

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM

Kémia Doktori Iskola

Anilin származékok és egyfalú szén nanocsövek kölcsönhatásának fluoreszcenciás és elméleti kémiai vizsgálata

PhD értekezés tézisei

Peles-Lemli Beáta

Témavezető:

Dr Kunsági-Máté Sándor
egyetemi docens



PÉCS, 2010

1. Bevezetés

A szén nanocsövek (Carbon NanoTubes – CNTs) valószínűleg jól alkalmazhatóvá válnak majd az energia, az elektronika és ehhez kapcsolódóan az információtechnika valamint az anyagtudományok területén is. Jelenleg ezen anyagok kémiai, biokémiai és biológiai valamint orvosi felhasználhatósága azért korlátozott, mert a legtöbb szerves és szervetlen oldószerben csakúgy, mint a vízben gyakorlatilag oldhatatlanok. A szén nanocsövek oldására csak alacsony permittivitású oldószerek nagyon szűk csoportja képes, ez viszont elektrokémiai tulajdonságaik, pl. a bennük megvalósuló iontranszport vizsgálatát is nehezkesé teszi. A felsorolt okok miatt a vizes és szerves rendszerekben oldható szén nanocsövek utáni érdeklődés igen nagy. A CNTs oldására illetve diszpergálására vonatkozóan két hatékony módszer ismert: az egyik a CNTs kémiai módosítása kovalens kötés létrehozásával, a másik a fizikai módosítás nem-kovalens kötésekkel.

Amerikai kutatók eredményei alapján lehetőség van egyfalú szén nanocsövek (Single-Walled Carbon NanoTubes – SWCNTs) anilinben történő oldására. Ezt követően az anilinben oldott nanocsövek után az érdeklődés megnőtt. Ennek ellenére az oldódás során lejátszódó folyamatok tisztázása még nem történt meg. A kutatók elképzelése szerint, az anilin a SWCNTs-vel töltés-átadáson alapuló komplexet képez. Ugyanakkor valószínűsíthető, hogy az anilin – SWCNT kölcsönhatásban szerepet játszik az anilin és a nanocső aromás elektronrendszere között létrejövő π - π típusú kölcsönhatás is.

A π -elektron-rendszereket tartalmazó molekulák között létrejövő kölcsönhatások közismerten fontos szerepet játszanak a biológiai folyamatokban, valamint a kémia számos területén. Aromás szegmenssel rendelkező molekulák esetében a köztük fellépő π - π kölcsönhatáshoz kapcsolódóan sikerült egyértelműen meghatározni az oldószer permittivitásának a komplexek stabilitására gyakorolt hatását.

2. Célkitűzés

Korábbi, π - π kölcsönhatásokra vonatkozó tanulmányaink felhasználásával célul tűztük ki egyfalú szén nanocsövek és anilin közti kölcsönhatás részletes vizsgálatát a szén nanocsövek oldhatóságának nem kovalens kölcsönhatáson alapuló növelése céljából. Az oldódási mechanizmus részletesebb felderítése érdekében kísérleteink egy részét kiterjesztettük az SWCNT egyes anilin származékokban történő solvatációjára is. Elemeztük a molekulakörnyezet permittivitásának hatását szén nanocsövek és anilin származékok között létrejövő gyenge kölcsönhatásokra, valamint meghatároztuk az adszorpciós folyamatot kísérő

termodinamikai paramétereket. Az oldási és szolvatációs folyamat molekuláris szintű értelmezése céljából kvantumkémiai számításokat végeztünk, melynek során egyrészt az oldószer hatását vizsgáltuk az anilin – SWCNT kölcsönhatásra, valamint az optikai és szerkezeti tulajdonságok közti összefüggéseket tanulmányoztuk.

3. Alkalmazott vizsgálati módszerek

A kísérletes munka során a mérések Fluorolog $\tau 3$ spektrofluoriméterrel (Jobin-Yvon/Spex) valamint Nicolet NXR 5700 FT-IR-Raman (UNICAM) fotométerrel történtek. Az elméleti számítások során a kvantumkémiai analízist a GAUSSIAN 03 Rev.B.05. valamint a TURBOMOLE 5.7.1. programokkal, a molekuladinamikai szimulációkat pedig a HyperChem Professional 7 szoftverrel végeztük.

