

**XXX. JUBILEUMI
ORSZÁGOS TUDOMÁNYOS
DIÁKKÖRI KONFERENCIA**

KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ

Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar

Pécs, 2011. április 27-29.



Analitikai kémia I. tagozat

**Aminonaftol sztereoizomerek nagyhatékonyságú
folyadékkromatográfiás elválasztása**

Aranyi Anita, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Péter Antal** egyetemi tanár
Dr. habil. Ilisz István egyetemi adjunktus
SZTE Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az élő szervezetekben a királis molekulák kiemelkedő jelentőséggel bírnak. A természetben előforduló biológiailag fontos vegyületek (fehérjék, aminosavak, cukrok, enzimek) mind királisak. Szervezetünk ugyanannak a molekulának a két konfigurációját nagyon látványosan különböztetheti meg, ezért nagy jelentőségű az enantiomerek tisztasága.

Bármilyen úton is történik a királis molekula előállítása, a királis tisztaság ellenőrzésére elengedhetetlen a szintézist követő valamilyen elválasztási módszer alkalmazása. Ennek egyik legelterjedtebb módja a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás analízis. Királis vegyületek elválasztása történhet közvetett illetve közvetlen módszerrel. Közvetett formában származékképző segítségével, közvetlen úton pedig királis oszlop vagy eluens alkalmazásával. Munkám során a közvetlen módszert alkalmaztam, és azon belül is az oszlop szolgáltatja a királis körülményeket.

Az aminonaftolok jelentőségét az adja, hogy sztereospecifikus reakciókban hatékony katalizátorok, illetve sok hasznos szintézis kiindulási molekulájaként szintetikus „építőkövekként” használhatók.

Dolgozatom célja aminonaftol sztereoizomerek elválasztása, továbbá az elválasztás optimalizálása Phenomenex Lux Cellulose-1, illetve Phenomenex Lux Amylose-2 királis folyadékkromatográfiás oszlopokon. A kitűzött cél elérése érdekében öt különböző aminonaftol származék enantiomerjeinek illetve diasztereomereinek kromatográfiás viselkedését tanulmányoztuk. Vizsgáltuk a mozgófázis összetételének illetve a hőmérséklet változásának hatását a retenciós paraméterekre. Az elválasztás hőmérsékletfüggéséből számítottuk a standard entalpia, entrópia és szabadentalpia változások értékeit. A mérési eredmények alapján az elválasztás lehetséges mechanizmusára következtetéseket vontunk le.

Raman-mikrospektrometria alkalmazása mennyiségi elemzésben**Farkas István, IV. évf. vegyészmérnök BSc**

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia tanszék

A műanyag- és gyógyszeripar a legdinamikusabban fejlődő iparágak közé tartozik. Mindkét iparterület alapvető kérdése a minták mennyiségi összetételének pontos ismerete. A fejlett roncsolásos technikákkal ellentétben a roncsolásmentes technikák még nem elterjedtek a mennyiségi elemzésben való felhasználásban.

Munkám során a Raman-mikrospektrometria által nyújtott lehetőségeket próbáltam alkalmazni és kiterjeszteni a mennyiségi elemzésben történő felhasználásra. Számos területen megvizsgáltam, hogy a jelenleg alkalmazott vizsgálati módszereket hatékonyan kiegészítheti, ill. felválthatja-e a Raman-mikrospektrometria. Minden mintát megvizsgáltam ún. Raman-térképezéssel és az adott területen rutinszerűen használt analitikai módszerekkel is. Az általam vizsgált területek (műanyag-hulladékok ill. különböző típusú gyógyszerminták összetételének vizsgálata) nagy részében sikerült kiválasztani, vagy kidolgozni a Raman-mikrospektrometria mennyiségi elemzésben leghatékonyabb felhasználási módját.

Dolgozatomban sorra ismertetem a Raman-mikrospektrometria alkalmazását a műanyag- és gyógyszeripar területein. Az autóiparból származó, sűrűségük alapján szétválasztott műanyag-hulladékok frakcióinak összetételét határoztam meg, és az analízis hatékonyságát az iparban jelenleg elfogadott módszerekkel hasonlítottam össze. Egy gyógyszeripari mintában egy adott hatóanyag különböző típusú ciklodextrinokkal végbemenő kölcsönhatását vizsgáltam. Ezt követően egy már forgalomban lévő gyógyszerkészítmény pontos összetételét próbáltam meghatározni. Az imént felsorolt analízisek során szerzett tapasztalataimat felhasználva célul tűztem ki olyan kiértékelési (ún. kemometriai) módszerek tesztelését és alkalmazását a Raman-térképezésben, melyekkel a számolt koncentráció pontosabban megközelíti a komponensek valós koncentrációit, illetve a koncentráció-bebecslés bizonytalansága is számíthatóvá válik. Modell-komplexek Raman-térképein teszteltem és alkalmaztam ezeket a modelleket.

Munkámmal igyekeztem hozzájárulni azokhoz a kutatásokhoz, amelyek a kvantitatív analízis pontosságát hivatottak továbbfejleszteni a műanyagipar és a gyógyszerformálás területén. Az elért eredmények azt igazolják, hogy a Raman-mikrospektroszkópia fontos eszköze lehet a minél jobb minőségű gyógyszer-és műanyagipari termékek előállításának.

Új oligoszacharid típusú aciklikus HPLC királis állófázis vizsgálata

Gulyás Zsanett, II. évf. Molekuláris biológia MSc

DE Általános Orvostudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Harangi János** egyetemi docens
Pannon Egyetem Műszaki Informatikai Kar
Dr. Harangi Mariann egyetemi adjunktus
DE-OEC I. Belgyógyászati Klinika

A királis állófázisok legtöbbször rendelkeznek egy olyan ciklikus szerkezettel, amely mellett, hogy királis tulajdonságú, a ciklus merev, jól definiált belső szerkezetű. Az ilyen állófázisok egyik legismertebb példája a ciklodextrin, amely glükóz egységekből áll, a glükóz egységek $\alpha(1\rightarrow4)$ kötésekkel kapcsolódnak egymáshoz, és alkotnak egy királis tulajdonságú üreget tartalmazó ciklust. A királis elválasztó képesség attól függ, hogy az elválasztandó optikai izomerek legalább egyike illeszkedjen a királis üregbe.

A ciklodextrin gyűrű felnyitásával egy maltooligomer molekulához jutunk, melyet HPLC állófázis hordozóra kötve és megfelelően védve a glükóz hidroxil csoportjait egy aciklikus királis állófázishoz jutunk, amely állófázis megtartja várakozásunk szerint a kvázi ciklikus szerkezetet, amelyet a dextrán α -hélix szerkezete tartalmaz. Mivel azonban nem tartalmaz ciklust, flexibilis szerkezetű, bármilyen molekulát át tud ölelni, és a maltooligomer királis tulajdonsága miatt várható királis elválasztás is. Az előbbieken vázolt állófázis elkészítését követően a permetilezett malto-oligomer állófázist először a polaritás szempontjából teszteltük, és a várakozásnak megfelelően egy mérsékelt poláris, fordított fázis jellegű tulajdonságot tapasztaltunk.

A királis elválasztó képességet néhány D és L szénhidrát származék felhasználásával teszteltük, de királis elválasztást nem tapasztaltunk. További nem szénhidrát típusú optikai izomerek elválasztására vonatkozó kísérletek döntik el, hogy az aciklikus szerkezet képes-e királis elválasztásra.

CO₂ mikrocella fejlesztése és alkalmazása PEKM mérőcsúcsként, élesztőtelep CO₂ kibocsátásának modellszámításos becsléséhez

Kiss András, V. évf. biológus

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Nagy Géza egyetemi tanár
PTE Fizikai Kémia Tanszék

Munkámban céлом volt megvizsgálni, hogy milyen módon, milyen hatékonysággal végezhető a pásztázó elektrokémiai mikroszkópia gyakorlatában gázfázisban történő pásztázással mérés. Milyen lehetőség kínálkozik hasznos információt hordozó gázfázisú PEKM imázs készítésére. Tudomásom szerint az egyetlen, amperometriás Clark-elektrodos elővizsgálatokon [1] kívül hasonló próbálkozásról ez ideig nem jelent meg közlemény.

A feladat megoldásához terveztem és építettem egy mikroméretű, légréses Severinghaus-típusú szén-dioxid mérőcellát [2], mely belső pH-elektrodként egy sajátkészítésű antimon-mikroelektrodot használ. Kísérleti munkában vizsgáltam az alapelektrodok, a mérőcella méréstechnikailag fontos sajátságait. Ezt a szén-dioxid mérőcellát használtam mérőcsúcsként PEKM pásztázások során, *S. cerevisiae* élesztőtelep feletti szén-dioxid parciális nyomás helyfüggésének jellemzésére. A szén-dioxid parciális nyomás profil alapján, a rendszer modellezése után, végesem módszerű szimulációval kiszámoltam az élesztőtelep felületén keresztüli szén-dioxid fluxust, mely 8.16 nmol/mm²/s nagyságúnak adódott.

Munkámmal bemutattam, hogy lehetséges légréses, potenciometriás mikrocella mérőcsúccsal gázfázisú PEKM méréseket végezni, gázfázisú imázst készíteni. Ismét megjegyzem, hogy mindeddig csak egyetlen amperometriás közlemény foglalkozott gázfázisú PEKM méréssel nem valós problémát nyújtó céltárgy alkalmazásával [1]. A gáz fázisú pásztázási módszer legnagyobb előnye, hogy mindenféle komolyabb invázió vagy zavarás nélkül tanulmányozhatóak gáz fázisú rendszerek, folyamatok. A módszer alkalmas részletes, nagyfelbontású pásztázásokra, a nyert adatok pedig felhasználhatóak a tanulmányozott rendszer további jellemzésére, származtatott mennyiségek, például fluxusok számítására.

[1] Maurizio Carano, Katherine B. Holt, and Allen J. Bard, Scanning Electrochemical Microscopy. 49. Gas-Phase Scanning Electrochemical Microscopy Measurements with a Clark Oxygen Ultramicroelectrode, *Anal. Chem.* 75, (2003), 5071-5079.

[2] John W. Severinghaus, A. Freeman Bradley, Electrodes for Blood pO₂ and pCO₂ Determination, *Appl. Physiol.* 13 (1958) 515-520.

Folyadékáram megosztásán alapuló injektálás kidolgozása mikrofluidikai csipeken történő elektroforetikus elválasztásokhoz

Koczka Péter István, I. évf. vegyész MSc
DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Gáspár Attila, egyetemi docens
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A mikrofluidikai csipekben történő elektroforetikus elválasztáskor, a megfelelő felbontás elérése érdekében kulcsfontosságú az elegendően kis mintatérfogat (<1 nL) szeparációs csatornába juttatása. Munkánk során kidolgoztunk egy olyan egyszerű elvet alkalmazó injektálási módszert, melyben az elektrokinetikus injektálásnál felmerülő hibák (*sampling bias*, *injection bias*) nem jelentkeznek. A Hagen-Poiseuille összefüggést szem előtt tartva különböző analitikai problémák megoldásához szükséges mikrofluidikai csipeket elkészíthetjük a csatornák paramétereinek (átmérő, csatornahossz) változtatásával. Az általunk tervezett és elkészített csipekben sikeresen alkalmaztuk a folyadékáram megosztásán alapuló, nyomás segítségével végrehajtott mintabeviteli módszert, néhányszor száz pikoliternyi minta szeparációs csatornába történő bejuttatására. Demonstráltuk, hogy az injektálási eljárás során használt tesztkomponens mellett, más anyagokat, így akár sejteket is tudunk injektálni elemzésekhez.

Az injektálást követő zónaelektroforetikus elválasztások körülményeinek optimalizálásakor tanulmányoztuk a különböző felületmódosító anyagoknak az elektroforézisre gyakorolt hatását. Megállapítottuk, hogy a vizsgált komponensek esetén a legjobb elválasztást a metil-cellulózzal kezelt csipben történő elektroforéziskor érhetjük el. Bemutattuk, hogy a csupán 400 pL minta elemzésével gyors (akár 15 másodpercen belüli), a nagyhatékonyságú, automatizált kapilláris elektroforézissel összemérhető teljesítőképességű rendszert dolgoztunk ki, mely széleskörű elemzések elvégzésére adhat lehetőséget.

Egy-nanopórusos elektrokémiai érzékelők válaszméchanizmusának modellezése

Makra István Tamás, I. évf. egészségügyi mérnök MSc

BME Villamosmérnöki és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Gyurcsányi E. Róbert** egyetemi docens
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

A nanoszerkezeteken alapuló meghatározások a bioanalitika legérzékenyebb módszerei között vannak számon tartva, ugyanis sok esetben lehetővé tették az érzékelési folyamat molekuláris szintű kontrollját és a rendkívül nagy, esetenként akár egy molekula detektálásához szükséges érzékenységet.

Jelenleg a nanopórusok/nanocsövek alkalmazása molekuláris felismerésre egy új, rendkívül perspektivikus kutatási területnek tekinthető. Analitikai téren három lényeges alkalmazása van: (a) az ultragyors DNS szekvenálás (a DNS szálak bázissorrendjének megállapítása); (b) bioérzékelés szelektív receptorokkal módosított nanopórusokkal; (c) makromolekulák és nanorészecskék számlálása.

Jellemző az érzékelő fejlesztés empirikus jellegére, hogy a legalapvetőbb képletekben is ellentmondások vannak. Erre példa a nanopóruson keresztüli áram meghatározása a nanopórus geometriájának ismeretében. Emellett azonban alapvető fontosságú a tudatos fejlesztés szempontjából, hogy a pórusba került különböző fizikai és kémiai tulajdonságú speciestek milyen mértékű áramjel modulálást eredményeznek, illetve, hogy a bekerülési frekvenciájukat hogyan lehet befolyásolni. Az érzékenység szempontjából elengedhetetlen a kis pórusméret, ami viszont egy alacsony koncentrációjú vegyület betalálásának valószínűségét is csökkenti, ezzel növelve a mérés idejét.

Ezen segíthet egy úgynevezett befogási zóna kiterjesztése, ami kellően nagy elektroforetikus mobilitással rendelkező részecskék esetén a térerősség, míg töltetlen vagy kis fajlagos töltésű vegyületeknél az elektrooszmotikus áramlás növelését jelenti a pórusnyílástól minél nagyobb távolságra.

Mindezen paraméterek hatásának meghatározására a Poisson-Nernst-Planck és Navier-Stokes csatolt differenciálegyenletek megoldása szükséges, amelyet a Comsol multifizikai végelem programcsomaggal végeztem. Munkám célja az volt, hogy a különböző kísérleti paraméterek hatásainak meghatározása által alapot nyújtsak az egy-nanopórusos érzékelők hatékony fejlesztésére nanorészecskék és vírusok számlálására.

Aerogéltöltetek kialakítása mikrofluidikai csipekben kromatográfias alkalmazásokhoz**Nagy Andrea**, I. évf. vegyész MSc

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: **Dr. Gáspár Attila**, egyetemi docens
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Konzulens: **Dr. Lázár István**, egyetemi docens
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A mikrofluidikai kutatások az utóbbi években robbanásszerű fejlődésnek indultak. Ezen kutatások egyik iránya a kromatográfias elválasztási technikák miniatürizálása, a különféle kromatográfias töltetek csipben való kialakítása és alkalmazása. Munkám során egy eddig még csipekben állófázisként nem alkalmazott anyagot, szilika aerogélt integráltam a mikrofluidikai csipek csatornájába.

Az aerogélek kromatográfias célokra való alkalmazásai mikrofluidikai csipekben számos előnyt jelenthetnek rendkívüli porozitásuk, nagy fajlagos felületük miatt. Az aerogél tömb porítása után nagyon kis, kb. 1 μm -nél kisebb részecskéknek mikrocsatornába töltését kellett megoldanom. Az általam kidolgozott töltési eljárásnál az öntőforma készítéséhez szükséges litográfias maszkra rajzolt vonal segítségével egy szűkület volt kialakítható az elkészült csip csatornájában, e szűkületnél nemcsak a csatorna szélessége, de magassága is jelentősen rövidült. Ez a szűkület a folyadék szempontjából átjárható volt, de az aerogél részecskéket már nem engedte át. Az aerogélrészecskék visszatartásával elkészült töltet többféle effektus (horgony-, zárókő-, bilincs-hatás) révén rögzült a rugalmas anyagú (poli(dimetil-sziloxán), PDMS) csipben. A töltetek készítése ezzel a módszerrel viszonylag gyors és reprodukálható eljárássá vált.

A kész aerogéltöltetek kromatográfias tulajdonságainak vizsgálata során 100 nL mintaoldatból 50x-es dúsítást értünk el. A töltet alkalmas komponensek kromatográfias elválasztására is. A megfelelő körülmények mellett 2 étfesték 10 s-on belül is elválasztható volt.

Az előállított kromatográfias csipek nagy előnye a rendkívül kis térfogatú minták gyors elemzésének lehetősége. A kromatográfias tölteteket tartalmazó csatornarendszerek ugyanazon a csipben való sokszorozásával lehetőség nyílik egyetlen minta egyszeri mintainjektálással több különböző tölteten történő elemzésre, vagy sok minta egyidejű meghatározására.

Régészeti kerámialeletek röntgen pordiffrakciós vizsgálata

Pataki Bernadeth, *nevezéskor*: I. évf. Modern technikák a kémiai szintézisben
MSc, Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar

jelenleg: I. évf. fizika PhD, BME Természettudományi Kar

és

tudományos segédmunkatárs, MTA Műszaki Fizikai- és Anyagtudományi
Kutatóintézetben.

Témavezetők: **Dr. Veress Erzsébet** ny. egyetemi adjunktus
Erdélyi Múzeum Egyesület Kutatóintézete,
Dr. Emil Indrea tudományos főmunkatárs
Országos Izotóp- és Molekulatechnológiai Kutatóintézet
Dr. Cosma Constantin egyetemi tanár
Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Környezettudományi Kar

Munkánk célja egyrészt a rendelkezésünkre álló műszerek-módszerek régészeti kerámiák archeometriai jellemzésére való alkalmasságának, valamint egy újabban felmerült tudományos kérdésnek a vizsgálata. Egyes szerzők véleménye szerint ugyanis téves a feltételezés, hogy a régmúltban a fazekasműhelyek kimondottan a közvetlen közelből kitermelt agyagot és soványítókat használták föl munkájuk során. A mindenkori szakember a nyersanyagot az adott kor igényei, ismeretei és lehetőségei függvényében választotta ki.[1]

A röntgen diffraktogramok standard Bruker D8 Advance röntgen diffraktométeren készültek (mérési paraméterek: 45 kV, 45 mA, monokromatikus koherens CuK_α sugárzás, adatgyűjtés $0,01^\circ$ lépésenként, spektrális tisztaságú Al_2O_3 , korund, belső standard). Az eredményekből arra a következtetésre jutottunk, hogy soványító anyagok szempontjából a minták három csoportba sorolhatjuk: az első és a második, a harmadik és az ötödik, illetve a negyedik minta alkot külön csoportot. Feltételezhető tehát, hogy a kerámiák készítéséhez használt soványító anyag három különböző helyről származott.

[1] R Martineau, A.-V. Walter-Simonnet, B. Grobéty, M. Buatier, *Archaeometry*, 49, 1, 23–52 (2007)

Különböző mértékben protonált anionok ionkromatográfiás csúcsalakjának vizsgálata az elválasztás hatékonyságának növelése céljából

Sepsey Annamária, I. évf. vegyész MSc

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Hajós Péter** egyetemi docens
Dr. Horváth Krisztián egyetemi tanársegéd
PE Analitikai Kémia Intézeti Tanszék

Ionkromatográfiás elválasztások során azon mintakomponensek csúcsalakja, melyek az elválasztás körülményei közt, egyazon időben különbözően protonált formában vannak jelen (multiprotikus vegyületek: foszfát, szelenát, oxalát, EDTA, DCTA stb.) kevésbé szimmetrikus és szélesebb, mint az egyszerű, egy- ill. kétszeresen negatív töltésű anionoké, ami jelzi, hogy ezen vegyületek elválasztásának hatékonysága nem megfelelő. Eddigi ismereteink szerint azon anionok analitikai elválasztása, amelyek különböző mértékben protonáltak az eluens pH viszonyainak megfelelően nem megoldott. Ugyanakkor egyensúlyi kémiai számítások módot adnak arra, hogy következtetni tudjunk a különböző protonáltságú komponensek jelenlétére.

Az ionkromatográfia sztochasztikus-egyensúlyi modellje [1] alkalmas egyszerű szerves és szervetlen anionok retenciós tulajdonságának, valamint csúcsalakjának leírására. E munka célja a sztochasztikus-egyensúlyi megközelítés kiterjesztése volt a multiprotikus anionok csúcsalakjának leírására az oszlopon belül lejátszódó szimultán egyensúlyi folyamatok [2] (protonálódás, ioncsere, stb.) figyelembevételével. A modell felírása során az egyes minták különbözően protonált alakjainak megkötődését egymástól független, a protonálódást pedig végtelenül gyors folyamatnak tekintettük. A kiterjesztett modell alkalmazásával nyomon követtük az eluens összetétel és pH változásának együttes hatását a mintaion retenciójára és csúcsalakjára (szélesség, aszimmetria). A modell gyakorlati szerepe többek közt abban áll, hogy a multiprotikus mintaionok elválasztásához szükséges optimális eluensösszetétel (koncentráció és pH) a modell segítségével meghatározható, és elválasztásuk hatékonysága növelhető.

[1] K. Horváth, M. Olajos, A. Felinger, P. Hajós, J. Chrom. A 1189 (2008) 42.

[2] P. Hajós, O. Horváth, V. Denke, Anal. Chem. 67 (1995) 434.

Nanopórus alapú potenciometriás ionszenzorok fejlesztése

Takács Ágoston, II. évf. vegyészmérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Gyurcsányi E. Róbert** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az ionszenzorok fő gyakorlati alkalmazása a biológiai folyadékok (vér, vizelet) elektrolit koncentrációjának meghatározása, amely világszinten több milliárd dollár éves forgalmú piacot jelent. A rutin alkalmazások ellenére, az ionszelektív elektródok analitikai teljesítményparaméterei jelentősen javíthatóak. Ebben a témakörben célul tűztem ki kémiaiilag módosított nanopórusok alkalmazását ionérzékelésre.

Az arany nanopórusok falára az egyes ionok szelektív felismerését biztosító ligandumok, valamint a permszelektivitást nyújtó anionok immobilizálásával újfajta ionszenzor konstrukciót vezettem be [1]. A hatékony miniatürizálás mellett a kovalensen rögzített felismerő molekulák alkalmazása megoldást jelenthet a napjainkban elterjedt folyadékmembrán érzékelők használatakor tapasztalt komponens kioldódásra. Ennek megszüntetése a szenzorok élettartamának és az orvosi célú *in vivo* alkalmazási lehetőségeinek számottevő növekedését eredményezheti.

Munkám során nyommaratott polikarbonát membránokban kialakított arany nanopórusok készítésével, kémiai módosításával és alkalmazásával foglalkoztam. Kísérleteimhez tiol, illetve ditiolán csoporttal rendelkező vegyületeket alkalmaztam, amelyek Au-S kötés kialakulásával önszerveződő monorétegeket alakítanak ki arany felületeken. Potenciometriás mérésekkel bizonyítottam, hogy arany nanopórusokba hosszú hidrofób szénlánccal rendelkező szulfonsav funkcionális vegyületet és a pórust hidrofóbbá tevő molekulákat vegyes monorétegekben rögzítve a membrán permszelektívvé tehető. A módosítások során kialakuló transzport gátlás a membránok ellenállásának megnövekedésével jár, amelynek vizsgálatára elektrokémiai impedancia spektroszkópiát alkalmaztam.

A nanopórus nanokörnyezetének kémiai módosítása az optimális ionszelektív válasz kialakítása szempontjából több tekintetben is kihívást jelentett. Egyrészt a pórusátmérő optimalizálását igényelte a módosító vegyületek megfelelő kötődése, illetve a permszelektivitás és az ionszelektivitás biztosításához. Emellett szükség volt a különböző funkcionálitással rendelkező komponensek (ionofor, kationcserélő és a hidrofób tiol) felületi arányainak beállítására az optimális analitikai paraméterekhez.

