Katalitikus hidrogénezés, izomerizációs hidrogénezés

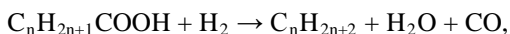
A trigliceridek katalitikus hidrogénező átalakítása során keletkező céltermék a biogázolaj, amely elsősorban gázolaj-forrásponttartományba eső normál- és izoparaffinokat tartalmaz. A paraffinok a kőolaj eredetű dízelgázolajok legjobb komponensei. A normál-paraffinok kiemelkedő cetánszámmal, de alacsony hőmérsékleten ( $\leq 10^\circ\text{C}$ ) kedvezőtlen tulajdonságokkal rendelkeznek, míg az izo-paraffinok alkalmazástechnikai tulajdonságai kiválóak alacsony hőmérsékleten is.

A katalitikus hidrogénező reakciók során főleg normál-paraffinok, kevés izo-paraffin, propán, széndioxid, szén-monoxid, víz, valamint szerves oxigéntartalmú vegyületek keletkeznek az alkalmazott katalizátor és egyéb körülmények függvényében. Ennek során a triglicerid molekulák a következő reakciók szerint alakulnak át (7. ábra):

- kettőskötések telítése (hidrogénezése),
- heteroatomeltávolítás [12]
  - oxigéneltávolítás (15. ábra)
  - hidrogénező oxigéneltávolítás (HDO reakció),
  - dekarboxilezés:

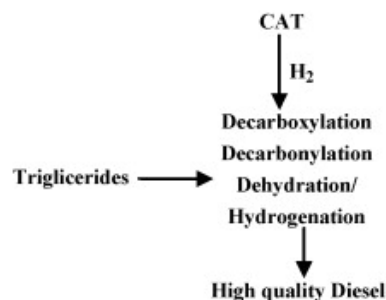


- dekarbonilezés:

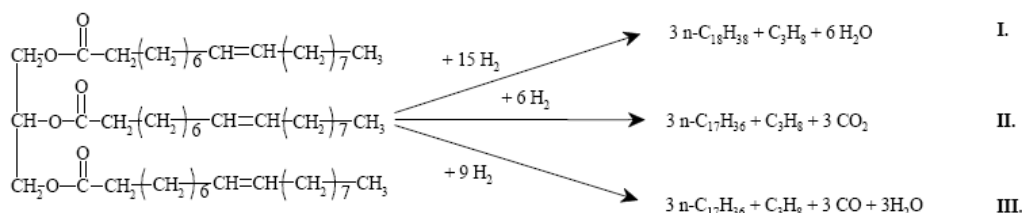


- kén- és nitrogéneltávolítás

- a zsírsav molekulaalkotó szénláncának (hidro)krakkolása.



7. ábra: A trigliceridek katalitikus hidrogénezése [13]



8. ábra: A három olajsavláncot tartalmazó triglicerid molekula esében főként n-paraffinokból álló biogázolaj előállításakor az oxigéneltávolítás három fő lehetséges útjának bruttó reakciója [14]

A hidrogénező oxigéneltávolítással történő katalitikus oxigéneltávolításkor (I. reakcióút) (HDO reakció) 1 mol triglicerid molekula 3 mol, a triglicerid zsírsavláncával megegyező hosszúságú n-paraffinná, valamint propánná és 6 mol vízzé alakul át. A dekarboxilezési (II. reakcióút) és dekarbonilezési reakció során (III. reakcióút) az oxigéneltávolítás szén-dioxid, szén-monoxid és víz formájában történik. A keletkező n-paraffinok szénatomszáma eggyel kisebb, mint a triglicerid molekulában lévőké. Egy adott katalitikus rendszerben az oxigéneltávolítás mind a három reakcióúton lejátszódik, azok mértéke azonban lényegesen eltér [5].

A hidrogénezés során keletkező nagy n-paraffin-tartalmú elegyet – elválasztás után – a szükséges mértékig izomerizálni kell a folyási tulajdonságok javítására [15]. Az így előállított termék a biogázolaj, amely nagy cetánszámmal és kiváló tulajdonságokkal rendelkezik alacsony hőmérsékleten is.

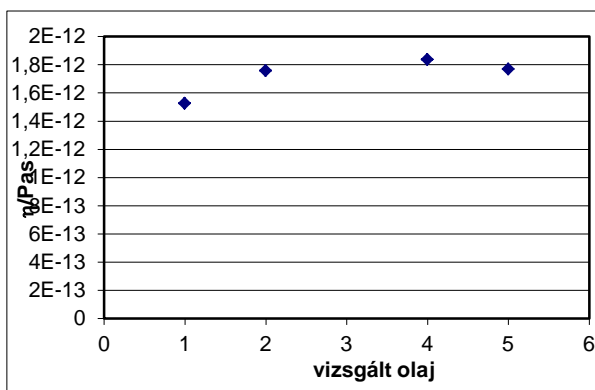
A biogázolaj ugyan felhasználható önmagában is Diesel-motorok hajtására, de az általános felhasználás esetén rendszerint nem szükséges ilyen kiváló minőségű termék alkalmazása. Így a biogázolajnak gázolaj-keverőkomponensként való felhasználásának lesz elsősorban gyakorlati jelentősége.

### Kísérleti eredmények

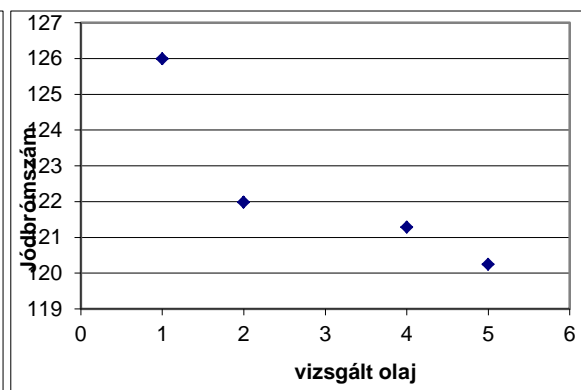
A biogázolaj előállításával kapcsolatban kísérleteket végeztünk növényi olaj laboratóriumi körülmények között végbehajtott hidrogénezésével különböző katalizátorok jelenlétében.

Az elsődlegesen felmerülő kérdés az volt, hogy lehet-e laboratóriumi körülmények között, viszonylag egyszerűen növényi olajat hidrogénezni. Ennek érdekében a hidrogénezést különböző katalizátorok jelenlétében, valamint különböző hőmérsékleten is megkíséreltük

Kísérleti körülmények: kb. 100g növényi olaj hidrogénezése atmoszférikus nyomáson 3 óra időtartamig I. és II. esetben 0,5 g Pd katalizátor jelenlétében 200 és 250 °C-on, III. és IV. esetben 0,25 g Pt katalizátor jelenlétében 200 és 250 °C-on.

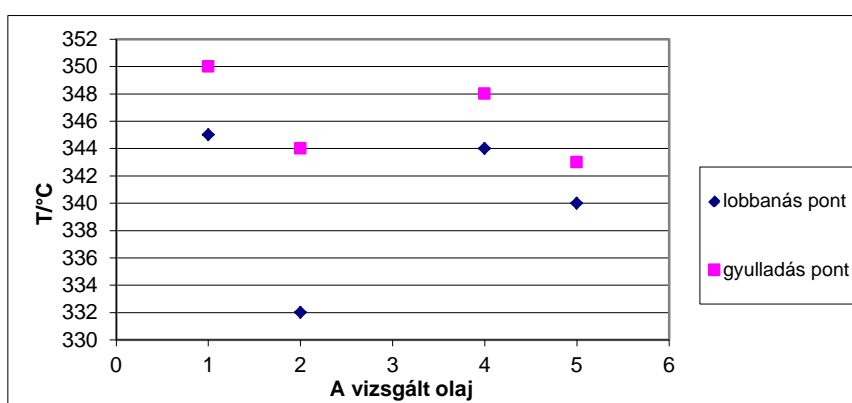


22. ábra: Az étolaj és a termékek viszkozitása



3. ábra: Az étolaj és a termékek jódbromszáma

(1: étolaj; 2: I. termék; 3: II. termék; 4: III. termék; 5: IV. termék)



24. ábra: Az étolaj és a termékek lobbanás- és gyulladáspontja  
(1: étolaj; 2: I. termék; 3: II. termék; 4: III. termék; 5: IV. termék)

A legfontosabb kérdésre, hogy hidrogénezhető-e a növényi olaj laboratóriumi körülmények között, a válasz egyértelműen igen. Ez leginkább a második mintán látszik. Itt a hidrogénezés olyan mértékben ment végben, hogy a termék szobahőmérsékletre hűlve szilárd halmazállapotú lett. Tehát a második kísérletet mondhatjuk e tekintetben a legsikeresebbnek.

A kísérleti eredményekből egyértelműen kitűnik, hogy a hőmérséklet növelése kedvez a hidrogénezés hatásfokának. Tehát lehetőség van ezen körülmények között növényi olaj telítésre, viszkozusabbá tételére, így alkalmasabbá tenni motorhajtóanyaggá. Az izomerizáció jelen körülmények között vélhetően nem ment végbe.

## Irodalomjegyzék

- [1] Halász J., Hannus I., Kiricsi I.: Környezetvédelmi technológia, JATEPress Kiadó, Szeged, 2007.
- [2] <http://www.mszh.hu/kiadv/ipsz/200710-pdf/01-biomassza.pdf>
- [3] <http://www.bkik.hu/download/Hancsok.ppt>
- [4] Halász J., Hannus I.: Kémiai technológia, JATEPress Kiadó, Szeged, 2006.
- [5] Krár M., Kovács S., Boda L., Leveles L., Thernesz A., Hancsók J.: Növényolajok motorhajtóanyag célú hidrogénezése NiMo/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalizátoron, Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék 8201. Veszprém, Egyetem u. 10., MOL NyRt. TKD Technológia és Projektfejlesztés, Százhalombatta 2443, Pf. 1.

- [6] <http://www.emk.nyme.hu/uploads/media/Hancsok.pdf>
- [7] Hancsók Jenő: Korszerű motor- és sugárhajtómű üzemanyagok III. Alternatív motorhajtóanyagok, Veszprém
- [8] <http://www.kreditvadasz.hu/education/preview/2705/view/Hungary/Szegedi-Tudomanyegyetem/Termesztudomanyi-es-Informatikai-Kar-SZTE-TTIK/Nem-tanari-szakok/Biologia-BSc/Alternativ-Energiaforrasok/Kiadott-Anyag/Biohajtoanyag.html>
- [9] Halász J., Hannus I.: Vegyipari és környezettechnikai műveletek, JATEPress Kiadó, Szeged, 2005.
- [10] S. Krondach, R. Pairintra, K. Krisnangkura: Improvement of used Vegetable Oil Quality for Diesel Engines; The Joint Graduate School of Energy and Environment, King Mongkut's University of Technology Thonburi, Bangkok 10140, Thailand
- [11] M. A. Delucchi, Institute of Transportation Studies, University of California, Davis, CA 95616, USA, T. Lipman, University of California, Berkeley, 4152 Etcheverry Hall, RAEL, Berkeley, CA 94720, USA: APPENDIX A: ENERGY USE AND EMISSIONS FROM THE LIFECYCLE OF DIESEL-LIKE FUELS DERIVED FROM BIOMASS, 2003
- [12] J. Mikulec, J. Cvengroš, Ľ. Joríková, M. Banič, A. Kleinová: PRODUCTION OF DIESEL FUELS FROM WASTE TRIACYLGLYCEROLS BY HYDRODEOXYGENATION, Slovnaft VÚRUP, Bratislava, Slovak Republic, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Slovak Republic, 44th International Petroleum Conference, Bratislava, Slovak Republic, September 21-22, 2009
- [13] G. W. Huber, P. O'Connor, A. Corma: Processing biomass in conventional oil refineries: Production of high quality diesel by hydrotreating vegetable oils in heavy vacuum oil mixtures; Chemical Engineering Department, University of Massachusetts-Amherst, Amherst, MA 01003, USA; BIOeCON BV Hogebrinkerweg 15e, 3871KM Hoevelaken, The Netherlands; Instituto de Tecnología Química, UPV-CSIC, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, Spain; 2007.
- [14] Cs. TÓTH, T. KASZA, S. KOVÁCS, P. BALADINCZ, J. HANCSÓK: INVESTIGATION OF CATALYTIC CONVERSION OF VEGETABLE OIL/GAS OIL MIXTURES; University of Pannonia, Department of Hydrocarbon and Coal Processing, Hungary, H-8201 Veszprém, P.O. Box 158.
- [15] [http://vikkk.vein.hu/publix/mkn07/Krar\\_Marton\\_ELoHIDROGeNEZETT\\_NoVeNYOLAJOK\\_IZOME\\_RIZaLaSA.pdf](http://vikkk.vein.hu/publix/mkn07/Krar_Marton_ELoHIDROGeNEZETT_NoVeNYOLAJOK_IZOME_RIZaLaSA.pdf)
- [16] M. Han, W. Yi, Q. Wu, Y. Liu, Y. Hong, D. Wang: Preparation of biodiesel from waste oils catalyzed by a Brønsted acidic ionic liquid; Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China; Bioresource Technology 100 (2009) 2308-2310
- [17] D. Fritsch, G. Bengtson: Development of catalytically reactive porous membranes for the selective hydrogenation of sunflower oil, GKSS-Forschungszentrum, Institut für Polymerforschung, Max-Planck-Strasse 1, D-21502 Geesthacht, Germany, 2006.
- [18] Halász J., Hannus I., Hernádi K., Kukovecz Á., Kónya Z., Tasi Gy., Kiricsi I.: Kémiai és környezetvédelmi technológiai gyakorlatok, JATEPress kiadó, Szeged, 2007.

# Nitrofurantoin fotodegradációjának vizsgálata

## *Photodegradation of nitrofurantoin*

**Fonyó Máté<sup>a</sup>, Szabóné Bárdos Erzsébet<sup>a</sup>, Andrea Cafuta<sup>b</sup>, Horváth Ottó<sup>a</sup>,  
Horváth Krisztián<sup>c</sup>, Sandra Babić<sup>b</sup>, Irena Škorić<sup>d</sup>**

*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék<sup>a</sup>*

*Analitikai Kémia Intézeti tanszék<sup>c</sup>, 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

*University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology, Department of*

*Analytical Chemistry<sup>b</sup>, Department of Organic Chemistry<sup>d</sup>*

*10000 Zagreb, Marulićev trg 19, Croatia*

[\*bardose@almos.uni-pannon.hu\*](mailto:bardose@almos.uni-pannon.hu)

Az elmúlt néhány évtizedben rohamosan bővült a gyógyszerek és a gyógyhatású készítmények skálája. Jelentős veszélyt jelenthet a környezetbe való jutásuk, felhalmozódásuk, illetve az, hogy lebomlásuk során sokszor toxikusabb vegyületté alakulnak át, mint a kiindulási anyag. Az élőlényeket károsító hatások elkerülése érdekében fontos a mesterséges vegyületek eltávolítása a vizekből. Napjainkban a víztisztítás főként biotechnológiai eszközökkel történik, vannak azonban olyan vegyületek, amelyeket ezek az élő szervezetek alig vagy egyáltalán nem képesek lebontani. A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közé tartozó heterogén fotokatalízissel a szerves vegyületek széles köre lebontható ártalmatlan vagy a környezetet kevésbé terhelő vegyületekké.

A nitrofurán antibiotikumok közé tartozó nitrofurantoint (NFT) széles körben alkalmazzák gyulladáscsökkentőként, elsősorban urológiai fertőzések esetén.

Munkánk során a biológiailag aktív vegyület fotodegradációját tanulmányoztuk különböző kísérleti körülmények között: anaerob és aerob rendszerekben közvetlen fotolízissel, illetve heterogén fotokatalízissel (katalizátorként titán-dioxidot alkalmaztunk). A bomlási folyamatot nyomon követtük a reakcióelegy színpéneke rögzítésével, pH-jának mérésével. A kiindulási vegyület és a képződő köztitermékek aktuális koncentrációjának meghatározását HPLC analízissel végeztük.

Megállapítottuk, hogy a fotokémiai folyamatokban az első, gyors lépés a vegyület fotoizomerizációja a C=N kötés körül, melyet ezután a lassabb degradációs lépések követnek. A degradációs folyamat azonosított vegyületei az aminohidantoin és a nitrofuraldehid. Az antibiotikum bomlását a reakcióelegy erős savasodása kíséri. Kimutattuk, hogy kezdetben salétromossav, majd annak oxidációját követően salétromsav keletkezik.

A fotoindukált folyamatokban képződő izomer termikusan nem stabil, bomlása során nitrofuraldehid, valamint aminohidantoin képződik. Részletesen tanulmányoztuk a köztitermékek fotodegradációját is.

Az antibiotikum fotokémiai mineralizációja folyamán keletkező köztitermékek nem toxikusak.

A kutatás anyagi háttérét a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 és az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 pályázatok biztosították.

1. Szabó-Bárdos, E.; Markovics, O.; Horváth, O.; Törő, N.; Kiss, G. *Water Res.* **2011**, *45*, 1617-1628.
2. Zsilák, Z.; Szabó-Bárdos, E.; Fónagy, O.; Horváth, O.; Horváth, K.; Hajós, P. *Catal. Today* **2014**, *230*, 55-60.
3. Zsilák, Z.; Fónagy, O.; Szabó-Bárdos, E.; Horváth, O.; Horváth, K.; Hajós, P. *Environ. Sci. Pollut. R.* **2014**, *21*, 11126-11134.



Lengyel Nikolett, Kiss Ferenc, **Suba Péter: Introduction of polyols**

#### **ABSTRACT**

Polyurethanes, having a relatively short history became one of the most dynamic groups of polymers, and their use covers practically all the fields of polymer applications - foams, elastomers, thermoplastics, thermorigids, adhesives, coatings, sealants, fibres and so on. Furniture, bedding, seating for cars, shoe soles, thermoinsulation for refrigerators and buildings, wood substitutes, packaging, and coatings, are only a few common examples of polyurethane use in every day life.

Polyurethanes are obtained by the reaction of an oligomeric polyol and a diisocyanate (or polyisocyanate). The structure of the oligomeric polyol used for polyurethane manufacture has a very profound effect on the properties of the resulting polymer.

MOL targets the Polyether polyol segment that covers 2/3 of PO consumption however, PO chemistry opens the door towards many other commodity and specialty chemicals.

Janecska Tünde, Orbánné Mester Ágnes, **Kissné Lovas Kinga, Kiss Ferenc:**  
**New homopolymer PP grade development**

#### **ABSTRACT**

The development project has started when new expectations came up from one of the most significant domestic partner Low & Bonar producer of geotextiles for building and construction application. Concerned new EN standards for geotextiles were updated in 2014 with stricter requirements. Modification of the current polypropylene homopolymer grade used by customer is needed in order to comply with the new European regulation for geotextile segment. Besides having good long term thermal stability the product must be resistant to water immersion while retaining a sufficient strength. Furthermore gas fading resistance it's a must to preserve the natural colour of the product during processing and long term use as well. For this purpose the aim was to develop and optimize the additive package of polypropylene with the use of antioxidants resistant to hydrolyses in aqueous medium without causing the discoloration of the product. After more laboratory experiments and plant trials the new product was made successfully. The produced geotextile reached the required quality and was accepted by the target customer.

# **Modell kísérletek a lézernyomatott papír festékanyag tartalmának eltávolítására kitozán biopolimer alkalmazásával**

*Model experiments for removal of laser printer ink by chitosan biopolymer*

**Lesták Lea, Farkas Csilla, Rezessyné Szabó Judit, Nguyen Duc Quang**

*Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi Kar, Sör- és Szeszípari Tanszék  
1118 Budapest, Ménesi út 43-45.*

---

## **Összefoglaló/ Summary**

A papír-újrahasznosítás egyik kiemelt kutatási és fejlesztési területe a nyomtatott papírok festékanyag tartalmának gazdaságos és költségghatékony eltávolítása és kinyerése. A szilárd hordozók, úgynevezett biopolimerek és a festék szemcsék közötti felületi kölcsönhatás, az adszorpciós festékanyag eltávolítás mechanizmusa jelenleg még nem teljesen ismert. Az aktivált kitozán, mint bioszorbens reakcióképes szabad funkció csoportokkal (amino,  $-NH_2$ ) rendelkezik, amelyeken keresztül a szerves festék részecskék megkötődhetnek. Jelen kutatómunka a különböző kitozán formák (deacetilezett kitozán, glutaraldehiddel keresztkötött deacetilezett kitozán és Na-alginát gélyöngyök felszínére rögzített deacetilezett kitozán) adszorpciós hatékonyságának, továbbá az optimális adszorbens mennyiség, adszorpciós idő, pH és hőmérséklet hatásának vizsgálatára irányult. A visszamaradt festékanyag mennyiségének meghatározása UV-Vis spektrofotométer segítségével 227 nm-en történt. A modell festékoldat HP fekete lézer tintapatronból származó festékanyagot tartalmazott. Az elért maximális adszorpciós hatékonyság 76 % volt, amely esetben a 100 ppm koncentrációjú festék oldat kezelése Na-alginát gélyöngyökre rögzített 1 % deacetilezett kitozánnal, 30 °C-on, pH 6,5 értéken, valamint 220 rpm állandó rázatás mellett történt 15 percen keresztül. A modell kísérletek eredményei ígéretesek, azonban újabb kutatások szükségesek a nyomtatott papírokra felvitt festékanyagok eltávolítása terén.

Adsorption deinking process could be a novel, economical and energy efficient method in paper recycling to remove ink particles with adsorbents, as biopolymers. However, much more researches are still needed to understand the mechanism of ink adsorption. Chitosan is known as a low-cost biosorbent, which has many favorable properties such as organic dyes removal due to the high presence of reaction sites mainly amino ( $-NH_2$ ) functional groups. The aim of this study was to determine the optimal conditions as adsorbent dosage, adsorption time, pH and temperature to reach the highest adsorption capacity of different chitosan forms (deacetylated chitosan, glutaraldehyde-crosslinked deacetylated chitosan and deacetylated chitosan coated Na-alginate beads) for HP laserjet black ink. The amount of residual ink was analyzed using UV-Vis spectrophotometer at 227 nm. An increased adsorption capacity was observed at 100 ppm initial concentration of ink, using 1 % deacetylated chitosan coated Na-alginate beads, pH 6.5 and 30 °C with constant shaking at 220 rpm for 15 min. The ink removal was approximately 76 %. The results are very promising and can serve as the basis for development further experiments with another model solutions and treatments of printed papers.

## *Studying the Performance of Modified Carbon Nanotube as Adsorbent Material in Oil Spills Clean Up*

**Noor Al Jammal, Tatjana Juzsakova, Zsófia Ifju**

*Institute of Environmental Engineering, Faculty of Engineering, University of Pannonia,  
Veszprem 8200, Hungary*

*Contact e-mails: naljammal@almos.uni-pannon.hu; yuzhakova@almos.uni-pannon.hu*

---

### **Summary**

Over the last decade of the 20<sup>th</sup> century, oil spill pollution has turned out to be a vital area of concern on account of its serious environmental influences and to such an extent of the pollution that it poses a worldwide risk, therefore, surface water spill or subsurface leakage of petroleum products has been of concern to many industries and governments and NGOs. Exploration, production and transportation of petroleum products, unprofessional discarding of petroleum wastes and stranded oil spills from pipelines, oil wells, underground storage tanks, are the foremost causes of surface and groundwater contamination.

This research aims to aim at to devise new methods for the oil removal from water by adsorption method and to study the promising carbon nanotubes (CNTs) for this purpose, hence a lot of attention is given to this new type of adsorbent due to their exceptionally high adsorption capacity for oil–water separation and to their high hydrophobicity properties. In this work commercial multiwall carbon nanotubes (MWCNT) was purchased from the Chengdu Organic Chemicals Co Ltd. (China) and was modified used microemulsion method in order to increase its adsorption capacity towards oil water pollutants. Unmodified and modified MWCNTs have been investigated by liquid N<sub>2</sub> adsorption (BET method). The commercial / unmodified MWCNTs have a particle length of 5-20 μm and 10–20 nm diameter ranges with purity of > 95%.

The MWCNTs have mainly mesopore size (2-50 nm) and about 10% of its surface area formed by micropores (< 2nm). SBET and SBJH surface areas of commercial MWCNT pretreated at 30°C under vacuum are 155 and 159 m<sup>2</sup>/g respectively indicating that material has pores close to cylindrical shape as expected. Microemulsion treatment leads to diminishing of micropores and hence to decrease of surface area to 95 m<sup>2</sup>/g value. Unmodified and modified MWCNTs have been used for oil compounds adsorption test. The water treatment efficiency is analyzed by TOC method.

**Acknowledgement:** This work was supported by GINOP-2.3.2-15-2016-00016 project: Excellence of strategic R+D workshops: Development of modular, mobile water treatment systems and waste water treatment technologies based on University of Pannonia to enhance growing dynamic export of Hungary.

### **Összefoglaló**

A felszíni vizek olajjal és olajszarmazékokkal történő szennyeződése egyre komolyabb kihívások elé állítja a kutatókat. A kísérleti munka során a szén-nanocsövek alkalmazhatóságát tanulmányoztuk a felszíni vizek olajmentesítésében. A multiwall szén-nanocsövek mikroemulziós technikával történő modifikálásával a nanocsövek hidrofób tulajdonságait kívántuk módosítani az adszorpciós kapacitás növelése céljából. Az alap szén-nanocsövek és a módosított nanocsövek fajlagos felületét, pórusszerkezetét tanulmányoztuk és az eredményeket szénhidrogén modell komponensek szorpciós eredményeivel korreláltattuk.

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönet a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 projekt anyagi támogatásáért.

# Nitrogénnel és fluorral módosított TiO<sub>2</sub> fotokatalizátor előállítása és alkalmazása

## *Preparation of nitrogen and fluorine co-doped TiO<sub>2</sub> catalyst*

Papp Antónia, Szabóné Bárdos Erzsébet, Horváth Ottó

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék  
8200 Veszprém, Egyetem utca 10.  
pappantonia@gmail.com

Az egyre növekvő népesség, a fokozódó ipari és mezőgazdasági termelés jelentősen terheli vízkészleteinket. Hazánkban a legelterjedtebb az eleveniszapos szennyvíztisztítás. Hátránya, hogy a perzisztens vegyületek esetenként nem távolíthatóak el hatékonyan. Ezért fontos a kémiai úton végrehajtott víztisztítási technológiák fejlesztése, majd gyakorlati alkalmazásuk. Az utóbbi évtizedekben kidolgozott, úgynevezett nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közös alapja, hogy fotolízissel vagy kémiai úton nagy reakciókészségű gyököket állítanak elő. A *heterogén fotokatalízis* alkalmazása mellett szól, hogy a szennyezések számos esetben a természetben is fotokémiai reakciókban bomlanak le. Az elmúlt fél évszázadban fotokatalizátorként leggyakrabban a TiO<sub>2</sub>-ot alkalmazták. E környezetbarát félvezető erős fotooxidációs képességgel rendelkezik, valamint kémiai stabilitása is figyelemre méltó. Hátránya, hogy széles a tiltott sávja, s emiatt csak UV fényel gerjeszthető. Az elmúlt néhány évtizedben széleskörű kutatás folyt annak érdekében, hogy a titán-dioxidot úgy módosítsák, hogy az a láthatótartományban is aktív legyen [1]. Egyik lehetséges eljárás, ha módosítjuk a katalizátor kristályrácsát; e célra főként valamilyen fémet használnak, de nemfémes elemekkel is adalékolható. Leggyakrabban a p-mező elemei közül a bór, a szén, a nitrogén, ritkábban a fluor vegyületeivel módosítják a katalizátort. A tiltott sávban új energiasávok kialakulása várható, melyek a töltés-rekombinációhoz szükséges időt növelik, illetve az alacsonyabb energiájú foton elnyelését is elősegítik, s ennek következtében a katalizátor a látható tartományban is fotoaktívvá válhat [2].

Nitrogénnel és fluorral módosított katalizátorokat állítottunk elő szolvotermális kezeléssel kombinált szol-gél módszerrel. TiO<sub>2</sub> prekursoraként titán(IV)-izopropoxidot használtunk, N-forrásként karbamidot, míg F-tartalmú reagensként ammónium-fluoridot vittünk be a rendszerbe. A lebontási kísérletekben oxálsav fotodegradációját vizsgáltuk ultraibolya és látható tartományban. A fotoindukált folyamatban képződő hidroxilgyökök mennyiségét kumarin gyökbefogóval határoztuk meg.

Kísérleti eredményeink alapján megállapítottuk, hogy bár a szol-gél eljárással készült TiO<sub>2</sub> katalizátor aktivitása kisebb, mint a Degussa P25 katalizátoré, ugyanakkor a N-t és F-t egyaránt tartalmazó katalizátor aktivitása nagyobb, mint a standard katalizátoré az UV tartományban. Látható tartományban a fotoaktivitásuk csekély mértékű.

A kutatás anyagi háttérét a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 és az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 pályázatok biztosították.

[1.] O. Elbanna, P. Zhang, M. Fujitsuka, T. Majima: *Appl. Catal. B. Environ.*, 2016, 192, 80-87

[2.] J. Cheng, J. Chen, W. Lin, Y. Liu, Y. Kong: *Appl. Surf. Sci.*, 2015, 332, 573-580

## **Fermentation profile of different yeast strains on sour cherry**

**Pham Minh Tuan, Mohan Malkani Anbalagan, Fanni Hegedűs, Réka Varjú,  
Quang D. Nguyen**

*Szent Istvan University, Faculty of Food Science, Research Centre for Bioengineering and  
Process Engineering, 1118 Budapest, Ménési út 45., Hungary*

---

### **Summary**

Palinka is the famous spirits in Hungary. It is usually made from peach, apple, apricot, cherry, etc. Sour cherry (*Prunus avium*) is a wild species of cherry and can serve as good raw material for palinka production. No doubt that aroma and quality of palinka are strongly influenced by yeast strain applied. The aim of this study was to compare the effectiveness of four commercial yeast strains including PM, CM, SLO and CGC 62 (Uvaferm<sup>®</sup>) in production of palinka from sour cherry. Sugars, alcohol, methanol content and volatile compounds were analysed with gas chromatography (GC-FID) and HPLC (LC-RI-PDA). At the end of fermentation, the alcohol contents in fermented mash were 5.3, 5.25, 5.4, 5.25 (v/v) % for MP, CM, SLO and CGC yeast strains, respectively. The results indicate that SLO achieved more effectively than other commercial yeasts. Fermentation of sour cherry using this strain touch two days shorter than with other commercial yeasts. Moreover, the highest alcohol content (5.4% vol), low methanol content and high volatile contents were achieved. Additionally, the pre-treatment of the sour cherry mash adversely affected the volatile compounds in the fermented mash. Pre-treatment led to higher content of methanol, 2-methyl-1-butanol, but lower ethanol and total esters. Moreover, pre-treatment method also had positive impact in eliminating the isoamyl alcohol formation in the sour cherry mash during fermentation. Also, the volatile acidity was much reduced in pre-treatment method. Our results can serve the basic to develop standard palinka production for sour cherry raw material.

---

Keywords: palinka, cherry, fermentation, yeast.

# Ultrahangos kavitáció alkalmazása használt termálvíz csírátlánítására

## *Disinfection of thermal water by ultrasonic cavitation*

**Pozsgai Emília, Németh Zsolt, Bíró Ildikó, Galambos Ildikó**

<sup>1</sup>*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Soós Ernő Víztechnológiai Kutató-Fejlesztő Központ  
8800 Nagykanizsa, Zrínyi Miklós utca 18.*

<sup>2</sup>*Nemzeti Közszolgálati Egyetem, Fenntartható Fejlődés Tanulmányok Kabinet,  
1083 Budapest, Ludovika tér 2.*

---

Az ultrahangos kavitáció széles körben alkalmazott módszer elfolyó vizek tisztítása céljából. Szakirodalmi adatok alapján a kavitációs reaktort alacsony frekvencián (20-35 kHz) működtetve is jelentős mértékű csírátlánítás érhető el. A módszer hatékonysága egyéb kémiai (például hidrogén-peroxid adagolása) vagy fizikai (például UV sugárzás) eljárás alkalmazásával növelhető. Munkánk során elfolyó termálvizek csíraszámcsökkentését célozzuk meg. Dolgozatunkban ismertetjük a kavitációs eljárásokat, kutatási tervet és előzetes eredményeket mutatunk be.

Acoustic cavitation is an useful tool for disinfecting effluent waters. Based on former investigations, lower operating frequency (20-35 kHz) is able to reduce the amount of CFUs in water. The efficiency of the method could be increased using further chemical (e.g. hydrogen-peroxide) or physical (e.g. UV irradiation) tools. We aim to reduce CFUs of effluent thermal water. In this study, we present cavitation methods, research plan and preliminary results.

---

## **Bevezetés**

A kavitáció inkompresszibilis közegekben általában hirtelen nyomásesés hatására pontokban létrejövő jelenség, melynek során a közegben annak lokális "szétszakadása" során többnyire mikroszkopikus, néhány vagy néhány száz mikrométer átmérőjű üregek képződnek. Ezen üregek a gerjesztésüktől függően hosszabb-rövidebb ideig léteznek, vizes oldatokban ez az időtartam tipikusan néhány mikroszekundumtól másodperces időtartamokig terjedhet [1.]. A kavitációs üregek összeomlása során általában magas hőmérsékletek (~10 000 K) és nyomások (~500 bar) állhatnak elő lokálisan, melyek a folyadékban fizikai és kémiai változásokat eredményeznek [2.]. A jelenség széles körű alkalmazásai közül egyik a fertőtlenítés, melynek során a kavitációs mikrobuborékok összeomlásával pusztítunk el különböző mikroorganizmusokat. Ennek jelentősége főleg abban áll, hogy az eljárás nem csak optikailag átlátszó folyadékokra alkalmazható, mint az általában jóval kevésbé költséges UV fertőtlenítés, hanem kolloid oldatokra, sőt, teljesen átlátszatlan (pl. szennyvíziszap) oldatokra is.

Az eddigi tapasztalatok [3., 4.] azt mutatják, hogy ultrahangos kavitációval hatékonyan csökkenthető a szennyvizek, fürdővizek csíraszám, illetve a kavitáció alkalmazásával a fürdővizekben fertőtlenítésre alkalmazott klór vagy más fertőtlenítőszer mennyisége. Ultrahangos kezelést jellemzően előkezelésként alkalmaznak az elfolyó szennyvizek tisztításakor, például kombinált eljárásokban a nagyméretű szilárd alkotórészek eltávolítására használt homokszűrők kiváltására.

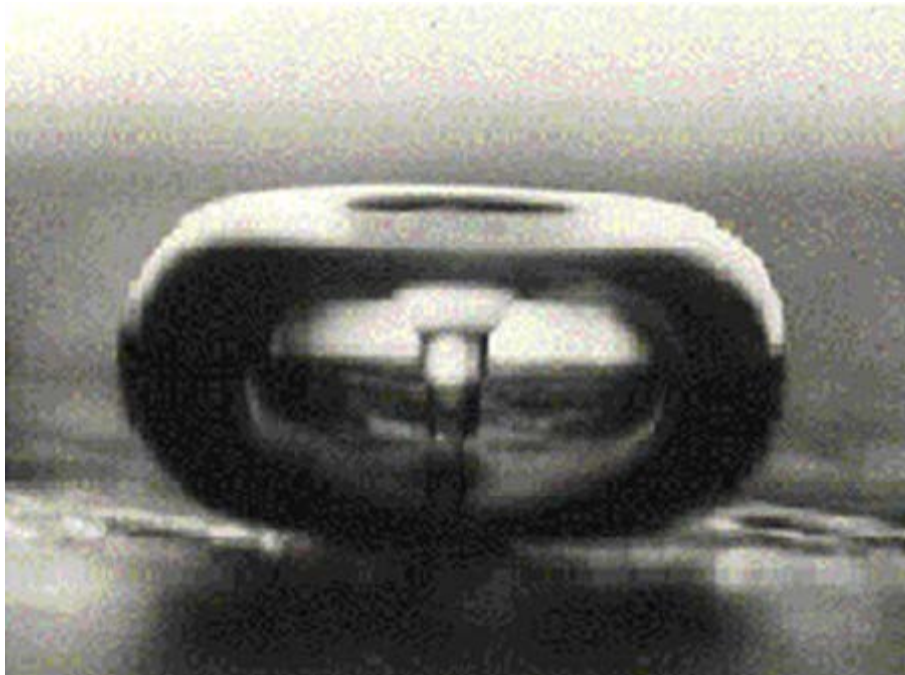
## **A kavitáció jelensége, a kavitációs eljárások technológiai háttére**

Ugyan a kavitáció jelenségének kutatása több mint száz évre tekint vissza, elméleti leírására való első, a fenomenológia szintjén próbálkozás pedig még a múlt század elején történt [1.]. Ennek ellenére az azóta eltelt idő sem volt elég egy egységes, a tapasztalt jelenségeket leíró, átfogó mikroszkopikus elmélet megalkotására (hasonlóan a klasszikus sokrészeskerendszerek elsőrendű fázisátalakulásaihoz). Az évszázad során felhalmozódott tudás azonban mégis közelebb vitt bennünket a jelenség jobb megértéséhez és sokrétű alkalmazásainak vált alapjává.

A kavitáció során a folyadék belsejében kisebb üreg, buborék keletkezik, mely vagy gyorsan, pár mikro- vagy milliszekundum alatt bezárul (tranzien kavitáció), vagy a környezeti feltételektől függően akár hosszabb ideig,

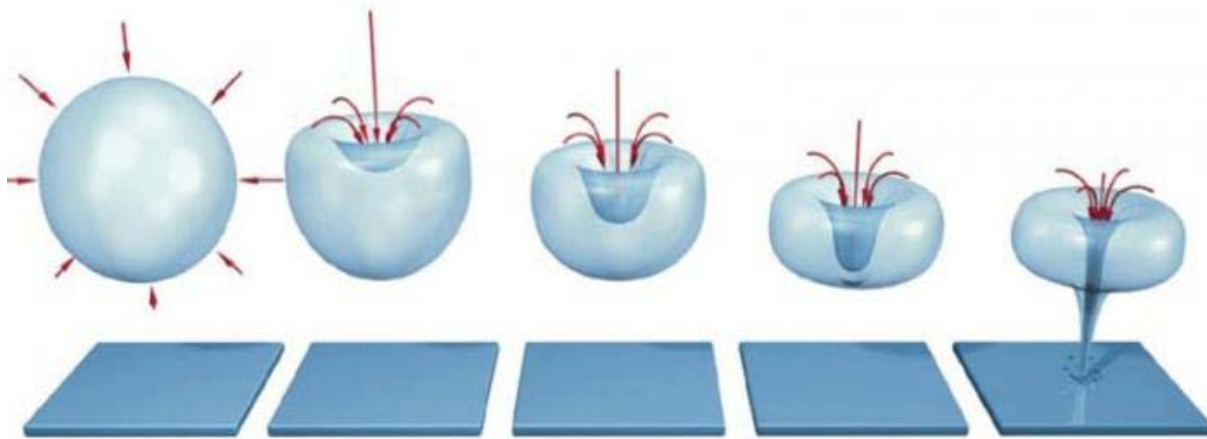
esetleg másodpercekig is képes fennmaradni. Ez utóbbi, stabil kavitációnak nevezett jelenség számunkra nem bír további jelentőséggel, ezért a tranziens, átmeneti kavitációval foglalkozunk.

A tranziens kavitációs üreg esetén nincs idő a folyadék molekuláinak, vagy más, a folyadékban lévő részecskéknak gőz, vagy szilárd formában nagyobb mennyiségben bejutni a kavitációs buborék belsejébe, ezért a buborékot létrehozó feltételek megszűnése után az rendkívül gyorsan, néhány mikroszekundum alatt bezárul. Ez az összeomlás (implózió) általában a folyadékban található inhomogenitások következtében mintegy "spontán szimmetriasértés" mellett kis túszerű nyálábbá alakulva megy végbe (1. ábra). A nyáláb sebessége a mérések szerint a normál állapotú vízben is kb. 100 m/s nagyságrendű [5.], ami hatalmas mechanikai nyírást eredményezve roncsolja el a környezetben található mikroszkopikus és makroszkopikus struktúrákat. A tranziens buborék gyors implóziójának másik eredménye a hőhatás, melynek során az összeomlás kis környezetében, néhány milliszekundum ideig akár több ezer Kelvin hőmérséklet is előállhat [1.]. Ezek a hatások a folyadékban szabadgyökök (például vízben hidroxilcsoportok) keletkezéséhez vezethetnek, melyek további kémiai reakciók során stabilizálják újra energiaállapotukat. Az így katalizált reakciókkal a szonokémia tudománya foglalkozik, hiszen a kavitációs buborékok keltésének egyik leggyakrabban alkalmazott módja az inkompresszibilis közeg hanggal, vagy ultrahanggal való besugárzása (akusztikus kavitáció) [6.]. Az iparban szintén gyakran alkalmazott típusa a hidrodinamikai kavitáció (nyomás hatására gerjesztett); további kevésbé ismert típusai az optikai kavitáció (nagy intenzitású fény hatására gerjesztett) és a részecske kavitáció (nagy energiájú részecskék bombázásával gerjesztett) [6.].



**1. ábra.** Összeomló kavitációs buborék [7.]

A kavitációs buborékok összeomlásának egyik mechanikai oka a buborékok szférikus szimmetriájának megszűnése, mely jórészt a folyadékban jelen lévő inhomogenitásoknak, határfelületeknek köszönhető. Ilyen inhomogenitások lehetnek egy emulzió vagy szuszpenzió részecskéi, melyek irányából a folyadék a buborék méretcsökkenési szakaszában lassabban áramlik vissza a buborék középpontja felé. Ekkor a buborék két végének sebességkülönbsége miatt a szférikus szimmetria sérül és a gyorsabb vég folyadékrészecskéi behatolva a buborékba kis folyadéknyaláb (jet) formájában mintegy átdöfik a buborékot a lassabb vég (vagyis az inhomogenitás) irányába (2. ábra).



2. ábra. Kavitációs buborék roncsolási iránya [8.]

A buborékok ezen okból tehát elsősorban az inhomogenitások irányába "sülnek el" vagyis a nagy sebességű (például normál állapotú vízben 90-110 m/s) jet keltette mikroáramlások éppen ezen inhomogenitásokat fogják szétroncsolni. A jelenség közismert a szivattyútervezőktől a hajócsavar-konstruktőrökig viszonylag széles körben, hiszen nem megfelelő kialakítás esetén a kavitációs károk bemaródások formájában a legkeményebb fémötvözeteket is képesek tönkretenni. Azonban ez – a mérnöki gyakorlatban általában nem kívánt mechanikai hatás – például a mikroorganizmusok elroncsolására rendkívül hatékony.

#### A kavitációs eljárás hatásfokának növelése

A kavitáció jelenségét a kezelendő folyadéktest összetétele, hőmérséklete, az ultrahangos kezelés időtartama, a kezelés folytonossága (folytonos vagy szakaszos), a kezeléskor alkalmazott frekvencia és intenzitás, továbbá az ultrahangos kezeléshez csatolt más addicionális fertőtlenítő eljárás (például  $H_2O_2$ ,  $NaClO$ ,  $O_3$ ), katalizátor (például  $TiO_2$ ,  $CuO$ ), UV sugárzás, elektrolízis, valamint az ultrahangreaktor felépítése befolyásolja [9., 10., 11., 12.].

Az ultrahangos kezelés alkalmazása (önállóan vagy kombinált eljárásban) az oldatot alkotó szilárd összetevők dezaggregálása következtében a szemcseméret csökkenését eredményezi [4.]. Ez a módszer egyik előnye, hiszen az eltömődés ("fouling") mértékének csökkentése nyomán nagyban hozzájárul a további csatolt, kis szemcseméret-tartományban alkalmazható membránszűrési műveletek hatékonyságának fokozásához. A módszer nagyméretű részecskék ( $>50\mu m$ ) dezaggregálására már kis intenzitású ultrahang alkalmazásával is kiválóan alkalmas [4.]. Alacsony, valamint magas intenzitású ultrahangos kezeléseket esetében csekély különbség mutatkozik az átlagos szemcseméret-csökkenés tekintetében. Ez a megfigyelés kiemelt jelentőséggel bír, hiszen a kavitáció épp az alacsony frekvenciájú ultrahangos kezelés esetében nagyobb mechanikai hatásfokú: nagyobb átmérőjű buborékok képződnek, melyek összeomlása mikroszkopikus méretű, de rendkívül intenzív folyadékáramlást idéz elő. A nagy energiájú áramlás hatására mechanikai igénybevétel éri a szilárd részecskék felületét, mely sérülést okoz, megbontja azokat.

A mikroorganizmusok kavitáció útján történő roncsolása több tényező függvénye: függ a koncentrációjuktól, a morfológiai jellegüktől, a sejtfalvastagságuktól [13.]. A mikroorganizmusok roncsolása a gázbuborékok robbanása következtében támadó nyomás, a sejten belül kialakuló nyírófeszültség, valamint szabadgyökök okozta kémiai oxidáció együttes eredménye [12.]. A mikroorganizmusok számának csökkentésére az alacsony frekvenciájú (20-35 kHz) ultrahangos kezelés bizonyul hatásosnak [11.,14.], hiszen ebben a frekvenciatartományban dominál a termikussal szemben a mechanikai hatás. Egyes esetekben a kezelés során megfigyelték, hogy a csíraszám a besugárzási dózis függvényében nem lineárisan csökken. A részleges csíraszám-növekedés a szilárd alkotórészekből és mikroorganizmusokból álló aggregátumok megbontásának, majd a csíraszámcsökkenés a mikroorganizmusok roncsolásának tulajdonítható [12.].

A fertőtlenítés mértékének fokozása céljából további fizikai vagy kémiai kiegészítő kezelést alkalmaznak. Ezek közül a hidrogén-peroxidos kezelés széleskörűen elterjedt. Hidrogén-peroxiddal kezelt kútvíz vizsgálata



alapján kimutatható, hogy már igen kis mennyiségű (5 mg/l) hidrogén-peroxid adagolásával is jelentős hatásfokjavulást lehet elérni ultrahangos kavitáció alkalmazása esetén (nagyobb mennyiségű (150 mg/l) vegyszeradagolás esetén nem mutatkozik jelentős hatásfok-növekedés) [15.]. Szakirodalmi adatok alapján [15.] ultrahangos kavitáció alkalmazása nélkül adagolt 5 mg/l hidrogén-peroxid 15 perc kezelési időt követően közel 10-20%-al, 60 perc kezelést követően közel 20-30%-al képes csökkenteni az összes coliform, fekális coliform, illetve fekális enterococcus csíraszámát. Ultrahangos kezelés (20,5 kHz) mellett adagolt 5 mg/l hidrogén-peroxid ugyanakkor jelentősebb csíraszámcsökkenést (65-90%) eredményez a nevezett törzsekre nézve már a 15. percben, majd a 60. percben azok teljes elroncsolását eredményezi a mintában.

### **Ultrahangos kavitáció alkalmazása a termálvízkezelésben – a kutatás célja**

Termálvizek vizsgálatakor kulcsfontosságú paraméter a víz viszonylag magas hőmérséklete. A kezelt közeg hőmérsékletének növelésével a kavitáció intenzitásának növekedése mutatható ki [10]. Ennek oka elsősorban a víz viszkozitásának erős hőmérsékletfüggésével magyarázható a 278-293 K hőmérsékleti tartományban. A kavitáció jelenségének hőmérsékletfüggéséről termálvizekben rendkívül kevés megfigyelés született. Ez alapján iránymutatóak lehetnek a termálvízminták csíraszámváltozására irányuló vizsgálataink. Kísérleteink során célunk az elfolyó, terhelt termálvizek csíraszámcsökkentése vegyszeradagolással kombinált kavitációs eljárással, melynek során vizsgáljuk: a hőmérséklet, a hullámhossz-változtatás, a kavitációs kezelés időtartam-változtatás, valamint a kiegészítő vegyszeradagolás hatását a terhelt vizek mikrobiológiai összetételére. Hosszútávú céljaink között magas hőmérsékletű közegben történő kavitációs eljárással működő csíramentesítő prototípus-fejlesztés szerepel. Vizsgálatainkat laboratóriumi, majd félüzemi méretben tervezzük folytatni. Laboratóriumi körülmények között egy dunántúli gyógyfürdőből származó elfolyó termálvíz minták kezelését kezdtük meg. A kavitációs reaktorban kezelt minták spektrofotométeres fényintenzitás-elemzését és zavarosság mérését végezzük el az összcsíraszám meghatározása mellett.

Kísérleteink első szakaszában az ultrahangos kavitációnak önállóan, illetve a hidrogén-peroxiddal és UV sugárzással együtt kifejtett hatását tanulmányozzuk különböző kezelési dózisok és vegyszer-koncentrációk alkalmazása mellett. A hidrogén-peroxid alkalmazása fürdővizek csírátlánítására azért előnyös, mivel jobb tárolhatósága mellett munkavédelmi szempontból a klórgáznál jóval kisebb kockázattal jár. Széles körben elterjedt az UV sugárzás alkalmazása az ultrahangos rendszerben, melynek hatásfokát nagyban befolyásolják a nagyméretű szilárd alkotórészek, (i) melyek felületén szóródnak az UV sugarak, továbbá (ii) a szilárd alkotórészek aggregátumokat képezhetnek biológiai szennyezőkkel (pl. baktériumok), ezáltal gátat szabhatnak az UV sugárzás és a baktériumok közvetlen érintkezésének, így feltétlen szükséges az aggregátumok ultrahangos előkezelés során történő megbontása [13.].

Első eredményeink alapján – összhangban a szakirodalmi adatokkal [12.,15.] az ultrahangos kezelés (30 °C vízhőmérséklet, 40 kHz frekvencia, 90 perc kezelési idő) a baktériumtelepek számának csökkenését eredményezi, míg hidrogén-peroxid (5 mg/l) adagolása mellett a fertőtlenítő hatás nagyban fokozható. Különös figyelmet érdemel, hogy önállóan alkalmazott ultrahangos kezelés esetében a vízminta zavarosságának nagyságrendi növekedését tapasztaltuk (3. ábra), mely okának feltárására mikrobiológiai vizsgálatokat tervezzük.



**3. ábra.** Termálműzmminta zavarosságának növekedése (bal oldal: Erlenmeyer lombikban nyers víz; jobb oldal: kavitációs berendezésben kezelt víz) kavitációs kezelést követően

Összefoglalva elmondható, hogy a kezdeti kísérletek alapján a kavitációs eljárás alkalmazásával a felhasznált fertőtlenítő vegyszer adagolása csökkenthető, a kavitáció optimális műveleti paramétereinek meghatározása további vizsgálatokat igényel.

### **Köszönetnyilvánítás**

Köszönet az EFOP-3.6.1-16-2016-00015 projekt anyagi támogatásáért.

### **Felhasznált irodalom**

- [1.] Suslick, K.S., Didenko, Y., Fang, M.M., Hyeon, H., Kolbeck, K.J., McNamara III, W.B., Mdeleleni, M.M., Wong, M., *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A.*, 335-353 (1999)
- [2.] Suslick, K.S. (ed.), *Ultrasound: its chemical, physical, and biological effects*. New York: VCH, 138-262 (1988)
- [3.] Maslak, D., *Disinfection mit hydrodynamischer Kavitation und Chlordioxid*. TU München, *Dissertation*, 197 p. (2010)
- [4.] Blume, T., Neis, U., *Combined Wastewater Disinfection Using Ultrasound*. IWA World Water Congress, 7-12 April 2004, Melbourne, Australia (2004)
- [5.] Lauterborn, W., Hentschel, W., *Ultrasonics*, 23 (6), 260-268 (1985)
- [6.] Pandit, A.B., Mukherjee, A.C., Kasat, G.R., Mahulkar, A.V., *Method of designing hydrodynamic cavitation reactors for process intensification*. Szabadalmi bejelentés, EP2285482 (2011)
- [7.] Cobley, A.J., Mason, T.J., *Circuit World*, 33, 29-34 (2007)
- [8.] <http://www.mcor.net/mcorabilities/mcorabilites-for-pumps-fluid-flow/cavitation-solution/> (Utolsó látogatás: 2017.03.19.)
- [9.] Antoniadis, A., Poullos, I., Nikolakaki, E., Mantzavinos, D., *Journal of Hazardous Materials*, 146, 492-495 (2007)

- [10.] De Giorgi, M. G., Ficarella, A., Tarantino, M., *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 39, 160-172 (2013)
- [11.] Joyce, E., Phull, S.S., Lorimer, J.P., Mason, T.J., *Ultrasonics Sonochemistry*, 10, 315-318 (2003)
- [12.] Naddeo, V., Cesaro, A., Mantzavinos, D., Fatta-Kassinos, D., Belgiorno, V., *Global NEST Journal*, 16 (3), 561-577 (2014)
- [13.] Blume, T., Neis, U., *Improved wastewater disinfection by ultrasonic pre-treatment*. 3rd Conference on Applications of Power Ultrasound in Physical and Chemical Processing, 13-14 December 2001, Paris, France (2001)
- [14.] Hua, I., Thompson, J.E., *Water Research*, 34, 3888-3893 (2000)
- [15.] Jyoti, K.K., Pandit, A.B., *Ultrasonics Sonochemistry*, 10, 255-264 (2003)

# **Biológiai úton előkezelt búzakorpa alkoholos erjesztése mono- és vegyes kultúrák alkalmazásával**

*Fermentation experiments on biological pretreated wheat bran with mono- and co-cultures*

**Puhl Dóra, Farkas Csilla, Rezessyné Szabó Judit, Nguyen Duc Quang**

*Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi Kar, Sör- és Szeszipari Tanszék*

*1118 Budapest, Ménesi út 43-45.*

---

## **Summary**

In Hungary, lignocellulosic materials from agro industrial activities (corn cob, sunflower stalk, wheat straw, wood-chips etc.) with a high content of carbohydrates are generated annually in large quantities, which may serve potential sources for production of bio-fibres, enzymes, antioxidants, ruminant feed, bio-pulp or even of bio-fuels. The carbohydrate polymers, mainly cellulose and hemicellulose, as well as aromatic lignin components in plant cell walls form heterogeneous and resistant structure. Among the pre-treatment processes, the most popular are combined methods for effective digestibility of the materials, though the pure biological pre-treatment is safer and more environmentally. However, it requires more time and the efficiency of bio-degradation is lower than at others. The aim of this study was to improve the reduced soluble carbohydrates content using lignocellulolytic filamentous fungal consortium of *Aspergillus niger* NCAIM F.00632, *Penicillium chrysogenum* NCAIM F.00913, *Trichoderma viride* NCAIM F.00795 on wheat bran, as model substrate and examine the efficiency of ethanol production by yeast and bacteria strains, as Levuline Fb type dried *Saccharomyces cerevisiae*, *Kluyveromyces marxianus* NCAIM Y.00959 and *Zymomonas mobilis subsp. mobilis* NCAIM B.01327<sup>T</sup>. The results indicate that filamentous fungal consortium showed the highest soluble carbohydrates content with 196 g.l-1 in 24-48 hours of bio-degradation at 10 % (w/v) wheat bran, 60:25:15 percent of initial conidia ratio with 10<sup>5</sup> conidia per gram dry substrate, liquid to solid ratio of 5:1, pH 5.0 and 30°C. Further increase in fermentable sugar content was reached after enzymatic saccharification using industrial enzymes, as cellulase and cellobiase (Sigma-Aldrich, Austria) in ratio of 3:3, at pH 5.5 and 55 °C. The reduced carbohydrates content was about 2-3 times more, and glucose content was 87.82 g.l-1, approximately. The mono-culture fermentation of pretreated wheat bran by *Kluyveromyces marxianus* NCAIM Y.00959 reached 5.6 %, V/V of ethanol at 144 hours. An increased ethanol concentration was obtained by co-culture of two yeast strains in ratio of 1:1, where ethanol concentration was about 6.7%, V/V. Although the experiments showed promising results, we still need further research in this area.

# Izopropil-alkohol előállító üzem operátor tréning szimulátorának megalkotása

*Development of operator training simulator for isopropyl alcohol producing plant*

**Puskás János, Egedy Attila**

*University of Pannonia*

*Egyetem str. 10, Veszprém, H-8200, HUNGARY*

---

## **Summary**

In this study an operator training simulator was developed for isopropyl-alcohol producing plant. The product of this plant is isopropyl alcohol - water azeotrope, by-product is diisopropyl ether which are formed by direct hydrolyzation of propylene via strong acid cation exchange resins. At first the plant was designed using a stationary process simulator. Honeywell's UniSim® Design was used for it and further works. The next step was the development of the dynamic simulator and the control system. Data for this simulator was provided by the stationary simulator. The dynamic simulator contains the preheater subsystems and the reaction subsystem. Finally, an operator screen was developed and connected to the dynamic simulator via UniSim Excel Interface Tool. This operator training simulator could be used for analysis and optimization moreover it also might be used in education.

## **Összefoglaló**

Munkánk során egy izopropil-alkohol előállító üzem operátor tréning szimulátorát alkottuk meg. A tervezett üzemből propilén közvetlen hidratálása történik erősen savas kationcserélő gyanta katalizátor jelenlétében; főterméke izopropil-alkohol – víz azeotróp, míg a kísérőterméke diizopropil-éter. Az első lépésként az üzemet terveztük meg annak stacioner szimulátorával, melyhez a Honeywell UniSim® Design szimulátorát használtuk. A következő lépésben a stacioner szimulátor által szolgáltatott adatok segítségével leképeztük a dinamikus szimulátort, mely tartalmazza az előmelegítő és a reakciós alrendszereket, valamint az irányítórendszert. Végül pedig az operátori képernyőt képeztük le, és UniSim Excel Interface Tool segítségével össze tudtuk kapcsolni a képernyőt a szimulátorral. Az így kapott operátor tréning szimulátor alkalmas analízisek és optimalizálási feladatok elvégzésére, továbbá alkalmas lehet az oktatásban történő használatra.

---

## **Introduction**

In the chemical industry and many other industries process simulators are increasingly used, due to their versatile application. These are such model based programs which could be used for design technologies, development, analysis and optimization. Due to the precise reproduction of the plants these simulators have to use such models which based on reliable physical phenomena including transfer processes, thermodynamics, reaction kinetics, etc. Moreover, the simulator is composed of basic operation units – valves, vessels, pumps, heat exchangers, etc. – in combination with the suitable fluid package – to determinate the state equations for calculations of the physical and thermodynamic properties [1, 2].

The control of a chemical technologies needs such professionals who have got the proper experience. It is estimated that billion dollars are lost annually in the process industry due to operator errors made during hazardous situations. The operator training simulators (OTS) can be used for training the operators, prepare them to control the technology and solve different problems via simulations. These simulators contain the dynamic simulator of the process and the distributed control system (DCS) connected to an operator screen. This screen is used as interface of these programs, which is the same as the plant's but these are linked with process simulators instead of real technologies. Operators could get enough experience training on these simulators to control the technology safely and effectively [3, 4].

The OTS are computer aided practicing and developing systems which contains the dynamic simulator of the technology and the controlling system furthermore the operator screen. Beginner operators and engineers can be

trained using OTS instead of interfering the plant. Moreover, they can be used for optimization, analysis and development of the technology as engineering tasks [4].

There are two kind of OTS's: stimulation and emulation OTS. The first is plant specified, which means the operator screen of the OTS is the same as the plant's. It might be used to train beginner operators. The emulation OTS is technology specified and can be used by engineers. The advantage of this kind OTS needs fewer resources than the stimulation one. This is due to the simulator of the control system is integrated to the process simulator [3 ,4].

The isopropyl alcohol (IPA) is a widely-used solvent, detergent and disinfectant. It is also used as intermedia in pharmacology and acetone producing. The most common technology for IPA production is the hydrolyzation of propylene. At the beginning sulphuric acid was used as catalyst, but nowadays the direct hydrolyzation is preferred due to the lower environmental polluting effect. The catalysts of these reactions are acidic component which are bounded to solid support such as phosphoric acid, silico tungstic acid or strong acid cation exchange resins. Two main reactions (1-2.) can be wright down the formation of the product and the by-product which is diisopropyl ether (DIPE) [5].



The equilibrium constants of these reactions were described with Arrhenius-type equations (3-4.) [6].

$$K_1 = 5.29 \cdot 10^{-6} \cdot \exp\left(-\frac{55.0}{R \cdot T}\right) \quad (3)$$

$$K_2 = 8.55 \cdot 10^{-2} \cdot \exp\left(-\frac{10.8}{R \cdot T}\right) \quad (4)$$

These equilibrium reactions might be shifted in the direction of the product with applying higher temperature and pressure, moreover acidic catalyst. The sample for our work was the Deutsche Texaco technology. The reason of the decision was that direct hydrolyzation is applied, furthermore the use of special construction material is not justified due to the reaction condition is not extreme (130-160 °C and 8-10 MPa). The conversion (0.75) and the selectivity (0.92-0.94) is also acceptable [5].

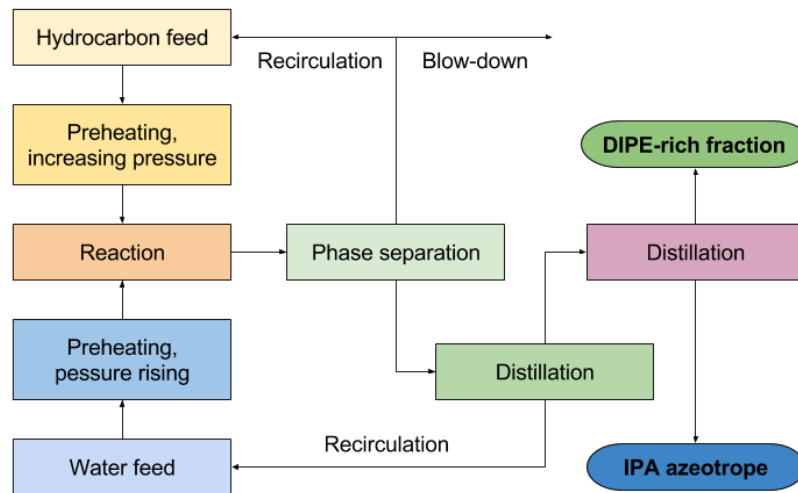
### **Development of OTS**

To create an OTS, dynamic simulator of process and control system is necessary as long as the operator screen. At first, we had to get the plant data, due to lack of this we developed a stationary simulator to estimate them for the dynamic simulator. In this study an emulation OTS was developed so the control system is integrated to the process simulator. The final step is the creating the operator screen and the connection of it to the process simulator.

#### ***Stationary process simulator***

The plant processes 600 kmol per hour propylene. The feed is propylene with 92% (mol percentage) purity because of the propane content and the and water (100% purity). The pressure of the hydrocarbon feed is 15 bar and its temperature is 25 °C. The pressure of the water feed is 3 bar and its temperature is 25 °C. The reactor pressure 80 bar, the temperature is 160 °C. The water-propylene mass rate in the reactor is 14:1, with 0.8 h<sup>-1</sup> LHSV. A separator is applied to recover the unreacted hydrocarbons from the reaction mixture. A part of it shall be blowed-down, another part shall be recirculated. Most of the water is separated from the liquid phase of the mixture in the first distillation column. In the second distillation column, the product is separated from the by-

product. The main product of this plant is IPA azeotrope, the by-product is DIPE-rich fraction. The process of the technology is shown in the block diagram below (Fig.1).



**Figure 1.** The block diagram of the IPA azeotrope producing process.

Honeywell's UniSim® Design was used to develop this technology to a stationary simulator. This is an intuitive process modeling software that helps engineers create steady-state and dynamic models for plant design, performance monitoring, troubleshooting, business planning, and asset management [2].

#### ***Dynamic process simulator***

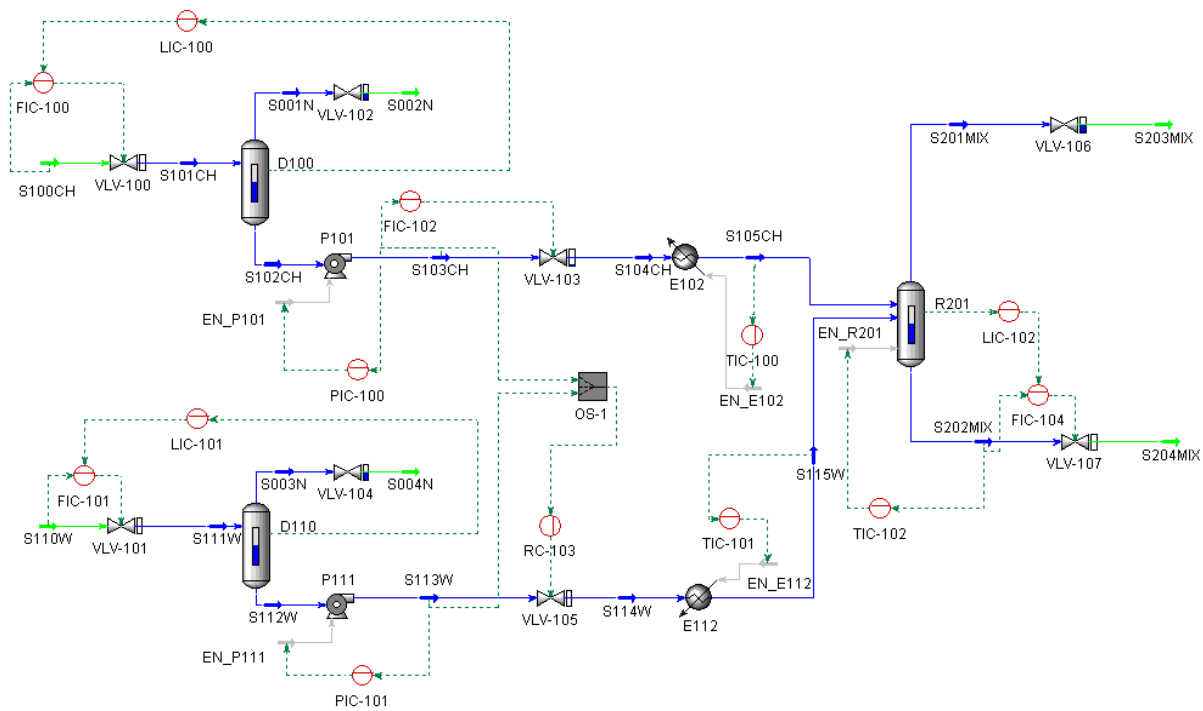
The dynamic simulator was developed simultaneously with the control system for the preheaters and the reaction subsystems. In every case PI controllers were applied which were tuned with the built-in Auto Tuner. However, in some cases manual tuning was necessary for the optimal working of the controllers. The process flow diagram of the dynamic simulator with the controlling system is shown below (Fig.2). In this simulator, we applied controllers for mass flow, pressure, temperature, vessel liquid level.

This dynamic simulator is also suitable for analysis and optimizing the technology. However, using a unique operator screen might be made the work more convenient. For example, Users should switch between many windows during their work, moreover the evaluation of the result could be complicated.

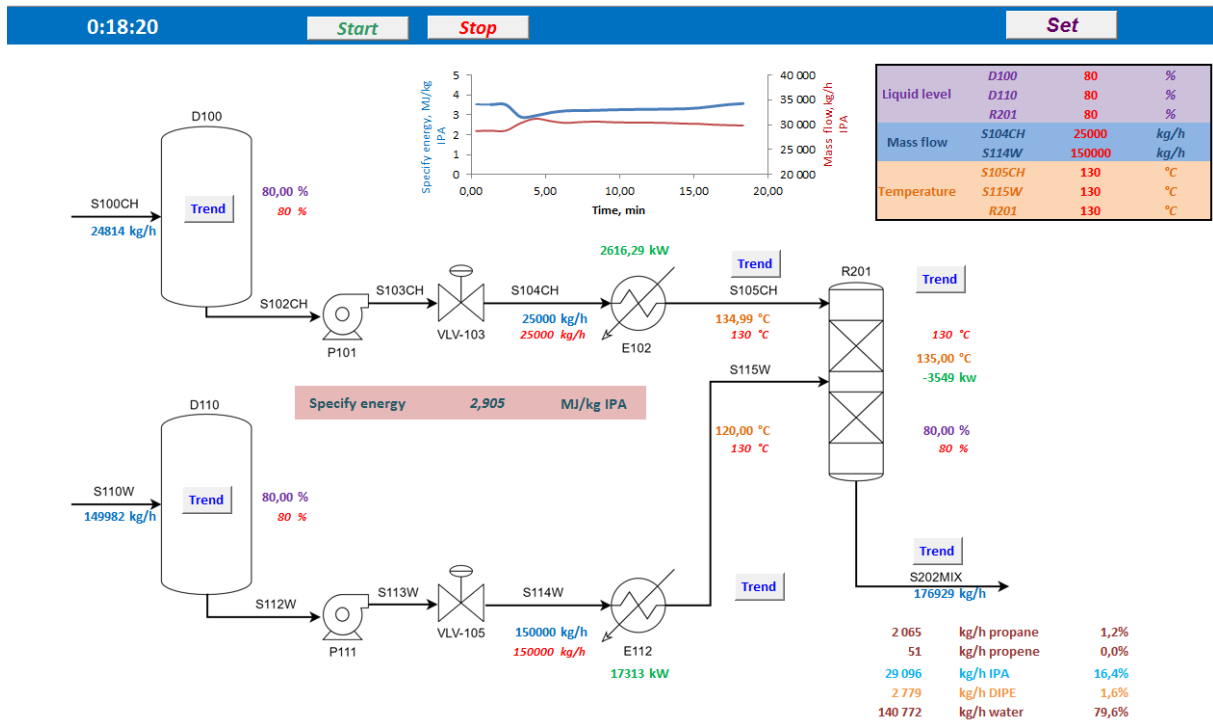
#### ***Operator screen***

The operator screens (OS) of plant specified OTS are the same as used for plant controlling. This is for the operators to learn on the same platform as they work on. In our study the OTS was developed for engineer application, but the OS is such important. To develop the OS Microsoft Excel was used. This is a spreadsheet developed by Microsoft. It features calculation, pivot tables, graphing tools, and a macro programming language called Visual Basic for Applications (VBA). Due to these features the OS could be created without deep programming knowledge.

The main property of the streams, equipments are shown in this screen and the User can set the set point of the controllers via this OS. It has got two kind of subscreens: the actual properties are displayed, the set points, and the graph of specify energy – the energy needed to produce one kilogram IPA – could be set in the first subscreen (Fig.3), the graphs contained the properties of each streams or equipments change over the time are shown the second subscreens (Fig.4). The second subscreens might be called with the “Trend” buttons next to the actual stream or equipment.



**Figure 2.** The dynamics process simulator with the controlling system.



**Figure 3.** The first subscreen of the OTS which contains the PFD of the simulator, the main properties, the set points and the time of the simulation.

### Connection between the screen and the simulator

UniSim Excel Interface Tool was used to make connection between the dynamic simulator and the operator screen. UniSim Excel Interface Tool is an Excel based tool that works with UniSim Design. It has two modes of



operation: Excel based case study, and a series of in cell custom formulae that can be used to set up Automation links between UniSim Design and Excel without the user needing to write any Automation code. The tool provides a graphical front end to simplify the set-up of the case study and the writing of these functions.

The main two functions are getting property data from UniSim to Excel and giving set points from Excel to UniSim. The first function works automatically, but set points should send manually to UniSim. This is due to the values of the set points shall be confirmed via a button before they are set by UniSim.

Data to be monitored are saved every unit of time. VBA codes were used to realize that. VBA is an implementation of Microsoft's event-driven programming language Visual Basic 6, which was associated integrated development environment (IDE). Data saving is provided by a loop which engine is the time. As the result of this the time and the main properties are stored in a sheet, which are shown in the trends. Due to this connection, the two programs could work as OTS.

### Operation of the OTS

After the programs (the dynamic simulator and the operator screen) were loaded with button “Start” the User can start the OTS. In a pop-up window the name of the User might be written in case of identifying the results. Then the timer starts and the investigation should be begun. In this user mode, the timer has twenty times real time factor. It is a convenient value; the changes of the simulator can be handled and it shorts the work. In the main screen the main properties can be continuously monitored. With buttons “Trend” the trends of the selected stream or equipment are shown. In case of changing the set points the User give the new value of the controller than press the button “Set”. A new window opens where values can be confirmed. When the investigation is finished the button “Stop” stops the timer, exports the property data to a csv file with the name of the user, the date and the time, and restores the simulation. This data can be analyzed after the work.

### Results and analysis

Our OTS in its present form might be used as an emulation OTS for engineer application. To test it an analysis of the technology was made. Mainly the specify energy was investigated in different operating points. Before the investigation, the dynamic simulator set to stationary state. In this state the reactor works in 130 °C temperature in izoterm condition. Operating points were set in three time as follows:

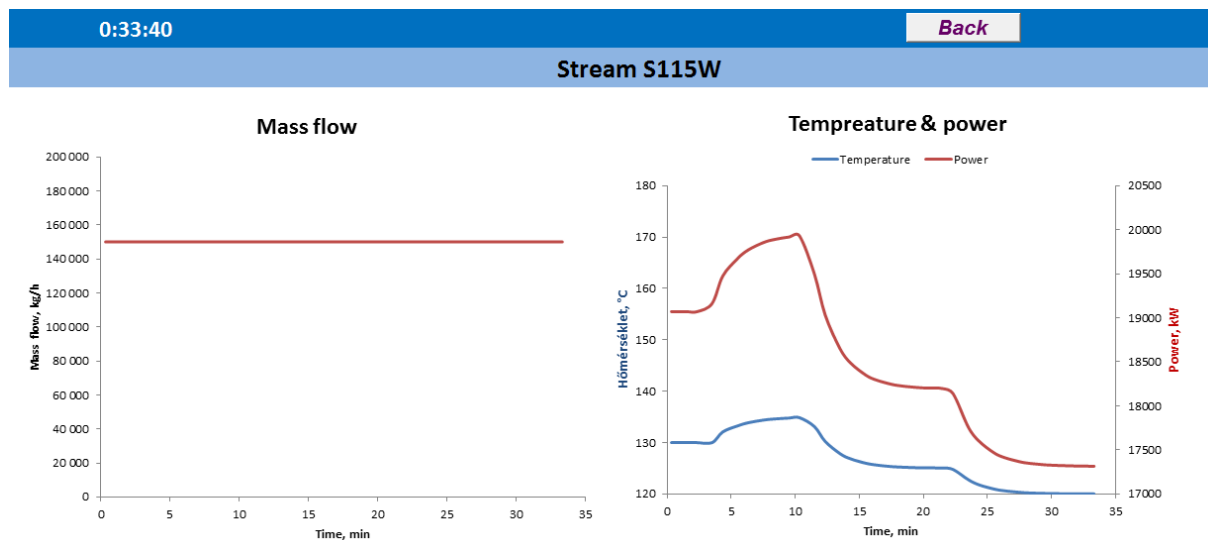
1. The inlets and the reactor temperature were raised up to 135 °C
2. The water inlet temperature was decreased to 125 °C
3. The water inlet temperature was decreased to 120 °C

The trend of the inlet water stream is shown after the investigation (*Fig.4*). Missing data can be seen in each graph at the same times. This is because of the Excel cannot run the timer when sends the values of the set point to the UniSim. The stationary values of the specify energy in each case are shown below (*Table 1.*).

**Table 1.** Values of the specify energy in each case.

Case No.	Inlet water temperature (°C)	Reactor temperature (°C)	Water preheater power (MW)	Reactor jacket power (MW)	Specify energy (MJ/kg)
0.	130	130	19.00	- 5.640	3.340
1.	135	135	19.87	- 4.697	3.639
2.	125	135	18.13	- 4.492	3.125
3.	120	135	17.26	-3.435	2.877

The result of this analysis illustrated that direct cooling of the reactor shall be more effective instead of using jacket cooler. However, it would be an optimize task to determine the minimum of the specify energy. The primary target of the investigation was to test the working of the program and present the usage of it.



**Figure 4.** The subscreen with the trends on water inlet stream. The mass flow in kg/h is shown in the first graph and the temperature of the water in °C and the power of the preheater in kW are shown in the second graph.

## Conclusion

After the stationary simulator was created, dynamic simulator and control system could be developed. By the time the OS was realized and connected to the simulator this system could work as OTS. Our OTS in this present form can be used for engineer application. In this present form, it is suitable to optimize and analyze the technology. It can also be used in education as a training for the students and the gained knowledge shall be exploited during their (industrial) carrier. In our further work, the dynamic process simulator will be completed with the separation subsystems, and there will be more accessories for example alarms – displayed warning and errors in the technology – and scenarios – predefined events – to the OTS could be used for training operators.

## References

- [1] Le Floc'h, J.G., Parmentier, F., *Consider dynamic simulation for successful training*, Hydrocarbon Engineering 84, p. 52. (2005)
- [2] Siminovich, C., Joao, S., *Dynamic operator training simulators for sulphuric acid, phosphoric acid, and DAP production units*, Procedia Engineering 83 p. 215-216. (2014)
- [3] Roe, A., Mason, J., Alamo, J., *The Role of Simulator Technology in Operator Training*, Consulting-Specifying Engineer. (2010)
- [4] M.G. Balaton, L. Nagy, F. Szeifert: *Operator training simulator process model implementation of a batch processing unit in a packaged simulation software*, Computers and Chemical Engineering, pp 335–336, (2012)
- [5] Kirk-Othmer: *Encyclopedia of Chemical Technology, Fifth edition*, John Wiley & Sons, Inc., ISBN 978-0-471-48494, Volume 20, pp. 104-113 (2007)
- [6] L. Petrus, R. R. De Roo, E. J. Stamhius, G. E. H. Joosten: *Kinetics and equilibria of the hydration of propene over a strong acid ion exchange resin catalyst*, Chemical Engineering Science Vol. 39, No. 3, pp. 422-446 (1984)

# Laboratóriumi méretű siló berendezés vizsgálata CFD szimulációval

*CFD simulation of laboratory scale silo*

**Radó Ákos, Egedy Attila**

*Pannon Egyetem*

*8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

## **Összefoglaló**

A mérnökök számára a mai napig kihívást jelent a szilárd, szemcsés anyagok áramlásának modellezése, szimulációja. Számos ipari és mezőgazdasági területen jelen vannak szilárd szemcsés anyagi rendszerek, mint alapanyag, mint termék formájában. Ezen anyagokat legtöbbször silókban tárolják. A legfőbb probléma a rendszerek paramétereinek mérésével van, mivel a méréssel megváltoztatjuk a szemcse halmaz áramlási viszonyait, így nem valós adatokhoz jutunk. A másik megoldandó feladat, a tölcéséredés kialakulásának megakadályozása. Erre úgynevezett inzertereket használnak, amit a siló belsejében helyeznek el, így változtatva az áramlási viszonyokat. A mai numerikus áramlástani (CFD) szimulátorok általában a fluidumok (folyadékok, gázok) szimulációjára képesek. Azonban már vannak kísérletek, ilyen rendszerek vizsgálatára oly módon, hogy a szemcsehalmazt nem-newtoni folyadékként vizsgáljuk.

Feladatom a Pannon Egyetem Folyamatmérnöki Intézeti Tanszékének laboratóriumi méretű silójának a vizsgálata. Az inzerterek nélküli, és inzertereket tartalmazó különböző geometriáknál mért tartózkodási idők alapján készítettem le CFD szimulátorokat. Kezdetben a geometriákat megalkottam COMSOL programban, mely segítségével a megfelelő módszerrel vizsgálom az áramlást, olyan nem-newtoni folyadékként kezelve, ahol a különböző paraméterek módosításával vizsgálom a tartózkodási idők változásait. Az utóbbi vizsgálatokat MATLAB program segítségével végzem, ahol szélsőérték kereső algoritmussal változtatom a változókat, és számolom a tartózkodási időket. A megfelelő pontosságú modell ezek után felhasználható lesz az adott feladatra alkalmas silógeometria meghatározására,

Kulcsszavak: CFD szimuláció, nem-newtoni folyadék, siló, tartózkodási idő

## **Summary**

Nowadays engineers face a lot of challenges with modelling and simulating particulate solids. These types of materials are used in many industrial and agricultural fields as reagents or products. These solid particles are stored mostly in silos. Measuring is the main problem because when we try to measure it, we change the flow conditions so we get false results. The second problem is that funnel flow is formed while the silo is being emptied because „dead zones” are formed so residence time will be different between the particles. To change the flow conditions, inserts can be placed in the silo. CFD simulators can be used mostly to model the fluid materials (gases, liquid) but there are applications where the solid particle systems are modelled as non-newtonian fluid.

This work shows the examination of laboratory sized silo of the Department of Process Engineering at the University of Pannonia. There are geometries with and without inserts and in each case the specific measured residence time is given. My main task was to create CFD simulators, and calculate simulated residence times. Firstly I created geometries in COMSOL program then I investigated the flow using the appropriate method considering the system as a non-newtonian liquid where I studied the changes of residence times by changing the parameters. For this process I used MATLAB program. The geometry of the silo could be optimized for a specified task with the proper model.

Keywords: CFD simulation, non-newtonian fluid, silo, residence time

---

# Itakonsav szeparációja elektrodialízissel

## *Separation of itaconic acid by electrodialysis*

**Rózsenszki Tamás, Nemestóthy Nándor, Bélafiné Bakó Katalin**  
*Biomérnöki, Membrántechnológiai és Energetikai Kutató Intézet*  
*Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

---

### **Összefoglaló**

Az itakonsav (2-metilén butándisav) egy telítetlen dikarbonsav mely potenciális építőelemként hasznosítható a vegyipar számára. Napjainkban leginkább kenőanyag adalékként, felületaktív anyagok, műanyagok, gyanták, szintetikus gumik stb. előállításánál alkalmazzák. Ipari mértékű biotechnológiai előállításánál nagyméretű, süllyesztett fermentációs technológiával glükózból, poliszacharid tartalmú ipari szennyvizekből *Aspergillus terreus* termeltetnek itakonsavat. A gazdaságosabb előállításra többféle kutatás folyik például *Pseudozyma antarctica*, *Yarrowia lipolytica*, *Synechocystis* sp. PCC6803 baktériumokkal.

A kinyerés fő problémája, hogy az itakonsav képződéssel párhuzamosan más hasonló tulajdonságú (karboxil csoportokat tartalmazó) szerves sav is megjelenik. A hatékony elválasztáshoz megoldást nyújthat a szerves savak eltérő pK értékei, alifás / aromás jellegük és vegyértékük, valamint polaritásuk.

A munka során a fő cél az itakonsav elválasztásának tanulmányozása volt egy integrálásra alkalmas membrános elválasztási technikával. Elválasztási művelethez az elektrodialízist választottuk, mivel releváns körülmények között az itakonsav előállítása bipoláris membrános elektrodialízis révén és ennek integrálása fermentációs folyamatban alig vizsgált témának számít. Az eredmények azt tükrözik, hogy a kiépített elektrodialízis rendszer alkalmazható volt az itakonsav elválasztására ezzel lehetőséget teremtve egy fermentációs folyamatba való integrálásra.

### **Summary**

Itaconic acid (2-methylene butanediacid) is an unsaturated dicarbonic acid, which can be applied as a potential building block in chemical industries. Nowadays it is used as an additive in lubrication matter, as a raw material for production of surface active agents, polymers, synthetic materials and rubbers. Itaconic acid is manufactured from glucose or industrial waste waters containing polysaccharides by submerged fermentation technology using *Aspergillus terreus*. Research is being carried out to enhance the effectiveness of the process by applying other strains, like *Pseudozyma antarctica*, *Yarrowia lipolytica*, *Synechocystis* sp. PCC6803 bacteria.

The main trouble in recovery of the acid is that other organic acids are formed during the fermentation. The effective separation should be based on the distinct pK values, aliphatic/aromatic characters, valences, polarities.

The aim of this research work was to study the separation of itaconic acid by a membrane separation technique which is suitable for integration. Electrodialysis (ED) with bipolar membranes was selected, since its integration to the fermentation has been hardly investigated so far. The first results confirmed that ED can separate the acid and it is possible to integrate it to the fermentation.

---

### **Köszönetnyilvánítás**

A kutatómunkát „Az elektrokémiai folyamatok hatása biológiai eredetű termékek elektrodialízissel történő szeparációjára” című K 119940 azonosítószámú OTKA projekt keretében végeztük.

# NEHÉZFÉMEK SZIMULTÁN MEGHATÁROZÁSA KOMPETITÍV VIZSGÁLATOKBÓL NYERT VIZES OLDATOKBAN, POTENCIOMETRIÁS SZTRIPPING ANALÍZIS MÓDSZERREL

## *SIMULTANEOUS DETERMINATION OF HEAVY METALS IN COMPETITIVE AQUEOUS SOLUTIONS USING POTENTIOMETRIC STRIPPING ANALYSIS*

Timothy Anemana Amangdam, Dániel Filotás, Géza Nagy, Lívia Nagy

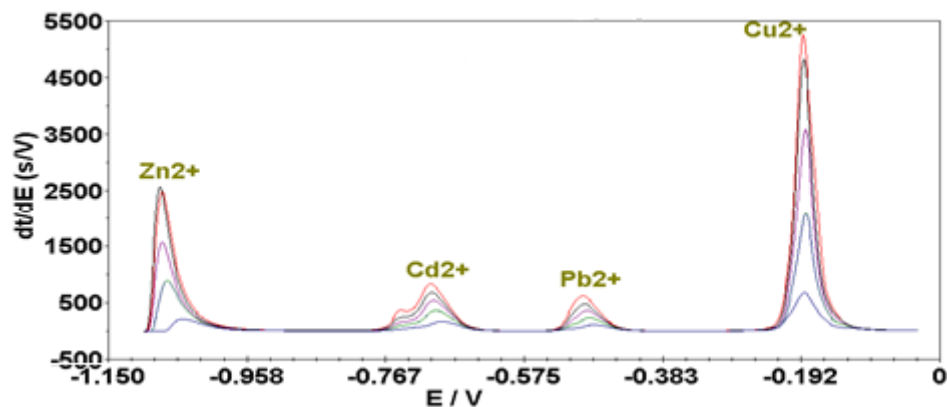
*Dept. of Gen. and Phys. Chemistry, University of Pecs Ifjusag utja 6, Pecs, 7624 Hungary*

### **Summary**

Owing to the ever growing industrial activities, the reduction of heavy metal emission is one of the great environmental challenges in the 21st century. The removal of the toxic elements from the wastewaters is of great importance and one promising technique is bioremediation. In our study we applied Anodic Stripping Voltammetry (ASV) and Potentiometric Stripping Analysis (PSA), the very sensitive electroanalytical methods with the advantages of extremely low detection limits ( $\sim 10^{-10}$  to  $10^{-9}$  M), simultaneous multielement detection with speciation capacities, suitable for on-line and in situ measurements beside low cost. As second, parallel analytical method Atomic Absorption Spectroscopy (AAS), a well-known powerful technique provided reliable quantitative information in the ppm-ppb ranges.

### **Introduction**

Simultaneous measurement of heavy metals (Cd, Pb, Zn, and Cu) could be performed using anodic stripping voltammetry and potentiometric stripping analysis. Samples of the competitive biosorbent capacity of algae were investigated in aqueous solution by electroanalytical and AAS methods. The analytical performances of Atomic Absorption Spectroscopy and Potentiometric Stripping Analysis methods are compared.



**Figure 1.** Simultaneous determination of Zn, Cd, Pb and Cu(1.286, 0.964, 0.643 és 0.321 ppm) metals by PSA, on GC electrode (OD=1mm).

### **Acknowledgement**

Timothy Amangdam Anemana wishes to express his profound gratitude to the Stipendium Hungaricum Program for the support in this research.

### **References**

1. Ralph N. Adams. Electrochemistry at solid electrodes. Marcel Dekker, Inc. 115-121(1996), ISN: 0-8247-1005-3.
2. Peter T. Kissinger, William R. Heineman., Laboratory techniques in electrochemical chemistry. Marcel Dekker, Inc. 31-36(1996), ISN: 0-8247-9445-1.

# Effect of inducer, different carbohydrates and metal ions on production of naringinase from *Lactobacillus fermentum* d13

Anh T. M. Tran<sup>1,2</sup>, Erika Bujna<sup>1</sup>, Judit Krénusz<sup>1</sup>, Mai S. Dam<sup>2</sup>, Quang D. Nguyen<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Brewing and Distilling, Faculty of Food Science, Szent István University  
H1118 Budapest, Ménesi út 45, Hungary

<sup>2</sup>Institute of Food Technology and Biotechnology, Industrial University of Ho Chi Minh City,  
No. 12, Nguyen Van Bao street, Ward 4, Go Vap District, Ho Chi Minh City, Viet Nam

## Summary

Naringinase is a hydrolytic enzyme complex consisting of  $\alpha$ -L-rhamnosidase (EC.3.2.1.40) and  $\beta$ -D-glucosidase (EC.3.2.1.21). It has been found in plants, yeasts, fungi and bacteria. Hydrolysis of naringin by  $\alpha$ -L-rhamnosidase results prunin and rhamnose. Then  $\beta$ -D-glucosidase hydrolyses prunin into non-bitter naringenin and glucose. Naringin and its hydrolysed products have a great potential not only in pharmaceutical industry, but also in food industry, especially in beverage industry. Naringinase is used in debittering and clearance of citrus fruit juices as well as enhancement of wine aromas. Recently, main source for production of naringinase is fungus and only some researches on naringinase activity from bacteria have been reported. In our previous study, *Lb. fermentum* D13 was screened from 16 *Lactobacillus* strains having the highest naringinase production. In this work, effects of inducer, different carbohydrates and metals ions on production of naringinase were investigated. The fermented media MRS was used in all experiments. Among investigated sugars, sucrose was be the best carbohydrate source for fermentation for production of naringinase (5.7 IU/ml). The results also showed that 0.1% inducer (naringin) resulted good naringinase production. About 6.04 IU/ml of extracellular enzyme activity was assayed. Interestingly, addition of  $\text{Cu}^{2+}$  can stimulate production of naringinase. Our results can serve a good basic for study of naringinase from *Lactobacillus* bacteria. It is also the first step to ferment citrus juice and debitter by the use of probiotic bacteria with high naringinase activity.

**Keywords:** naringinase, probiotic bacteria, debitter, citrus juices.

# Effect of exogenous riboflavin on growth and production of some metabolites by *Shewanella xiamenensis* and *Shewanella japonica*

Truong Hoang Duy<sup>1,2</sup>, Edina Nagy<sup>1</sup>, Levente Horváth<sup>1</sup>, Dam Sao Mai<sup>2</sup>,  
Quang D. Nguyen<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Szent Istvan University, Faculty of Food Science, Research Centre for Bioengineering and Process Engineering, 1118 Budapest, Ménézi út 45, Hungary

<sup>2</sup>Industrial University of Ho Chi Minh city, Institute of Food Technology and Biotechnology, 12 Nguyen Van Bao Street, Go Vap District, HCMC, Vietnam

## Summary

*Shewanella* species are reported to be able to produce extracellular electrons and transfer them onto electrode, thus these species can act as biocatalysts in MFC systems. The efficiency of electron transfer can be increased by some shuttle compounds such as proteins, flavins etc. The *Shewanella oneisensis* MR-1 strain is able to secrete extracellular riboflavin, but this capability of other species even other strains is still in question. In this study, the effect of exogenous riboflavin on growth and changes of conductivity of fermented broth by *Shewanella xiamenensis* and *Shewanella japonica* is investigated. Different concentration (0, 20, 40, 60, 80nM) of exogenous riboflavin were supplemented into fermentation media. The growth of *Shewanella xiamenensis* and *Shewanella japonica* were done with the initial microbial cell about  $10^5$  CFU/ml and at 30<sup>0</sup>C in the shaker incubator (200 rpm) for 5 days. Microbial cells, pH, riboflavin, protein content and conductivity were measured. Bacterial species grew well in all investigated media reaching about  $2.3 \times 10^8$  CFU/ml after 3 days. The results were shown that the conductivity and protein contents increased continuously. A correlation between conductivity, riboflavin content, protein content and exogenous riboflavin was detected. In the case of *Shewanella xiamenensis* the following model  $y_1 = 35.07 + 0.09x_{11} + 36.69x_{21} - 0.14x_{31}$  ( $R^2 = 0.789$ ) and in the case of *Shewanella japonica*  $y_2 = 36.11 - 0.09x_{12} + 16.95x_{22} + 0.05x_{32}$  ( $R^2 = 0.965$ ) can be used to describe the changes of conductivity depending on protein, riboflavin contents and amount of exogenous riboflavin, respectively. This result is preliminary, but can serve as basic for understand mechanism of electron transfer of *Shewanella* bacterium.

**Keywords:** riboflavin, conductivity, *Shewanella xiamenensis*, *Shewanella japonica*, protein.

# Nagyhatékonyságú oxidációs eljárások előkezelési hatása a membránszűrés paramétereire tejipari szennyvizek esetében

*Effect of advanced oxidation pre-treatment on membrane filtration parameters of dairy waste water*

**Zakar Mihály<sup>1</sup>, Kovács Ildikó<sup>2</sup>, Muhi Péter<sup>2</sup>, Hanczné Dr. Lakatos Erika<sup>1</sup>, Keszthelyi-Szabó Gábor<sup>2</sup>, László Zsuzsanna<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Institute of Food Sciences, Széchenyi István University, H-9200 Mosonmagyaróvár, Lucsony u. 15-17.*

<sup>2</sup> *Department of Process Engineering, Faculty of Engineering, University of Szeged, H-6724 Szeged, Moszkvai krt. 9.*

*e-mail: zszisu@mk.u-szeged.hu*

---

## Összefoglalás

A tejipari szennyvizek jellemzően magas biológiai és kémiai oxigénigénnyel jellemezhetőek, hiszen magas szerves anyag tartalommal rendelkeznek, amelyek nagyrészt a tejből származó szénhidrogéneket, proteineket és zsírokat tartalmaznak. Számos kutatás irányul a tejipari szennyvizek újrahasznosítására, amelyek közül a membrán műveletek ígéretes megoldásnak bizonyultak. Korábbi munkák igazolták, hogy a membránszűréssel megfelelő szennyezőanyag visszatartás érhető el és a keletkező permeátum újrahasznosítható. A membránok eltömődése azonban csökkenti, limitálja a módszer hatékonyságát. A nagyhatékonyságú oxidációs eljárásokat (AOPs) széles körben alkalmazzák a szennyvíztisztítás során, hiszen alkalmasak a szerves szennyezők lebontására. Ezen kívül a membránszűrés paramétereire is hatással vannak: az ózon például mikroflokkuláló hatásának köszönhetően szignifikánsan növeli a szennyezők eltávolítási hatékonyságát, csökkenti a membrán irreverzibilis eltömődését.

Jelen munka célja néhány tejipari szennyező eltávolíthatóságának vizsgálata az ózonkezelés és a Fenton-reakció hatására, az eljárások összehasonlítása, ezután pedig az oxidációs előkezelések hatásának vizsgálata a membránszűrés paramétereire, úgy mint elérhető fluxus, eltömődés és szennyezőanyag visszatartás a kémiai oxigénigény meghatározásával.

A modelloldatok előállításához tejpport, kazeint és laktózt használtunk. Az ózontartalmú gázt folyamatos kevertetés mellett buborékoltattuk keresztül a modellszennyvízen. Az ózon koncentrációjának meghatározása spektrofotométerrel történt, 254 nm hullámhosszon. Az ózont oxigénből állítottuk elő a egy koronakisüléssel elven működő ózongenerátorral. A Fenton-reakció szintén egy folyamatos kevertetéssel működő reaktorban játszódott le, majd az ultraszűrés állandó nyomás és kevertetés mellett 10 kD vágási értékű PES membránon keresztül történt.

A kísérleti munka első felében a laktóz, kazein és a modell szennyvíz degradációjának vizsgálata és összehasonlítása történt. Megállapítottuk, hogy a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások csökkentik a kémiai oxigénigényt és a kazein és a tejporból készült modellszennyvíz esetében a zavarosságot is. Az ezt követő kísérletek során az előkezelés nélküli és az előkezelt minták fluxusának összehasonlítása történt az ultraszűrés során. Annak érdekében, hogy több információt kapjunk a szűrés mechanizmusáról, eltömődési modelleket számoltunk. A szűrési ellenállásokat (reverzibilis és irreverzibilis) a sorba kapcsolt ellenállási modell alapján határoztuk meg. Megállapítottuk, hogy rövid idejű előkezelés növeli a fluxust, míg a hosszabb időtartamú csökkenti és ugyanígy igaz ez a szennyezők visszatartására is. Ez abból adódik, hogy a rövid előkezelés során érvényesül a mikroflokkuláló hatás, azonban a hosszabb előkezelésnél a szennyező részecskék aprózódnak, átjuthatnak a permeátumba, illetve a pórusok között irreverzibilis ellenállást eredményeznek.

## Köszönetnyilvánítás

A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült. A szerzők hálásak továbbá a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal által biztosított anyagi támogatásért (NKFI témaszám: K112096) is.

---