4. Új tudományos eredmények

Munkánk során egyfalú szén nanocsövek egyes anilin származékokban történő szolvatációját, ezen belül az anilin – nanocső kölcsönhatás permittivitástól való függését tanulmányoztuk fluoreszcenciás és elméleti kémiai módszerekkel. Eredményeink alapján a következő megállapításokat tettük:

1. Az SWCNT-k anilinben a korábban leírtaknál mintegy három nagyságrenddel kisebb mértékben oldódik, eszerint 0,001 mg SWCNT oldódható fel 1 ml anilin oldószerben.
2. A korábbi elképzelések alapján az anilin szén nanocsövekkel töltés-átadáson alapuló komplexet képez. Az általunk vizsgált anilinszármazékok esetében a $-\text{CH}_3$ csoportok szterikus gátlása, mindenekelőtt az *N,N*-dimetil-anilin származék esetében, előrevetíti az oldódásnak a korábban közöltekénél összetettebb jellegét, melyben π - π típusú kölcsönhatások is szerepet játszanak.
3. Az anilin – SWCNT, a 2,6-dimetil-anilin – SWCNT és *N,N*-dimetil-anilin – SWCNT oldatok különböző permittivitású szerves oldószerekkel történő hígítása során a nanocső mikrokörnyezete megváltozik, a társ-oldószer molekulái is bekapcsolódnak az anilin – nanocső kölcsönhatásba
4. Az anilin – SWCNT különböző alkoholos oldószerben történő komplexképződését kísérő szabadentalpia változás kisebb, mint amit korábban aromás molekulák π - π típusú kölcsönhatásai során leírtak. A termodinamikai paraméterek permittivitás függő

változása ugyanakkor alacsonyabb permittivitású oldószerben a korábban tapasztaltaknak megfelelően erősebb kölcsönhatást mutatnak.

5. Elméleti kémiai számításaink során igazoltuk, hogy a BP86-D és meghatározott esetekben az MPWB1K funkcionálok alkalmasak az anilin – nanocső kölcsönhatás leírására. A szimulációk során modellrendszerünk anilin – $C_{42}H_{16}$ (n,0) SWCNT fragmens illetve anilin – $C_{64}H_{20}$ (n,0) SWCNT fragmens + 2 MeOH (ahol n=8, 10 vagy 30) összetételűek voltak, így nem meglepő tehát, hogy a vizsgált folyamatokat kísérő, kísérletileg meghatározott szabadentalpia változások közvetlenül nem mérhetőek össze a számított kölcsönhatási energiákkal.
6. A számított adszorpciós energiák alapján a π - π kölcsönhatáson alapú anilin – SWCNT komplexek stabilabbak, mint a T-alakú szerkezetek. A DFT eredmények alapján az anilin csúcs lefelé irányuló elhelyezkedése eredményezi az energetikailag legkedvezőbb szerkezetet.
7. Eredményeink alapján a molekuláris környezet megváltozásának hatására feltételezhetően az anilin – nanocső komplex szerkezetének és a kölcsönhatásban résztvevő anilin konformációjának változása következik be.
8. A TDDFT számítások eredményeit összehasonlítottuk a kísérleti eredményekkel. A kísérletek során az anilin – SWCNT oldat alkoholos hígítása nem okoz észrevehető eltérést a mért spektrumok alakjában és elhelyezkedésében. Az elméleti analízis során a metanol molekulák jelenléte igen gyenge új átmenteket eredményez, melyek hatására gyakorlatilag nem változik a számított spektrum alakja sem.
9. A rezgési tulajdonságokra vonatkozó molekuladinamika szimulációk során megfigyelhető a cső keresztmetszetének időben változó deformációja, mely a flexibilis molekuláris részletekkel rendelkező molekulák adszorpcióját preferálja.

Reményeink szerint eredményeink hozzájárulhatnak a szén nanocsövek oldhatóságának a növeléséhez, továbbá hatékonyan növelhetik az aromás molekulák csomagolóanyagként történő alkalmazhatóságát is.

5. Tudományos közlemények, előadások

I. A PhD értekezés alapjául szolgáló referált tudományos közlemények

1. **B. Peles-Lemli, L. Kollár, S. Kunsági-Máté:**
Thermodynamics of the solvation of carbon nanotubes: exchange of aniline to primary alcohols on the surface of carbon nanotubes
Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures (2010) nyomdában IF= 0.680
2. **B. Peles-Lemli, G. Matisz, A.-M. Kelterer, W.M.F. Fabian, S. Kunsági-Máté:**
Non-covalent Interaction Between Aniline and Carbon Nanotubes: Effect of Nanotube Diameter and the Hydrogen-bonded Solvent Molecules on the Adsorption Energy and the Photophysics.
Journal of Physical Chemistry C 114 (2010) 5898-5905. IF=3.396
3. **B. Peles-Lemli, P. Ács, L. Kollár, S. Kunsági-Máté:**
Permittivity-dependent carrier behavior of aniline derivatives towards common low-permittivity solvents in the solubilization of carbon nanotubes
Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 16 (2008) 247-257. IF= 0.680
4. **B. Peles-Lemli, J. Peles-Lemli, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:**
Temperature-independent longitudinal waves obtained on carbon nanotubes with special emphasis on the tubular ion-transport
Studia Universitatis Babes-Bolyai, Seria Chemia 2 (2008) 37-41. IF=0.000

II. A PhD értekezés témakörében készült nem referált közlemények, konferencia absztraktok, előadások és poszterek

II.a Teljes terjedelemben megjelent nem referált közlemények és konferencia absztraktok

1. **B. Peles-Lemli, S. Kunsági-Máté:**
Szén nanocsövek rezgéseinek tanulmányozása elméleti kémiai módszerekkel - NIIF szuperszámítógép a nanotechnológiában
NIIF Hírlevél (Publisher: Miklós Nagy, director of the Hungarian National Infrastructure Development Program Office, Editor: Tamás Máray, ISSN 1588-7316) 4(2) 2007 pp. 9
2. **B. Peles-Lemli, P. Ács, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:**
A molekulakörnyezet permittivitásának hatása szén nanocsövek és aromás molekulák gyenge kölcsönhatására
Műszaki Kémiai Napok '07, (Pannon University, Veszprém (Hungary), Editor: Endre Nagy, ISBN 978 963 9696 15 0), 2007 pp. 253-257.
3. **B. Peles-Lemli, J. Peles-Lemli, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:**
Szén nanocsövekben megvalósuló, iontranszportot meghatározó karakterisztikus rezgések és ezek meglepő hőmérsékletfüggése
Műszaki Kémiai Napok '07, (Pannon University, Veszprém (Hungary), Editor: Endre Nagy, ISBN 978 963 9696 15 0), 2007 pp. 262-265.

II.b Nemzetközi konferencia absztraktok, előadások és poszterek

1. **B. Peles-Lemli**, W.M.F. Fabian, A.-M. Kelterer, L. Kollár, S. Kunsági-Máté:
Weak Interactions of Aromatic Compounds Regarding the Solvation Mechanisms of Aniline-Carbon Nanotube Aggregates in Alcoholic Solutions
10th International Conference on Calixarenes, Korea University, Seoul, South Korea, 13-16 July, 2009., P129
2. **B. Peles-Lemli**, W.M.F. Fabian, A.-M. Kelterer, S. Kunsági-Máté:
Adsorption of aniline derivatives on carbon nanotube as key step towards permittivity-dependent solubilisation
Molecular Modelling in Chemistry and Biochemistry (MOLMOD 2009), Cluj-Napoca (Romania) 2-4 April 2009
3. **B. Peles-Lemli**
The role of the solution permittivity in the solubilization of anilin – carbon nanotubes in common solvents
DissertantInnenseminar in Chemie III (LV 646.516) at Institute of Chemistry (IfC) of the Karl-Franzens University, Graz (Austria), 23 January 2009.
4. **B. Peles-Lemli**, P. Ács, L. Kollár, S. Kunsági-Máté:
The role of the solution permittivity in the stability of aniline – SWCNT interaction in alcoholic solvents
Nanotechnology Materials and Devices Conference 2008, Kyoto (Japan), 20-22 October 2008.
5. **B. Peles-Lemli**, W.M.F. Fabian, S. Kunsági-Máté:
Adsorption of aniline molecule on the planar and rolled graphene surfaces due to its role in the solubilization of carbon nanotubes
44th Symposium on Theoretical Chemistry, From Basic Principles to Applications, Ramsau am Dachstein (Austria), 23-27 September 2008.
6. **B. Peles-Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
The effect of vibration dynamics of SWCNTs on their ion and molecule transport
9th Symposium on Instrumental Analysis, Pécs (Hungary), 29 June - 2 July 2008.
7. **B. Peles-Lemli**, P. Ács, L. Kollár, S. Kunsági-Máté:
Solubilization of SWCNTs: Permittivity-dependent carrier property of aniline derivatives
9th Symposium on Instrumental Analysis, Pécs (Hungary), 29 June - 2 July 2008.
8. **B. Peles-Lemli**, P. Ács, L. Kollár, G. Nagy and S. Kunsági-Máté:
The effect of solvent permittivity on the weak interaction between carbon nanotubes and aromatic molecules
3rd International Conference on Optoelectronics and Spectroscopy of Nano-structured Thin Films and Materials, Beijing (China), Capital Normal University, 15-19 October 2007.

9. **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, L. Kollár, G. Nagy and S. Kunsági-Máté:
Effect of dynamical motions of carbon nanotubes on the ion-transport behavior and their solubilization processes
3rd International Conference on Optoelectronics and Spectroscopy of Nano-structured Thin Films and Materials, Beijing (China), Capital Normal University, 15-19 October 2007.
10. **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
Temperature-independent longitudinal waves obtained on carbon nanotubes with special emphasis on the tubular ion-transport
Molecular Modelling in Chemistry and Biochemistry (MOLMOD 2007), Arcalia (Romania) 5-8 July 2007
11. **B. Lemli**, J. Peles, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Molecular dynamics study of single-walled carbon nanotubes in accordance to their solubilization
1st European Chemistry Congress, Budapest (Hungary), 27-31 August 2006.

II.c Hazai konferencia absztraktok, előadások és poszterek

1. **B. Peles-Lemli**, P. Ács, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Az oldószer permittivitásának hatása szén nanocsövek oldhatóságára
Centenáriumi Vegyészkonferencia (Centenary Chemist Conference), Sopron, (Hungary), 29 May – 1 June 2007
2. **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Szén nanocsövek karakterisztikus rezgései és a dinamikai tulajdonságok hőmérsékletfüggése
Centenáriumi Vegyészkonferencia (Centenary Chemist Conference), Sopron, (Hungary), 29 May – 1 June 2007
3. **B. Peles-Lemli**, P. Ács, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Szén nanocsövek és anilin származékok molekuláris rezgéseinek szerepe a szolvatáció folyamatában
Centenáriumi Vegyészkonferencia (Centenary Chemist Conference), Sopron, (Hungary), 29 May – 1 June 2007
4. **B. Peles-Lemli**, P. Ács, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
A molekulakörnyezet permittivitásának hatása szén nanocsövek és aromás molekulák gyenge kölcsönhatására
Műszaki Kémiai Napok '07 (Conference of Chemical Engineering '07) Veszprém , (Hungary), 25-27 April 2007
5. **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
Szén nanocsövekben megvalósuló, iontranszportot meghatározó karakterisztikus rezgések és ezek meglepő hőmérsékletfüggése
Műszaki Kémiai Napok '07 (Conference of Chemical Engineering '07), Veszprém , (Hungary), 25-27 April 2007

6. **B. Lemli**, J. Peles, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Szén nanocsövek adszorpcióképességének vizsgálata
II. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia (II. Conference on Environmental Sciences of the Carpathian Basin), Pécs, (Hungary), 1-3 June 2006
7. **B. Lemli**, J. Peles, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Szén nanocsövek rezgési tulajdonságai
Műszaki Kémiai Napok '06 (Conference of Chemical Engineering '06), Veszprém (Hungary), 25-27 April 2006

III. A PhD értekezés témakörén kívül készült egyéb referált tudományos közlemények

1. **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, I. Bitter, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
Competitive Thermodynamic and Kinetic Processes During Dissociation of Some Host-Guest Complexes of Calix[4]arene Derivatives
Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry 59(3-4) (2007) 251-256. IF=1.153
2. **B. Lemli**, J. Peles, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
The rate of host-guest complex formation of some calixarene derivatives towards neutral aromatic guests
Supramolecular Chemistry 18(03) (2006) 251-256. IF=1.861
3. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Lemli**, I. Bitter, G. Nagy, L. Kollár:
Host-guest interaction between water-soluble calix(6)arene hexasulfonate and p-nitrophenol
Thermochimica Acta 425(1-2) (2005) 121-126. IF=1.230
4. **B. Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, G. Molnár, S. Kunsági-Máté:
The predictive behavior of the phase transition temperatures of imidazolium based ionic liquids
Lecture Series on Computer and Computational Sciences 4A (2005) 315-318. IF=0.000
5. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Lemli**, I. Bitter, G. Nagy, L. Kollár:
Increased complexation ability of water-soluble calix(4)resorcinarene octacarboxylate towards phenol by the assistance of Fe(II) ions
Journal of Physical Chemistry B 108 (2004) 15519-15522. IF=3.834
6. S. Kunsági-Máté, **B. Lemli**, G. Nagy, L. Kollár:
Conformational change of the cation-anion pair of an ionic liquid related to its low-temperature solid state phase transitions
Journal of Physical Chemistry B 108 (2004) 9246-9250. IF=3.834

IV. A PhD értekezés témakörén kívül készült nem referált közlemények, konferencia absztraktok, előadások és posztterek

IV.a Teljes terjedelemben megjelent nem referált közlemények és konferencia absztraktok

1. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, C. Schür, H.P. Strunk
Fenolszármazékok adszorpciója GaAs(001) kristály felületén
Műszaki Kémiai Napok '07, (Pannon University, Veszprém (Hungary), Editor: Endre Nagy, ISBN 978 963 9696 15 0), 2007 pp. 266-270.
2. J. Peles, **B. Lemli**, I. Bitter, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
Kalixarének aromás semleges molekulákkal alkotott komplexeinek meglepő disszociációs dinamikája
Műszaki Kémiai Napok '06, (Pannon University, Veszprém (Hungary), Editor: Endre Nagy, ISBN 963 9495 86 7), 2006 pp. 173-176.
3. **B. Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
Imidazólium kation alapú ionfolyadékok fázisátalakulásai
XI. Nemzetközi Vegyészkonferencia, (Hungarian Technical Scientific Society of Transylvania, Editor: Kornélia Majdik, ISBN 973 7840 07 0), 2005 pp. 185-188.
4. J. Peles, **B. Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
Kalixarének mint molekuláris kapszulák komplexeinek stabilitását meghatározó versengő termodinamikai és kinetikai folyamatok
XI. Nemzetközi Vegyészkonferencia, (Hungarian Technical Scientific Society of Transylvania, Editor: Kornélia Majdik, ISBN 973 7840 07 0), 2005 pp. 198-201.
5. S. Kunsági-Máté, **B. Lemli**, G. Molnár, G. Nagy, L. Kollár:
Imidazólium kation alapú ionfolyadékok fázisátmeneti hőmérsékleteinek tervezhetősége
Műszaki Kémiai Napok '05, (Pannon University, Veszprém (Hungary), Editor: Endre Nagy, ISBN 963 9495 71 9), 2005 pp. 298-301.

IV.b Nemzetközi konferencia absztraktok, előadások és posztterek

1. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, C. Schür, H.P. Strunk
Adsorption of phenol derivatives on GaAs(001) surfaces
3rd International Conference on Optoelectronics and Spectroscopy of Nano-structured Thin Films and Materials, Beijing (China), Capital Normal University, 15-19 October 2007.
2. **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, I. Bitter, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté:
The role of competitive thermodynamic and kinetic processes in the stabilization of host-guest complexes of calix[4]arene derivatives
Molecular Modelling in Chemistry and Biochemistry (MOLMOD 2007), Arcalia (Romania) 5-8 July 2007
3. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, C. Schür, H.P. Strunk:
Molecular modelling of adsorption of phenols on GaAs(001) surface
Molecular Modelling in Chemistry and Biochemistry (MOLMOD 2007), Arcalia (Romania) 5-8 July 2007