[1] Jággerszki, Gy., Takács, Á., Bitter, I., Gyurcsányi, E. R., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 50, 1656-1659 (2011)

Mátrixizolációs Raman mérési lehetőség kidolgozása az ELTE-n

Vörös Tamás, II. évfolyam Kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Tarczay György** adjunktus

ELTE TTK Kémiai Intézet

Bazsó Gábor PhD hallgató

ELTE TTK Kémiai Intézet

Mátrixizolációs módszer alkalmazásával lehetőség nyílik reaktív, instabil vegyületek előállítására és vizsgálatára, valamint a hagyományos spektroszkópiai módszereknél jobb felbontású spektrumok felvételére. Eddig az ELTE-n ezt a módszert elsősorban IR, UV és VCD spektroszkópiával társítva alkalmazták. Ezen módszerek mellett az asszignációban, illetve egyéb spektroszkópiai vizsgálatok során gyenge jelet adó minta esetében az azonosításban nagy segítséget nyújt az anyag Raman spektruma is. Munkám célja elsősorban az volt, hogy az optimális mátrixizolációs Raman mérési paramétereket kísérletileg meghatározzam a laborban található mátrixizolációs berendezésre és Raman spektrométerre.

A mérések során részben optikai, részben geometriai tulajdonságokból eredő problémákra kerestem megoldást. A vizsgálatok során megkerestem az optimális mérési hőmérsékletet, minta/mátrixalkotó arányt, leválasztási időt, a mérés során a mérőfej és a spektrométer közötti távolságot. Ezeket a megfelelő körülményeket biztosítva acetonnitrillel, valamint dirodánnal végeztem méréseket.

Ezen eredmények felhasználásával lehetőség nyílik további új, akár reaktív molekulák és gyökök mátrixizolációs Raman spektroszkópiai vizsgálatára. Ez segíti a mátrixizolációs IR spektrumok asszignálását és így a laboratóriumban előállított új anyagok azonosítását is.

Gas chromatographic analysis of aspirin as trimethylsilyl derivative

Groza Radu - Constantin, 1st year master student – *versenyen kívüli*

West University of Timișoara, Faculty of Chemistry - Biology - Geography

Scientific advisor: Prof. Dr. Ciucanu Ionel

West University of Timișoara, Faculty of Chemistry - Biology -
Geography

Acetylsalicylic acid (ASA), also known as aspirin, is widely used as an analgesic, anti-inflammatory and antithrombotic drug. The most commonly used methods for the determination of ASA include spectrophotometric, fluorimetric and chromatographic techniques.

Within the present work, ASA was analyzed using gas chromatography. Since ASA decomposes by heating, a derivatization step was necessary prior to gas chromatographic analysis. Derivatization of ASA can be obtained through methylation, trimethylsilylation or conversion to fluorinated compounds [1,2]. This work presents the optimal conditions in the process of trimethylsilylation with several frequently used reagents such as trimethylchlorosilane, hexamethyldisilazane, bis(trimethylsilyl)-acetamide and trimethylsilylimidazole. A few weak bases were used as proton capturing agents in order to improve the yield of the trimethylsilylation reaction. The aim of this research was to determine the influence of the trimethylsilylation agent and the base on the yield of the reaction. The results obtained for each trimethylsilylation reaction mixture were compared in order to determine the effect of introducing a weak base in the system and the optimal conditions for the derivatization process.

[1] Mongillo, J., A., Paul, J., *Microchem. J.*, 55, 308-318 (1997)

[2] Drozd, J., *Chemical derivatization in gas chromatography*, Elsevier, 69-75 (1981)

.....

Analitikai kémia II. tagozat

Elektrokémiai szenzor optimalálása reaktív oxigén és nitrogén származékok detektálására

Angyal Tünde, IV. évf. gyógyszerész

PTE Általános Orvostudományi Kar

Témavezető: **Dr. Nagyné Dr. Zengő Livia** egyetemi adjunktus
PTE Fizikai Kémiai Tanszék

Az oxidatív stressz egyre növekvő figyelmet kap mind különböző fiziológiás folyamatok, mind pedig betegségek széles spektrumával kapcsolatban. A reaktív oxigén származékok szerepe már számos területen bizonyítást nyert, mint az öregedés, jelátvitel, immunválasz, valamint bőrgyógyászati, idegi és immunológiai kórképekben.

Méréseim során amperometriás detektálási technikát alkalmaztam. A Pt elektród szelektivitását a felületén kialakított polimer biztosította. A m-fenilén-diamin monomerekből elektrokémiai polimerizációval méret-kizárásos réteget készítettem és ezt modelleztem, ennek kialakulását valós idejű elektrokémiai kvarc-kristály mikromérleggel nyomon követtem. Atomerő mikroszkóp segítségével nagy felbontású 3 dimenziós felvételek készültek a réteg felületének morfológiájáról. A jól működő szelektív réteg érzékenységének fokozására a periodikusan megszakított amperometriás módszert alkalmaztam. Az eljárást kipróbáltuk *in vitro* szelektív H₂O₂ detektálásra.

Teszteltem a fenti módosítások használhatóságát µm-es dimenzióval rendelkező elektródokon és terveztem egy *in vivo* elektrokémiai vizsgálatokhoz kényelmesen használható elektród elrendezést.

[1] Nagy L., Kálmán N., Nagy G.: *J.Biochem. Biophys. Methods* **69** (2006) 133-141.

[2] Tamaskó M., Nagy L., Witmann I., Mikolas E., Molnar A. G., Nagy G.: *Physiological Measurement* **28** (2007) 1533-1542.

[3] Matsumoto A., Ichiba M., Horita M., Yamashita Z., Takahashi T., Isse T., Oyama T., Kawamoto T., Tomokuni K.: *Alcohol* **41** (2007) 57-59.

Gyógyszermaradványok meghatározása szennyvíziszapból QuEChERS LC-MS/MS technikával

Bodai Zsolt, I. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Eke Zsuzsanna** egyetemi adjunktus
ELTE Analitikai Kémiai Tanszék
Varga Renáta PhD hallgató
ELTE Analitikai Kémiai Tanszék

A rohamos népességnövekedés mellé jelentősen növekvő gyógyszerfogyasztás társul. Egyre több szennyvíz, valamint szennyvíziszap termelődik, melyet a magas szervesanyag és egyéb talajminőség-javító anyagtartalma miatt célszerű lenne mezőgazdasági célokra felhasználni. A szennyvíziszap mezőgazdasági felhasználásáról szóló kormányrendelet [1] számos szerves anyagra kiterjed gyógyszerhatóanyagokra azonban nem. A bevitt gyógyszereket a szervezet nem használja fel teljes mértékben, így azok, valamint a metabolitjaik bekerülnek a szennyvíziszapba, majd a mezőgazdasági célú felhasználás után dúsulhatnak növényekben, állatokban. Épp ezért ezen vegyületek folyamatos nyomon követése elengedhetetlen.

Céлом az volt, hogy egy egyszerű, olcsó, hatékony minta-előkészítési módszert találjak, ami megfelelő rendszerrel csatolva (LC-MS/MS) alkalmas lehet a szennyvíziszapban alacsony koncentrációban jelenlevő gyógyszermaradványok kimutatására. E célból a QuEChERS nevű eljárással foglalkoztam, ami egy gyors, egyszerű, olcsó, hatékony, robusztus és biztonságos (quick, easy, cheap, effective, rugged and safe) módszer, melyet eredetileg peszticidek meghatározására fejlesztettek ki zöldségekből és gyümölcsökből [2].

Tudományos diákköri munkám során egy igen összetett mátrixból -szennyvíziszapból- gyógyszermaradványok mérésére alkalmas minta-előkészítési módszer fejlesztésének első lépéseit tettem meg. A módszer 26 komponensre terjed ki. Magában foglalja a leggyakoribb szív- és érrendszeri betegségek esetén használatos, valamint gyomorsav-túltengést gátló szereket. Az alkalmazott módszer, a QuEChERS, számos paraméter optimálása után alkalmasnak bizonyult a vizsgálni kívánt komponensek kimutatására adalékotlatlan szennyvíziszap minta esetén.

[1] 50/2001 (IV.3.) Kormány Rendelet

[2] M. Anastassiades, S.J. Lehotay *Journal of AOAC international*, 86, 412-431 (2003)

A Déli-Bakonyból származó ehető gombafajok Po-210 koncentrációjának meghatározása

Csordás Anita, III. évf. környezetmérnöki BSc

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Kovács Tibor** egyetemi docens
PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

A gombák kiemelkedő szerepet kapnak az erdei ökoszisztémákban, néhány gombafaj képes egyes nyomelemek akkumulációjára is. Egyes kalapos gombák esetén a micélium nagy talajfelszín alatti kiterjedése miatt viszonylag nagy területről képes akkumulálni a nyomelemeket. Így egyes esetekben nukleáris balesetek és egyéb nehézfém-szennyeződéssel járó balesetek után a gombák gyakran vizsgált indikátorok.

A Pannon Egyetem Radiokémiai és Radioökológiai Intézetében több éve folyik a környéken gyűjtött gombák radiológiai vizsgálata.

Munkám során a Déli-Bakony területén 2009-2010-ben gyűjtött 19 db kalapos gombaminta Pb(Po)-210 meghatározását végeztem el.

A meghatározást félvezető (PIPS) detektoros α -spektrométerrel végeztem. A minta-előkészítés során kombinált savas feltárást alkalmaztam. A mérés pontosítása és reprodukálhatósága érdekében Po-209 nyomjelzőt adtam a mintához. Ezt követően spontán depozícióval választottam le a polóniumot Ni tartalmú, saválló acéllemezre.

A vizsgált gombaminták Pb(Po)-210 aktivitás-koncentrációja 1 mBq/g és 184 mBq/g között változott. Ezek az értékek összhangban vannak az erről a területről gyűjtött korábbi gombaminták mérési eredményeivel. Az egyes fajok akkumulált Pb(Po) mennyisége nem mutat jelentős évenkénti változást.

Az általam vizsgált gombafajok esetén elvégeztem a gombák fogyasztásából, annak Po-210 tartalmától származó sugárterhelés becslését, mely alapján elmondható, hogy egyes gombafajok esetében viszonylag magas a fogyasztásból származó sugárterhelés nagysága.

Szlovéniai talajminták radiológiai elemzése

Fábián Ferenc, II. évf. vegyészmérnöki BSc

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Kovács Tibor** egyetemi docens
PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

Napjainkban egyre nagyobb figyelem fordul a lakóházak és munkahelyek egészséget veszélyeztető körülményeinek csökkentésére. Az egyik ilyen tényező ezen területek sugárveszélyessége. Ezt elsősorban a talajban lévő természetes eredetű radioizotópok (elsősorban radon és leányelemei) okozzák.

Az utóbbi időben a térinformatika és a komplex adatkezelési módszerek fejlődésével újra előtérbe került egyes területek radiológiai felmérése. Több országra kiterjedő projekt keretében komplex radiológiai és radonpotenciál térkép kidolgozására kerül sor, ebben a munkában a szlovéniai talajminták laboratóriumi radiológiai vizsgálata volt a cél.

A munka során 70 db szlovéniai talajminta gamma-spektrometriai elemzésére és radon emanációs tényezőjének meghatározására került sor. A talajminták Th-232, Ra-226, K-40 koncentrációját alacsonyháttérű HPGe gamma spektrométerrel határoztam meg, relatív módszerrel. A légszáraz minták mérését alumínium Marinelli edényben, 30 napos légmentes lezárás után 60, illetve 80 000 másodpercig végeztem.

A radonemanációs tényezőt törőcellás módszerrel határoztam meg, a szekuláris egyensúly beállása után, NDI detektorrendszerbe épített Lucas cellával.

A vizsgált minták Th-232, Ra-226 és K-40 koncentrációja átlagosnak mondható, még az uránbányák környezetében vett minták sem mutatnak jelentős anomáliát. A mért K-40 aktivitáskoncentrációk 400-600 Bq/kg, Th-232 60-100 Bq/kg, Ra-226 60-80 Bq/kg értékek között változnak. A rádiumkoncentrációk és az emanációs tényezők egyes esetben nagyobbak, amelyek magyarázatot jelentenek egyes szlovéniai lakóházak, iskolák magas radonkoncentrációjára.

A kapott adatokkal kiegészítve a komplex adatbázist, amely több fontos adatot tartalmaz, mint pl. talajmechanikai, geológiai, hidrogeológiai terepi radon és talajgáz-méréseket, elkészíthető a terület radiológiai térképe. Az adatbázis jelentős szerepet kaphat a későbbi radon és sugárveszélyes területek megítélésében, építési engedélyek kiadásában, így döntéshozókat támogató rendszer kialakításában.

Táplálékkiegészítőkben használt β -Ciklodextrin zárványkomplexek előállítása és vizsgálata

Erdei Gyula, I. évf. élelmiszer-ipari termékek technológiája és minőségellenőrzése
MSc

Ferencz Zsolt, I. évf. élelmiszer-ipari termékek technológiája és minőségellenőrzése
MSc

Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Rácz Csaba** egyetemi tanársegéd
Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Fizikai kémia tanszék
Dr. Csavdári Alexandra egyetemi docens
Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Fizikai kémia tanszék

A dolgozat célja, a táplálékkiegészítőkben alkalmazott α -liponsav (LS) és Lutein (LU) β -ciklodextrin (β -CD) komplexek előállítása, ezek létrejöttének vizsgálata, és az ipari termelésre legalkalmasabb előállítási módszer kiválasztása. Különböző komplexképzési módszereket használtak: szuszpenzióban; együttkristályosítással és liofilizálással. A komplex létrejöttét infravörös spektroszkópiával, valamint pásztázó kalorimetriás módszerrel vizsgálták, a sztöchiometria meghatározásához UV-VIS spektroszkópiát használtak. A vizsgálatok bebizonyították, hogy mindkét komplex létrejött, valamint a komplexképzés 1:1 mólarányban ment végbe. Végül is ipari termelés szempontjából az LS- β -CD komplex előállítására a szuszpenziós módszert javasolták, míg a LU- β -CD komplex előállítására az együttkristályosítás módszerét.

Kulcsszavak: α -Liponsav, Lutein, β -Ciklodextrin, zárványkomplex

**Bioaktív szénhidrát komponensek gázkromatográfiás vizsgálata
élelmiszer alapanyagokban és termékekben****Harasztos Anna Helga**, II. évf. biomérnök BSc

BME Vegyész Kar

Témavezetők: **Dr. Tömösközi Sándor** egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Balázs Gábor doktor jelölt

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az emberi táplálkozásban alapvető jelentőségű gabonákban található nem keményítő jellegű poliszacharidok, illetve az ezek között legnagyobb mennyiségben jelenlévő arabinoxilánok (AX) szerepet játszanak az élelmiszerek táplálkozási és technológiai tulajdonságainak kialakításában. Bár egészségmegőrző és betegségmegelőző hatásuk régóta ismert, a funkcionális komponensként történő felhasználásukra irányuló kutató-fejlesztő munka csak az elmúlt évtizedben indult meg. [1] A fejlesztés azonban nagy jelentőségű lehet, mivel a gabonaalapú termékek szinte mindenki számára alapélelmiszernek számítanak.

Ezért kutatásaink középpontjában olyan analitikai módszer fejlesztése és alkalmazása áll, amely alkalmas az arabinoxilánok eddigénél pontosabb meghatározására, és ezáltal az ezen komponenseket magasabb arányban tartalmazó élelmiszerek fejlesztésének magalapozására. Az első analitikai feladat a gázkromatográfiás módszer optimalítása volt.

Majd az optimalizált módszerrel vizsgáltuk a nemesítés és a malmi technológia hatását, valamint az alapanyagvizsgálatok alapján készült kísérleti termékeket.

Az optimalizált analitikai módszer számos gyakorlati alkalmazás előtt nyitott ajtót: meghatározó szerepe lehet gabonavonalak AX tartalom alapján történő szelektálásában, a malmi technológiák ilyen irányú optimalizálásában, az AX és a mellette előforduló egyéb bioaktív poliszacharidok funkcionális és táplálkozási tulajdonságainak vizsgálatában, valamint alapvetően szükséges a roncsolás-mentes gyors módszerek kalibrációjának elkészítéséhez is

[1] Gebruers K., Courtin C.M., Delcour J.A. 2009. *Health Grain methods*, 177-189. oldal AACC International Inc.

A munka kapcsolódik két kutatási programhoz, a TECH_08_A/2-2008-0425 számú NTP projekthez, valamint a CK 80334 OTKA kutatáshoz.

A keményítő-állapottól függő reológiai paraméterek alkalmazásának lehetőségei a búzaminósításban

Hevér Alina, II. évf. biomérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Tömösközi Sándor** egyetemi docens,
Szendi Szilvia PhD hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A búza minőségének megítélése elsősorban a belőle készült őrlemények és termékek minősítésén keresztül történik. A reológiai jellemzők alapvető fontosságúak a malom- és a sütőipar számára. Mindeddig nagy hangsúlyt a fehérje-, elsősorban a sikértulajdonságtól függő reológiai paraméterekre helyeztek, azok a műszerek pedig, amelyek a keményítőtulajdonságokat határozták meg, mind csak liszt-víz szuszpenziókkal dolgoztak (esésszám, amilográf, gyors viszkoanalizátoros mérések).

Munkám célja annak megállapítása, hogy a keményítőtulajdonságok mérésén alapuló minősítési módszerek beilleszthetőek-e az újfajta minősítési rendszerekbe, adnak-e plusz információt a már használatban lévő műszerekhez képest, érzékenyebben jelzik-e a környezeti hatásokat, a fajták közötti különbségeket. Hét különböző termőhelyről származó, 18 búzafajtát vizsgáltam. Méréseimet egy új készülékkel, a Mixolabbal végeztem, mely lehetővé teszi a lisztek komplex reológiai analízisét, ezen belül a keményítőállapottól függő paraméterek meghatározását. Egyetlen tesztből nyerhettem információt olyan tulajdonságokra vonatkozóan, ami korábban csak legalább három különálló teszt elvégzésével volt lehetséges. Az eredményként kapott paraméterek közötti eltérések szignifikanciáját Statistica 9.1 program segítségével értékelem ki.

A paraméterek és a görbék alapján a fajták közötti különbségek egyértelműen megmutatkoznak, a termőhelyek összehasonlításából pedig látszik, hogy a viszkozitásszerű paraméterek egy része érzékenyebben reagál a környezetre. A Mixolabos paraméterek értékelésének egyedülálló lehetősége a pókháló diagram, mint minőségprofil generálása, mely jól használható a minőségi különbségek gyors szemléltetéséhez. A minták egy részénél elvégzett RVA-s vizsgálatok eredményei jól összeegyeztethetők a Mixolabos mérések eredményeivel. A *kutatómunka a „Pannon búza fajták és fajtajelöltek nemesítése, termesztési és élelmiszeripari feldolgozási rendszerének fejlesztése” c. NTP programhoz kapcsolódik (TECH-09-A3-2009-0221)*

Az in-situ radioizotópos nyomjelzéses elektródsüllyesztéses módszer továbbfejlesztése porózus fémelektródok vizsgálatára**Horváth Dávid, V. évf. vegyész**

PE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Varga Kálmán egyetemi tanár
PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

A kombinált radioizotópos nyomjelzéses és elektrokémiai ún. elektródsüllyesztéses módszer hatékonyan alkalmazható jól definiált poli és egykristály szerkezetű fémelektródok felületén az anyag és töltéstranszport folyamatok in-situ vizsgálatára. A módszer eredeti változatát azonban polírozott kompakt fémfelületek tanulmányozására dolgozták ki. Ez a tény nagymértékben korlátozza alkalmazhatóságát mind a vizsgálható jelzett specieszek, mind az ipari jelentőségű fémes szerkezeti anyagok vonatkozásában. Nem alkalmas alacsony fajlagos aktivitású jelzett specieszek (Cl-36-tal jelzett klorid-ionok) szorpciós folyamatainak nyomon követésére, illetve a felületi többletkoncentráció (Γ) kvantitatív meghatározására sima, kis érdességi tényezőjű ($\gamma < 2$) kompakt fémfelületeken. Mind az in-situ radioizotópos nyomjelzéses eljárás érzékenysége növelhető (azaz a kimutathatósági határ csökkenthető), mind a vizsgálható rendszerek köre bővíthető, amennyiben a korábban kidolgozott mérés technikai alapelveket továbbfejlesztjük porózus, nagy érdességi tényezőjű ($\gamma > 10$) kompakt fémelektródok vizsgálatára. A vázolt módszertani fejlesztés révén olyan - korábban in-situ nyomjelzés technikai eljárásokkal nem mérhető - folyamatokról nyerhetünk információt, mint a klorid-ionok feldúsulása a paksi atomerőmű primer hűtőkörében alkalmazott korrózióálló acélfelületeken.

Elsőként a (S-35-tel és Cl-36-tal jelzett) szulfát- és kloridionok kompetitív adszorpciójával foglalkoztam kis érdességi tényezőjű ($\gamma < 2$) Pt-elektrod felületén. A mérések eredményeként megállapítható, hogy: a kloridion rendkívül erősen kötődik a polikristályos platina felületén, azonban a nyomjelzett Cl-36 megkötődése mennyiségileg nem kimutatható.

Második lépésként, a nagy érdességi tényezőjű kompakt felületek mérés technikai alapelveit, valamint a méréshez szükséges összefüggéseket dolgoztam ki, melyek segítségével a módszer kibővíthetővé vált ipari jelentőségű felületek és kis fajlagos aktivitású specieszek vizsgálatára.

Köszönetemet szeretném kifejezni a Paksi Atomerőmű Zrt-nek az eddigi és jövőbeni támogatásáért.

Dohánynövény alkalmazása uránbánya remediációjának ellenőrzésében

Horváth Mária, III. évf. környezetmérnöki BSc

PE Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Kovács Tibor egyetemi docens
PE Radiokémiai és Radioökológiai Intézet

A dohány Po(Pb) felhalmozó képessége régóta ismert, egyes kutatók az izotópok levélfelületen való megkötődését, más elméletek a gyökérzetten keresztül történő felvételt tartják a lehetséges megkötési módoknak.

A rekultivált, nehézfémeket és radioizotópokat tartalmazó meddőhányók, iszaptározók esetén a rekultiváció hatásossága, a növények nyomelem felvétele fontos kérdés.

A Pannon Egyetem Radiokémiai és Radioökológiai Intézetében több éve folynak dohánytermesztési kísérletek, többek közt a mecseki remediált uránbánya területén.

Dolgozatomban a 2001-ben elkezdett, remediált uránbánya-területeken kísérleti céllal termesztett dohánynövények Po-210 (Pb-210) koncentrációját vizsgáltam és foglaltam össze.

Meghatározva a dohány Po(Pb) akkumuláló képességét és a talaj-dohány közötti transzferfaktor értékét, a zagytarozó vízbázist és élővilágot veszélyeztető hatása vizsgálható.

Munkám során a 2002 és 2009 között termesztett, összesen 31 darab dohány és talajminta Po-210 koncentrációját határoztam meg félvezető (PIPS) detektoros alfa-spektrométer segítségével. A mérésre alkalmas forrást spontán depozíciós eljárással készítettem a minta kombinált savas feltárása után, Po-209 nyomjelző alkalmazásával.

A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy a dohány és talajminták Po(Pb)-210 aktivitás-koncentrációja $2.12 \pm 0.8 - 1866 \pm 98$ mBq/g között változott.

Feldolgozva a korábbi évek mérési adatait, látható volt, hogy a talajminták Po(Pb) koncentrációjának változásával a dohányminták aktivitás-koncentrációja is arányosan változott. Így a későbbiekben a zagytarozóból kioldódó és migráló radioizotópok nyomon követhetők.

Polifenolok elemzése multiprogramozott HPLC módszerrel**Makuta Mariann**, Molekuláris Biológia MSc II. évf.

DE-OEC Általános Orvostudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Harangi János** egyetemi docens
Dr. Harangi Mariann egyetemi adjunktus
DE-OEC I. Belgyógyászati Klinika

A sokkomponensű rendszerek elemzése szükségessé teszi az elemzési paraméterek változtatását a HPLC elemzés során annak érdekében, hogy széles polaritásbeli eltérést mutató komponenseket el tudjunk választani egy elemzésben. Az eddig alkalmazott gradiens elúció mellett kísérleteinkben a hőmérsékletet és az áramlási sebességet is változtattuk, amivel az elemzésben az eddigieknél szélesebb polaritás tartomány vizsgálható rövidebb elemzési idő alatt.

Az áramlási sebesség programozását az emelkedő hőmérséklet és a növekvő szerves módosító tartalom által okozott viszkozitás csökkenése teszi lehetővé. Bizonyítottuk, hogy az elválasztóképesség a hőmérséklet és az áramlási sebesség programozásával nem romlik, sőt alkalmas paraméterek mellett javul. Ezt a módszert multiprogramozott HPLC-nek nevezzük, alkalmazhatóságát borok polifenol tartalmának meghatározásával teszteltük.

Az Aprotinin meglepetései: avagy gyártásközi szennyezők tömegspektrometriai szerkezetvizsgálata**Tarsoly Gergely, II. évf. vegyész MSc**

ELTE Természettudományi Kar; Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutató Osztály

Témavezető: Kóti János kutató-fejlesztő
Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutató Osztály

Az aprotinin 58 aminosavból álló polipeptid, mely sokrétű gyógyászati alkalmazással rendelkezik. Enziminhibíciós hatása miatt vérzéscsökkentőként használják, bizonyos baktériumokkal szemben pedig antibakteriális tulajdonságot mutat. A Richter Gedeon Nyrt. foglalkozik aprotinin gyártásával, és a szennyezési profil vizsgálatokor felderített új szennyező molekulák vizsgálatával a Szerkezetkutató osztályt bízták meg. A szennyezők preparatív HPLC-n legyűjtve kerültek az osztályra a Technológiai Fejlesztő Laboratórium II-ről. A preparatív munkával foglalkozó vegyészek az eljárás ismeretében koncepciókat dolgoztak ki azzal kapcsolatban, hogy milyen szennyezőket várnak, ezen elképzelések igazolásához ultranagyfelbontású tömegspektrometriás méréssel megmértük a molekulatömegét.

A célunk az volt, hogy a szennyezők igazolása mellett azok spektroszkópiai karakterizálását is elvégezzük, tehát ujjlenyomat szerű azonosításhoz illetve komolyabb szerkezetbizonyításhoz alkalmas tömegspektrometriás módszert dolgozzunk ki. A módszereinkben elektronspray ionizációt, lineáris ioncsapda és ionciklotron-rezonancia analizátorokat alkalmaztunk, illetve MSn módszereknél CID, ECD és IRMPD fragmentációkkal dolgoztunk. A mintát mértük kémiai változtatás nélkül, a kénhidakat redukálva, enzimatis emésztéssel és kémiai módszerrel hasítva is.

Méréseink eredményeivel sikeresen beazonosítottuk a szennyezőket, és sikerült a módszereinket úgy finomítani, hogy a polipeptid szekvenciájának nagy részét, köztük a szennyező és a gyógyszermolekula közötti különbséget okozó aminosavak jelenlétét reprodukálható módon bebizonyítsuk.

Élelmiszer-feldolgozási folyamat allergén fehérjékre gyakorolt hatásának vizsgálata módszervalidálási protokoll fejlesztéséhez**Hajas Livia**, I. évf. biomérnök MSc**Török Kitti**, IX. évf. biomérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Tömösközi Sándor** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A népesség egyre nagyobb hányadánál bizonyos élelmiszer-összetevők – általában természetesen előforduló fehérjék - kedvezőtlen reakciókat okozhatnak, melyek különböző formában nyilvánulhatnak meg: immun-mediált élelmiszerallergia vagy nem-immunmediált élelmiszerintoleranciaként.

Az élelmiszerallergiát gyógyítani nem lehet, egyetlen kezelési módja az adott allergén fehérjét tartalmazó élelmiszerek étrendből történő kihagyása. A betegek biztonsága érdekében a kapcsolódó törvényi előírások folyamatosan szigorodnak, a jelenleg érvényben lévő EU direktívák szerint 14 allergén komponens jelölése kötelező a termékek csomagolásán. Ehhez azonban olyan pontos és megbízható analitikai módszerek szükségesek, melyek alacsony mennyiségben is képesek kimutatni a kérdéses fehérjetartalmat. Ennek elérése kizárólag validált módszerekkel lehetséges, jelenleg azonban nem állnak rendelkezésre referencia anyagok és módszerek. Az egyik fő probléma az, hogy számos élelmiszer-mátrix létezik, nem tisztázott, hogy ezekben hogyan viselkednek az allergén fehérjék, hogyan változnak a feldolgozás, elsősorban a hőkezelés (sütés, főzés, pörkölés, stb.) alatt.

Kutatásaink célja élelmiszer-feldolgozási folyamat allergén fehérjékre gyakorolt hatásának vizsgálata volt, mely fontos információkkal szolgálhat egy jövőbeni módszervalidálási protokoll fejlesztéséhez. Búzáliszt alapú süteményekkel, mint feldolgozott élelmiszer-mátrix modelltermékkel dolgoztunk, mely két meghatározott allergénforrást, tojás- és tejfehérjét tartalmazott ismert mennyiségben. A munka minden fázisában mintát vettünk az allergén mennyiségi meghatározása céljából. Az alkalmazott analitikai módszer a szendvics- és indirekt kompetitív ELISA volt.

Méréseink során azt tapasztaltuk, hogy a sütési fázis lecsökkenti a mérhető fehérjék mennyiségét. Ennek pontos hátterét biztosan nem ismerjük, különböző módokon magyarázható. Egyik lehetséges ok a fehérjék hődenaturációja vagy az, hogy a mérési, mintaelőkészítési módszer nem megfelelő az alkalmazott mátrixhoz.

A jövőbeni céljaink közé tartozik ezen okok feltárása, valamint a kísérletsorozat kiterjesztése a cöliákiában szenvedők számára kérdéses gluténra.

Szőlőmag olajok összetételének vizsgálata

Varga Gerda, II. biológia MSc

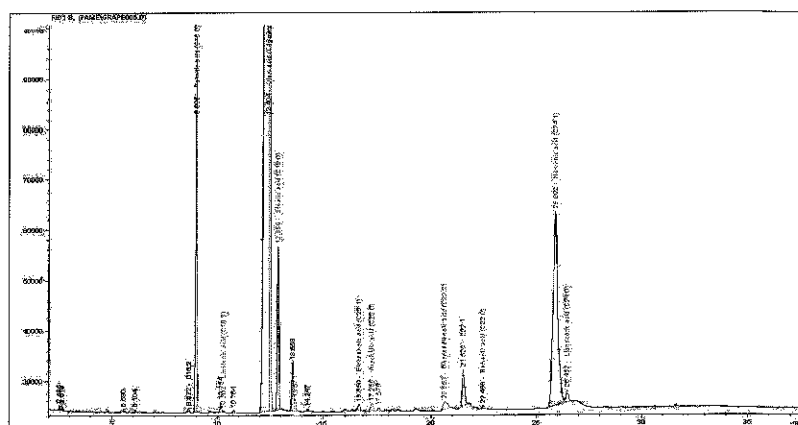
Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: **Dr. Harangi János** egyetemi docens
Pannon Egyetem, Műszaki Informatikai Kar
Rendszer és Számítástudományi Tanszék
Dr. Sipiczki Mátyás egyetemi tanár
Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar
Genetikai és Alkalmazott Mikrobiológiai Tanszék

Különböző borvidékekről származó vegyes szőlőből nyert szőlőmag olajok összetételét elemeztük, megállapítottuk, hogy a komponens összetétele hasonló, a szőlőmag olajok nagyrészt telítetlen zsírsavakat tartalmaznak. A legnagyobb komponens a linolsav (C18:2), amely legalább 50%-át jelenti a teljes zsírsav mennyiségnek. Jelentős mennyiségben vannak jelen az ennél nagyobb telítetlenségű komponensek is.

A retenció idő alapján a 24 szénatomszámú tartományban nervonsav előfordulása látszott valószínűsíthetőnek. Ez a komponens nagyon jelentős biológiai aktivitással rendelkezik, ezért a komponens jelenlétét tömegspektrometriás vizsgálattal próbáltuk megerősíteni. Kiderült azonban, hogy ebben a tartományban nem zsírsavak, hanem szteránvázis komponensek eluálódnak.

Ugyancsak ebben a tartományban található szilikonolaj jellegű komponensek, amelyek valószínűleg a présgépből kerültek a mintába.



A hajós-bajai borvidékekről származó szőlőmag olaj zsírsavösszetétele

Zearalenon hőtranszformációjának vizsgálata élelmiszerekben eltérő térfogatnövelő szerek hatására

Végh Éva Kinga, III. évf. kémia-biológia BSc

Eszterházy Károly Főiskola Természettudományi Kar

Témavezető: **B. Tóth Szabolcs** főiskolai adjunktus
Eszterházy Károly Főiskola, Élelmiszertudományi Intézet;
Kémia, Borászati kémia és Borászat Tanszék

Az élelmiszer alapanyagok mezőgazdasági termelésben történő termesztése során a napjainkban előtérbe kerülő biogazdálkodás miatt a növényvédő szerek felhasználása háttérbe szorult. Ezen tevékenység hozományaként a növényeken megtelepedő gombák száma megnőtt a számukra kedvezően alakuló életkörnyezet hatása miatt. A penészgombák által termelt másodlagos anyagcseretermékek – mikotoxinok – keletkezése, összes mennyisége a gombák számának a növekedtével egyenes arányban nőtt, amely az élelmiszerek minőségében jelentős kockázati tényezőként szerepel.

A kutatás során a Zearalenon mennyiségének a változását vizsgálok különböző élelmiszer adalékanyagok, mint térfogatnövelő szerek változtatása során.

A kutatás jelentősége az élelmiszerek – főleg kenyérfélék – sütése során felhasznált fő-, segéd- illetve adalékanyagok minőségi hatásának a vizsgálata a zearalenon mennyiségi változására. Továbbá meghatározni azon adalékanyagokat, amelyek adagolása révén a toxin mennyisége csökkenhet az élelmiszerekben.

A kutatás során egy, a hétköznapiakban használt kenyérsütési recept felhasználásával készítettem pékárut, amelyet a fent említett zearalenon toxinnal szennyeztem. A sütési paraméterek közül csak a térfogatnövelő szer minőségét változtattam a normál élesztő, sütőpor és szalalkáli viszonylatában. A feltevésem a toxin bomlása és a térfogatnövelő szer által létrehozott különböző pH-jú közegek kapcsolatában az volt, hogy a zearalenon erősen lúgos közegben jelentősen bomlik, hatása megszűnik. A vizsgálat során a különböző térfogatnövelő szerek segítségével sült pékárú maradék, még mobilizálható zearalenon tartalmát HPLC-UV technikával határoztam meg. A kísérletek során 10 illetve 20 mg L⁻¹ koncentrációjú zearalenon sztenderdekkel végeztem el a vizsgálatokat, amelyek eredményeként a három térfogatnövelő szer között a zearalenon bomlására gyakorolt hatás szempontjából jelentős eltérések mutatkoztak.



Anyagtudomány tagozat

A Fe(III) lokális szerkezetének szerepe a Fe(III)-mal dópolt TiO₂ fotokatalizátorok aktivitásában

Bajnóczi Éva Gabriella, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Sipos Pál** egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Munkám során két eltérő (szol-gél ill. lánghidrolitikus) módszerrel előállított, Fe(III)-mal dópolt fotokatalizátor mintasorozat szerkezetét hasonlítottam össze. Az összehasonlítás azért vált érdekessé, mert azt tapasztaltuk, hogy a Fe(III) hozzáadása hatására a fotokatalitikus aktivitás a két mintasorban eltérő módon változik mind Vis, mind UV-fénnyel történő megvilágítás mellett. A szol-gél eljárással készült (S) minták esetében a növekvő Fe (III)-tartalommal maximumgörbén haladt keresztül, míg a lánghidrolitikus minták (L) a Fe (III)-tartalomtól függetlenül sokkal alacsonyabb fotokatalitikus aktivitást mutattak, mint az azonos körülmények között előállított dópolatlan katalizátor. Az S és L mintasorban tehát ugyanaz az adalékanyag (Fe₂O₃) a fotokatalitikus aktivitás szempontjából ellentétes hatást váltott ki. Kutatásaim célja az volt, hogy a fotokatalizátorok részletes összehasonlításával szerkezeti magyarázatot találjak erre az eltérő hatásra.

A katalizátorok jellemzésére atomabszorpciós spektrofotometriát, diffúz reflektancia spektroszkópiát, röntgendiffrakciót, transzmissziós elektronmikroszkópiát valamint röntgen-fotoelektron spektroszkópiát használtunk. Ezek alapján bebizonyítottuk, hogy a katalizátorok tömbi tulajdonságaiban azonosítható különbségek nem indokolják azok eltérő fotokatalitikus viselkedését. Így a jelenség magyarázatát a dópolóanyag szerkezetének (elsősorban a Fe(III) lokális szerkezetének) különbségeivel kíséreltük meg leírni. Röntgen-sugár abszorpciós spektroszkópia (XAFS) segítségével a két mintasorozat között jelentős különbségeket mutattunk ki a Fe(III) lokális szerkezetében. A pre-edge és a XANES régió alapján mindkét sorozatra torzult oktaédres geometria jellemző, de a torzulás az S sorozatban jelentősen nagyobb mértékű, mint az L-ben. Az EXAFS régió elemzése alapján a S sorozat tagjaiban jelentősen nagyobb számú hibahely figyelhető meg, mint az L sorozatban. A hibahelyekre vonatkozó megállapításainkat független Mössbauer-spektroszkópiai vizsgálatokkal is megerősítettük. Emellett az S sorozaton belül az aktivitás maximumgörbe szerinti változását a Fe(III) körüli geometria torzulásának jól megfigyelhető megváltozásával értelmeztük.

Inverz gázkromatográfia alkalmazása cellulóz alapú szubsztrátumok felületi tulajdonságainak jellemzésére

Bandi Éva Eszter, I. évf. vegyészmérnöki MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Csiszár Emília** egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Fekete Erika tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A lineáris inverz gázkromatográfia (IGC, infinite dilution) egy gyors és viszonylag egyszerű módszer szilárd felületek energetikájának tanulmányozására. A lineáris IGC alkalmazásakor a vizsgálandó anyaggal töltjük meg a kolonnát, majd ismert jellemzőkkel rendelkező folyadék gőzét injektáljuk a vivőgáz áramába. A retenciós adatokból az adszorbens felületi tulajdonságait határozhatjuk meg, azaz a felületi feszültség diszperziós komponensét (γ_s^d), illetve a sav-bázis konstansokat (elektron akceptor: K_A ; elektron donor: K_D).

Az elmúlt években a cellulóz alapú szubsztrátumok felületi tulajdonságait több szerző is vizsgálta inverz gázkromatográfias módszerrel. A publikált eredmények azonban számos ellentmondást tartalmaznak, amely elsősorban az eltérő (vagy éppen nem definiált) mérési paramétereknek és a minta előkészítésnek tudható be. A szerzők nagy része egyetért abban, hogy a felületi feszültség diszperziós komponense csökken a növekvő hőmérséklettel, de gyakorlatilag nincs egységes álláspont a felület energetikájára és bázicitására vonatkozó legalapvetőbb kérdésekben.

Tudományos diákköri dolgozatomban nyers pamut és len szubsztrátumok felületi tulajdonságait jellemeztem IGC-vel és más analitikai módszerekkel. Darált és szálas mintákat vizsgáltam állandó kifűtést alkalmazva. Összehasonlítottam a szálasanyagok felületi tulajdonságait, valamint jellemeztem a szubsztrátumok megjelenési formájának (szálas, darált) hatását a mérhető felületi jellemzők értékére. Vizsgáltam a felületi feszültség diszperziós komponensének hőmérséklet függését, továbbá a felületek sav-bázis viselkedését poláros molekulákkal. Az IGC-vel nyert mérési eredményeket összevettem más módszerekkel (vízgőzszorpció, rézszám, polimerizációs fok, SEM, elektronsugaras mikroanalízis) kapott eredményekkel.

ZnO-dal borított többfalú szén nanocső (MWNT) alapú kompozitok előállítása és vizsgálata**Bártfai Erika**, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Hernádi Klára** egyetemi tanár
Németh Zoltán PhD hallgató
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A ZnO-MWNT kompozitok kiemelkedő fotokatalitikus aktivitásúak lehetnek. A korábbi kutatások eredményei alapján a kompozitok nagyobb fotokatalitikus aktivitással rendelkeznek, mint a ZnO nanorészecskék, vagy a ZnO nanorészecskék és MWNT mechanikai keveréke, ezért igen fontos, hogy a többfalú szén nanocsövek felületén szervesen réteget tudjunk kialakítani.

Munkánk során többfalú szén nanocsövek Zn-acetát, illetve Zn-szulfát prekursorokkal, N,N-dimetil-formamid, etanol és víz oldószerekkel előállított kompozitjait vizsgáltuk. A kompozitok előállításánál a prekursorokhoz, illetve a szén nanocsövekhez a megfelelő oldószert adtuk, majd homogenizáltuk a két alkotórészt. Ezután a mintákat 110 °C-on szárítottuk. Vizsgáltuk a lúgos közeg hatását, illetve azt is, hogy a nanocsövek felületkezelése milyen hatással van a rajta kialakuló réteg szerkezetére, ezért bizonyos mintáknál Na-dodecyl-szulfáttal kezeltük a szén nanocsövek felületét. Az elkészített mintákat transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM), pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM), röntgendiffrakcióval (XRD) és elektrondiffrakcióval (ED) vizsgáltuk. Az elsődleges XRD felvételek alapján megállapítottuk, hogy a ZnO felületi réteg csak hőkezelés alkalmazásával alakul ki a felületen.

A kompozitok kialakításában a szén nanocsövek nagy előnye, hogy a legtöbb reakciókörülmény között inerte, kémiai és mechanikailag is stabilak. A félvezető nanorészecskék felvitele során megfelelő alapot biztosítanak ahhoz, hogy a nanorészecskék megfelelő diszperzitással eloszthatók legyenek a felületen. A fotokatalitikus hatás alapja a ZnO-ról a nanocsövekre történő elektrontranszfer lehet. A továbbiakban terveink közt szerepel, hogy tanulmányozzuk a homogenitás-fotokatalitikus aktivitás összefüggést. Jelenlegi munkánk során homogén felületi réteg kialakítására törekszünk, ezért vizsgáljuk a prekursor-nanocső tömegarány és a pH hatását. Ezen kompozitok fotokatalitikus aktivitását fogjuk összehasonlítani a korábbi munkánk során kapott szemcsés szerkezetű felületi réteggel rendelkező kompozitok fotokatalitikus aktivitásával.

Réztartalmú lignocellulóz alapú szenek előállítása és jellemzése**Berke Barbara**, IV. évf. vegyészmérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Nagyné Dr. László Krisztina, egyetemi docens
BME VBK Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Összetett porúsrendszerüknek köszönhető nagy fajlagos felületük miatt az aktív szenek már az ókori egyiptomiak óta ismert általános szorbensek. Legyen szó „csupán” közlekedési vagy ipari balesetben felszabaduló ammóniáról vagy harci gázokról, ezekben az esetekben van valami közös. A következmények elhárítása, felszámolása megfelelő légzésvédelem nélkül lehetetlen. A célnak megfelelő specifikus szorpciós tulajdonságokat a szénfelületek módosításával fokozhatjuk.

Az elterjedt eljárások döntő többsége aktív szenek utólagos kezelésével segíti elő a veszélyes gázok megkötését. Általában többszörös és komplex impregnálást alkalmaznak.^[1] A jelenlegi technológiákban használt igen hatásos de rákkeltő króm kiváltása új impregnálási módszereket igényel.

A felületre felvitt Cu^{2+} elsősorban a savas jellegű gázok (pl.: H_2S vagy HCN) megkötését segíti. Célom volt 2-6% ilyen formájú rézet tartalmazó, nagy fajlagos felületű szénminták előállítása és vizsgálata. A jelenlegi impregnálási eljárásokkal ellentétben, melyek kész aktív szénből indulnak ki, az impregnálószer az aktív szén előállításnak már egy korábbi lépésében be kívántam vinni a mátrixba.

Hazai lignocellulóz alapanyagból indultam ki.^[2] Mintáimat kétféle módon készítettem. Az egyik esetben az alapanyagot mindenfajta előkezelés nélkül impregnáltam különféle réz(II)-oldatokban, míg a másik esetben az impregnálás a kiindulási anyag karbonizálása után történt. Az előállítás utolsó lépése minden esetben vízgőzös aktiválás volt.

Vizsgáltam a mintákra felvitt réz mennyiségét, illetve a kezelt minták porozitását. Az utóbbit N_2 -gőz adszorpcióval jellemeztem. Kiegészítő módszerként termikus analízist (TA), pásztázó elektronmikroszkópiát (SEM), energia-diszperzív röntgen analízist (EDAX) és röntgengerjesztéses fotoelektron spektroszkópiát (XPS) alkalmaztam.

[1] Lodewyckx P.: Adsorption of chemical warfare agents in Activated Carbon Surfaces in Environmental Remediation, Bandosz T.J., Elsevier, New York, 475-528 (2006)

[2] László K., Bóta A., Nagy L.G., Carbon, 38 (14) 1965-1976 (2000)

Egyfalú szén nanocsövek töltése fullerénnel szuperkritikus széndioxid segítségével**Botos Ákos, végzett nevezéskor**

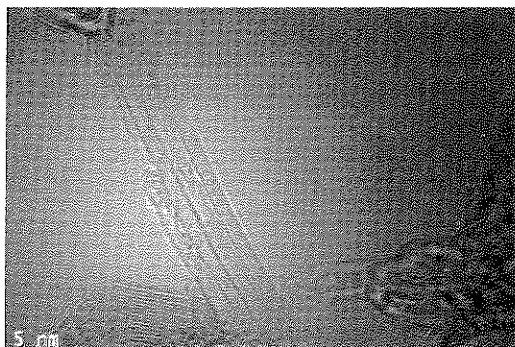
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Kamarás Katalin** tudományos munkatárs
MTA, Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

A nanocső és a fullerén a szén egy-egy allotróp módosulata. A nanocsövek kvázi egydimenziós üregeiben a molekulák a nanocsövek átmérője által befolyásolt fázisokat hoznak létre, amelyek fizikai tulajdonságai eltérhetnek a tömbfázisban tapasztaltaktól. A csövekben a molekulák kémiai reakciói zavaró külső hatásoktól mentes környezetben vizsgálhatók. Ehhez hasonlóan léteznek olyan fullerének, amelyek belsejében például fém atom van ($M@C_n$). Kísérleteim során fullerénnel és kubánnal töltött szén nanocsöveket állítottam elő és vizsgáltam Dr. Kamarás Katalin vezetésével. Tudományos diákköri munkám célja egy alacsony hőmérsékletű nanocső töltési eljárás kidolgozása, és a paraméterek optimalizálása volt.

Munkám során sikeresen állítottam elő fullerénnel töltött szén nanocsöveket a hagyományos gázfázisú töltéssel és szuperkritikus széndioxid közegben végrehajtott nano-extrakcióval. Ezt TEM felvételek és Raman spektrumok támasztják alá. A reakciók eredményességének transzmissziós elektronmikroszkóp nélküli vizsgálatára kidolgoztam egy összetett eljárást, aminek alkalmazásával fullerének és más IR és egyben Raman aktív molekulák esetén megállapítható a reakció sikeressége.

Megállapítottam, hogy kubán, C_{60} és szén nanocső külön fázisaiból kiindulva nem képződik $C_{60}\cdot C_8H_8@SWNT$, csak $C_{60}@SWNT$. A reakciót ezért $C_{60}\cdot C_8H_8$ kokristályból kiindulva is elvégeztem, és bizonyítottam a C_{60} beépülését ebben az esetben is. A $C_{60}\cdot C_8H_8@SWNT$ előállításának bizonyításához TEM felvételekre van szükség.



$C_{60}@SWNT$ transzmissziós elektronmikroszkóp felvétele.

Nanoméretű WO_3 szemcsék alkalmazása fotokatalizátorként: a WO_3 kristályszerkezetének és összetételének hatása a fotokatalízisre

Fórizs Balázs, V. évf. vegyészmérnök BSc

BME Vegyész és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Szilágyi Imre Miklós tudományos munkatárs
MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Ahhoz, hogy minél hatékonyabb funkcionális anyagokat állítsunk elő, ismernünk kell a kristályszerkezet, a pontos összetétel, előállítási körülmények, morfológia stb., hatásait. Jól ismert tény, hogy ezen faktorok nagy hatással van a fizikai, kémiai tulajdonságaikra. Az elmúlt évtizedekben széleskörűen vizsgálták a különböző félvezető anyagokat (pl. fém-oxidok, és – kompozitok). A fotokatalízis jelenségének felfedezése óta, a vizsgálatok döntő többségét TiO_2 -on végezték, de számos tudományos cikk látott napvilágot különböző félvezető-oxidok, és kompozitok kutatási eredményeivel is (pl. WO_3 , SnO_2 , ZnO , $AgBr/Ag$, Bi_2WO_6). A fotokatalízis különböző mechanizmusai, a szerkezet (rutil, anatáz), a morfológia (nanodot, nanocső, nanoszál, üreges gömbök, csillagok stb.) mind mélyen tanulmányozottak, és kellő mértékben feltártak a TiO_2 esetén. Az elmúlt öt évben exponenciálisan megnőtt a témával foglalkozó eredmények száma, így mára a volfram-trioxid is egy jól ismert anyagnak számít, eltekintve attól, hogy legjobb tudásunk szerint senki nem kutatta a kristályszerkezet, összetétel hatását a fotoaktivitásra.

Célunk ezek felderítése volt. Jól kontrollálható, és reprodukálható hevítési eljárással, hexagonális-ammónium-oxid bronzból $((NH_4)_xWO_{3-y})$ állítottunk elő, különböző átlagos összetételű, és kristályszerkezetű nanoméretű volfram-trioxid szemcséket. Széleskörűen jellemeztük a mintákat, a minél pontosabb megismerés miatt. Szimultán termogravimetriát, tömegspektrométerrel kombinálva, tudtuk kidolgozni a pontos hevítési módot, valamint kontrollálni azt. Por röntgendiffrakció segítségével információt kaptunk a kristályszerkezetről, és az átlagos szemcseméretéről. A Raman spektroszkópiai mérések alátámasztották a röntgennel mért eredményeket. Pásztaó -és transzmissziós elektronmikroszkópiát használtunk a morfológia felderítésére. A nagy felbontású TEM mikrográfiákon láthatóak voltak egyes szemcsék kristályrács rétegei is! UV-VIS spektroszkópia segítségével tudtuk meghatározni a különböző porok elnyelési spektrumát, reflektanciás mérés alapján. Az előállítás mód, és a kiindulási anyag, valamint megelőző kutatások alapján feltételezhettük, hogy a felületi –és, a tömbi összetétel megegyező, így XPS segítségével tanulmányozhattuk a mintákban a volfram oxidáltsági fokát. Por mintán mért fotolumineszcencia spektrumok hozzájárult az eltérő fotokatalitikus aktivitások jobb megértéséhez. A fotokatalízist folyadék és gáz fázisban is vizsgáltuk. Folyadékfázisban metil-naracs festéket bontottunk el, míg gázfázisban acetont. A gázfázisú mérés lehetőséget adott a vízgőz szerepének empirikus tanulmányozására.

Végeredményként azt mondhatjuk el, hogy a WO_3 esetén az összetételnek, pontosabban az átlagos oxidációs állapotnak nagy hatása van az aktivitásra; ui. minél teljesebb a volfram oxidációja, annál aktívabb fotokatalizátor. Valamint megállapítjuk, hogy a kristályszerkezet is befolyással bír a tulajdonságokra, de nem akkora mértékben mint a TiO_2 esetén.

Akrilát anionokkal interkalált réteges kettős hidroxidok készítése és jellemzése

Muráth Szabolcs II. kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Pálinkó István** egyetemi docens
SZTE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Sipos Pál egyetemi docens
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A réteges kettős hidroxidok a brucit-hoz $[Mg(OH)_2]$ hasonló szerkezetű anyagok, amelyben a kétértékű fémionokat részlegesen háromértékűekre cserélték. Ekkor a rétegek töltése pozitív lesz, a rétegek közötti térben pedig a töltést kompenzáló anionok helyezkednek el. Ezek alapesetben kisméretű szervetlen ionok. A szervetlen anionok nagyméretű szerves anionokra, például karbonsavak anionjaira cserélhetők, amikor is a rétegtávolság jelentősen megnőhet. A kapott szerves-szervetlen nanokompozitok sokféleképpen felhasználhatók. Ha a "vendég" anion királis akkor alkalmazhatók immobilizált királis organokatalizátorként, kiralitást megőrző "bőröndként", ha a szerves iont királis szintenként akarjuk felhasználni, vagy akár olyan behatárolt térfogatú és geometriájú reaktorként, amelyben az interkalált szerves anionok a reaktánsok. E munkában bemutatott nanokompozitokat ez utóbbi távlati cél elérése érdekében készítettük: majdan akrilsavszármazékok fényindukálta topotaktikus reakcióit szeretnénk vizsgálni egy behatárolt térrészben.

Ennek érdekében CaFe réteges kettős hidroxidba beépítettünk többféle módszerrel különféle akrilát anionokat, és a mintákat műszeres módszerekkel jellemeztük. Az alaptéchnika a por röntgendiffrakció volt. A diffraktogram (003) reflexiójának helyzetéből kiszámítottuk a rétegek közötti távolságot. Az anyagok morfológiáját pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) tanulmányoztuk. Az elemeloszlás kvalitatív jellemzésére elkészítettük az elem térképet, a kvantitatív összetételre vonatkozó adatokat pedig energiadiszperzív röntgen-fluoreszcencia (EDX) mérésekből nyertük. Az interkaláció módjára infravörös mérésekből és molekulamodelljei eredményekből következtettünk. Tanulmányoztuk a kompozitok termikus viselkedését is.

Azt tapasztaltuk, hogy az interkaláció minden esetben sikeres volt, a szerves anionok nem szenvedtek semmilyen átalakulást a beépítés során, és valószínű térbeli elhelyezkedésük sok esetben lehetővé teszi, hogy egymással reagálni tudjanak a rétegek közötti térben.

Alkálifémek (K, Cs) hatása a szén nanocsövek katalitikus szintézisére**Németh Krisztián**, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Hernádi Klára**, egyetemi tanár**Fejes Dóra**, PhD hallgató**Németh Zoltán**, PhD hallgató

SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszékének kutatócsoportja évek óta aktív résztvevője a szén nanocsövek katalitikus módszerrel történő előállításának. 1991-es felfedezésük óta óriási figyelem övezi a szén nanocsövekkel kapcsolatos kutatásokat, melyek rendkívüli mechanikai és elektromos tulajdonságaiknak köszönhetően számos területen ígéretes, új anyagnak bizonyultak [1].

A szén nanocsövek előállítására a szénhidrogének katalitikus bontása (CVD)[2] a legelterjedtebb módszer. A CVD szintézist alapvetően négy tényező befolyásolja: az alkalmazott hordozó (oxid vagy szilikát jellegű), katalizátor (egy-, illetve kétfémes átmenetifém katalizátorok), szénforrás (etilén, acetilén, metán) valamint a hőmérséklet (600-1000°C). A CVD eljárás nagy előnye, hogy egyszerű és ezzel a módszerrel állíthatunk elő legkönnyebben dópolt szén nanocsöveket [3]. A dópolás során ún. promotereket adunk a katalizátorokhoz. A promoter (dópoló vegyület) olyan anyag, amit készítés közben kis mennyiségben adunk a katalizátorhoz. Egymagában kis aktivitású vagy inaktív, de az adott reakcióban fokozza az aktív komponens aktivitását, stabilitását illetve szelektivitását. Ehhez kapcsolódik TDK dolgozatom témája is, mely alkálifémek (K, Cs) hatását vizsgálja a szén nanocsövek katalitikus szintézisére dópolásos technika alkalmazásával.

Kísérleteink során többfajta katalizátort állítottunk elő, melyeket vizes szuszpenzióból impregnálással készítettünk el. A kísérleti munka során változtattuk a hordozó típusát (CaCO₃, 13X zeolit), a Fe(III)-Co(II) katalizátorfémek egymáshoz viszonyított arányát, a dópoló vegyületek minőségét (KBr, CsCl, Cs-acetát), valamint a dópoló vegyületek arányát (0, 1, 3, 5%). A szén nanocsövek katalitikus szintézisét 720°C-on, acetilén bontásával valósítottuk meg. Az előállított mintákat elektronmikroszkópos technikákkal (TEM, SEM) vizsgáltuk.

[1] Cullinan, MA., Culpepper, MR., Physical Review B, 82 (11), (2010)

[2] Landois, P., Peigney, A., Carbon, 47 (3), 789-794 (2009)

[3] Tao, X., Zhang, X., Chemical Physics Letters, 409 (1-3), 89-92 (2005)

Spirális és egyenes szén nanocsövek szintéziséhez alkalmazott katalizátorok előállítása

Raffai Manuella, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Hernádi Klára egyetemi tanár
Fejes Dóra PhD hallgató
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

A szén nanocső nem más, mint egy tökéletes hengerré csavart, egyetlen atom vastagságú grafitréteg, azonban sokféle, eltérő tulajdonságú szén nanocső létezik. A feltekérés módjától függően előállhatnak fémes és félvezető tulajdonságúak is, a felhasználáshoz azonban nagyon jól definiált tulajdonságokkal, morfológiával kell rendelkeznie az anyagnak, így a gyakorlati alkalmazás szükséges feltétele általában a szelektív szintézis.

Kísérleti munkám során spirális és egyenes szén nanocsövek előállítására alkalmas katalizátorok készítésével foglalkoztam. Mintáimat őrlési technikával illetve impregnálással állítottam elő.

A tanszéken végzett korábbi kutatások eredményei alapján megállapítottuk, hogy a 60 perces őrlési idővel előállított katalizátorok alkalmazásával nagyon kis átmérőjű szén nanocsövek képződtek, vagyis ez az őrlési időtartam túl hosszúnak bizonyult. Ezek alapján vizsgáltuk az őrlési idő hatását a képződő termék mennyiségére és minőségére nézve. Ennek célja, hogy megállapítsam, az őrlési idő hogyan befolyásolja a szén nanocsövek szintézisét, valamint a kapott anyag szerkezetét. A reaktor hőmérséklete is fontos paraméter, ezért ennek hatását is vizsgálni kívántuk 650-750°C közötti hőmérséklet tartományban (ezen kísérletek még folyamatban vannak). Szintéziseinkhez katalizátor prekursoroként $\text{Co}(\text{CH}_3\text{COO})_2$, és $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ -ot alkalmaztunk 13X zeolit hordozón. A szén nanocsövek előállítása vízszintes átáramlásos reaktorban történt, ahol a reaktáns gáz acetilén, a vivőgáz nitrogén volt.

A képződött terméket elektronmikroszkópos technikával (TEM, SEM), a katalizátorokat pedig röntgendiffrakcióval (XRD) vizsgáltuk. Megállapítható, hogy az őrlési idő egyenesen arányos a szén nanocsövek átmérőinek nagyságával, tehát minél hosszabb ideig őrljük a nanocsövek előállításához szükséges katalizátor prekursorokat, annál kisebb átmérőjű csöveket szintetizálhatunk, továbbá megállapítható az is, hogy hosszabb ideig tartó őrlési idő szükséges a spirális nanocsövek keletkezéséhez. Az általam előállított spirális szén nanocsövek átmérőinek átlaga mindkét esetben kisebb volt, mint az egyenes csövek átmérőinek átlaga.

Biokémia, biotechnológia I. tagozat

Drosophila virilis* heterotrimer dUTPázának szerkezeti és funkcionális vizsgálata*Benedek András**, IV. évf. vegyészmérnöki BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Vértessy Beáta** tudományos tanácsadó

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

MTA-SzBK Enzimológiai Intézet

Horváth András PhD hallgató

MTA-SzBK Enzimológiai Intézet

A DNS épségének és megfelelő működésének megőrzéséhez elengedhetetlenül szükséges a minden prokarióta és eukarióta sejtben megtalálható dUTPáz enzim. Szerepe az uracil DNS-be való beépülésének megakadályozása a dUTP dUMP-vé való hidrolízise révén. A dUMP a dTTP szintézis prekursoraként szolgál, így a dUTPáz az utóbbi reakciót katalizáló timidilát szintáz enzimmal együtt az állandóan alacsony dUTP/dTTP arány fenntartásáért felelős a sejtben.

A dUTPáz enzimek általában három azonos polipeptid láncból álló, úgynevezett homotrimernek. Létezik néhány organizmus, mint például az általam is vizsgált *Drosophila virilis*, amelynek genomjában ez a trimer szerkezet már eleve kódolva van. Ebben az esetben a dUTPáz kódoló gén szekvenciája háromszoros kópiában, egy leolvasási keretben található meg a DNS-ben, és egy polipeptidként fejeződik ki. Az így kialakuló szerkezetet nevezik kovalens heterotrimernek. Munkám során arra szeretnék választ kapni, hogy milyen evolúciós úton alakult ki ez a szerkezet, és miért lehet előnyös a *Drosophila virilis*-nek.

A vizsgálatokhoz polimeráz láncreakció segítségével a vad típusú és különböző csonkított mutáns dUTPázok szekvenciáit állítottam elő, amelyeket pet19-b plazmidba ültettem be, majd a megfelelő fehérjéket *E. coli* BL21 baktériumtörzsben fejeztem ki. A megtermelt fehérjéket affinitás kromatográfiával és gélszűréssel tisztítottam, majd vizsgáltam funkcióképességüket (specifikus enzimaktivitás), oligomerizációs állapotukat és stabilitásukat.

A várakozásnak megfelelően az előállított vad típusú dUTPáz aktívnak találtam. A különálló alegységekké, és érdekes módon a dimerré csonkított genetikai kódról átírt fehérjék is funkcióképesek, annak ellenére, hogy a korábbi elképzelések szerint a homotrimer szerkezet kialakulása feltétlenül szükséges az enzim működéséhez.

Urokináz plazminogén aktivátor receptor blokkoló peptidok szintézise és konjugálása

Enyedi Kata Nóra, II. évf. kémia MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Mező Gábor** tudományos tanácsadó
ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

Statisztikai adatok alapján a daganatos megbetegedések a második helyen állnak a halálozási okok között. A rákos halálozások elsődleges oka azonban nem a primer tumorokban keresendő, hanem a betegség során kialakult áttétekben. Gyakran előfordul ugyanis, hogy bár a beteg primer daganatát sikeresen kezelik pl. sebészeti beavatkozás vagy sugárkezelés útján, a mikrometasztázisokat képző rákos sejtek mégis túlélnek a terápiás kezeléseket, és láthatatlanok maradnak a különböző klinikai képalakító eljárások számára. Később, külső behatásra, ezek a nyugvó mikrometasztázisok makrometasztázisokká fejlődhetnek, és a betegség kiújul.

Bár a különböző rákos megbetegedések kezelésére számos lehetőség nyílik, mégis ilyen esetekben a hagyományos kezelési módszerek önmagukban nem célravezetőek, tehát újabb, hatékonyabb eljárásokra van szükség. Munkám során ezért olyan peptid konjugátumok szintézisét tűztem ki célul, melyek a malignus tumorok további áttétképzésének megakadályozásában kapnának szerepet.

TDK munkám során olyan peptid-kimérák előállítását terveztem, amelyek egyszerre lehetnek képesek megakadályozni az urokináz plazminogén aktivátor rendszer extracelluláris mátrix degradációjában való részvételét, valamint kölcsönhatásba lépését a migrációt elősegítő integrinokkal. Ennek érdekében az irodalmi adatok alapján uPA antagonistaként az Å6-ot és egy kevésbé hatékony származékát, az Å8-ot választottam. Mivel számos integrin lehet célpont, ezért a kiméra peptid másik komponensként egy olyan nagy aktivitású, ugyanakkor a migrációt elősegítő integrinokra ($\alpha_v\beta_3$, $\alpha_v\beta_5$, $\alpha_5\beta_1$) viszonylag specifikus peptid antagonistát kerestem. Választásom ezért a ciklo[RGDfC] ciklopeptidre esett. A két választott receptor antagonistát egy flexibilis spaceren keresztül kapcsoltam össze, lehetővé téve a kettős receptor-blokkolást. Az alkalmazható biológiai vizsgálatok számának bővítését szem előtt tartva anyagaim 7-dietilamino-3-karboxikumarin származékai is előállítottam, melyek alkalmasak a peptidok sejtekhez kötődésének vizuális vizsgálatára is. Bár a biológiai vizsgálatok még zajlanak, mégis elmondható, hogy a vizsgált peptid-peptid konjugátum ígéretesnek bizonyult, és megfelelő optimalizálás esetén versenytársa lehet a jelenleg alkalmazott metasztázist gátló gyógyszermolekuláknak.

Hagyományos kínai gyógynövények az α -szinuklein amiloid képződés gátlásában

Gelencsér Annamária, V. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

MTA-SZBK Enzimológiai Intézet

Témavezető: **Dr. Tompa Péter** csoportvezető
MTA-SZBK Enzimológiai Intézet

Bár a Parkinson-kórra, napjaink második leggyakoribb neurodegeneratív betegségére utaló tüneti feljegyzéseket évezredekkel korábbról találhatunk, magát a betegséget kevesebb, mint 200 éve, egészen pontosan 1817-ben írta le először névadója, James Parkinson. A teljesség igénye nélkül az alábbi tünetek jellemzik: remegés, a mozgásszervek merevsége és lassulása, apróléptű, csoszogó járás, mimikaszegénység, egyensúlyzavarok. A betegség lassú, halálos és az orvostudomány jelen állása szerint gyógyíthatatlan.

A kór klinikai markere az ún. Lewy-testek jelenléte, amik az idegsejtekben lerakódó toxikus aggregátumok. Fő komponensük az α -szinuklein nevű fehérje, mely hajlamos az aggregációra. Gyakorlatilag akárhány fehérje összekapcsolódhat, és óriásméretű- akár szabad szemmel is látható- aggregátumot, amiloidot képezhet.

A modern szintetikus gyógyszerek orvoslásban betöltött szerepe mellett újra előtérbe kerül a gyógynövények használata is. Kínában nagy hagyománya van a gyógyhatású növények alkalmazásának. Ma teljes kutatóintézetek foglalkoznak e növények hatásának megértésével, kutatják azokat a vegyületeket, amelyek egy-egy betegséget meggyógyítanak. A neurodegeneratív betegségek gyógyítására irányuló kutatások egyik szegmense a különböző TCM-ek (Traditional Chinese Medicines) vizsgálata, melyeknek neuron-védő szerepet tulajdonítanak.

Munkám során 6 különböző kínai medicina hatását vizsgáltam *in vitro* az α -szinuklein amiloid képzésére abból a célból, hogy potenciális gátló hatású vegyületeket azonosítsak. Két növényi kivonat nagyon ígéretesnek tűnik, már nagyon kis mennyiségben gátolták az amiloid szálak képződést, sőt, előidéztek a már kialakult amiloid szálak szétesését. Ezek az eredmények fontos lépést jelenthetnek gyógyszerhatású készítmények kidolgozása, illetve kezelések kifejlesztése felé.

Az exendin-4 minifehérje „élete” a DNS-től az NMR-ig**Huszka Beáta, I. évf. vegyész MSc.**

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Perczel András egyetemi tanár
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Munkám során az exendin-4 (EX4) minifehérjét állítottam elő génexpresszós úton, és tanulmányoztam térszerkezetét valamint dinamikáját és NMR-spektroszkópia segítségével.

Az exendin-4 egy viperagyík (*Heloderma suspectum*) nyálából izolált, 39 aminosavból álló fehérje, mely analóg egy szénhidrát anyagcserét befolyásoló inkretinnel, a glukagon-szerű peptiddel (GLP-1). Az 53%-os szekvenciális, és térszerkezetbeli hasonlóság miatt kötődik a GLP-1 receptorhoz, és serkenti az inzulin-, valamint gátolja a glukagon-szekréción. Így a fehérje potenciális terápiás szernek tekinthető a kettős típusú diabéteszben.

Az exendin-4 *in vivo* előállításához *Escherichia coli* sejteket alkalmaztam. A fehérjét kis mérete miatt ubikvitin fúziós rendszerben termeltem. Az *N*-terminálison elhelyezkedő ubikvitin egy hisztidin címkével van ellátva, így a tisztításokhoz Ni²⁺ affinitás kromatográfiát használtam. A fúziós partnert YUH (élesztő ubikvitin hidroláz) enzimmel emésztettem le.

Az exendin-4 végső tisztítását RP-HPLC-vel végeztem, C18-as kolonnán, TFA-t is tartalmazó víz-acetonitril gradiens elúcióval.

A fehérjét normál- és a dinamikai mérésekhez szükséges ¹⁵N- jelölt formában is elkészítettem.

Az NMR mérések vizes közegben illetve 30% trifluoretanol tartalmazó oldatban zajlottak, 500 MHz-es készüléken. A jelöletlen exendin-4-ről homonukleáris ¹H-¹H TOCSY és NOESY, a ¹⁵N izotópjelöltről T1, T2 relaxációs, valamint heteronukleáris ¹H-¹⁵N NOE spektrumokat vettem fel. A TOCSY-NOESY spektrumok jeldiszperzitása vizes közegben nem volt megfelelő, így fehérje térszerkezetét tekintve főleg irodalmi előzményekre támaszkodtam. A heteronukleáris spektrumokból nyert T1, T2 és hetNOE adatok szekvencia-függő elemzéséből megállapítottam, hogy a molekula eleje (első 10 aminosav), és vége (Gly³⁰-tól) igen erőteljes szegmensmozgásokkal bír, míg a középső Ser¹¹-Lys²⁷ szakasz merevebb a helikális szerkezetnek köszönhetően.

Az exendin-4 szerkezetének és dinamikájának megismerése fontos lépés lehet a kettős típusú cukorbetegség molekuláris hátterének megértésében.

Mycobacterium tuberculosis* dUTPáz mutánsok kötéshasításának vizsgálata QM/MM módszerrel*Lopata Anna, I. évf. biomérnöki MSc**

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Rosta Edina** posztdoktor
NIH NIDDK Laboratory of Chemical Physics
Dr. Tóth Judit tudományos főmunkatárs
Dr. Vértessy Beáta tudományos tanácsadó
MTA SZBK Enzimológiai Intézet

A WHO adatai szerint a tuberkulózis a leghalálosabb betegség a világon, ami évente közel 2 millió áldozatot szed. A betegség gyógyítására megfelelő célpont lehet a kutatócsoportunk által behatóan tanulmányozott dUTPáz enzim, amely esszenciális a *Mycobacterium tuberculosis* baktérium számára. Ezen enzim alapvető szerepet játszik a DNS integritásának megőrzésében azáltal, hogy a dUTP hidrolízisét katalizálja dUMP-vé és pirofoszfáttá. Ezzel az enzim előállítja a dTTP bioszintézis prekurzorát és alacsony szinten tartja a dUTP:dTTP arányt. Mivel a dUTPáz hiányában ez az arány magas lesz, DNS fragmentáció és az úgynevezett timinmentes sejthalál következik be.

Az enzim mechanizmus alapjainak megismeréséhez korábbi munkám során olyan mutáns enzimeket állítottam elő, amelyek a szubsztrátot kötő C-terminális karjukban különböznek a vad típusú dUTPáztól. Ezek közül az uracillal aromásan átlapoló hisztidin aminosav alaninra való mutációját tartalmazó mutáns és a teljes C-terminális kar nélküli csonkolt mutáns kristályszerkezetét is sikerült meghatározni, amelyek a PDB adatbázisban 3LOJ és 3I93 kóddal találhatók meg. A vad típusú enzim és a mutánsok szubsztrát hasítási mechanizmusának összehasonlításához *in silico* vizsgálatokat kezdtem az NIH-ben (National Institutes of Health, Bethesda, Maryland, USA).

Egy korábban definiált (Barabás *et al*, 2010, publikálás alatt) reakciókoordináta mentén haladva több szerkezetet minimalizáltunk, az enzim és a szubsztrát kiindulási állapotából az átmeneti állapoton keresztül a termékig. Az enzimek teljes aktív centrumát és a szubsztrátot sűrűségfüggőképpel, míg az enzim és az oldat többi részét molekulamechanikai módszerrel írtuk le.

Eredményeinkből megállapítható, hogy a kapott reakció-energiaprofilok aktiválási szabadentalpiája jó összhangban van a kísérletileg mért katalitikus állandókkal. A kapott szerkezetek aktív centrumának töltéseloszlása, valamint a kötéshosszak és -szögek változása alapján azonosíthatók azok a kulcsfontosságú pontok, amelyek biztosítják a dUTPáz enzim megfelelő katalitikus hatékonyságát.

Terápiás fehérje bevitele nyálmirigy géntranszferrel**Sipos Bernadett**, II. évf. biomérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Rácz Gábor Zoltán** tudományos munkatárs
Semmelweis Egyetem Orálbiológiai Tanszék

A felnőttkori fogvesztés leggyakoribb oka a fogágygyulladás (parodontitisz). Ez egy csontvesztéssel járó gyulladással járó betegség, ahol a bakteriális fertőzésre kialakuló immunválasz kóros irányba fordul, és a csontfalósejtek (oszteoklasztok) fokozott aktiválódását okozza. A tartósan aktivált oszteoklasztok bontják a fogágy csontszövetét, ez csontvesztéshez, majd a fog kihullásához vezet. Az oszteoklasztok aktiválódása oszteoprotegerin fehérje alkalmazásával gátolható. A terápiás fehérjék bevitelének egyik lehetséges módja a génterápia. Korábbi vizsgálatokban a nyálmirigy több szempontból jó célszervnek bizonyult génterápiás beavatkozásokra: könnyen hozzáférhető, nem létfontosságú, nagy mennyiségű fehérje termelésére és elválasztására képes, kötőszövetes tokban található szerv. Célunk az volt, hogy kísérleti állatokban nyálmirigy géntranszferrel terápiásan hatékony mOPG koncentrációt érjünk el nyálban és/vagy szérumban.

Egér oszteoprotegerin (mOPG) cDNS teljes kódoló régióját kódoló AdmOPG rekombináns adenovírust hoztunk létre, melyet amplifikáltunk és tisztítottunk. A vírust patkány szubmandibuláris nyálmirigybe (SMG) juttattuk, 2 nap múlva stimulációt követően nyálát gyűjtöttünk, majd vizsgáltuk az mOPG expressziót nyálban, szérumban és nyálmirigyben.

Az AdmOPG géntranszfer dózisfüggő módon növelte a patkány SMG-ben az mOPG termelését. Akár kolinerg stimulációt alkalmaztunk (csak a folyadékszekréciót serkenti), akár kolinerg és β -adrenerg stimulációt (a szekréciós granulumokat is a nyálba üríti), a termelődt mOPG-nek elenyésző része volt kimutatható a nyálban (kolinerg: 0,05% (0,03-1,02%), kolinerg és β -adrenerg: 0,06% (0,00-0,18%), medián (minimum–maximum) értékek, a különbség nem szignifikáns). Tehát a termelt mOPG döntő része nem szekretálódott, hanem a nyálmirigyben volt kimutatható, és a szekréciós granulumok ürítésével sem lehetett növelni a nyálba szekretált mOPG mennyiségét. A szérumban nem volt kimutatható mennyiségű mOPG egyik kezelés során sem.

Eredményeink arra utalnak, hogy a patkány SMG-ben adenovirális géntranszferrel termelt mOPG (1) a nyálba szekretálódik; (2) mennyisége alacsony; (3) a szekréciós granulumokat elkerülve szekretálódik a nyálba.

Az Alfa-fetoprotein (AFP) gén szerepe rákos sejtvonalakban és megnyilvánulásának vizsgálata Real-time PCR technikával

Szabó Diána Rita, végzett okleveles biomérnök

BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Holczinger András**, egyetemi adjunktus
BME Alk. Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Kiss Gábor vezető kutató
Nova Scienta Kft.

Munkám során egy olyan kutatásba kapcsolódtam be, mely célul tűzte ki az AFP variánsok hatásainak tesztelését különböző rákos elváltozások és immunrendszert érintő folyamatok esetén. Az Alfa-fetoprotein egy magzati plazmafehérje, melyet az albuminoid géncsaládba tartozó AFP gén kódol. Jelentős diagnosztikai marker az orvostudomány számára, melyet két esetben alkalmaznak: egyrészt a terhes nőknél, szűrővizsgálat esetén, néhány születési rendellenesség felderítésére (nyitott gerinc stb.), másrészt felnőtteknél és gyerekeknél daganatjelzőként, néhány daganatfajta esetén. Feladatom, egy olyan Real-time PCR alapú eljárás kifejlesztése, mely referenciának használható az AFP kimutatás és a kiindulási AFP RNS koncentráció pontos meghatározásában. Ennek segítségével megállapítható, hogy az adott mintában az AFP megnyilvánul e, és ha igen, milyen mértékben, azaz egyaránt alkalmas diagnózis felállítására és a kezelés hatásának nyomon követésére. Ezen felül, a munkámmal párhuzamosan zajló AFP microarray vizsgálati eredmények validációjára is alkalmazható.

TDK munkám során, előzetes bioinformatikai elemzések alapján primert terveztem az AFP gén egy konzervált régiójára és az általam kiválasztott GAPDH, referencia génre. Összehasonlítottam az AFP és a GAPDH expressziós profilját és ez alapján kiválasztottam a megfelelő (HepG2 májrak) sejtvonalat. Ebből RNS-t izoláltam és reverz transzkriptáz enzimmel cDNS-é fordítottam le. Először végpontos PCR reakciót állítottam be, mely során vizsgáltam az AFP és GAPDH gének jelenlétét és a primerek megfelelő működését. A sikeres végpontos PCR mérések után a rendszert Real-time PCR-re adaptáltam.

Sikerült egy reprodukálható Real-time SYBR Green PCR alapú, relatív mennyiségi mérési rendszert kidolgoznom, mely egyszerre, egy panelban detektálja az AFP és GAPDH gén expresszióját kvalitatív és kvantitatív módon. Ennek köszönhetően az AFP expresszióban bekövetkező változása a GAPDH konstans expressziója mellett egy olyan gyors és pontos diagnosztikai eljárást jelent, mely a különböző génelterések, klinikai kezelések nyomon követését stb. teszi lehetővé.

Enzimek evolúciójának molekuláris értelmezése a Kemp elimináció alapján**Lábas Anikó**, III. évf. biomérnök BSc

BME Vegyész- és Biomérnöki Kar

Szabó Eszter, III. évf. biomérnök BSc

BME Vegyész- és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Fuxreiter Mónika** tudományos főmunkatárs
MTA SzBK Enzimológiai Intézet
Mones Letif MSc vegyész
MTA SzBK Enzimológiai Intézet

Az enzimátikus katalízis értelmezése, molekuláris hátterének feltárása napjainkban nagy elméleti és gyakorlati jelentőséggel bír. Munkák célja az volt, hogy feltárjuk az enzimek evolúciójának hajtóerejét, és a katalízis fő tényezőit, és ezeket az alapelemek felhasználva hatékony enzimeket tervezzünk.

Modellrendszerünk egy mesterségesen előállított, a Kemp eliminációt katalizáló enzim volt [1]. Az enzimet számítógéppel tervezték meg, és laboratóriumban előállították. A natív enzim nagy egyezést mutatott a tervezett szerkezettel, de aktivitása messze elmaradt a természetben kifejlődött enzimekéhez képest. Ezért *in vitro* evolúcióval próbálták optimalni, melynek eredményeként kifejlődött egy olyan evolvált variáns, amelynek katalitikus hatása 200-szor nagyobb volt.

Mind a natív, mind az evolvált variáns reakcióját szimuláltuk, hogy megkeressük a fő katalitikus tényezőket. Módszerünk egy hibrid QM/MM módszer, az EVB módszer volt [2]. A szimuláció eredményei jó egyezést mutattak a kísérleti adatokkal. Azt tapasztaltuk, hogy az aktiválási gát csekély, a reorganizációs energia jelentősen csökkent az evolvált variánsban, az evolúció folyamata során optimalódott, tehát ezt tekintettük a katalízis fő tényezőjének.

Ezt követően mindkét enzimben megvizsgáltuk az enzim oldalláncainak a hozzájárulását a katalitikus effektushoz. Majd kidolgoztunk egy algoritmust, melynek segítségével *in silico* pontmutánsokat hoztunk létre, és ezeknek az oldalláncoknak a hozzájárulását néztük a katalízishez. Végül számítási eredményeinket összevetettük a kísérleti adatokkal.

[1] Khersonsky, O., et al., *J Mol Biol*, 396(4): p. 1025-42 (2008)

[2] Hwang, J.K. and A. Warshel, *Biochemistry*, 26(10): p. 2669-73. (1987)

Patkány Octn2 transzporter fehérjét túltermelő CHO-K1 emlős sejtvonallétrehozása és karakterizálása

Szabó Kitti, V. évf. (1. évf. biomérnöki MSc)

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Nagy Zoltán molekuláris biológia csoport vezetője
Solvo Biotechnológiai Zrt.

Konzulens: Dr. Sveiczter Ákos egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A XXI. század orvostudományában az anyagcsere zavarral járó, valamint rákos megbetegedések gyógyítása jelentős probléma, amiben fontos szerepük van a membrán transzporter fehérjéknek. A mai gyógyszerfejlesztés során szintén megkerülhetetlen annak vizsgálata, hogy a membrán transzporter fehérjék milyen szerepet játszanak a hatóanyagok felvételében, leadásában, a gyógyszerek farmakokinetikájában. A kísérleti állatok vizsgálatánál nyert eredmények kiértékelésében, a gyógyszerek *in vivo* farmakológiájának megértésében kulcsfontosságú a humán, patkány és egér transzporter fehérjék működésének összehasonlítása. Az *in vivo* kísérletek mellett egyre nagyobb szerepet kapnak az olcsóbb, gyorsabb és közvetlen kölcsönhatás tanulmányozására alkalmas *in vitro* vizsgálatok, mint például a transzporter fehérjéket túltermelő immortalizált sejtvonalakon, membrán preparátumokon alapuló mérési módszerek.

Az OCTN2 („novel organic cation/carnitine”) membrán fehérjét, mint az L-karnitin (3-hidroxi-4-N-(trimetilamino)-butirát) Na^+ -függő reabszorpciójáért felelős transzportert azonosították. Az L-karnitin számos élettani szerepet tölt be, többek között a β -oxidáció egyik szereplője, így nagy jelentősége van ezen fehérje ismeretének. A OCTN2 fiziológiai fontosságát mutatja az autoszómális, recesszív öröklődésű, primer karnitin deficienciában bizonyított szerepe is. Emellett feltételezhetően különböző szerves kationok felvételében is szerepet játszik.

A munka célja patkány rOctn2 membrán transzporter fehérjét túltermelő CHO-K1 emlős sejtvonallétrehozása, erre alapuló *in vitro* mérési módszer kifejlesztése és a fehérje működésének összehasonlítása a humán OCTN2 transzporterrel. Az rOctn2 gént patkány veséből klónoztuk pcDNA3.1 emlős expressziós vektorba. A kapott konstrukcióval immortalizált emlős sejteket (CHO-K1) transzfektáltunk, majd szelekciót követően a rOctn2-t stabilan túltermelő sejtvonalat hoztunk létre. A kapott CHO-K1/rOctn2 sejtvonalat karakterizáltuk és 96-lyukú lemezen transzporter-drog, drog-drog kölcsönhatás vizsgálatára alkalmas mérési módszert fejlesztettünk ki. További mérések során összehasonlítjuk a humán és a patkány transzporter fehérje működését és funkcióját.

Útban a *Pseudomonas aeruginosa* gyógyszerpumpájának megértéséhez**Végh Ádám, V. évf. vegyész**

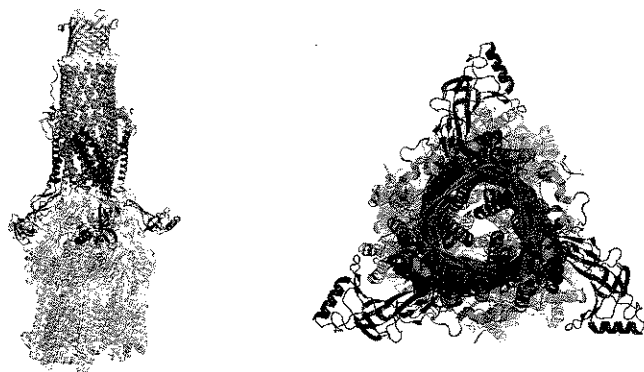
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Henrietta Venter** kutató
University of Cambridge Department of Pharmacology
Dr. Harmat Veronika egyetemi docens
Dr. Perczel András egyetemi tanár
ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Az antibiotikumok korának hajnalán egy ismert állatorvos, James Herriot úgy írta le a penicillin hatását egy beteg birkán, hogy „A csoda a szemünk láttára zajlik le”. Sajnálatos módon azonban napjainkban jelentősen szűkülni kezdenek az antibiotikumok használatának lehetőségei, mivel azok a kórokozók, amelyek ellen a gyógyászatban alkalmazták őket, többnyire rezisztenssé váltak az alkalmazott antibiotikumokra.

Az egyik ilyen baktérium a Gram negatív aerob *Pseudomonas aeruginosa*. A rángó-görcsben szenvedő betegek legnagyobb halálozási rátáját ez a baktérium okozza. A krónikus betegeknél a tüdő mélyebb járataiban is megjelenő kiterjedt, nyálkás baktériumtelepek lényegében kiirathatatlanok, mivel antibiotikum rezisztensek. A *P. aeruginosa* rengeteg fertőzést okoz a legyengült immunrendszerrel rendelkezők esetében, mint pl. a HIV- és rákbetegeknél, és a súlyos égési sérülést szenvedőknél. Az utóbbi két esetben a fertőzés valószínűsége igen nagy (50% körüli). A baktérium mérgező fehérjéket termel, ami gyengíti a páciens immunrendszerét, és károsítja a szöveteket: így például a szembe kerülve vaktságot okozhat. Az antibiotikum rezisztenciának két fő oka van: a sejtmembrán nehéz átjárhatósága, és az úgynevezett gyógyszerpumpák (drugpump).

Jelen kutatás hosszú távú célja, hogy megértsük a MexAB-OprM pumpa szerkezetét, működését, és ezek után olyan gyógyszereket tudjunk tervezni, amelyek hatásosan veszik fel a harcot a gyógyszerrezisztenciáért felelős pumpákat tartalmazó baktériumokkal.



1.Ábra: Az MexA (kék) – MexB (sárga) - OprM (zöld) pumpa oldal- ill. felülnézeti modellje

A Colicin E7 fehérje nukleáz doménjének vizsgálata

Németh Eszter, II. évf. Vegyész MSc

Zóka István Győző, II. évf. Vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Gyurcsik Béla** egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Dr. Körtvélyesi Tamás egyetemi docens
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A géntechnológia egyik nagy kihívása olyan megbízható mesterséges nukleáz létrehozása, amely egy tetszőleges, de specifikus helyen képes a DNS hasítására. A hasítás révén beindulhat a sejt saját javítómechanizmusa, lehetővé téve egy genetikai hiba javítását. Elsősorban cink-ujj nukleázokat tesztelnek erre a célra, amelyek azonban citotoxicitást mutatnak a fehérje részleges sérülése esetén. Ez a genomális DNS nonspecifikus helyen történő hasítását eredményezi. A fentiek miatt olyan nukleázra van szükség, amely a felismerőhely aktiváló szabályozása alatt áll.

Munkánk célja a Colicin E7 fehérje nukleáz doménjének vizsgálata abból a szempontból, hogy alkalmas lehet-e a molekula egy mesterséges nukleáz tervezésére. Ezen nukleáz esetében kutatócsoportunk kimutatta, hogy az ún. HNH-motívumot tartalmazó C-terminális aktív központ csak abban az esetben képes a DNS hasítására, ha az N-terminális részen található arginin jelen van. Ez előrevetíti az allosztérikusan szabályozott enzim kialakításának lehetőségét.

Kísérleti munkánk során az N-terminális végen rövidített fehérjéket vizsgáltunk az allosztérikus szabályozás jobb megértése céljából. CD-, fluoreszcencia spektroszkópia, illetve ún. gél-eltolódásos kísérletek segítségével tanulmányoztuk e fehérjék kölcsönhatását Zn^{2+} ionnal illetve DNS-sel. Az N-terminális bázikus aminosavak szerepének tisztázása érdekében három, pontmutációkat tartalmazó fehérje előállítását is megkezdtük, a rekombináns DNS-technológia eszközeit felhasználva.

A kísérletekből nyerhető információkat számítógépes kémiai módszerekkel egészítettük ki. Szemiempirikus kvantumkémiai számításokkal optimalizáltuk a mutáns fehérjék szerkezetét, és számításokat hajtottunk végre annak felderítésére is, hogy milyen erősen kötődik az N-terminális vég a fehérje többi részéhez. Az egyes fehérjék oldatbeli viselkedését molekuladinamikai módszerekkel modelleztük. Vizsgáltuk, hogy mennyire általános jelenség lehet a HNH-motívumot tartalmazó fehérjék esetében a pozitív töltésű oldallánc által megvalósított pozitív kontroll. E célból számos fehérje szekvenciáját és ahol lehetett, szerkezetét hasonlítottuk össze.

Biokémia, biotechnológia II. tagozat

Hisztidin-gazdag proteinek előállítása biotechnológiai módszerekkel fémionok megkötése céljából

Bacsa Ildikó, III. évf. kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Gyurcsik Béla, egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az Ac-His-Pro-His-Pro-His-NH₂, illetve a Ac-His-Pro-His-His-NH₂ szilárd fázisú peptidszintézissel előállított változataival a tanszékünkön már foglalkoztak és megállapították azok erős fémion (főleg Cu(II) és Zn(II) ion) kötését. E vizsgálatok során bizonyítást nyert a bennük levő három hisztidin oldalláncában levő nitrogének kizárólagos koordinációja pH ~ 7 körül. E peptidek tehát komplex-képző tulajdonságaikban nagy hasonlóságot mutatnak a természetben előforduló hidrolitikus és redoxi enzimek aktív centrumaival. További kísérletek során kimutatták a polipeptidek fémkomplexeinek hidroláz aktivitását egy modellszubsztráton és natív DNS-en is, valamint a réz(II)-vel alkotott komplexek szuperoxid-dizmutázhoz, illetve pirokatechinázhoz hasonló viselkedését. Vagyis e peptidek az említett enzimek legegyszerűbb szerkezeti és funkciós modelljeinek tekinthetők.

A munkám során a fentiekben említett két oligopeptid rekombináns DNS technológia segítségével, baktériumokban, biológiai úton történő termeltetését tűztem ki célul. Elsőként a peptideket kódoló géneket, majd az ezeket tartalmazó mutáns plazmid DNS-eket állítottam elő. A rövid peptidmolekulák azonban önmagukban nem stabilisak a baktériumsejtekben, ezért a peptid N-terminális része felől egy nagyobb fehérje génjét is beillesztettem a plazmidokba. Ezeket Escherichia coli baktériumokba juttatva a fúziós fehérje-peptid kifejezésének, illetve túltermeltetésének körülményeit optimalizáltam. A fenti kísérleteket elvégeztem olyan tápoldatokban is, melyek különböző átmeneti fémionokat tartalmaztak, különböző koncentrációkban. Ezekben az esetekben a fehérjekifejezés után vizsgáltam a tápoldatban visszamaradt, illetve a baktériumsejtek által megkötött fémionok mennyiségét. Mivel a peptidhez fűzött fehérje specifikus DNS-kötő sajátsággal is rendelkezik, azt is megvizsgáltuk, hogy e tulajdonsága a módosítás után is megmaradt-e, hiszen ebben az esetben fehérjeink újszerű specifikus mesterséges nukleázként is viselkedhetnének.

A TDK munkában ezen eredményeimet mutatom be, valamint a kifejezni kívánt polipeptidek hatására vonatkozó következtetéseket a baktériumok normális életműködését és azok fémion tűrőképességét illetően.

***Mycobacterium tuberculosis* tenyészetének növekedését gátló
peptidkonjugátumok szintézise és funkcionális jellemzése****Baranyai Zsuzsa, II. évf. vegyész MSc**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Bósze Szilvia** tudományos főmunkatárs
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Horváti Kata tudományos munkatárs
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

A tuberkulózis, a *Mycobacterium tuberculosis* okozta megbetegedés, világszerte az egyik fő közegészségügyi probléma napjainkban [1]. A tbc kezelése 6-12 hónapot vesz igénybe, és a jelenleg alkalmazott antituberkulotikumok többségének számos mellékhatása ismert.

Hordozók alkalmazása csökkentheti a terápiás szerek mellékhatásait, javítja oldékonyságukat vizes közegben, valamint lehetőséget kínál a hatóanyagok sejt-specifikus célbajuttatására. A *M. tuberculosis* intracelluláris kórokozó, ezért nagy jelentőségű lehet a hatóanyagok szelektív bejuttatása a fertőzött makrofágokba.

Makrofágokra jellemző scavenger- és tuftsin receptorokra specifikus peptideket alkalmaztam hordozómolekulákként [2, 3]. Ilyen hordozók az elágazó láncú polipeptidek [4] és a tuftszármazékok [3]. Szilárdfázisú peptidszintézissel hordozómolekulákat és távolságtartó egységet állítottam elő, melyekhez oximkötés [5] kialakításával kapcsoltam az *in silico* meghatározott antituberkulotikus hatású vegyületeket. Meghatároztuk a szabad hatóanyagok, a hordozók és a konjugátumok minimális gátló koncentráció (MIC) értékét és telepszámát (CFU) *M. tuberculosis* H₃₇Rv tenyészetben. Arra kerestük a választ, hogy a hatóanyagok a konjugátumokban megőrzik-e antituberkulotikus hatásukat. A peptidszármazékok egy részéhez fluoreszcens jelölőmolekulát kapcsoltam, majd a sejtekbe történő bejutásukat vizsgáltam áramlási citométerrel „makrofág modellként” alkalmazható MonoMac6 humán monocita sejtvonalon.

[1] Global tuberculosis control, WHO, (WHO/HTM/TB/2009.411) (2009)

[2] Szabó, R., et al., *Bioconjugate Chem.*, 16 (6), 1442-1450 (2005)

[3] Mező, G., et al., *J. Pept. Sci.*, 10 (12), 701-713 (2004)

[4] Mező, G., et al., *Biopolymers*, 42, 719-730 (1997)

[5] Shao, J., Tam, J. P., *J. Am. Chem. Soc.*, 117 (14), 3893-3899 (1995)

Fokhagyma (*Allium sativum* L.) kivonatok előállítása alkoholos extrakcióval, az eljárás méretnövelése, és a kivonaton alapuló termékfejlesztés

Csépány Péter, II. évf. vegyészmérnök MSc
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Simándi Béla** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Dr. Nagy Bence tanszéki mérnök
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A gyógynövényeket az emberiség történelmében fontosságuk alapján sorrendbe állítva, a fokhagyma mindig az első tíz legfontosabb között szerepelt. Mai világunkban az elsőszámú modernkori betegség, vagyis a szív és érrendszeri problémák kezelésében és megelőzésében van egyre növekvő szerepe. A fokhagyma széles spektrumú hatóanyagrendszerével képes csökkenteni a vérnyomást, a káros LDL koleszterinszintet, illetve megakadályozni a vérrögképződést. A szakma egyöntetű véleménye alapján a fokhagyma legfontosabb vegyülete az allicin, és annak bomlástermékei, amely az alliin molekulát bontó alliináz enzim működése során keletkezik, és okozza a jellegzetes és mindenki által jól ismert szagot.

Munkám első szakaszában egy többlépcsős, laboratóriumi méretű, alkoholos extrakciós eljárást dolgoztam ki gazdasági megfontolások figyelembevételével. További laborkísérletekben kidolgoztam egy módszert a fokhagyma alapanyag teljes alliantartalmának meghatározására.

Munkám második szakasza a félüzemi berendezés megtervezésével kezdődött. Majd miután megépítettük azt, megkezdődhetett a laboratóriumi eljárás adaptálása. Próbakísérleteket hajtottam végre a készülék pontos beállítása érdekében. További kísérletekben bizonyítottam, hogy sikerült reprodukálni a kívánt eljárást a félüzemi berendezésben, sőt még a vártnál jobb eredményeket is produkáltam. Még ebben a munkaszakaszban végrehajtottam számos termelési kísérletet, amelyek során kiváló minőségű szilárd extraktokat, illetve betöményített extrakt oldatokat állítottam elő.

A harmadik szakaszban a félüzemi termelési kísérletekben gyártott fokhagyma extraktra alapozva végrehajtottuk a termékfejlesztést a kutatási partnereink szoros együttműködésével. Az általunk tervezett termék magas allicin potenciállal rendelkezik, továbbá megoldottuk a feldolgozás során keletkező szaganyagok molekuláris csapdázását is.

Termotoleráns baktériumok vizsgálata tejsavtermelés céljából**Dülk Metta**, IV. évf. biomérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Sevela Béla** egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Hetényi Kata PhD hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A tejsav, sokrétű felhasználhatósága révén a következő években az egyik legkeresettebb vegyipari nyersanyaggá válhat. A biomassza nyersanyagon előállítható tejsav tehát számtalan vegyület lehetséges kiindulópontja lehet (ún. platform-alkotó vegyület), így a jövőben jelentős alternatívaként szolgálhat a kőolajalapú technológiák területein. Munkám során egy biofinomító üzem termofil tejsavtermelő technológiájának kidolgozásában vettem részt. A biofinomítóban feldolgozni kívánt nyersanyag a magas cukortartalmú cukorcirok lé volt, melyet a növény szárából préseléssel nyernek ki. A cukorcirok számos területen felhasználható, mint biomassza, papírpép, komposzt vagy szénforrás tejsav, etanol, aminosav előállításához.

A tejsav fermentáció mezofil vagy termofil körülmények között is megvalósítható. Mivel a termofil (55-60°C) fermentáció több szempontból is előnyös (sterilitás fenntartása, SSF technika megvalósíthatósága), ezért célom egy termotoleráns baktériumtörzs kiválasztása és cukorcirok lére való adaptálása volt.

Kutatásaim során több törzset is vizsgáltam a *Bacillus*, *Geobacillus* nemzetségekből egy többlépcsős screening keretein belül. A törzseket különböző cukrok felhasználása alapján szelektáltam és megfigyeltem a tejsav termelődés alakulását. A kísérletek alapján kiválasztottam a legtöbb cukron alkalmazható, a legjobb hozamot és produktivitást mutató törzset, majd teszteltem, hogy a rendelkezésre álló nitrogénforrások mennyiben befolyásolják a tejsav keletkezését a fermentáció során, így optimalizálva a cukorciroklé alapú tápközeget. A tejsavtermeléshez szükséges nitrogénforrás mennyiségének meghatározása után 0,5, illetve 1 literes léptékű fermentorokban követtem nyomon a tejsavas fermentációk folyamatát, különböző pH-szabályozási módokat alkalmazva.

Az eddigi fermentoros kísérletek által kapott eredmények alapján a kiválasztott törzs alkalmasnak bizonyult a biofinomító fermentációs üzemében való felhasználásra.

Növekedési mintázatok vizsgálata a hasadó élesztő sejtciklus mutánsaiban: lineáris vagy bilineáris?

Horváth Anna, IV évf. biomérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Sveiczter Ákos egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Rácz-Mónus Anna doktoráns

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A hasadó élesztőként is ismert *Schizosaccharomyces pombe* az ötvenes évek vége óta egyre kedveltebb modellorganizmus. Hengeres sejtjei kizárólag hosszirányban nőnek állandó átmérővel, amit az erre kidolgozott mikrofotográfias eljárással követhetünk nyomon. A sejteknek egy ciklusuk során méretük állandóságának fenntartásához átlagosan meg kell kettőzniük a térfogatukat és hosszukat is, amit a méretkontroll biztosít.

A sejt növekedésének leírására a három legelterjedtebb modell a lineáris, az exponenciális és a bilineáris (két lineáris szakasz egy sebességváltási ponttal (RCP)). A legadekvátabb modell kiválasztására kidolgozott módszer a kvantitatív modellszelekciós kritériumok használata, melyek segítségével különböző paraméterszámú modellek is könnyen összehasonlíthatóak. A sejt növekedésre alkalmazott ötparaméteres linearizált biexponenciális modell (bilineáris) lehetővé teszi egy folytonosan differenciálható függvény alkalmazását, amely magában foglalja a két lineáris szakasz közti átmenetet is. Hasadó élesztő esetében ez a modell korábbi kutatásokban adekvátabbnak bizonyult, mint a lineáris vagy az exponenciális modell.

Munkám során 180 egyedi sejt növekedési mintázatát mértem le, 60 *cdc2-3w* szimpla mutánsét, 60 *cdc2-3w cdc25Δ* dupla mutánsét és 60 *cdc2-3w cdc25Δ pyp3Δ* tripla mutánsét. Minden mért és simított hossz adatsorra illesztettem egy bilineáris, egy exponenciális és egy lineáris modellt, a modellek közül pedig a fent említett modellszelekciós kritériumok segítségével választottam ki a legadekvátabbat. A sejtek mintegy fele bilineáris növekedési mintázatot mutatott. Korábbi irodalmi adatok szerint ezekben a mutánsokban a méretkontroll máshol hat, mint vad típusban, amit munkám során újabb módszerekkel ismételtelen megvizsgáltam. Továbbá vizsgáltam a bilineáris növekedési mintázatú sejtek esetében a függvény két lineáris szakaszának meredekségét is. Összehasonlítottam azokat *t*-próbával, hogy az RCP előtti és utáni szakaszok meredeksége szignifikánsan eltér-e. Néhány kivételtől eltekintve a *t*-próba is megerősítette, hogy a bilineáris modell adekvátabb a lineárisnál a hasadó élesztő *cdc2-3w* mutáns sejtek növekedési mintázatainak leírására.

A hasadó élesztőben működő méretkontroll mechanizmusának modellezése

Németh Márton, III. évf. biomérnök Bsc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Rácz-Mónus Anna** doktoráns

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Dr. Sveiczler Ákos egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

A sejtek növekedése és osztódása egy erősen szabályozott folyamat. Fontos, hogy ne rendszertelenül osztódjanak, mivel ez könnyen a kipusztulásukhoz vezethet. Ezért a sejtek biokémiai reakciók sorával biztosítják, hogy mindig körülbelül azonos mérettel osztódjanak el. Ezt a mechanizmust méretkontrollnak nevezzük, működése a sejtcikluson belül érvényesül. A folyamat univerzális, gyakorlatilag ugyanúgy játszódik le egy emberi sejtben, mint a legegyszerűbb élőlényekben is. A sejtciklus működésének vizsgálatára az egyik legalkalmasabb modellorganizmus a *Schizosaccharomyces pombe*.

Modellezésnél a sejtciklus működésének biológiai sokszínűségét próbáljuk a matematika nyelvére lefordítani. A folyamatban résztvevő fehérjék aktivitásának változását, egymáshoz való viszonyát differenciálegyenletekkel írjuk le.

A TDK dolgozatom során új kísérletes eredményekre alapozva változtatásokat hajtottam végre egy korábbi modellen. Eleinte a méretkontroll mozgató rúgójának a sejtmagban történő MPF akkumulációt hitték, ez határozza meg a mitózis inicializálását. Ezt az elméletet cáfolták meg a legújabb szakirodalmi eredmények, mely szerint a sejtmag a sejttel együtt nő. Ezért a most megalkotott modellben a sejtosztódást gátló inhibitor fehérjék hígulására helyeztem a hangsúlyt.

Munkám során a WinPP program segítségével számítógépen szimuláltam a hasadó élesztőgomba sejteiben működő méretkontrollt. A modellen történő változtatásokat lépésenként hajtottam végre. A méretkontrollt úgy vizsgáltam, hogy az osztódási méret, a sejtciklus alatti növekedés és a ciklusidő, milyen erősen korrelál a születéskori mérettel. A rendszer stabilitását pedig bifurkációs diagram segítségével tanulmányoztam.

Alzheimer-kór diagnosztikájára alkalmas β -amiloid epitóp peptidet tartalmazó konjugátumok szintézise

Pethő Lilla, I. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Mező Gábor tudományos tanácsadó
ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

Az Alzheimer-kór okozza az összes demenciák 2/3-át, ami 65 év felett a lakosság 5%-át, 80 év felett pedig 20%-át érinti. Az Alzheimer-kór okai még ma is ismeretlenek, a kutatások során csak feltételezések születtek eddig. Az egyik az amiloid kaszkád hipotézis, mely a β -amiloid peptid ($A\beta$) aggregációjával hozza kapcsolatba a betegséget [1]. Korábbi kísérletek során meghatározták az $A\beta$ „plakk-specifikus” ($A\beta(4-10)$) és „plakk-védő” ($A\beta(21-37)$) epitópját [2]. Az utóbbit az $A\beta$ -autoantitestek ismerik fel, amelyek gátolják az aggregátumok kialakulását, és specifikusan csak az oligomer β -amiloidokhoz kapcsolódnak. Ennek ismeretében immundiagnosztikumok és immunterápiára alkalmas oltóanyagok állíthatók elő.

Munkám során szilárdfázisú peptidszintézissel β -amiloid epitóp peptideket tartalmazó konjugátumokat állítottam elő egy kis kapacitású, polietilén-glikol alapú gyantán totálszintézissel. Hordozóként különböző hosszúságú tuftsin-származékokat alkalmaztam, amikhez egy hosszabb ($A\beta(21-37)$) és egy rövidebb ($A\beta(30-37)$) epitópot is kapcsoltam a minimális epitóp meghatározására. Korábbi kutatásokban alkalmaztak spacer is a hordozó és az epitóp között, ezért olyan konjugátumokat szintetizáltam, amelyekben nincs távtartó egység, így vizsgálva az antigén-antitest komplex kialakulását. A biokonjugátumok autoantitest-kötő képességét indirekt ELISA módszerrel ellenőriztük.

A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy az autoantitestek kötődéséhez szükséges a hosszabb tuftsin-származék, továbbá nem elegendő a rövidebb β -amiloid epitóp ($A\beta(30-37)$), hanem valószínűleg kell a teljes szekvencia ($A\beta(21-37)$) a kötődés eléréséhez. Mivel a konjugátumok nem tartalmaztak spacer, ezért a mostani eredményeket a korábbiakkal összehasonlítva kijelenthető, hogy az autoantitestek megfelelő kötődéséhez szükséges spacer beépítése.

[1] Hardy, J., Selkoe, D. J., *Science*, 297, 353-356 (2002)

[2] McLaurin, J., Cecal, R., Kierstead, M. E., Tian, X., Phinney, A. L., Manea, M., French, J. E., Lambermon, M. H., Darabie, A. A., Brown, M. E., Janus, C., Chishti, M., Horne, P., Westaway, D., Fraser, P. E., Mount, H. T., Przybylski, M., St George Hyslop, P., *Nature Med.*, 8, 1263-1269 (2002)

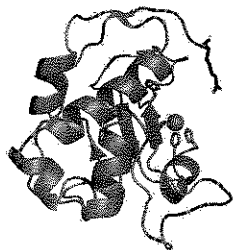
Mesterséges cink-ujj nukleázok előállítás és vizsgálata**Szabó Johanna, III. évf. kémia BSc**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Gyurcsik Béla** egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A cink-ujj nukleázok ismert felépítésű és működésű mesterséges enzimek, melyek egy cink-ujj fehérjéből és egy természetes eredetű nukleáz (FokI restrikciós endonukleáz) hasításért felelős részéből állnak. Mivel a cink-ujj fehérjék képesek a DNS-hez specifikusan kötődni és célszekvenciájuk tetszőlegesen tervezhető, szívesen alkalmazzák őket a géntechnológiában. Azonban a ma ismert cink-ujj nukleázok, sejtet mérgező hatásuk miatt génterápiás célokra nem alkalmasak.

Célom ezért az volt, hogy egy olyan fehérjét találjak, mely a cink-ujj doménhez fűzve képes elhasítani a DNS-láncot, de csak szabályozott körülmények között. Erre a Colicin E7 fehérje nukleáz doménjében lévő HNH-motívumot tartottuk alkalmasnak. Ugyanis e nukleáz domén N-terminális végén lévő arginin és a C-terminális részén lévő HNH-motívum egymáshoz közel kerül az aktív központban (lásd ábra), azaz az N-terminális rész allosztérikus szabályozóként működik.



A Colicin E7 nukleáz doménjének 3D szerkezete. Feketével kiemelve a N-terminális arginin, ill. kézzel a C-terminális HNH-motívum (PDB kód: 1ZNS).

Munkám során olyan cink-ujj nukleázokat állítottam elő, melyekben a fenti nukleáz domén N-terminális része, azaz az arginin is, hiányzik. A cink-ujj fehérje azonban rendelkezik olyan aminosavakkal, amelyek oldalláncai képesek lehetnek átvenni annak a funkcióját, ami megakadályozná egy allosztérikus szabályozás kialakításának lehetőségét. Hogy ezt tanulmányozhassam, a módosított nukleáz domén génjét polimeráz láncreakcióval állítottam elő, majd ezt ültettem bele a cink-ujj fehérjét tartalmazó plazmid DNS-be, hogy azt fehérje termelő baktériumokba transzformálva fehérjét fejtszenek ki. Vizsgáltam az új fehérjék hatását a baktériumok növekedésére, valamint a DNS-sel való kölcsönhatásukat.

**Transz-1,2-ciklohexán-diol enzimekatalizált kinetikus rezolválása
folyamatos nagynyomású reaktorban**

Szelezcky Zsolt, I. évf. gyógyszervegyész-mérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: Kózné Dr. Székely Edit, adjunktus

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Dr. Simándi Béla, egyetemi tanár

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A transz-1,2-ciklohexán-diol (CHD) enantiomerjei illetve származékai alkalmasak kiralitás centrumok bevitelére nagyobb molekulák szintézise során. A *Candida antarctica* lipáz B (CALB) enzim enantioszelektíven katalizálja CHD kinetikus rezolválása során az *R,R*-diacetát képződését, ezért *S,S*-monoacetát és *R,R*-diacetát enantiomertiszta elegye állítható elő. Az egyszerű oldószer – oldott anyag elválasztás miatt előnyös a szuperkritikus szén-dioxid (scCO₂) alkalmazása elválasztási műveletekben és reakció közegeként, akár enzimes reakciók során is. A reakciókat egy extraktor - reaktor rendszerben hajtottam létre, ahol a szubsztrátot a szuperkritikus scCO₂ az extraktor oszlopban feloldja, majd egy T-elágazásban keveredik a vinil-acetáttal és így homogén formában jut az enzimmel töltött reaktorba. A méréseket a szakaszos kísérletek során meghatározott műveleti paraméterek mellett hajtottam végre (100 bar nyomás, 45 °C hőmérséklet, 10:1 vinil-acetát:CHD molarány). A tartózkodási idő csökkentésével széles tartományban lineárisan nőtt az egységnyi időre vonatkoztatott produktivitás, optimális esetben a szakaszos reaktorban elérhető 1650-szorosa volt. A paraméterek optimalizálásával 13 másodperces tartózkodási idővel, teljes konverzió mellett enantiomertiszta termékeket állítottam elő.

Enzimes emésztés és keményítő hőkezelés monitorozásának lehetőségei RVA módszer alkalmazásával

Takács Mónika, I. évf. biomérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Bachrathyné Dr. Gelencsér Tímea** labor- és minőségbiztosítási vezető
Hungrana Kft.

Dr. Salgó András egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A gyors viszkoanalizátoros (Rapid Visco Analyser, RVA) technika egy ausztrál csoport által 1987-ben kifejlesztett reológiai módszer, amely a keményítőtartalmú minták viszkozitását méri, így azok technológiai, funkcionális tulajdonságairól nyújt felvilágosítást. A készülék előnyei közé tartozik, hogy a mérés és a méréshez tartozó minta-előkészítés egyszerűbb és gyorsabb, mint a megjelenéséig használt készülékek és módszerek, ezért használata hamar elterjedt a világon.

A BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer tudományi Tanszékén a módszer új fajta alkalmazását kezdték meg 2009-ben, viszkozus keményítőgél enzimes hidrolízisét RVA-ban monitorozták, ugyanis irodalmi hivatkozások szerint, a keményítő enzimes hidrolízisének következményeként a gél viszkozitásának csökkenése matematikailag leírható folyamat. A fő cél az, hogy az időben történő viszkozitás változás alapján nyomon követhető enzimes hidrolízis kutatásában rejltő lehetőségeket feltárják. TDK munkámmal a leírt munkába kapcsolódtam be, illetve folytattam azt. Módszert dolgoztam ki különböző enzimaktivitású oldatok alkalmazásával keményítő gél hidrolízis során történő viszkozitás változásának monitorozására, valamint előzőleg hővel (mikrohullámmal és száraz hővel) kezelt keményítők gélesedési tulajdonságait és enzimes hidrolízis során megfigyelhető viselkedését vizsgáltam. Eredményeim igazolták az RVA alkalmazhatóságát enzimes emésztés valamint keményítők hőkezelés okozta változásainak nyomon követésében.

Gyógyszertechnológiai fejlesztések biohatóanyagok formulálására**Wagner István, II. évf. vegyészmérnök MSc****BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar**

Témavezetők: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Nagy Zsombor Kristóf doktorjelölt
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az új évszázad elején a gyógyszer technológia az egyik legdinamikusabban fejlődő iparág. Ennek legnagyobb fejlődési potenciállal rendelkező része az úgy nevezett humán egészségügyi biotechnológia. Ezt jól mutatja, hogy az elmúlt évtizedben rohamosan nőtt a piacra kerülő, biotechnológiai eredetű hatóanyagokat tartalmazó készítmények száma. A biohatóanyagok jelenlegi és várhatóan tovább erősödő térnyerése a gyógyszer kutatásban, a gyógyszer formulálást (gyógyszer technológia) is új kihívások elé állítja.

TDK munkámban biohatóanyagok formulálását végeztem. Folyadék halmazállapotban ezeknek a környezetre érzékeny (pH, mechanikai stressz, hő) hatóanyagoknak a stabilitása általában alacsony, emiatt célszerű szilárd készítményt alkalmazni, mely a beteg együttműködést (compliance) és a dozírozás pontosságát is jelentősen javíthatja. Célom az volt, hogy új kéméletes technológiákat fejlesszek szilárd gyógyszerformák előállítására, melyek hatékony alternatívaként jelenhetnek meg az iparban elterjedt idő és energiaigényes fagyasztva szárítás kiváltására. Két különböző típusú technológiát vizsgáltam. Az egyik technológia az elektrosztatikus nanoszálképzés, melynek gyógyszeripari bevezetése még nem történt meg, azonban más iparágak már alkalmazzák ezt a nanotechnológiai eljárást pl. a textil iparban. Ez a technológia - amellet, hogy kellően kéméletes formulálást valósít meg - folyamatos és igen alacsony költségű gyártást tesz lehetővé. A másik fejlesztett technológia gyógyszeriparban általánosan alkalmazott berendezésekre alapult. Az előállított minták morfológiáját optikai- és pásztázó elektronmikroszkóppal figyeltük meg. Vizsgáltuk a folyamat során esetlegesen fellépő denaturálódást, illetve a biohatóanyagok stabilitását különböző hőmérsékleteken tárolva.

A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy a fejlesztett kéméletes és alacsony energiaigényű gyógyszer technológiai eljárások új, lehetőségeket nyújthatnak biohatóanyagok formulálására.

Érdemes-e az ipari szennyvizet előtisztítani?

Weinpel Tamás, V. évf. környezetmérnök

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Jobbágy Andrea** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az Európai Unió irányelveihez történő felzárkózás érdekében napjaink legfontosabb teendői közé tartozik a keletkező szennyvizek minél nagyobb hányadának a megtisztítása, és a meglévő telepek korszerűsítése, optimalizálása. Ehhez kapcsolódik az a követelmény is, hogy mindenképpen teljesülnie kell a csatornarendelemben előírt határértékeknek az ipari szennyvizekre. Ezáltal számos ipari – elsősorban egyes élelmiszeripari – üzemet kényszerítenek költséges előtisztító megépítésére, ahol a sok esetben az önmagukban nehezen biodegradálható komponensek eliminálásához pl. pótnitrogén- ill. foszfor-forrás is adagolandó.

Másrészt a vízfogyasztás csökkenéséből fakadóan nő a háztartásokból származó szennyvizek csatornarendszerbeli tartózkodási ideje. Emiatt a bekerülő, könnyen biodegradálható szénforrások sok esetben már ott eliminálódnak, és így igen kedvezőtlenül alakul a telepekre befolyó szennyvizek C:N aránya, ami a szigorodó határértékek mellett csupán pótszénforrás adagolással teszi lehetővé a nitrogéneltávolítást befejező denitrifikációs lépés hatékony elvégzését.

Kutatásom során egy Modell Szennyvíztisztító Telep hatékonyságnövelési lehetőségeit és ehhez kapcsolódóan egy jégkrém-előállító cég szennyvizének hatásait vizsgáltam. Általános gyakorlat az, hogy a kommunális tisztító telepek problémáit a befolyó, ipari hányadra vezetik vissza. Ezért abban bíznak, hogy a bevezetés megszüntetésével a telepi gondok is megoldódnak. A tisztítótelepen jelentkező problémák okainak feltárása érdekében áttekintettem a rendelkezésre álló korábbi adatokat, valamint helyszíni profilméréseket végeztem a lejátszódó bioreakciók nyomkövetése érdekében. Ezután matematikai szimulációs számítások segítségével kerestem megoldási lehetőséget az eleveniszapos biodegradáció, különösen a nitrifikáció és denitrifikáció hatékonyságának növelésére. Mindezek nyomán arra jutottam, hogy a jégkrémgyár szennyvizének kiugróan magas szervesanyag tartalma esetén, az adott, kishatékonyságú levegőztetés mellett ugyan jelentősen visszaeshet a nitrifikáció hatékonysága, a tisztító megépítése után azonban a denitrifikációhoz pótszénforrást kell adagolni. Így a költséges előtisztító építése helyett a kommunális telep levegőztetési hatékonyságának növelése és ezzel egyidejűleg a denitrifikáció hatékonyságát elősegítő, minimális ráfordítást igénylő bioreaktor átalakítás szolgáltatja az igazi, olcsó és hosszú távon is megbízható megoldást.

Elméleti kémia és kémiai informatika tagozat

**A von Pechmann reakció mechanizmusának vizsgálata elméleti
kémiai módszerekkel****Daru János, II. évf. vegyész MSc**

ELTE TTK Kémiai Intézet

Témavezető: **Dr. Stirling András** tudományos tanácsadó
MTA Kémiai Kutatóközpont, elméleti kémiai osztály

A kumarinvázis vegyületek előállításának egyik elterjedt módszere, a Hans von Pechmann[1] által kifejlesztet kondenzációs reakció.

A reakció mechanizmusa az 1884-es felfedezése ellenére mind a mai napig vitatott kérdés. Kutatásunk során megkíséreltünk három potenciális reakcióutat összehasonlítani elméleti kémiai módszerek segítségével, valamint választ adni arra a kérdésre, hogy vannak-e a reakcióúton stabil, spektroszkópiák segítségével kimutatható intermedierek. Számításainkat G03 programcsomaggal végeztük, a gázfázisban, merev-rotátor – harmonikusoscillátor – ideális-gáz közelítésben, és figyelembe vettük az oldószer effektust polarizálhatókontinuum modell alkalmazásával.

[1] v. Pechmann, H.; Duisberg, C., *Ber. Dtsch. Chem. Ges.*, 2119 (16), (1883)

[2] Calvino-Casilda V., Banaresa M.A., LozanoDizb E., *Catalysis Today* 155 (3-4) 279, (2010)

A Soai-reakció sztochasztikus kinetikai elemzése

Dóka Éva, I. évf. vegyész MSc

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Lente Gábor egyetemi docens
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az élő szervezetekben szinte kizárólag D-cukrok és L-aminosavak találhatók meg, ez a jelenség a *biológiai homokiralitás*. Jelenlegi ismeretünk szerint ennek kialakulásánál a *királis autokatalízis*nek nevezett jelenség jelentős szerepet játszhatott.

Abszolút aszimmetrikus szintézis (AASZ) vagy spontán aszimmetrikus szintézis során akirális kiindulási anyagokból optikailag aktív reagensek távollétében optikailag aktív termékek keletkeznek. Az AASZ első kísérleti megvalósítása a Soai-reakció, amelyben prokirális pirimidin-karbaldehidekből királis pirimidil-alkanokat állíthatunk elő. [1] A királis alkohol a reakció hatékony királis autokatalizátora, fellép a *királis erősítés* jelensége.

Munkám során egy irodalmi mechanizmusjavaslatra [2] építve kidolgoztuk a Soai-reakció sztochasztikus modelljét Monte Carlo módszerrel, ezzel bemutatva a Monte Carlo modellezés egy lehetséges használatát a reakciókinetikában. Kidolgoztuk továbbá az előgyensúlyi közelítés sztochasztikus leírását, amely eddig csak a determinisztikus megközelítésben volt részletesen ismert. Ennek segítségével a munka egy másik részeként elkészítettük a Michaelis–Menten-mechanizmus teljes sztochasztikus leírását tetszőleges részecskeszámra. Megmutattuk, hogy a Monte Carlo modellezés determinisztikus folytatással kiegészítve ígéretes megoldást nyújthat bonyolultabb reakciómechanizmusok esetén is.

Az alkalmazott mechanizmusjavaslat, amire a Monte Carlo számolásokat felépítettük, nem magyarázza az abszolút aszimmetrikus szintézis kialakulását. A probléma feltehetően a dimer- és a trimer részecskék kialakulásában keresendő, mivel az asszociátumok kialakulásához többnyire a részecskék relatíve nagy koncentrációja szükséges, ami speciálisan a reakció elején, amely szakasz vizsgálódásaink fókuszában áll, nem feltétlenül fordul elő.

Az AASZ kialakulásának magyarázatában tehát az lehet a következő lépés, hogy az alkalmazotthoz képest módosított, vagy lényegében különböző, új mechanizmus használatával folytadjuk tovább a számításokat.

[1] Soai, K. *et al.*, *Tetrahedron Asymm.*, 14, 185-188 (2003)

[2] Buhse, T., *Tetrahedron Asymm.*, 14, 1055-1061 (2003)

A szarvasmarha szérum albumin fehérje modellezése**Gyebrovski Andrea, II. évf. vegyész MSc**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Hoffmann Eufrozina Andrea egyetemi tanársegéd**Dr. Körtvélyesi Tamás** egyetemi docens

SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A szarvasmarha szérum albumin (*Bovine Serum Albumin*, BSA) a kémiai- és biokémiai reakciók gyakori modellvegyülete, egyben számos kutatás tárgya. Évente több száz publikáció jelenik meg a BSA-val kapcsolatban, ugyanakkor 3D struktúrája a mai napig sem tisztázott. Szerkezete a hidrodinamikai kísérletek [1, 2, 3] és a kis szögű röntgenszóródás mérések [4] alapján egy 140×40 Å dimenziójú lapított ellipszoid (szivar). Az NMR [5] és a hagyományos röntgen kristallográfiai adatok [6] azonban az albumint inkább szív alakúnak jósolják. Korábban próbálták meghatározni a BSA pH titrálási görbéjét, valamint vizsgálták különböző tenzidekkel való kölcsönhatásait kalorimetriás mérésekben.

Munkám során különböző homológia modellező módszereket teszteltünk a BSA 3D szerkezetének predikciójára. Templátként a humán szérum albumint (HSA) 3D szerkezetét használtuk, amelynek a BSA-val való szekvencia azonossága 72,6 %. Az eredmények értékelése során több protein szerkezet összehasonlító módszert alkalmaztunk, a kapott modelleket RMSD értékek és Ramachandran eloszlás alapján vizsgáltuk és rangsoroltuk. Elvégeztünk egy ellenőrző modellezést is, amely során a HSA szekvenciáját „igazítottuk” HSA templátba.

A kapott modellek 3D szerkezetét molekulamechanikai (MM) módszerrel optimalizáltuk és minden modell esetén meghatároztuk az egyes aminosavak energiáját, valamint az oldalláncok protonálódási állapotát különböző pH-kon.

[1] Hughes, W. L. In "The Proteins", Academic Press, N. Y. Vol. 2b, 663-755 (1954)

[2] Squire, P. G., Moser, P., O. Kanski, Biochemistry, 7, 4261-4272 (1968)

[3] Wright, A. K., M. R. Thompson, Biophys. J., 15, 137-141 (1975)

[4] Bloomfield, V., Biochemistry, 5, 684-689 (1966)

[5] Bos, O. J. M., Labro, J. F. A., Fischer, M. J. E., Witling, J., Janssen, L. H. M. J. Biol. Chem., 264; 953-959 (1989)

[6] Carter, D. C., He. X. M., Munson, S. H., Twigg, P.D. Gernert, K.M., Broom, M. B., and Miller, T. Y. Science, 244; 1195-1198 (1989)

Ultrahideg atomok kezelése a Bose-Hubbard modellben**Jeszenszki Péter**, II. évf. Vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Surján Péter** egyetemi tanár
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék
Dr. Szabados Ágnes egyetemi adjunktus
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

A kutatásaim során a kvantumkémiai körökben jól ismert és gyakran használt direkt Davidson algoritmust alkalmaztam egy olyan rendszerre, amelyet mindeddig a kvantumkémikusok nem tanulmányoztak. A vizsgált rendszer az optikai rácsban csapdázott, alacsony hőmérsékletre hűtött atomok halmaza. Az optikai csapdák mérete kvantumkémiai léptékben nagy (nagyságrendileg 1000 nm), így az atomok egymással csak szóródási folyamatokon keresztül lépnek kölcsönhatásba. Egy atom spinje a magspin és elektronok spinjeinek eredője. Ha ez az érték egész szám, akkor az atomokat kvázi bozonoknak tekintjük, viselkedésük Bose-Einstein statisztikát követ. Az optikai rácsban csapdázott atomokat a Bose-Hubbard közelítés keretében vizsgáltuk.

A Bose-Hubbard operátor a rendszer Hamilton operátorának félempirikus közelítése, amely számos fizikai folyamatot (pl. szuperfolyékony - Mott szigetelő átmenet) jól leír. Megvizsgáltuk a Bose-Hubbard modell megoldását az átlagtér közelítésben és az egzakt diagonalizációs technikát alkalmazva. Kiemelkedően fontos eredményünk az egzakt megoldást szolgáltató direkt algoritmus, amelyet bozonikus rendszerekre dolgoztunk ki. Az általunk készített programot összehasonlítva már létező kóddal (ALPS), azt találtuk, hogy mind a gépidő mind a memóriaigényt tekintve a mi algoritmusunk hatékonyabb.

Egy Cu,Zn-szuperoxid-dizmutáz N-terminális fémkötő helyének szerkezeti modellezése

Matyuska Ferenc, V. évf. kémia-matematika tanár,
végzett nevezéskor

Témavezetők: **Dr. Hoffmann Eufrozina** egyetemi tanársegéd
SZTE TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Gajda Tamás egyetemi tanár
SZTE TTIK, Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az egyik legismertebb cink-tartalmú enzim a Cu,Zn szuperoxid-dizmutáz, ami szuperoxid anion diszproporcióját katalizálják oxigénné és hidrogén-peroxiddá az aktív centrumukban felváltva redukálódó és oxidálódó réz(II/I) ion segítségével [1]. Ezek a minden eukarióta sejtben megtalálható enzimek fontos részét képezik az aerob szervezetek oxidatív stressz elleni védelmének. Néhány Gram-negatív baktériumnál a SOD enzim N-terminálisa hisztidinben gazdag részt tartalmaz, ami kétértékű fémek nagyaffinitású kötőhelyeire utal. Ilyen baktériumok például a *H. ducreyi*, amelynek N-terminális szakaszának hisztidinben gazdag részét (NH₂-HGDHMHNHDTK) a Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszéken korábban részletesen vizsgálták kísérletileg [2]. A jelen dolgozatban ezen peptid cinkkötésének helyét vizsgáltuk kvantumkémiai módszerekkel. A modellezés első fázisaként elkészítettem cink-komplexek kiindulási szerkezeteit az Arguslab programmal, majd a VEGA programmal elvégeztem ezen szerkezetek konformáció analízisét. Az így kapott, legjobbnak ítélt szerkezeteket szemiempirikus kvantumkémiai módszerrel optimalizáltam implicit vizes közegben.

[1] B.L. Vallee In: I. Bertini, C. Luchinat, W. Maret and M. Zeppezauer, Editors, *Zinc Enzymes*, Birkhauser, Boston (1986)

[2] Paksi, Z., Jancsó, A., Pacello, F., Nagy, N., Battistoni, A., Gajda, T., J. Inorg. Biochem., 102 (2008) 1700-1710.

Cink-ujj fehérjék DNS-kötő képessége és specifikussága Kísérletek és számítások

Nagy Gábor, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Gyurcsik Béla** egyetemi adjunktus,
SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék
Dr. Körtvélyesi Tamás egyetemi docens
SZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A cink-ujj fehérjék olyan, moduláris szerkezetű proteinek, amelyek fontos szerepet játszanak a génkifejeződésben. A mesterséges cink-ujj fehérjék széles körben felhasználhatóak a biotechnológiában, génterápiás eljárásokban. Ennek oka az, hogy képesek modulonként (ujjanként) speciálisan egy bázishármassal erős kötést kialakítani, így egy több ujjból álló cink-ujj fehérje képes a genomban egyedi szakaszokat megtalálni. A cink-ujjakon alapuló mesterséges enzimek használhatóságának egyik sarkalatos kérdése az, hogy a célzott DNS-szakaszhoz képesek vagyunk-e specifikusan kötődő cink-ujjat előállítani.

A cink-ujj fehérjék felépítése nagyon hasonló egymáshoz; egy cink-ujj két antiparallel β -lemezt és egy α -hélixet tartalmaz, a szerkezetet pedig egy Zn^{2+} -ion stabilizálja jól meghatározott helyen levő Cys2-His2 komplex kialakításával. A cink-ujjak aminosavjainak többsége nem járul hozzá jelentősen a cink-ujj - DNS lánc kölcsönhatáshoz, ezért csak 4-6 jól meghatározott helyen levő aminosav felelős. Ezen kulcsamino savak megváltoztatásával a cink-ujj alapú fehérjék bármilyen gén tetszőleges szakaszával képesek kölcsönhatni, de ha nem specifikusak, akkor a fehérje sejtméregként viselkedhet. Emiatt egy potenciálisan felhasználható génterápiás cink-ujj fehérje esetén fontos megvizsgálni annak specifikusságát.

A TDK dolgozat alatt egy cink-ujj fehérje – DNS komplex (1MEY) nagyfelbontású XRD-vel meghatározott szerkezete alapján becsültük meg az 1MEY fehérje specifikusságát. A specifikusság becsléséhez a specifikus kötőhellyel nem rendelkező DNS modell felhasználásával összehasonlítottuk a specifikus és nonspecifikus kölcsönhatások entalpiáit szemiempirikus számítási módszerek útján. Munkánk során a különböző fehérje-DNS komplexekben kialakuló DNS-fehérje és DNS-DNS kölcsönhatásokat megvizsgálva próbáltuk felderíteni a specifikus kötődéssel járó entalpiaváltozásokat, hogy ezeket felhasználva más, hasonló szerkezetű cink-ujj fehérjék specifikusságát is megbecsülhessük.

**Multikonfigurációs perturbációs számítás
skalázott energiatagokkal**

Nagy Péter, II. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Szabados Ágnes egyetemi adjunktus
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

A kémiában fontos molekuláris rendszereket elméleti úton legprecízebben kvantummechanikai modellekkel írhatjuk le, ám a számítások kivitelezhetőségéhez legtöbbször közelítéseket kell bevezetni. Legtöbbször elegendő, az atommagok térbeli helyzetének ismeretében, az elektronok viselkedésének megadása. Erre a sokelektron hullámfüggvény szolgál, melyet általában egyszerűbb, egyelektron függvényekből alkotott determináns(ok) alakban írunk fel. A kvantumkémiában legelterjedtebb módszer, a Hartree–Fock (HF) egy determinánst használ, emellett az elektronok kölcsönhatását is közelíti egy átlagos elektromos potenciál segítségével.

Az elektronok azonban egyedileg hatnak kölcsön (elektron korreláció), mely jól bevált módon perturbációs számítással (Perturbation Theory, PT) vehető számításba. A PT különböző változatai az eredeti rendszer partícinálásában, vagyis a közelítő (nulladrend) és korrigáló (perturbáció) részekre bontásban térnek el. A partíciók helyes megválasztása jobb közelítéshez vagy kisebb számítási költséghez vezethet. Továbbá, a korrekciót skalázó paraméterekkel pontosabb energiaértékek kaphatók. A dolgozatban az általánosítás lehetősége miatt átfogalmazzuk ezen sikeres skalázási lehetőségeket (Feenberg- és Grimme-féle) partícióválasztási változatokra.

Sajnos a kérdéses molekuláris rendszert (pl. kötések felbomlása) a HF determináns többször kvalitatíven is rosszul jellemzi. Ilyenkor, továbblépésként a hullámfüggvényt több determinánsból állítjuk elő. Ezek az ún. multireferencia módszerek számos perturbációs számítással javított változatban (MRPT) is elérhetők.

A dolgozatban egy MRPT változat, a multikonfigurációs perturbációs számítás (MCPT) egydetermináns PT-ből általánosított skalázási lehetőségeiről lesz szó. Fő célunk kiaknázni a jól bevált skalázási módszereket a MRPT kialakult gyakorlatában, melyre eddig nem volt példa az irodalomban. A skalázás partíciós formáját használva, észszerű kompromisszumokkal élve a skalázott MCPT különböző változatait dolgoztuk ki. A képletek programozása után a módszerek teljesítőképességét több példán, ismert módszerekkel összevetve tanulmányoztuk. Az skalázott MCPT alkalmazhatósága egyelőre korlátozott, mivel sok ponton optimálható, nem szigorúan kötött módszer, illetve mivel az energiában elért javulás nem kompenzálja a megnövekedett számítási igényt. Az új módszer előnye, hogy a skalázást nem csak az egyensúlyi magelrendeződés esetén tudja hatékonyan végezni.

Caco-2 permeabilitás *in silico* predikciója

Németh Eszter, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Keserű György Miklós egyetemi magántanár
Richter Gedeon Nyrt., Budapest

A modern gyógyszerkutatás folyamata során a klinikai sikertelenség egyik fő oka, hogy az egyébként megfelelő affinitású klinikai jelöltek egy része nem rendelkezik jó farmakokinetikai paraméterekkel, nem megfelelő a szervezetben való abszorpciója, eloszlása, metabolizmusa és/vagy kiürülése (ADME tulajdonságok). A kiesések kockázatának minimalizálása érdekében ezen tulajdonságok már a gyógyszertervezés korai fázisaiban sem hagyhatók figyelmen kívül, ezért nagy áteresztőképességű, *in vitro* mérésük és számítógépes előrejelzésük nagy jelentőséggel bír.

Abszorpciónak nevezzük azt a folyamatot, amelynek során a gyógyszermolekulák a gasztrointesztinális traktusból a portális vénába jutnak. Mivel ekkor a gyógyszermolekulának a sejtmembránon kell átjutni, a folyamat *in vitro* modellezésére alkalmas az egysejt rétegen vagy mesterséges membránon keresztüli transzport mérése. Az egyik legnépszerűbb eljárásban Caco-2 sejtvonalat használnak, amely humán vastagbél-epitélium carcinoma sejteket tartalmaz egyrétegben elrendeződve. Fontos megjegyezni, hogy mivel a Caco-2 sejtvonal heterogén, a különböző laboratóriumokból származó mérési adatok közvetlenül nem vethetők össze.

Munkám célja a gyógyszerfelszívódást modellező *in vitro* Caco-2 permeabilitás mérések számítógépes predikciója olyan molekulák esetén, melyek elsősorban passzív transzporttal jutnak át a membránon. A modellépítéshez a 343 db molekulából álló adatkészletet a Richter Gedeon Nyrt. Kémiai és Biológiai Adatbázisának Caco-2-adataiból állítottam össze. A modellekhez használt függvények függő változója az experimentális látszólagos Caco-2 membrán permeabilitás, függő változói pedig a ligandumokra jellemző olyan fizikai-kémiai mennyiségek (ún. deskriptorok), melyekről szemléletes fizikai jelentésük folytán feltételezhető, hogy kvantitatív összefüggésbe hozhatóak a permeabilitással. Ilyen deskriptor pl. az oktanol/víz megoszlási hányados, a poláris molekulafelület, a moláris tömeg stb. Az egyes deskriptorok erősen korreláltak lehetnek, így elemzésükhöz a korrelációs mátrix felállítása ill. főkomponens elemzés szükséges.

A különböző modelleket vizsgálva megállapítható, hogy a legáltalánosabban használható deskriptor a megoszlási hányados, de a korreláció további deskriptorok bevezetésével javítható. Célszerű minden gyógyszertervezési projektben az adott szerkezeti körben legalább 10-15 vegyület kísérleti vizsgálatát elvégezni, melyek Caco-2 adatainak felhasználásával jó esély van egy kvantitatív értelemben is prediktív modell felállítására.

Van-e biológiai kockázata a fehérje rendezetlenségnek: rákos mutációk vizsgálata

Pajkos Mátyás, IV. évf. Biomérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Dosztányi Zsuzsanna** tudományos főmunkatárs
MTA SZBK Enzimológiai Intézet

Egyre több az adat arra vonatkozóan, hogy az eukarióta genom olyan fehérjéket kódol, melyeknek jelentős nagyságú szakasza rendezetlen. Annak ellenére, hogy ezek a fehérjék nem rendelkeznek jól meghatározott szerkezettel, fontos szerepet töltenek be a sejtciklus folyamataiban, szabályozásban és jelátviteli folyamatokban [1]. Ugyanakkor azt is megfigyelték, hogy a rendezetlen részek gyakoriak a rákhoz, illetve más betegségekhez kapcsolódó fehérjék között, és ezért felmerült, hogy a rendezetlenség egyfajta biológiai kockázatot rejt magában [2]. Projekttem segíthet ezt a feltételezést igazolni vagy megcáfolni. Kutatásom célja a rákos megbetegedésekhez köthető pontmutációk és polimorfizmusok gyakoriságának részletes tanulmányozása volt a rendezetlen és rendezett fehérje részekben, illetve a rendezetlen kötőhelyeken, bioinformatikai módszerek és statisztikusan kezelhető mennyiségek segítségével. A vizsgálathoz a rákos betegségekkel összefüggésbe hozható fehérjék kísérletes úton ellenőrzött mutációs adatait a Swiss-Prot adatbázis szolgáltatta. A polimorfizmusokra vonatkozó eredményeim azt mutatják, hogy azok eloszlása a fehérjékben nem egyenletes, a rendezetlen részekre esnek nagyobb gyakorisággal, utalva ezzel a rendezetlen régiók toleranciájára. Az általánosan elfogadott nézettel ellentétben további eredményeim arra engednek következtetni, hogy a rákkal kapcsolatos mutációk és a fehérjék szerkezeti tulajdonságai közötti összefüggések egy összetettebb képet mutatnak, azonban általánosságban elmondható, hogy a véletlenhez képest a rákot okozó mutációk nagyobb valószínűséggel esnek rendezett szekvencia részekre, és ez a hatás még nagyobb volt, ha a polimorfizmusok nem egyenletes eloszlását használtam referenciának. Mindemellett fehérje példákon keresztül bemutattam a szerkezeti részekre különböző gyakorisággal eső mutációk és a fehérje funkciók kapcsolatát.

[1] Wright, P.E. and H.J. Dyson, *Intrinsically unstructured proteins: re-assessing the protein structure-function paradigm*. J. Mol. Biol. 1999. 293:321-31

[2] Iakoucheva, L.M., et al., *Intrinsic disorder in cell-signaling and cancer-associated proteins*. J. Mol. Biol. 2002. 323:573-84

Kukurbit[7]uril „vendég-gazda” komplexeinek elméleti vizsgálata

Roósz Balázs, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Körtvélyesi Tamás egyetemi docens
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Az ún. „vendég-gazda” komplexképződés igen jelentős a modern komplexkémiaiában, gyógyszertervezésben. A „gazda” molekulák olyan makrociklusos vegyületek, amelyeknek belső üregébe reverzibilisen kötődik egy kisebb, „vendég” molekula.

Wyman és mts-i. [1] a kolinok és foszfónium-kolinok vizes oldatában vizsgálták a kukurbit[7]urillal (CB[7]) történő komplexképződést. A kolinok molekulaképlete: $(\text{CH}_3)_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OR}$. Valamennyi molekula tartalmaz egy trimetil-ammonium csoportot, amely az acetilkolin ($\text{R} = \text{COCH}_3$) esetén az acetilkolin-észteráz enzim aktív helyére kötődik. A kötőhely aromás aminosav-oldallánccokat tartalmaz, pld. triptofánt, amelyekhez kation- π kölcsönhatásokkal köt a szubsztrát. A gyógyszermolekulák másik csoportja, ahol alkalmazhatóak „gazda” molekulák, a helyi érzéstelenítők [2]. Ezek kétszeresen protonálhatóak: az anilin nitrogénen és a terciér amin nitrogénen. Ezért farmakokinetikájuk érzékeny a pH-ra, hatásereőségük attól függ, hogy dikationos, kationos, vagy semleges formában stabilisak az adott közegben. Minél közelebb van a pH a terciér amin pK_s -ához, annál előbb kezdik hatásukat kifejteni.

Munkánk elsődleges célja a CB[7], mint „gazda” részvételével történő komplexképződési folyamatok modellezése. Ennek során a CB[7] „gazda” molekula szerkezetét DFT módszerrel (Gaussian 03) a „vendég” molekulák szerkezeteit PM6 szemiempirikus kvantumkémiai módszerrel (MOPAC2009) optimaltam. A „vendég” molekulákat dokkoltam a CB7 üregébe.

A számítások során feltérképeztük a „vendég” molekulák CB7-hez kötődő szerkezetét és a kötődés módját. A „vendég” molekulákat sikerült linearitást mutató csoportokra bontani a számított Hawkins GB/SA pont és a $\lg K$ közötti korreláció alapján. Ezzel megalapozva egy szerkezet - $\lg K$ modell lehetőségét.

[1] Wyman, I. W., Macartney, D., H., *Org. Biomol. Chem.*, 8, 253-260 (2010)

[2] Wyman, I. W., Macartney, D., H., *Org. Biomol. Chem.*, 8, 247-252 (2010)

Alagúthatás karbénekben**Sarka János, III. évf. kémia BSc**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Császár Attila** egyetemi tanár
ELTE TTK Molekulaspektroszkópiai Laboratórium

TDK dolgozatomban a [H,H,C,O] rendszerrel analóg [H,H,C,S] és [H,H,C,Se] rendszerekre végeztem részletes kvantumkémiai számításokat. Elektron- és magmozgás számítások segítségével vizsgáltam a rendszerek elektron alapállapotában a lehetséges izomerek szerkezetét, rezgési és forgási spektrumát, valamint az alagúthatás fellépésének lehetőségét a transz-HCSH \rightarrow H₂CS, és a transz-HCSeH \rightarrow H₂CSe átalakulások esetén.

Számításaim legfontosabb megállapítása az alagúteffektus kapcsán az, hogy a transz-HCOH \rightarrow H₂CO rendszer esetében tapasztalt gyors izomerizációval ellentétben sem a transz-HCSH \rightarrow H₂CS, sem a transz-HCSeH \rightarrow H₂CSe átalakulások esetében nem várható alagúthatás észlelése a mátrixizolációs kísérletek alacsony (10 K körüli) hőmérsékletén. Ez a megállapítás igaz mind az Eckart-gáton, mind a Wentzel-Kramers-Brillouin-közelítésen alapuló számítások esetében.

Az Eckart- és a sokkal jelentősebb számítási időigényű WKB-módszerek eredményei hasonlóak. A közöttük meglévő különbségeket vizsgálva megállapíthatjuk, hogy az Eckart-módszerrel a pontosabb WKB-módszerhez képest mintegy két nagyságrenden belül lehet megmondani az alagúthatás felezési idejét. Ezért a felezési idő közelítő kvantumkémiai meghatározására a WKB-modellnél sokkal egyszerűbb Eckart-modell is többnyire sikeresen alkalmazható.

A számítási eredmények tükrében megállapíthatjuk, hogy a WKB-görbék alakjában történő kis változás a számított felezési időkben rendkívül nagy különbségeket okoz. Bár pontos számításaink szerint a gátmagasság ezekben a rendszerekben alig változik, a [H,H,C,S] és [H,H,C,Se] rendszerek esetében a [H,H,C,O] rendszerénél tapasztaltnál szélesebb gátat számítottunk. Ez természetesen azzal függ össze, hogy az átmeneti állapotot jellemző imaginárius frekvencia legnagyobb a [H,H,C,O] rendszerénél. A gát szélességében tapasztalható különbségek is rendkívüli mértékben megváltoztatják az izomerizációs reakció felezési idejét.

Az alagúteffektus kapcsán meghatározott kvalitatív eredményeimet a számítások maradványhibái nem befolyásolják. A számított geometriai adatok, frekvenciák, dipólus nyomatékok és relatív energiák kvantitatív értékek, melyek maradványhibája többnyire jóval kisebb 1%-nál. Ezek az értékek alkalmasak például a transz-HCSH esetében a jövőbeni kísérleti spektroszkópiai eredmények pontos értelmezésére.

A formaldehid nagyfelbontású spektroszkópiája

Szabó István, I. évf. kémia MSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Molekulaspektroszkópiai Laboratórium

Témavezető: Dr. Császár Attila egyetemi tanár
ELTE TTK Kémiai Intézet, Molekulaspektroszkópiai Laboratórium

A H_2CO molekula rezgési-forgási spektrumának tanulmányozását annak légköri és asztrofizikai jelentősége motiválja. Annak ellenére, hogy a molekula infravörös színeképek felvételéhez alkalmazott kísérleti módszerek nagyfelbontású színeképet szolgáltatnak, a rezgési-forgási átmenetek és energiaszintek asszignációja bonyolult feladatnak bizonyult. A rezgési-forgási energiaszintek azonosításában komoly segítséget jelentenek a modern kvantumkémiai számítások.

TDK munkám során illesztettem a H_2CO molekula negyedrendű erőterét [1] a laboratóriumunkban kifejlesztett DEWE elnevezésű variációs jellegű magmozgás számító programcsomaghoz [2]. A variációs számítások segítségével meghatároztam a molekula rezgési-forgási átmeneteit, az "egzakt" és a harmonikus oszcillátor közelítésben számolt hullámfüggvények ismeretében pedig felépítettem a molekula NMD (*Normal Mode Distribution*) mátrixát.

A H_2CO molekula és három izotóphelyettesített származékára (D_2CO , D_2^{13}CO , HDCO) a skálázott kvantummechanikai erőter módszerrel (SQM) skálafaktorokat határoztam meg, a kísérleti energiaszintek felhasználásával, az anharmonikus erőter javítása céljából. A kvadratikus erőállandók korrekciójával az erőter lényegesen jobb reprezentációját adja a molekula potenciális energia felületének. A számított energiaszintek további korrekciójára eljárást dolgoztam ki, melynek során alapoztam a $J-K_a$ forgási kvantumszámok skálázódására. Az implementált algoritmussal számolt energiaszintek 0.005 cm^{-1} pontossággal közelítik a kísérleti energiaszinteket, lehetőséget adva a kísérletileg illesztett spektroszkópiai állandók fizikai tartalmának ellenőrzésére.

Kísérletet tettem továbbá a H_2CO molekula AE-CCSD(T)/cc-pCVQZ szinten meghatározott egyensúlyi geometriájának [1] korrekciójára egy általam írt algoritmus segítségével.

[1] P. R. Schreiner, H. P. Reisenauer, F. C. Pickard, A. C. Simonett, W. D. Allen, E. Mátyus, A. G. Császár, *Nature* 453, 906 (2008).

[2] E. Mátyus, G. Czakó, B. Sutcliffe, A. G. Császár, *J. Chem. Phys.* 127, 084102 (2007).

A $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$ reakció dinamikájának vizsgálata kvázi-klasszikus trajektória módszerrel**Szabó Péter, II. évf. vegyész MSc**

PE Mémöki Kar

Témavezető: **Dr. Lendvai György** egyetemi docens
PE Általános és Szervetlen Kémiai Intézeti Tanszék

A hidrogént és oxigént tartalmazó reakciórendszerek egyik elemi lépése a $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$ reakció. Ebben a reakcióban lép az O_2 a reakciórendszerbe, és emellett lánccélágazási pontként is szerepel. Emiatt szokás az égések kémiájának legfontosabb elemi reakciójaként emlegetni.

A reakciót számos kísérletben tanulmányozták. Meghatározták az alapállapotú O_2 reakciójának sebességi együtthatóját, annak hőmérsékletfüggését és az abszolút reaktív szórási hatáskeresztmetszetet néhány ütközési energiánál.

A kísérleti vizsgálatok csak az alapállapotú oxigén ($\text{O}_2(^3\Sigma_g^-)$) és hidrogén ($\text{H}(^2\text{S})$) reakciójára szorítkoztak, de fontos lenne tudni, hogyan reagál a gerjesztett elektronállapotú $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ molekula. E folyamat dinamikája nehezen tanulmányozható kísérleti úton, elméleti vizsgálatokban viszont megkaphatóak a dinamikai paraméterek.

Külföldi partnerekkel együttműködve ennek a reakciónak a teljes dinamikai jellemzését szeretnénk elvégezni mind alapállapotú, mind gerjesztett oxigénmolekula esetére, hogy felmérjük, mi a különbség a két elektronállapotú O_2 reaktivitásában. Ebben a dolgozatban a reakció kvázi-klasszikus trajektória módszerrel történő vizsgálata során kapott eredményeket foglalom össze. A reakciódinamikai modellszámításokban a Guo és munkatársai által kiszámított, magas szintű *ab initio* kvantumkémiai eredményeken alapuló globális potenciális energiafelületet (PES) használtuk.

A trajektóriaszámítások mellett a PES részletes tanulmányozását is elvégeztem. A trajektóriaszámítások alapján meghatároztam a reakció szórási hatáskeresztmetszetét, a termékek kvantumállapot illetve szórási szög szerinti eloszlását. Elemeztem a gerjesztett állapotra kapott eredményeim és a Guo és munkatársai által szűk reaktáns kvantumállapot tartományban végzett egzakt kvantummechanikai úton valamint statisztikus módszerrel származtatott adatok viszonyát, valamint az alap- és gerjesztett elektron állapotú O_2 reakciójának hasonlóságait és különbségeit.

Pentakoordinált főcsoportbeli elemek kötésviszonyai**Szűcs Rózsa**, IV. évf. vegyészmérnöki BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Hollóczki Oldamur** doktoráns
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék**Konzulens:** **Dr. Nyulászi László** egyetemi tanár
BME Szeretlen és Analitikai Kémia Tanszék

A periódusos rendszer harmadik és negyedik periódusbeli elemeinek pentakoordinált vegyületeinek viszonylag nagy stabilitása reaktivitásukat alapvetően befolyásolja, így például könnyebben vihetők a nukleofil szubsztitúciós reakciókba, ami a polifoszfátok hidrolízisében, vagy a szilán védőcsoportok egyszerű eltávolításában játszik fontos szerepet. E szerkezetek közül átfogóan csak a foszfor és a szilícium ilyen származékait vizsgálták, noha e különös vegyületek szerkezeti sajátosságainak átfogó megértéséhez a más elemek származékaival való összehasonlítás nagymértékben hozzájárulhatna.

Munkám során az EH_4X összegképletű hipervalens vegyületcsaládot vizsgáltam (ahol E: Si^- , Ge^- , P, As, S^+ , Se^+ ; X: -H, -F, -OH, $-\text{NH}_2$, $-\text{CH}_3$, $-\text{BH}_2$) sűrűségfukcionál (B3LYP, MPW1K, PW91) és perturbációs (MP2) módszerekkel, a molekulák szerkezete, az azt befolyásoló tényezők, és az ezekben felfedezhető trendek átfogó megértése céljából. A trigonális bipiramis (TBP) szerkezetekben a szubsztituens axiális illetve ekvatoriális pozícióban tartalmazó izomerek közötti energiakülönbséget a ligandum és a központi atom közötti elektronegativitáskülönbség mellett a hiperkonjugáció, illetve magános elektrópárral rendelkező ligandumok esetén az $n \rightarrow \sigma^*$ kölcsönhatás jelentősen befolyásolja.

A pentavalens szerkezetek kialakítására való hajlam összehasonlítására az EH_2X általános összegképletű molekula hidrogénezésének reakcióhőjét vizsgáltam. Eredményeim azt mutatják, hogy az elektronegatívabb szubsztituensek, és a negatívabb töltésű központi atomok jól stabilizálják e szerkezeteket. Ennek megfelelően az E: Si^- , X: -F esetben a reakció energiája igen negatív, míg az E: S^+ , X: -H vagy $-\text{CH}_3$ esetben nagy pozitív értéknek adódott. A legérdekesebbek talán azok a szerkezetek, melyekben a reakció energiája nulla körüli érték (pl. E: Si^- , X: $-\text{CH}_3$; E: Ge^- , X: -F), hiszen ez felveti e reakció alkalmazásának lehetőségét hidrogén reverzibilis megkötésének céljából, melynek az üzemanyagcellák, illetve homogén katalitikus reakciók fejlesztésében nyithat új lehetőségeket.

Fizikai kémia tagozat

**Megfelelő modellje az elektrolitoknak a primitív implicit oldószer modell?
Az aktivitás koncentráció- és hőmérsékletfüggésének vizsgálata****Dolyákné Vincze Julianna**, VI. évf. vegyész

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Boda Dezső** egyetemi docens és
Dr. Valiskó Mónika egyetemi adjunktus
PE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

Az elektrolitok legegyszerűbb, tankönyvi modellje szerint pontszerű ionok mozognak egy implicit oldószerben, amit egy dielektromos háttér formájában veszünk figyelembe. Az ionatmoszféra árnyékoló hatását a Debye-Hückel elmélet írja le. Ez a modell végtelen hígítás esetén érvényes és az ionok kémiai potenciálja a koncentráció logaritmusával arányos. Ehhez a modellhez képest egy lényeges előrelépés, amikor az ionok méretét és az egymással való elektrosztatikus többlet-korrelációkat is figyelembe vesszük. A legegyszerűbb ilyen modellben az ionokat töltött merevgömbökkel modellezzük és az elektrolitok primitív modelljének (PM) nevezzük. Ekkor a koncentráció logaritmusán kívül fellép egy többlet tag, amit a fizikai kémiában egy multiplikatív tényező, az aktivitási együttható formájában vesznek figyelembe.

A dolgozat témája különböző vizes oldatok (LiCl, NaCl, KCl, CsCl, MgCl₂, CaCl₂, SrCl₂, BaCl₂, NaI, NaBr) aktivitási tényezőjének vizsgálata a koncentráció és a hőmérséklet függvényében. Modellünkben nem használunk illeszthető paramétereket; minden paraméternek (ionsugár, az oldat dielektromos állandója és a solvatációs szabadentalpia) kísérleti alapja van. A többlet kémiai potenciált az ion-ion kölcsönhatás és az ion-víz kölcsönhatás járulékaiknak összegére bontjuk. Az ion-ion tagot egy nagykanonikus sokaságon működő Monte Carlo szimulációs eljárással határozzuk meg (Malasics, Boda, *J. Chem. Phys.* **132**, 244103, 2010). Az ion-víz kölcsönhatásnak megfelelő járulékot a Born-egyenletnek a kísérleti szabadentalpiához való illesztésén keresztül számítjuk. Eredményeink azt mutatják, hogy az aktivitási együttható nem-monoton koncentrációfüggésének az ion-ion kölcsönhatás és az ion-víz kölcsönhatás egyensúlya az oka. Vizsgálataink rámutatnak arra, hogy PM (megfelelően használva) alkalmas az elektrolit modellezésére és arra is, hogy melyek azok az esetek, amikor explicit vízmodell használata válik szükségessé. Eredményeinkből megjelent egy publikáció (Vincze, Valiskó, Boda, *J. Chem. Phys.*, **133**, 154507, 2010).

Magnetit tartalmú vezetőpolimer - elektródok előállítása és elektrokémiai vizsgálata

Endródi Balázs, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Visy Csaba** egyetemi tanár
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
Janáky Csaba végzett PhD hallgató
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Napjainkban nagy érdeklődést vonzanak, és a kutatás középpontjában állnak a különböző anyagok kombinálásával készített összetett elektródok. Ennek oka, hogy ezek kémiai folyamatok széles körét képesek katalizálni, így megfelelő körülmények között akár elektrokémiai szenzorként is alkalmazhatóak lehetnek.

Szervetlen nanorészecskék vezető polimer mátrixba való beépítésével újszerű, elektródként közvetlenül alkalmazható anyagokhoz jutunk. Ezek érdekessége abban áll, hogy számos vezető polimer önmagában is jelentős katalitikus hatással bír egyes folyamatokra, amit a beépített részecskékkel tovább fokozhatunk.

Tudományos diákköri munkám során felderítettük egy a magnetitnek polipirrolba történő beépítésére irányuló – a kutatócsoportban korábban már használt – elektrokémiai szintézis mechanizmusát. Ennek során Fourier-transzformációs infravörös (FT-IR)-, valamint Mössbauer-spektroszkópiás mérésekkel igazoltuk, hogy a vas-oxid részecskék felülete módosul a polimerizációs oldatban jelenlévő vezetősó hatására, így azok a kialakuló negatív töltésük révén épülnek be a polimerizáció során oxidált formában képződő, ezáltal pozitív töltésű polimer mátrixba.

A magnetitet tartalmazó kompozitok és a polipirrol elektrokémiai viselkedését az oxigén redukciós reakcióban vizsgáltuk. Ciklikus voltammetriás és kronoamperometriás méréseink során bizonyítottuk, hogy a polipirrol réteg katalitikus aktivitást mutat a folyamatra, amit a kompozit esetén beépülő magnetit nanorészecskék tovább fokoznak. A redukció mechanizmusára azt találtuk, hogy az a kompozit elektródon kevert mechanizmus ($2 e^-$ -os és $4 e^-$ -os út) szerint játszódik le, de a $4 e^-$ -os út a domináns.

Megmutattuk, hogy megvilágítás hatására a rétegek katalitikus aktivitása közel kétszeresére növekszik, ami egy intermedier, a hidrogén-peroxid képződéséhez és elektrokémiai bontásához rendelhető.

A kétféle rétegen (polimer és kompozit) vizsgáltuk a hidrogén-peroxidnak – mint az O_2 -redukciós reakció köztitermékének – az elektrokémiai bontásának sebességét is. Az amperometriás mérések során a kompozit réteg már $5 \times 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$ -es koncentrációjú oldatban is jelentős katalitikus aktivitást mutatott.

Fotoreaktor tervezése kinonok fotokémiájának vizsgálatára**Gombár Melinda, I. évf. kémia MSc**

Debreceni Egyetem, Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Ósz Katalin** egyetemi adjunktus
DE Fizikai Kémiai Tanszék
Dr. Braun Mihály egyetemi adjunktus
DE Szervetlen és Analitikai Tanszék

A 2,6-diklór-1,4-benzokinon (DCQ) vizes oldatának bomlását különböző típusú fotométerekkel vizsgáltuk. Összehasonlítottuk a különféle fotométerekkel, azonos körülmények között mért kinetikai görbéket. A DCQ bomlásakor 2,6-diklór-3-hidroxi-benzokinon (DCHB), hidrokinon (DCHQ), valamint oxigén keletkezik. A lilás színű DCHB nem stabilis, és – bár kisebb sebességgel, mint a DCQ – oldatban is tovább bomlik. Bizonyítottuk, hogy ez utóbbi folyamat fotoreakció.

A DCHB bomlásának vizsgálatára egy olyan fotoreaktort terveztünk, amelyben a gerjesztő fényt LED-ek szolgáltatják. A LED-ek fényereje jelentős, valamint kis félértékessélességű, közel monokromatikus fényt bocsátanak ki. Ehhez egy saját tervezésű mintatartót készítettünk, melynél a küvetta hossz tengelye mentén tudjuk megvilágítani az oldatokat, keresztirányban pedig a detektáló fénysugár halad át. A LED-ek egyszerűen cserélhetőek. A spektrofotometriás mérésekhez CCD detektoros, Avantes gyártmányú száloptikás spektrofotométert használtunk. A deutérium-halogén fényforrás fényét optikai szál vezeti a küvettához, a küvettától a spektrométerhez. Korábban diódasoros fotométereket is alkalmaztak fotokémiai folyamatok tanulmányozására. Az általunk készített mérőrendszerrel a detektáló és gerjesztő fény egymástól független. A detektáló fény intenzitása több nagyságrenddel kisebb, mint a LED-eké, így a folyamatot csak a gerjesztő fény befolyásolja. Méréseink szerint a LED fényforrásból szórt fény nem jut a detektorba.

Mivel a spektrométer fényintenzitás mérésre is alkalmas, a LED-ek relatív intenzitásának mérésére - egy fénygyengítő közbeiktatásával - kifejlesztettünk egy módszert. Ezáltal össze tudtuk hasonlítani a LED-ek fényintenzitását, és azonos integrált intenzitással való megvilágítás mellett tudtunk kísérleteket kivitelezni.

Dolgozatomban részletesen tárgyalom a monokromatikus zöld (520 nm) és a polikromatikus fehér LED hatását a DCHB képződésére és bomlására. A folyamatok gyorsabban játszódtak le, azonban a képződés és bomlás is gyorsabbnak bizonyult, ill. a két LED hatása hasonló.

Ezen munka a **TÁMOP 4.2.1/B-09/1/KONV-2010-0007** támogatásával készült.

Illatanyagok adszorpciós jellemzőinek vizsgálata természetes gyapotszálon

Gubik Zsuzsa, IV. évf. vegyészmérnök BSc

PE Mémöki Kar

Témavezetők: **Dr. Dallos András** egyetemi docens
Kondor Anett okl. vegyészmérnök
PE Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

Információk százezreit jelentik az illatanyagok, amelyek szaglószerünk által jellemzést adnak környezetünkről. A gyakorlati életben egyre fontosabbá vált az illatanyagok adszorpciós tulajdonságainak feltérképezése, hiszen gyakran valamilyen felülethez kötődve jutnak el hozzánk. Inverz gázkromatográfiás méréseink aromaanyagok adszorpciós tulajdonságainak vizsgálatára irányultak.

Munkánk során Chrompack 439 típusú gázkromatográfiás készülékkel, standard pamutanyag-állófázissal töltött oszloppal dolgoztunk. Az oszlopon számos illatminta retenciós jellemzőit vizsgáltuk, He vivógázt, 70 °C és 130 °C közötti hőmérséklettartományt alkalmazva. A kromatogramok alapján meghatároztuk a valódi retenciós időket, majd az ebből számolt fajlagos retenciós térfogatokat. Az injektált anyagmennyiség függvényében ábrázoltuk a fajlagos retenciós térfogatokat, és extrapolációval meghatároztuk az oldott anyagok végtelen kicsi koncentrációjára vonatkozó fajlagos retenciós térfogat értékeket (V_g^{∞}). Ezen értékek alapján adszorpciós szabadentalpia-változást számoltunk és ennek hőmérséklet függvényéből kiszámítottuk az adszorpciós folyamat moláris entalpia- és entrópia változását. Az adszorpciós izotermákra hőmérsékletfüggő paraméterekkel rendelkező, Langmuir-adszorpciós modell egyenletet illesztettünk. A számított és a mért adatok jól egyeztek egymással.

A laboratóriumi kísérletek eredményeinek gyakorlati alkalmazása az öblítőszer, mosószer tervezésekor kerül előtérbe. Adataink segítségével megjósolható, hogy milyen mértékben kötődnek a ruhaneműkhöz a textilöblítőben alkalmazott illatanyagok.

„A” típusú zeolitok víz/metanol-adszorpciós vizsgálatai molekuláris szimulációkkal**Kaviczki Ákos, III. évf. vegyészmérnöki BSc**

Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Témavezető: Dr. Kristóf Tamás egyetemi docens
PE Mérnöki Kar Kémia Intézet / Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

A zeolitokat az élet sok területén alkalmazzák. Kiváló anyagmegkötő tulajdonságuknak és elválasztóképességüknek köszönhetően napjainkban egyre szélesebb körben használják őket adszorbensként, katalizátorként, ioncserélőként vagy szelektív membránként. Adszorpciós folyamataik értelmezésében különösen fontos szerepet töltenek be a molekuláris szimulációk.

Monte Carlo technika használatával vizsgáltam metanol és víz adszorpcióját különböző kationtartalmú (Li^+ , Na^+ , K^+) A típusú zeolitokon. Az adszorbensek szelektivitását meghatározó hajtóerők tanulmányozására a számításokat atomi szinten definiált modellekkel végeztem. A KA és a LiA zeolitra vonatkozó potenciálmodellt a NaA zeolitra rendelkezésre álló modell módosításával nyertem. A vízre és a metanolra olyan realiztikus potenciálmodelleket használtam fel, amelyekkel a tiszta anyagok termodinamikai tulajdonságai jól reprodukálhatók.

A számítások szerint 378 K hőmérsékleten általában a LiA zeolit köti meg a legtöbb vizet, de a kisebb mértékű metanoladszorpció miatt atmoszférikus nyomáson mégis a KA zeolit mutatja a legnagyobb szelektivitást a vízre. A különösen erős adszorbens-víz kölcsönhatás következtében a nyomás csökkenésével a LiA zeolit szelektivitása a többiéhez képest növekszik.

Somatostatin-14 peptid hormon önszerveződésének koncentrációfüggése

Kispál Katalin, III. évf. kémia BSc

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kunsági-Máté Sándor egyetemi docens
PTE Fizikai Kémiai Tanszék

Jelen munkánk egy önszerveződésre képes peptid esetében a koncentrációnak az önszerveződésre gyakorolt hatásának felderítésére irányult. Reményeink szerint a megszerzett ismeretek elősegítik majd a szomatosztatinhoz hasonló típusú hormonok vizsgálatát és az emberi szervezetben való működésének a megértését.

A szomatosztatin a közelmúltban számos orvosi kutatás középpontjába került az emberi szervezetben kifejtett kedvező hatása révén. A központi idegrendszerben gátló hatást fejt ki a neuronális transzmisszióra, gátolja a gyulladáshoz és a tumorok képződéséhez, a szenzoros idegvégződéseken csökkenti a fájdalom és a gyulladás kialakulásáért felelős neuropeptidok felszabadulását. Számos kísérletben kimutatták, hogy a kívülről beadott szomatosztatin csökkenti a fájdalmat.

A szomatosztatin különleges önszerveződő tulajdonságot mutat, amely fibrillációhoz vezet. Korábbi vizsgálatok kimutatták azonban, hogy az önszerveződés csak nagy koncentrációban megy végbe. Jelen munkánk során e tulajdonság okának felderítésére vonatkozó méréseket végeztünk.

Vizsgálataink során gyengített totálreflexiós infravörös spektroszkópiát (ATR) alkalmaztunk a peptidkötés kimutatására, fluoreszcencia intenzitást mértünk az önszerveződés nyomán követése céljából és a modellünk igazolására felvettük a polarizációfok-idő függvényt. ATR-el végzett mérések alátámasztják azt a megfigyelést, miszerint az önszerveződés csak magas koncentráció esetén megy végbe. A fluoreszcencia intenzitás idő függése kis koncentrációban folyamatos kismértékű csökkenésen túl egyéb változást nem mutat. Nagy koncentrációban szigmoid alakú görbét eredményez. Ilyen görbe figyelhető meg egyes lépcsős polimerizációval végbe menő reakciók esetében. Feltételezéseink szerint a szomatosztatin fibrillációja során ezt a reakciómechanizmust követi, melynek során a rotációs entropia megváltozása játszik meghatározó szerepet. A polarizációs görbében megfigyelhető egy ugrás pontosan abban az időpontban, amikor a szigmoid görbének inflexiós pontja van. Mivel közismert, hogy a nagyobb méretű molekulák lassúbb forgást végeznek, a polarizáció fok nagyobb lesz. Ezen méréseink alátámasztják azon elképzeléseinket, miszerint az önszerveződés során egy adott időpontban hirtelen alakulnak ki a nagyméretű molekulák.

[1] S. Kunsági-Máté, K. Iwata: Effect of cluster formation of solvent molecules on the preferential solvation of anthracene in binary alcoholic solutions, *Chemical Physics Letters* 473 (2009) 284-287

[2] Masato Kodaka: Requirements for generating sigmoidal time-course aggregation innucleation-dependent polymerization model, *Biophysical Chemistry* 107 (2004) 243-253

Sószenyezett gyenge sav – gyenge bázis diódák modellezése és nano-mintázatos membrán készítése a diódához**Koncz Viktória, V. évf. vegyészmérnök MSc****BME Vegyészmérnöki Kar**

Témavezetők: **Dr. Noszticzius Zoltán** egyetemi tanár
BME Fizika Tanszék, Kémiai Fizika Csoport
Rozsol László tudományos segédmunkatárs
BME Fizika Tanszék, Kémiai Fizika Csoport

Kutatásom során sav-bázis diódák modellezésével és azok fejlesztésével foglalkoztam. A sav-bázis diódákban két oldatteret (egy sav és egy bázis oldata) egy olyan gél (vagy membrán) köt össze, amely megakadályozza a folyadék áramlását, de megengedi a különböző oldatbeli komponensek diffúzióját és reakcióját. A diódára feszültséget kapcsolva azt tapasztaljuk, hogy a diódán átfolyó áram nagysága, hasonlóan a félvezető diódákhoz, függ a feszültség polaritásától - innen a sav-bázis dióda elnevezés.

A záróirányba kapcsolt diódán átfolyó áram az oldatterekbe juttatott sószennyezésekre igen érzékenyen reagál, érdekes módon az áram nem csak nőhet, hanem egy újabb felfedezésünk szerint csökkenhet is (pozitív és negatív sóhatás).

TDK munkámban elsősorban gyenge sav - gyenge bázis diódákat vizsgáltam, és a szimulációkhoz készült programot is folyamatosan fejlesztettem. Modellszámításaim bizonyítékul szolgáltak arra a feltevésünkre, miszerint gyenge sav - gyenge bázis diódákban szintén megfigyelhető a pozitív és negatív sóhatás erősen nemlineáris jelensége.

A sószennyezés hatását gyenge sav - gyenge bázis diódákra a későbbiekben kísérletileg is szeretnénk megvizsgálni. Az eddig használt gélben azonban a stacionárius állapot csak nagyon lassan áll be, ezért ezt le kívánjuk cserélni egy vékony membránra, amely gyorsabban reagálna az oldatterek változásaira. Munkám során ezért erre alkalmas ionvezető membránok fejlesztésében is részt vettem. Egy olyan membránkészítési módszert dolgoztunk ki, amellyel poli(vinil-butirál)-ból ionvezető membrán készíthető, és ezen a membránon nano-mintázatot is felfedeztünk. