

**Óbudai Egyetem Anyagtudományok és Technológiák
Doktori Iskola**

Anyagvizsgálat a környezetvédelemben

Habilitációs téziszfüzet

Dr. Ágoston Csaba Gábor
egyetemi adjunktus

Óbudai Egyetem
Rejtő Sándor Könnyűipari és Környezetmérnöki Kar
Természettudományi és Környezetmérnöki Intézet

„Az igazi kereső semmilyen tant nem fogadhat el, az, aki valóban találni akar. Aki azonban megtalálta a kincset, az minden, minden tanítást jóvá tud hagyni, minden utat, minden célt...”

Hermann Hesse: Sziddhárta

Tartalom

I.	A kutatás előzményei	2
II.	Új tudományos eredmények	5
II.1	Csatolt kelátgyűrűk tagszámának hatása peptidek átmenetifémkomplexeinek stabilitására.....	5
II.2	Szilárd települési hulladékok összetétel-meghatározásához szükséges mintavételi és vizsgálati módszerének fejlesztése, szabványosítása	7
II.3	Környezeti zavaró szagok jogszabályi definíciójának pontosítása, vizsgálati módszerek fejlesztése.	12
II.4	Környezeti szempontból jelentős, királis centrumot tartalmazó szerves vegyületek vizsgálati módszereinek fejlesztése.....	14
II.5	Aminok GC-MS meghatározási módszerének fejlesztése.....	16
II.6	Lakossági kibocsátások hatása a lokális légszennyezettségre.	19
III.	A kutatás és a bemutatott eredmények hatása, visszhangja	21
IV.	Irodalmi hivatkozások listája	22
V.	A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények.....	24
VI.	További tudományos közlemények (Opcionális).....	25

I. A kutatás előzményei

A környezetvédelem, környezetünk védelme sok módon értelmezhető, és világnézettől, szakmai előképzettségtől függően az egyes embereknek mást és mást jelent. Egy kémikus számára a világunk, a környezetünk egy összetett reakciótér, melyben egymáshoz számos módon kapcsolódó kémiai reakciók biztosítanak egy globális szintű dinamikus egyensúly. Ebben a megközelítésben környezetünk védelme ennek a dinamikus egyensúlynak a fenntartását jelenti, melyhez elengedhetetlen a környezeti elemek és bennük az antropogén eredetű anyagok, hulladékok kémiai összetételének, szerkezeti felépítésüknek, és egymásra gyakorolt hatásaiknak megismerése. A megismerési folyamathoz szükség van mintavételi és mérési metodikák fejlesztésére, és a mért értékek összehasonlíthatóságának biztosítása céljából a módszerek egységesítésére, szabványosítására. Az emberi tevékenységek folyamatainak szabályozása, műszaki szempontú felügyelete, ellenőrizhetősége megköveteli, hogy a kidolgozott anyagvizsgálati módszerek egy része műszaki dokumentumokban (szabványokban), illetve jogi erővel bíró dokumentumokban, jogszabályokban is rögzítésre kerüljön.

Kutatói munkám során a környezetünket alkotó anyagok és struktúrák megismerésének céljából mintavételi és vizsgálati módszerfejlesztést, anyagvizsgálatokat végeztem, több esetben szabványosítási és jogalkotási tevékenységeket segítve:

-Kutatói aktivitásomat átmenetifém-komplexek szerkezeti felépítésének, és egyensúlyi rendszereiknek tanulmányozásával kezdtem. Az átmentifémek szerves ligandumokkal alkotott komplexei nagy jelentőséggel bírnak úgy az élő szervezetekben, mint a környezeti elemekben található átmenetifémek anyagforgalma tekintetében [Körös Endre, 1980]. Az egyes fémkomplexek szerkezeti felépítésének, a kialakuló struktúrák stabilitásának megismerése segíti az átmenetifémek környezeti rendszerekben betöltött szerepének megismerését. A peptidek átmenetifémekkel alkotott komplexeiben kialakuló kelátgyűrű tagszáma hatással lehet a keletkező komplexek stabilitására, mely hatást egyensúlyi rendszerekben vizsgáltam [1].

A későbbiekben több tématerületen is dolgoztam, részben időbeli átfedéssel:

-A technológiai anyagok körfolyamatainak kialakításához, a hulladékká vált anyagok minél nagyobb arányú hasznosításához szükséges anyagi összetételük megismerése. A lakossági

eredetű, úgynevezett vegyesen gyűjtött szilárd települési hulladékok összetételének meghatározására európai közösségi módszer nem áll rendelkezésre, ezért szükséges a szilárd települési hulladékok összetételének meghatározására alkalmas módszerek kidolgozása, szabványosítása, majd széleskörű vizsgálati kampányok lefolytatása [2, 3].

-Az ipari, mezőgazdasági, és közüzemi technológiák széles köre bűzkibocsátással jár, ami a lakosság életminőségét rontó, mindennapi tevékenységét zavaró környezeti hatás. Az Európai Unió nem alkalmaz egységes jogi-műszaki szabályozást a környezeti zavaró szagok kibocsátásával kapcsolatban, ezért szükséges nemzeti szintű szabályozók megalkotása is. Ehhez mintavételi és mérési módszerek fejlesztésére is szükség volt [*Béres András és Ágoston Csaba, 2010*], melyekre alapozva megalkotható volt a hazai szabályozás [4].

-A királis centrumot tartalmazó anyagok enantiomerjei eltérő élettani hatásúak lehetnek [*Kim, J.H. és Scialli, A.R., 2011*]. Az egyes enatiomerek vizsgálatához szükséges az elválasztásukra alkalmas analitikai módszerek fejlesztése. Az egyes vegyületek esetén alkalmazható analitikai eljárásokat segíti, ha hasonló modellvegyületek esetében rendelkezésre állnak adatok. Munkám ezen szakaszában bekapcsolódtam modellvegyületek enantiomerpárjainak királis elválasztásának módszerfejlesztésébe [5, 6].

-A környezeti mintákban található aminok gázkromatográfiás és folyadékkromatográfiás módszerekkel vizsgálhatók, melyek között származékképzésen alapuló módszerek is megtalálhatóak. [*Simpson R. C., at al., 1983*] Az analitikai módszerfejlesztéshez szükséges a reakcióutak megismerése, a képződő származékok azonosítása. Munkám során egyes aminocsoportot tartalmazó vegyületek orto-ftálaldehid/etántiol reagensekkel alkotott származékait vizsgáltam [7].

-A környezeti levegő terheltsége (a légszennyezettség) jelentős egészségügyi kockázati tényező, mely az Európai Környezetvédelmi Ügynökség jelentésében szereplő becslés szerint 2022-ben 239 000 korai halálesetért volt felelős Európában (EU 27). A lakosságot a környezeti levegőből érő expozíció becslése Magyarországon az Országos Légszennyezettségi Mérőhálózat (OLM) adatainak felhasználásával történik, a jogszabályban meghatározott időtartamokra megállapított átlagkoncentráció határértékek alapján [306/2010 (XII.23.) Kormányrendelet]. A lakossági tevékenységhez köthető helyi kibocsátások lokális levegőterheltségi szintekre jelentős hatást gyakorolhatnak, mely jelentős hatással lehet a szűkebb területen élő lakosság életminőségére [Seinfeld, J.H., és Pandis, S.N. 2016]. Ezt a hatást vizsgáltam egy medencehelyzetű településen időszakosan engedélyezett avarégetés tekintetében, ahol a tevékenység széleskörű lakossági vitákat váltott ki [Ágoston Csaba, 2018], [8].

II. Új tudományos eredmények

II.1 Csatolt kelátgyűrűk tagszámának hatása peptidek átmenetifémkomplexeinek stabilitására

A környezeti elemekben a fémionok mobilizációját a kelátképző szerves vegyületek elősegítik, melyek által alkotott komplexek stabilitását egyéb tényezők mellett a kialakuló kelátgyűrűk tagszáma befolyásolhatja [H.Sigel *et al.*, 1982]. Ezt a hatást α - és β -aminosav-egységeket tartalmazó (öt és hattagú csatolt kelátokat képező) peptidek esetén vizsgáltam. Az oldalláncban található donoratomok jelentősen befolyásolják a keletkezett komplexek stabilitását [Sanna *D., et al.*, 2001], mely hatást elkerülendő oldalláncban donoratomot nem tartalmazó alanin-származékokat alkalmaztam. Munkámban az 5- és 6-tagú kelátgyűrűk stabilitását β -alanil-származékokat tartalmazó di- és tri-peptidek nikkel(II)-, valamint palládium(II)- ionokkal alkotott komplexeit, mint modellvegyületeket vizsgáltam potenciometriás, UV-VIS és ^1H -NMR spektroszkópiás módszerekkel. A donorcsoportok koordinációjuk során deprotonálódnak, így a képződő komplexek stabilitási állandói pH-metriás titrálási görbékből számítással meghatározhatók (1-2. táblázatok).

1. táblázat: A nikkel(II)-ion tripeptidekkel képezett komplexeinek stabilitási állandói ($\log \beta_{\text{pqr}}$) [1]

Species	GlyGlyGly	GlyGly- β -Ala	Gly- β -AlaGly	β -AlaGlyGly	Gly- β -Ala- β -Ala	β -AlaGly- β -Ala
[HL]	7.93	7.93	8.06	9.29	8.12	9.29
[H ₂ L] ⁺	11.25	12.02	11.42	12.55	12.21	13.40
[NiL] ⁺	3.75(2)	3.82(2)	4.18(1)	3.53(6)	4.05(3)	3.54(5)
[NiL ₂]	6.77(4)	6.90(3)	7.34(3)		7.44(6)	
[NiH ₋₁ L]	-5.45(5)	-5.03(5)	-5.26(8)	-5.25(8)	-4.98(9)	-4.81(5)
[NiH ₋₂ L] ⁻	-12.85(3)	-12.34(2)	-12.45(2)	-12.47(2)	-14.93(5)	-13.99(6)
$\log K_0$	-4.18	-4.11	-3.88	-5.76	-4.07	-5.75
$\log K_{-1}$	-13.38	-12.96	-13.32	-14.54	-13.10	-14.10
$\log K_{-2}$	-20.78	-20.27	-20.51	-21.76	-23.05	-23.28

T=298K, I=0,2 mol/dm³ KCl, zárójelben a szórás értéke.

2. táblázat: A palládium(II)-ion tripeptidekkel képezett komplexeinek stabilitási állandói ($\log \beta_{\text{pqr}}$) [1]

Species	GlyGlyGly ^a	GlyGly- β -Ala	Gly- β -AlaGly	β -AlaGlyGly	Gly- β -Ala- β -Ala	β -AlaGly- β -Ala
[HL]	7.93	7.93	8.06	9.29	8.12	9.29
[H ₂ L] ⁺	11.25	12.02	11.42	12.55	12.21	13.40
[PdL] ⁺	15.92	16.79(2)	16.26(5)	14.40(20)	16.66(3)	
[PdH ₋₁ L]	12.65	10.97(12)	12.06(10)	8.76(10)	13.24(5)	12.64(4)
[PdH ₋₂ L] ⁻	9.07	10.98(2)	11.79(2)	9.03(3)	10.12(3)	9.58(3)
[PdL ₂]	23.00					
[PdH ₋₁ L ₂] ⁻	19.81					
[PdH ₋₂ L ₂] ²⁻	13.40					
$\log K_0$	7.99	8.86	8.20	5.11	8.54	
$\log K_{-1}$	4.72	3.04	4.00	-0.53	5.12	3.35
$\log K_{-2}$	1.14	3.05	3.73	-0.26	2.00	0.29

T=298K, I=0,2 mol/dm³ (KCl+KNO₃=1:1), zárójelben a szórás értéke.

„a” [A.C. Agoston *et al.*, 1999]

A komplexek szerkezeti felépítését, geometriáját a nikkel(II)-ionok esetében UV-VIS, míg a palládium(II)-ionok esetében ^1H -NMR vizsgálatokkal támasztottuk alá [1].

Tézisek:

II.1.1. A fémionok koordinációs geometriáját nem befolyásolta a kelátgyűrű mérete, de a komplexek termodinamikai stabilitására hatást gyakorolt a β -alanil-alkotók (6 tagú kelátgyűrűk) száma és elhelyezkedése [1].

II.1.2. Az N-terminális β -alanil-részek destabilizáló hatása minden esetben megfigyelhető volt. A $[\text{NiH-2L}](-)$ komplexek (NH_2 , N-, N-, N-, COO^-) koordinációs módjának stabilitási sorrendje a következőképpen írható le: GlyGly- β -Ala (5,5,6) nagyobb vagy egyenlő Gly- β -AlaGly (5,6,5) nagyobb vagy egyenlő GlyGlyGly (5,5,5) > β -AlaGlyGly (6,5,5) > Gly- β -Ala-béta-Ala (5,6,6) > β -AlaGly- β -Ala (6,5,6), míg a megfelelő palládium(II)-komplexek esetében: Gly- β -AlaGly (5,6,5) > GlyGly- β -Ala (5,5,6) > Gly- β -Ala-béta-Ala (5,6,6) > GlyGlyGly (5,5,5) > β -AlaGly- β -Ala (6,5,6) nagyobb vagy egyenlő, mint a β -AlaGlyGly (6,5,5) [1].

II.1.3. A β -alanin beépítése a tripeptidmolekulák belső vagy C-terminális pozícióiba jelentősen növeli a ligandumok fémkötő képességét [1].

II.2 Szilárd települési hulladékok összetétel-meghatározásához szükséges mintavételi és vizsgálati módszerének fejlesztése, szabványosítása

A szilárd települési hulladék (SZTH) anyagfajták szerinti összetételének ismerete alapvető jelentőségű a haszonanyagok kinyerése és az anyagában nem hasznosítható alkotók energetikai hasznosításra történő előkészítése érdekében. A szilárd települési hulladékok összetételének meghatározására nem áll rendelkezésre európai közösségi módszer (CEN szabvány), így fontos a céloknak megfelelő nemzeti módszerek kidolgozása. Munkánk kezdeti lépéseként meghatároztuk a vegyesen gyűjtött települési szilárd hulladék esetében reprezentatív átlagminta legkisebb mennyiségét, ezt követően a lakossági hulladékgyűjtő körzetekre, a kezelő létesítményekbe érkező gyűjtőjárművek kiválasztására építő mintavételi metodikát fejlesztettünk ki [Faitli József és társai, 2006], [2]. A vett átlagminta anyagfajták szerinti összetételének meghatározására kézi válogatáson és tömegmérésen alapuló vizsgálati módszert dolgoztunk ki, melynek keretében 12 anyagfajta és a mérete miatt kézzel már anyagfajták szerint nem szétválasztható úgynevezett finomfrakció mennyisége (szárazanyagra, vagy nedves összetételre vonatkoztatott tömegaránya) (3. táblázat) határozható meg [Faitli József és társai, 2006], [2].

3. táblázat: A javasolt 12 +1 anyagi összetétel kategória. [2]

1. Bio	étel, falevél, virág, stb.
2. Papír	újság, csomagolópapír, boríték, stb.
3. Karton	kartonpapír, tojásos doboz, stb.
4. Kompozit	TetraBrik (tej), dobozos gyümölcsle, stb.
5. Textil	ruhák, táskák, krumplis-zsák, stb.
6. Higiéniai	pelenka, tampon, papír-zsebkendő, vatta, stb.
7. Műanyag	PET palackok, zacskók, fóliák, stb.
8. Éghető	fa, bőr, gumi, csont, stb.
9. Üveg	fehér és színes öblös és síküveg
10. Fém	konzerves dobozok, fóliák, stb.
11. Éghetetlen	kő, tégl, kerámia, stb.
12. Veszélyes	elem, akku., fejték, olaj, fecskendő, gyógyszer, stb.
13. Finom	< 2 cm átmérőjű anyagok: por, hamu, stb.

Módszerünk főbb lépései:

- A vizsgált gyűjtőkörzetből véletlenszerűen kiválasztott gyűjtőjárművek által beszállított hulladékból 500 kg tömegű átlagminta mintavétele.
- 100 mm-nél nagyobb szemcseméretű frakció előre meghatározott anyagfajták szerinti szétválogatása (12+1 frakció). (1. ábra)

-20 mm-nél nagyobb szemcseméretű alkotók (szükség esetén negyedeléssel csökkentett méretű mintából) előre meghatározott anyagfajták szerint történő szétválogatása (12+1 frakció).



1. ábra: A javasolt 12 anyagi összetétel kategória szerinti kézi válogatás 100 mm részméretű szitán [2].

A tapasztalatok összegzéseként összeállítottunk egy módszertani leírást a mintavételei és terepi összetételi vizsgálatok elvégzésére, melyet két magyar nemzeti szabványban a Magyar Szabványügyi Testület magyar nemzeti szabványként kiadott:

-MSZ 21420-28:2005 Hulladékok jellemzése. 28. rész Települési szilárd hulladékok vizsgálata. Mintavétel

-MSZ 21420-29:2005 Hulladékok jellemzése. 29. rész Települési szilárd hulladékok vizsgálata. A minta előkészítése, az anyagi összetétel meghatározása anyagfajták szerinti szétválogatással.

Az inhomogén anyagösszetétel, az évszakos változások és területi eltérések felmérésére az általunk összeállított szabványos módszerekkel, valamint továbbfejlesztett módszerünkkel több országos felmérést végeztünk az elmúlt 20 évben, nyomon követtük és adatokkal alátámasztottuk (2. ábra) a lakossági hulladéktermelés, és hulladékbegyűjtés változásait (4. táblázat).

4. táblázat: A magyar nemzeti hulladékösszetétel-vizsgálati kampányok főbb adatai. [3]

Időszak	Átlagminták száma/évszak	Alkalmazott módszer/vizsgálat célja	Hulladékárám	7. frakció (műanyag) száraz m/m %-os aránya
2005	6/tél	magyar szabványok tervezete/módszer-validálás	v.gy. SZTH	13,5
2006	42/tavaszi	magyar szabványok	v.gy. SZTH	15,4
2007	42/tavaszi	magyar szabványok	v.gy. SZTH	13,9
2009	52/tavaszi	magyar szabványok	v.gy. SZTH	20,2
2017-2018	112/2017/tél 112/2018/tavaszi	magyar szabvány szerinti részletes összetételvizsgálat	v.gy. SZTH	15,9 (tél) 17,5 (tavaszi)
2022-2023	120/2022/ősz 120/2022/tél 120/2023/tavaszi 120/2023/nyár	módosított magyar szabvány (EPR módszer), szerinti részletes összetételvizsgálat. /adatok a magyar EPR és DRS rendszer tervezéséhez, EU adatszolgáltatás	v.gy. SZTH, lomtalanítási, közterületi, illegálisan lerakott	10,6 (2022) ősz, 11,4 (2022) tél, 11,1 (2023) tavaszi, 11,3 (2023) nyár
2024-2025	117/2024/nyár 117/2022/ősz 117/2023/tél 165/2023/tavaszi	módosított magyar szabvány (EPR módszer), szerinti részletes összetételvizsgálat/ adatok a magyar EPR és DRS rendszer ellenőrzéséhez, EU adatszolgáltatás	v.gy. SZTH, lomtalanítási, közterületi, illegálisan lerakott, RDF	folyamat-ban lévő értékelés

Magyarázat: v.gy. SZTH: vegyesen gyűjtött Szilárd Települési Hulladék,

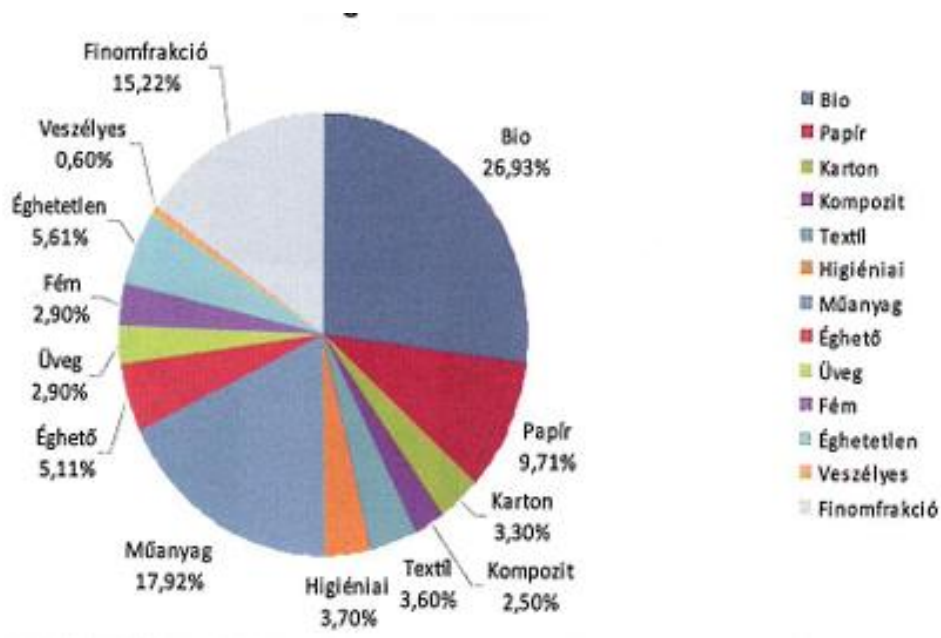
RDF: vegyesen gyűjtött szilárd települési hulladékból kinyert másodlagos tüzelőanyag (Refuse Derived Fuel)

EPR: kiterjesztett gyártó felelősség (Extended Producer Responsibility)

DRS: kötelező visszaváltási rendszer (Deposit Return System)

Magyarország minden statisztikai régiójában kiválasztottunk egy regionális hulladékgazdálkodási létesítményt a mintavétel és az elemzés helyszínéül. A hulladékgyűjtő járműveket a mintavételhez véletlenszerűen választottuk ki a következő kategóriákba tartozó településekről: nagyváros (> 50000 lakos), középváros (10000-50000 lakos), kisváros (3000-10000 lakos), falu (<3000 lakos). Az adott városi osztályokból származó átlagolt minták számát rögzítettük. Az eredmények értékelését először a települési szintre vonatkozóan végeztük el. A

teljes felmérési területre és a gyűjtőjárművek útvonalaira is meghatároztuk a lakótömbökben és családi házakban élő lakosok számát, amelyeket szektoroknak neveztünk el. A teljes felmérési területre és a gyűjtőjárművek útvonalaira vonatkozóan is meghatároztuk a vállalati eredetű szilárd hulladék százalékos arányát. Az összes kapcsolódó településre súlyozott átlagokat számoltunk. A kapcsolódó települések lakosainak számát, a településméret-osztályokat és a statisztikai régiókat a magyar statisztikai hivatal nyilvános adataiból határoztuk meg, és súlyozott átlagokat számoltunk ki minden mintában szereplő települési szilárd hulladékáramra és statisztikai régióra, valamint az ország egészére vonatkozóan. A hulladék szárazanyagra vonatkoztatott és nedves, szárítás nélküli anyagra vonatkoztatott összetételére egyaránt kiszámítottuk [3].



2. ábra: Egy 2006-ban végzett szilárd települési hulladék (SZTH) összetételvizsgálat eredménye, nedves anyagtartalomra vonatkoztatott tömegszázalékos összetétel [Faitli József és társai, 2006].

Tézisek:

II.2.1. A települési szilárd hulladék anyagfajták szerinti makroszkópikus összetételének meghatározására a kézi válogatáson alapuló módszerünk alkalmas, rutinanalitikai módszerként magyar nemzeti szabvány státuszban bevezetésre került [2].

II.2.2. A lakosság életszínvonalának növekedésével összefüggésben a vizsgált 2005-2018 időszakban a települési szilárd hulladék műanyagfrakciójának mennyisége növekedett, így vizsgálataink alátámasztják a szelektív gyűjtési rendszer bevezetésének szükségességét [3].

II.2.3. A szelektív hulladékgyűjtés, valamint az EPR és DRS rendszerek bevezetésével csökkent a műanyagok mennyisége a vegyesen gyűjtött szilárd települési hulladékban, mely folyamatot országos felméréseinkkel részletesen dokumentáltunk [3].

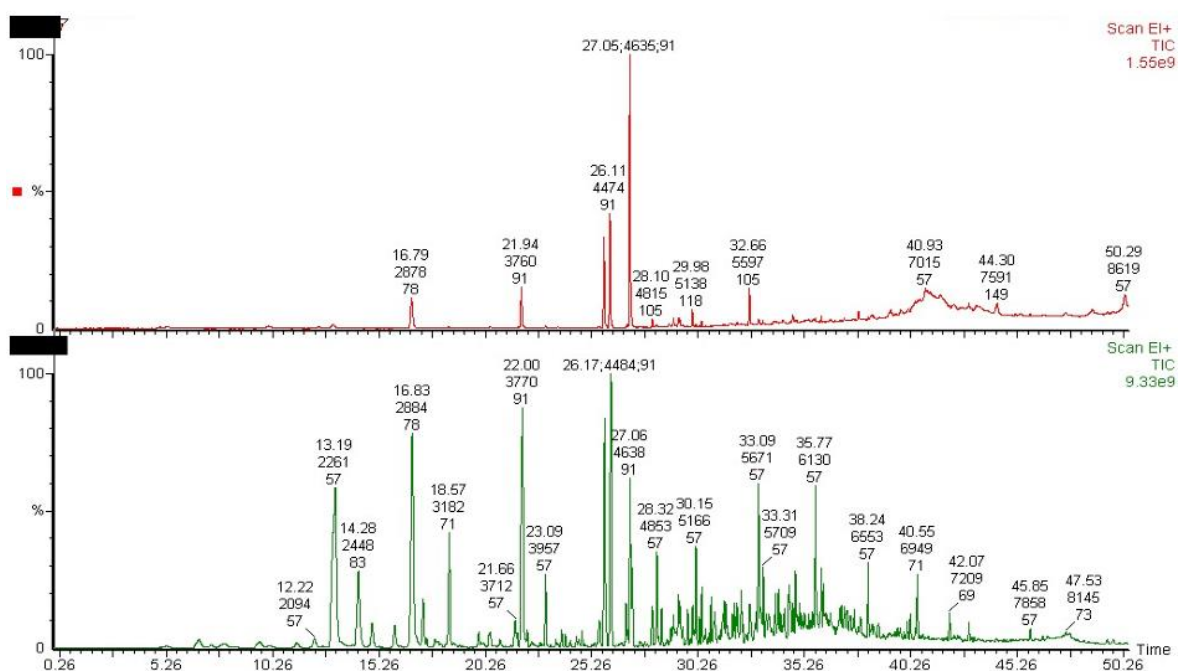
II.3 Környezeti zavaró szagok jogszabályi definíciójának pontosítása, vizsgálati módszerek fejlesztése.

A bűz (zavaró környezeti szag) a lakosságot zavaró jelentős környezeti tényezők között szerepel. Az Európai Unió közösségi szinten nem szabályozza a kérdést, ezért a nemzeti szintű szabályozás, és a megfelelő műszaki szabályzók megalkotása szükséges. A bűzhatás mérése, a zavarás mértéke nem lehetséges kémiai alkotók koncentrációinak mérésével nyert adatok alapján, csupán olfaktometriás módszerekkel [4], ezért a bűz korábbi jogszabályi definícióját szükséges volt módosítani annak érdekében, hogy a lakossági zavarás műszakilag és jogalkalmazói oldalról egyaránt vizsgálható legyen. 2010-ben javaslatot tettem a bűz jogszabályi definíciójának pontosítására [Béres A.; Ágoston Cs., 2010], melyet a jogalkotó elfogadott, és a kapcsolódó kormányrendeletben [306/2011 (XII.23.) Kormányrendelet] megfogalmazott „bűz” definíció kiegészült a „*az adott környezetben környezetidegen, és az érintett terület rendeltetésszerű használatát zavarja;*” résszel. A kiegészített definíció lehetővé teszi, hogy az olfaktometriás mérésekkel nyert, nem tömegkoncentráció dimenziójú szagkoncentráció adatokat a környezetvédelmi hatóságok a zavaró hatásra, és „környezetidegen” jellegre hivatkozva felhasználják, eljárjanak.

Amennyiben egy bűzkibocsátó forrás esetén szükségessé válik a kibocsátás (szagkoncentráció) csökkentése, akkor a csökkentés mértékét, a szagcsökkentő-berendezés hatásfokát mérésekkel kell meghatározni [6/2011 (I.14.) VM rendelet] TD-GC-MS kromatográfiás és olfaktometriás méréseket végezve megállapítottam, hogy a szaghatáscsökkentő berendezések az egyes kémiai alkotók koncentrációit nem azonos mértékben változtatják meg, ezért a berendezések szagcsökkentési hatásfokának mérésére kizárólag az olfaktometriás módszerek alkalmasak [Ágoston Cs., 2015], [4].

Számos esetben a szagkoncentráció meghatározásán túl szükség lehet a szagok eredetének vizsgálatára, a zavaró környezeti szaghatást okozó szagkibocsátó forrás egyértelmű azonosítására. A szagszennyezett levegő bűzkoncentrációjának mérésére nem alkalmas kromatográfiás vizsgálatok segítségével viszont lehetővé válik a levegőmintában található szerves eredetű szennyezőanyagok minőségi azonosítása, illetve az egyes szennyező komponensek koncentráció arányainak meghatározása, ami az egyes szagforrásokra, technológiákra jellemző, így a kromatográfiás vizsgálatok hasznos adatokkal egészítik ki az olfaktometriás vizsgálatokkal mért eredményeket. Nagyérzékenységű kromatográfiás módszerrel vizsgálva a leggyakoribb kibocsátó forrásokat, összeállíthatjuk az egyes forrásokra jellemző szennyezőanyagokat, és ezek arányait tartalmazó adatbázist (kromatogramtárat), mely

alapján egy immissziós vizsgálat esetén felvett kromatogram segítségével a környezeti levegőben mérhető bűz egyik vagy másik forráshoz rendelhető („ujjlenyomat” kromatogram) [Ágoston Cs., 2015], [4]. A módszer megfelelő kromatográfiai paraméterek mellett akár igen hasonló források esetén is lehetőséget ad az azonosításra (3. ábra). A gyakorlati tapasztalatok azt mutatják, hogy a termáldeszorberrel történő mintaelőkészítés alkalmazható hatékonyan (TD-GC-MS módszer), az elterjedten alkalmazott leoldási technikák nem alkalmasak [4].



3. ábra: Egy petrokémiai telepen működő eltérő technológiai lépéshez tartozó légszennyező forrás esetén felvett ujjlenyomat-kromatogram [Ágoston Csaba, 2009]

Tézisek:

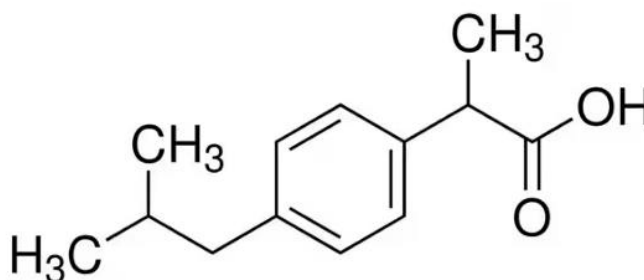
II.3.1. A szaghatáscsökkentő berendezések az egyes kémiai alkotókat különböző hatásfokkal választják le a szagszennyezett levegőből. Emiatt a berendezések szaghatáscsökkentési hatásfoka az egyes kémiai komponensek koncentrációinak mérésén alapuló számítással nem állapítható meg. A szaghatáscsökkentő berendezések hatásfokának meghatározására az olfaktometriás méréseken alapuló számítás alkalmas [4].

II.3.2. Módszert fejlesztettünk ki a szagot okozó források azonosítására. Nagyérzékenységű kromatográfiai módszerrel vizsgálva a leggyakoribb kibocsátó forrásokat, összeállíthatunk az egyes forrásokra jellemző szennyezőanyagokat, és ezek arányait tartalmazó adatbázist (kromatogramtár), mely alapján egy immissziós vizsgálat esetén felvett kromatogram segítségével a környezeti levegőben mérhető bűz egyik vagy másik forráshoz rendelhető [4].

II.4 Környezeti szempontból jelentős, királis centrumot tartalmazó szerves vegyületek vizsgálati módszereinek fejlesztése.

A királis vegyületek enantiomerjei eltérő biológiai aktivitással rendelkeznek. A gyakorlatban használt királis centrumot tartalmazó anyagok, mint például egyes gyógyszerek, vagy növényvédőszeres vegyipari gyártása során gyakran mindkét enantiomer keletkezik, ugyanakkor csak egyikük rendelkezik a kívánt élettani tulajdonságokkal, hatással [Kim, J.H. és Scialli, A.R., 2011]. Emiatt kiemelt fontosságú az enantiomer elegyek alkotóinak elválasztása, a királis elválasztás.

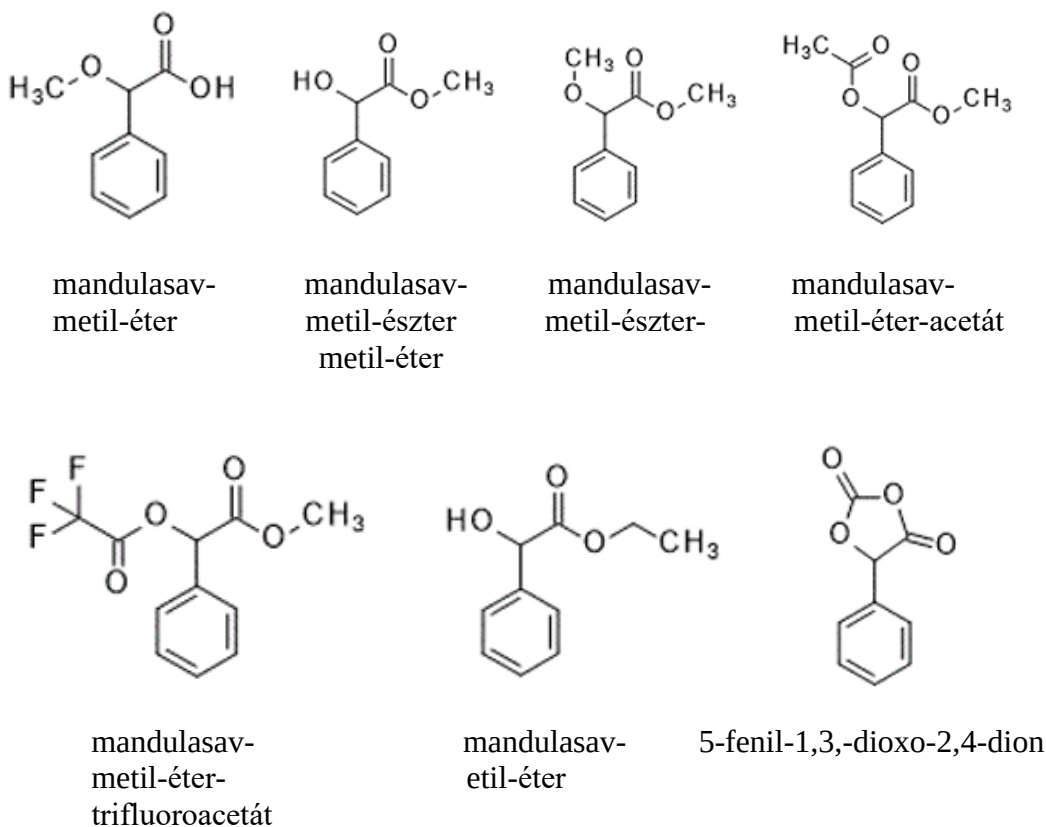
A jó királis elválasztás általában próbamérések sorozatának eredménye; azonban szisztematikus vizsgálatok révén bizonyos elveket fel lehet állítani a szerkezet és a királis szelektivitás korrelációjára. Ezek az elvek ezután más királis elválasztások esetén alkalmazhatóak, csökkentve a királis szelektív analitikai módszerek kifejlesztésének idejét [Juvancz Z. és társai, 2022]. A modellvegyületek felhasználásával a megállapított elvek a vegyületek szélesebb körére alkalmazhatóak. Munkánk során ibuprofén (4. ábra) [5], és mandulasav szubsztituált származékait (5. ábra) [6] választottuk modellvegyületekként az átvihető szabályok megállapítása érdekében.



4. ábra: Az Ibuprofén, (RS)-2-(4-(2-metilpropil)fenil) propánsav szerkezeti képlete.

A modellvegyületek királis szelektivitását mértük módosított ciklodextrin szelektorokon. A különböző gyűrűméretű (α , β és γ) ciklodextrinek királis szelektivitásának összehasonlítása további betekintést nyújt a bevonás szerepébe a ciklodextrin alapú álló fázisok királis szelektivitásában.

E vegyületek felhasználásával vizsgáltuk a hidrogéndonor-akceptor kölcsönhatások és a dipólus dipólus kölcsönhatások és zárványok szerepét a királis felismerési folyamatokban. A királis szelektivitási értékeket megmértük és extrapoláltuk ugyanarra a hőmérsékletre, az összehasonlíthatóság kedvéért. Több általános tendenciára következtettünk, amelyek felhasználhatók a további enantiomerpárok királis elválasztására.



5. ábra: A vizsgált királis mandulasav-származékok szerkezeti képlete.

Tézisek:

II.4.1. A királis elválasztás hatékonyságát minden vizsgált szelektor esetében javította a hidroxilcsoportok hidrogénkötés-donálási képessége [5, 6].

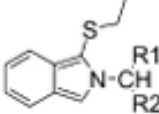
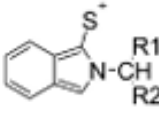
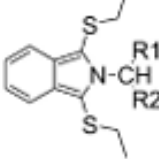
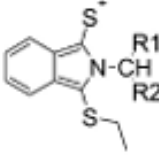
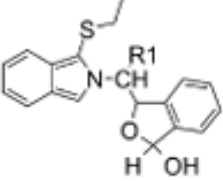
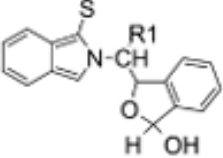
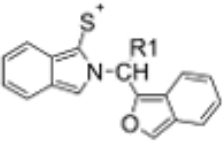
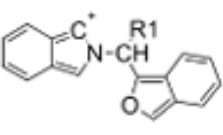
II.4.2. A vizsgált vegyületek mindegyike esetében a β -CD szelektor biztosította a leghatékonyabb szelektív elválasztást [5, 6].

II.4.3. A ciklodextrin-szelektorok gyűrűmérete jelentős hatást gyakorol a szelektív elválasztás hatékonyságára. Amennyiben egy adott szelektor nem választ el egy enantiomerpárt, akkor a ciklodextrin-szelektorok gyűrűméretének megváltoztatásával általában elérhető a szelektív elválasztás. [5, 6].

II.5 Aminok GC-MS meghatározási módszerének fejlesztése

Aminocsoportot tartalmazó vegyületek származékképzést követően mérhetőek GC-MS technika alkalmazásával. [Simpson R. C., *et al.*, 1983]. Az orto-ftálaldehid (OPA)/etántiol (ET) reagensekkel alkotott származékok jellemzőit normál/izo C₃ és C₄, n-C₆, n-C₇ és n-C₈ alifás és feniletilaminok esetében GC-MS módszerrel vizsgáltuk. Az OPA/ET-reagenseket 1/3 és 1/50 mólos arányban használtuk. A származékokat a CHCl₃-ba történő extrakciójukat követően azonosítottuk és GC-MS segítségével mennyiségi meghatározást végeztünk.

Eredmények azt mutatták, hogy az izoindol mellett a két OPA és a két SH-tartalmú származék is képződött, figyelembe veendő mennyiségben. Részletesen vizsgáltuk az OPA-származékok arányait és szerkezetét (6. ábra), fragmentációs mintázatukat, továbbá a szelektív fragmentumionok relatív intenzitásait. Meghatároztuk a reprodukálhatósági adatokat is, melyek fontos jellemzői egy analitikai eljárásnak [7].

szerkezeti képlet, IPA/NPA, IBA/NBA, HEXA, HEPTA, OKTA, PHEA						
	219	233	261	275	289	281
	190	204	232	246	260	252
	279	293	321	335	349	341
	250	264	292	306	320	312
	353	367	395	409	423	415 (414)
	292	306	334	348	362	354
	306 (308)	320 (322)	348 (350)	362 (364)	376 (378)	368 (369)
	274	288	316	330	344	336

6. ábra: Az OPA/ET származékok szerkezeti felépítése és/vagy fragmentum-ionjainak m/z (tömeg/töltés) értékei. IPA: i-propil, NPA: n-propil, IBA: i-butyl, NBA: n-butyl, HEXA: n-C₆, HEPTA: n-C₇, OKTA: n-C₈, PHEA: fenil-etil

Tézisek:

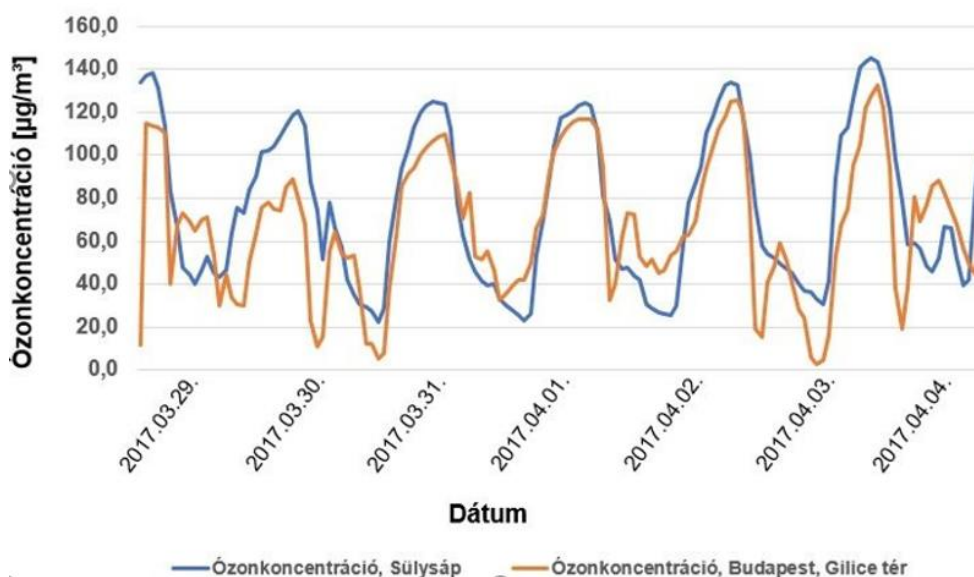
II.5.1. Az i-propil-amin, mely $>\text{CH-NH}_2$ csoportot tartalmaz, a várakozásnak megfelelően, a többi amintol eltérően, egyetlen fő származékot képezett, egy klasszikus izoindol, legnagyobb tömegű molekulaionja alapján jó ismételtelhetőséggel [7].

II.5.2. A további vizsgált primer aminok, az n-propil, i-butil, n-butil, n-C₆, n-C₇, n-C₈ és fenil-etil-amin, melyek $-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ szerkezetű csoportot tartalmaznak a klasszikus izoindolok mellett egy további OPA-t tartalmazó származékot is képeznek. A két OPA-t tartalmazó származék mellett minden esetben kimutatható volt a dithio-OPA származék is [7].

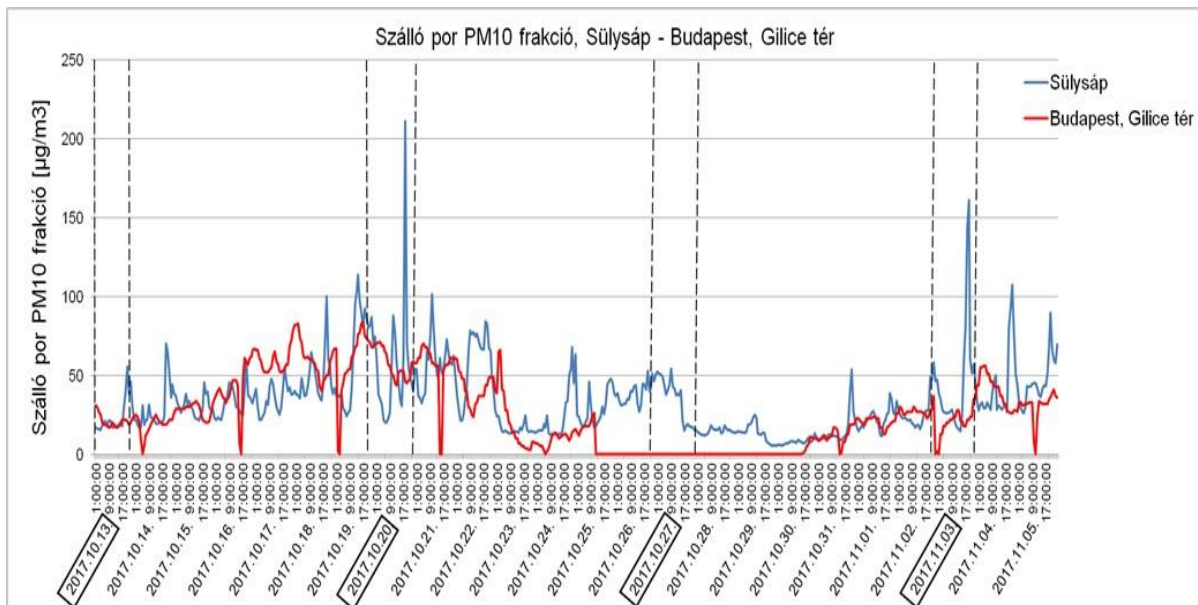
II.5.3. A származékképzés, a kromatográfiás eljárás reprodukálhatóságát a kapott TIC-értékek (teljes ionáram) összegével lehet jellemezni, amely egy futtatás során képződött és elválasztott OPA-származékok összegéből adódik: és egyúttal az OPA-származékok stabilitását is reprezentálja. Ezen (integrátoregység/pmol aminban kifejezett) értékek alapján kijelenthető, hogy az i-propil-amin, az n-C₆, n-C₇, n-C₈ és fenil-etil-aminok stabil OPA/ET származékokat képeznek [7].

II.6 Lakossági kibocsátások hatása a lokális légszennyezettségre.

Tartósan szélcsendes időben, jelentős felhőborítottság esetén úgynevezett inverziós hőmérsékleti légköri rétegződés alakul ki, amikor az alsóbb hideg légrétegek nem keverednek a magasabb légrétegekkel, ami elősegíti a lokális légköri kibocsátások helyben maradását, gátolja hígulását, ezáltal elősegíti nagy lokális koncentrációjú immissziós állapotok kialakulását. A medencékben, völgyekben található települések esetén ez a hatás fokozott lehet [Seinfeld, J.H.; Pandis, S.N., 2016]. A kerti zöldhulladék lakosság általi égetése medence helyzetű településeken kiugróan nagy lokális levegőterheltségi szinteket eredményezhet. Ha a lakossági avarégetés csak bizonyos időszakokban megengedett, akkor az avarégetés lokális hatása a helyszínen és egy referencia területen egyidőben végzett környezeti levegő mérések segítségével tanulmányozható. Munkám során módszert dolgoztam ki, melynek segítségével a lokális légszennyező komponensek közül a lokális kibocsátáshoz köthetőek azonosíthatóak, és a helyi kibocsátás hatása azonosítható, mértéke becsülhető. Egy medencehelyzetű településen, Süllyápon egy tavaszi és egy őszi időszakban vizsgálatsorozatokot végeztünk, és tanulmányoztuk a lokális kibocsátások hatásait. A helyben mért adatokat a budapesti Gilice téren működő, az Országos Légszennyezettségi Mérőhálózat (OLM) keretében üzemeltetett mérőállomás adataival hasonlítottuk össze. A helyi kibocsátásokkal kapcsolatba nem hozható ózon esetében a két helyszínen mért koncentráció értékek a teljes vizsgálat időszak alatt közel azonosak (7. ábra). A szállópor esetében az égetés szempontjából tiltott napokon szintén jó egyezést mutatnak a két helyszínen mért adatok, míg az avarégetés napjain (péntekente) jelentősen nagyobb koncentrációk mérhetőek (8. ábra).



7. ábra: A földközeli ózon koncentrációjának időbeli változása az első, egy hetes vizsgálati időszakban Süllyápon és Budapesten (Gilice téri OLM pont).



8. ábra: A szállópor (PM_{10}) koncentrációjának időbeli változása az második, hetes vizsgálati időszakban Sülysápon és Budapesten (Gilice téri OLM pont).

Tézisek:

II.6.1. A lokális légszennyező források hatása a lokális légszennyezettségre azonosítható, a lokális kibocsátás hozzájárulásának mértéke a lokális levegőterheltséghez megállapítható a helyben mért levegőterheltségi szintek és az OLM megfelelő hálózati pontján mért levegőterheltségi szintek komponensenkénti összehasonlításával. [8]

II.6.2. Kedvezőtlen domborzati (medencehelyzet) és meteorológiai viszonyok esetén a lokális kibocsátások meghatározóvá válhatnak a lokális levegőterheltségi szintek kialakulásában. [8]

II.6.3. Az országosan, vagy nagyobb területi egységre jellemző levegőterheltségtől jelentősen eltérő helyi állapotokat az OLM hálózat nem mutatja ki. A lakossági együttműködés attitűdjének kialakítása elengedhetetlen egy adott településen a megfelelő levegőminőség biztosításához. [8]

III. A kutatás és a bemutatott eredmények hatása, visszhangja

A β -alanil-származékokkal kapcsolatos publikációra eddig 19 hivatkozás érkezett (Wos/Scopus jelölt), melyből 11 független (valamennyien külföldi szerzők), koordinációs kémia szakterületen aktív kutatók.

A Szilárd Település Hulladékkal kapcsolatos munkánkra az eddigiekben hivatkozás nem érkezett, ugyanakkor kutatásunk egy konkrét gyakorlati probléma megoldására irányult, melyet sikeresen teljesített. A fejlesztett módszert a 20/2006 (IV.5.) KvVM rendelet nevesíti, mint alkalmazandó módszert, és a módszerrel végzett vizsgálati kampányok eredményei széleskörűen hasznosulnak. egyrészt a hazai EPR és DRS rendszer számára tervezési alapadatok, másrészt az EU részére történő adatszolgáltatás alapját képezik.

A Szagvédelmi Kézikönyv kapcsán 3 nem független hivatkozás történt, és kutatások eredményei alapján a hazai levegőtisztaság-védelmi szabályozás fejlesztésre, kiegészítésre került. A kapcsolódó analitikai módszerfejlesztésekért kiemelkedő műszaki alkotásért adható „Wartha Vince Emlékérem” elismerésben részesített a Magyar Kémikusok Egyesülete.

Királis elválasztással kapcsolatos publikációinkra 1 nem független (Wos/Scopus jelölt) hivatkozás érkezett.

OPA/ET származékokkal kapcsolatos munkánkra 8 hivatkozás (melyből 7 Wos/Scopus jelölt) érkezett, 2 független. Ezirányú kutatásunk eredményei a gyakorlatban csak szűk körben kerültek hasznosításra, melynek vélelmezhetően egy konkurens méréstechnika (HPLC-MS) gyors fejlődése az oka.

Lokális légszennyezettséggel kapcsolatos munkámra eddig hivatkozás nem érkezett, de hatására országos szemléletformálási kampány kezdődött („Kölcsönkapott Levegő” és „Mindennapi Levegőnk” projektek), és kutatás kezdődött a hazai iskolák környezetének lokális légszennyezettség felmérésére. Lokális légszennyezettséggel kapcsolatos munkámat „Környezetünkért Emlékplakett” kitüntetéssel díjazta a környezetvédelemért felelős Energiaügyi Miniszter.

IV. Irodalmi hivatkozások listája

1. Kőrös Endre, *Bioszervetlen Kémia*, Gondolat, Budapest, 1980, ISBN: 963 280 816 9
2. Béres, András; Ágoston, Csaba, *A levegővédelmi szabályozás gyakorlati kérdései: A zavaró szaghatás problémája a tervezett jogszabályi változások tükrében* (2010) Konferencia a Jövő Nemzedékek Országgyűlési Biztosának Irodája szervezésében, Előadás, Budapest, 2010. október 4.,
3. Kim, J.H. and Scialli, A.R., *Thalidomide: the tragedy of birth defects and the hope for cancer therapy*. Birth Defects Research Part C: Embryo Today: Reviews, 93(2), 212-131. (2011)
4. Simpson RC, Spriggle JE, Veening H J Chromatogr 261:407–411 (1983)
5. 306/2010 (XII.23.) Kormányrendelet a levegő védelméről
6. Seinfeld, J.H. and Pandis, S.N., *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* (3rd ed.) John Willey and Sons (2016)
7. Ágoston, Csaba, *Az engedéllyel végzett zöldhulladék égetés hatása a levegőminőségre*, Budapest, Magyarország 2018.04.20. (Környezetvédelmi Szolgáltatások és Gyártók Szövetsége (KSZGYSZ), Magyar Víz- és Szennyvíztechnikai Szövetség, Óbudai Egyetem
8. H. Sigel, B. Prijs and R.B. Martin, Inorg. Chim. Acta, 1982. 56, 45
9. Sanna, D; Agoston, CG; Sovago, I; Micera, G *Potentiometric and spectroscopic studies on the copper(II) complexes formed by oligopeptides containing histidine with a protection at the terminal amino group*, POLYHEDRON 20:9-10 pp. 937-947., 11 p. (2001)
10. C., G., Ágoston; T., Kowalik-Jankowska; I. Sóvágó; J. Chem. Soc., Dalton Trans. (1999) 3295.
11. Faitli, J.; Csőke, B.; László, T.; Győrfi, A.; Kecskés, Á.; Burai, L.; Ágoston, Cs.; Béres, A.; Nagy, Gy.; Faitli, J (szerk.) *Települési szilárd hulladékok vizsgálata*. Műszaki Szakértői Tanulmány 2006. pp. 1-35., 35 p. (2006) Megjelenés: Magyarország, Zártolt közlemény:2866232 Nyilvános Forrás Egyéb (Kutatási jelentés (közzétett))
12. 6/2011 (I.14.) VM rendelet a levegőterheltségi szint és a helyhez kötött légszennyező források kibocsátásának vizsgálatával, ellenőrzésével, értékelésével kapcsolatos szabályokról
13. Ágoston, Csaba; *Műszaki és jogszabályi lehetőségek bűzforrások kibocsátásának mérésére engedélyezési eljárásokban, hatósági ellenőrzések során és monitoring kötelezettségek teljesítése esetén* In: IMSYS (szerk.) XVII. Környezetvédelmi és iparbiztonsági konferencia (2015) p.

14. Ágoston, Cs.: A környezeti szagforrások azonosítása, a szag eredetének megkeresése.
In: A bűzkibocsátás jelenlegi szabályozása. A továbbfejlesztés lehetőségei,
Konferencia, OPAKFI Környezetvédelmi Szakosztály, Budapest, 2009. január 29.
15. Juvancz, Z.; Bodáné-Kendrovics, R.; Laczkó, Z.; Iványi, R.; Varga, E. Chiral
Separations of Pyrethroic Acids Using Cyclodextrin Selectors. *Molecules* 2022, 27,
8718.

V. A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

1. Agoston, CG; Miskolczi, Z; Nagy, Z; Sovago, I
The effect of ring size of fused chelates on the stability constants and spectroscopic properties of nickel(II) and palladium(II) complexes of peptides,
 POLYHEDRON 22:18 pp. 2607-2615., 9 p. (2003)
2. Faitli, J.; Nagy, S.; Ágoston, Cs.; Szabó, A.; Szakolczai, P.
EPR and DRS Based Municipal Solid Waste Analysis Seasonal Campaigns in Hungary,
 In: CHANIA 2023 - 10th International Conference on Sustainable Solid Waste Management Chania (2023) pp. 1-8. Paper: 3. paper in Session V., 8 p.
3. Faitli, József; Leitöl, Csaba; Ágoston, Csaba
The evolution of the Hungarian MSW sampling methodology from Pierre Gy's MODECOM to sophisticated EPR and DRS based one
 In: Raffaello, Cossu (szerk.) Proceedings of the VENICE2024 10th International Symposium on Energy from Biomass and Waste (2024), 6 p.
4. Béres, András; Ágoston, Csaba;
 Lovrityné, Kiss Beáta
Szagvédelmi kézikönyv, 46 p. (2014), Magyar Mérnöki Kamara Környezetvédelmi Tagozat, http://www.kvtagozat.hu/pictures/Szagvedelmi_kezikonyv_2.veglegesvba.pdf,
 f,
5. Juvancz, Z.; Bodane-Kendrovics, R.;
 Agoston, C.; Czegledi, B.; Kaleta, Z.;
 Jicsinszky, L.; Riszter, G.
Chiral Selectivities of Permethylated α -, β -, and γ -Cyclodextrins Containing Gas Chromatographic Stationary Phases towards Ibuprofen and Its Derivatives
 INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES 25:14 Paper:7802, 11 p. (2024)
6. Juvancz, Zoltan; Bodane-Kendrovics, Rita; Agoston, Csaba; Maklari, Dora;
 Voller, Csanad Csaba; Kaleta, Zoltan
Chiral Separation of Mandelic Acid Derivatives Using Various Permethylated Cyclodextrin Selectors Containing Stationary Phases in GC,
 MOLECULES 30:3 Paper: 451, 16 p. (2025)
7. Toro, T; Agoston, C; Molnar-Perl, I
GC-MS study on the composition of the o-phthalaldehyde/ethanethiol derivatives of aliphatic amines
 CHROMATOGRAPHIA 60 pp. 153-159., 7 p. (2004)
8. Ágoston, Csaba
Az inverziós légköri hőmérsékleti rétegződés légszennyező anyagok terjedésében játszott szerepének jelentősége egy gyakorlati példán keresztül, In: Koltai, László (szerk.) REJTŐ '50' JUBILEUMI KONFERENCIA, Budapest, Magyarország: Óbudai Egyetem (2022) pp. 13-20., 8 p.

VI. További tudományos közlemények (Opcionális)

-