4. J. Peles, **B. Lemli**, I. Bitter, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
The stabilization of host-guest complexes of calixarene with neutral guests: competitive kinetic and thermodynamic processes
1st European Chemistry Congress, Budapest (Hungary), 27-31 August 2006.
5. **B. Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
The phase transitions of imidazolium based ionic liquids
11th International Conference of Chemistry, Cluj (Romania), 11-13 November 2005.
6. J. Peles, **B. Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Competitive thermodynamic and kinetic processes determining the stability of complexes of calixarenes as molecular capsules
11th International Conference of Chemistry, Cluj (Romania), 11-13 November 2005.
7. **B. Lemli**, L. Kollár, G. Nagy, G. Molnár, S. Kunsági-Máté
The predictive behavior of the phase transition temperatures of imidazolium based ionic liquids
International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2005 (ICCMSE 2005), Loutraki (Greece), 21-26 October 2005.
8. **B. Lemli**, S. Kunsági-Máté, G. Nagy, L. Kollár
Structural changes of cation-anion pair of the imidazolium-hexafluorophosphate ionic liquid with consequences on its solid-solid and solid-liquid phase transitions
8th Symposium on Instrumental Analysis, Graz (Austria), 25-28 September 2005.
9. **B. Lemli**, J. Peles, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Effect of the tBu substituents of calixarene host molecules on the rate of host-guest formation with neutral aromatic guests
8th Symposium on Instrumental Analysis, Graz (Austria), 25-28 September 2005.
10. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Lemli**, G. Nagy, L. Kollár
Guest – induced entropy compensation effect on the stability of the calix[6]arene – phenol host-guest complexes
8th Symposium on Instrumental Analysis, Graz (Austria), 25-28 September 2005.
11. **B. Lemli**, S. Kunsági-Máté, G. Nagy, L. Kollár
The rate of host-guest complex formation of some calixarene derivatives towards neutral aromatic guests
8th International Conference on Calixarenes (CALIX2005), Prague (Czech Republic), 25-29 July 2005.
12. S. Kunsági-Máté, **B. Lemli**, K. Szabó, G. Nagy, L. Kollár
Theoretical evaluation of the unusual entropy change during formation of calix[6]arene – phenol host-guest complexes
8th International Conference on Calixarenes (CALIX2005), Prague (Czech Republic), 25-29 July 2005.

13. S. Kunsági-Máté, **B. Lemli**, G. Nagy, L. Kollár
Energetics of the proton tunneling channels related to the cyclic hydrogen bonds at lower rim of cone conformers of methyl-, thia- and oxa-calix[4]arenes
7th Symposium on Instrumental Analysis, Pécs (Hungary), 22-24 September 2003.

IV.c Hazai konferencia absztraktok, előadások és poszterek

1. S. Kunsági-Máté, K. Szabó, **B. Peles-Lemli**, J. Peles-Lemli, C. Schür, H.P. Strunk
Fenolszármazékok adszorpciója GaAs(001) kristály felületén
Műszaki Kémiai Napok '07 (Conference of Chemical Engineering '07), Veszprém ,
(Hungary), 25-27 April 2007
2. J. Peles, **B. Lemli**, I. Bitter, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Szelektív kémiai érzékelésre alkalmas kalixarén származékok komplexképződési
dinamikája
II. Kárpát-medencei Környezettudományi Konferencia (II. Conference on
Environmental Sciences of the Carpathian Basin), Pécs (Hungary), 1-3 June 2006
3. J. Peles, **B. Lemli**, I. Bitter, L. Kollár, G. Nagy, S. Kunsági-Máté
Kalixarének aromás semleges molekulákkal alkotott komplexeinek meglepő
disszociációs dinamikája
Műszaki Kémiai Napok '06 (Conference of Chemical Engineering '06), Veszprém
(Hungary), 25-27 April 2006
4. **B. Lemli**
Környezeti szempontból kiemelkedő jelentőségű ionfolyadékok szerkezetváltozásainak
vizsgálata
X. Országos Felsőoktatási Környezettudományi Diákkonferencia (X. National Higher
Educational Environmental Science Student's Conference), Eger (Hungary), 10-12
April 2006.
5. S. Kunsági-Máté, **B. Lemli**, G. Molnár, G. Nagy, L. Kollár
Imidazólium kation alapú ionfolyadékok fázisátmeneti hőmérsékleteinek tervezhetősége
Műszaki Kémiai Napok '05 (Conference of Chemical Engineering '05), Veszprém
(Hungary), 26-28 April 2005.
6. **B. Lemli**
Ionfolyadékok szerkezetváltozásainak vizsgálata
XXVII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia (XXVII. National Scientific
Students' Associations Conference), Budapest (Hungary), 21-23 March 2005.
7. **B. Lemli**
Ionfolyadékok szerkezetváltozásainak vizsgálata
Tudományos Diákköri Konferencia, regionális forduló (Scientific Students'
Associations Conference, regional round), Pécs (Hungary), 26 November 2004.
8. S. Kunsági-Máté, **B. Lemli**, G. Nagy, L. Kollár
Egy ionfolyadék meglepő szilárd-szilárd fázisátmenetének vizsgálata
Vegyészkonferencia 2004. (Chemist Conference 2004), Balatonföldvár (Hungary), 30
June – 2 July 2004.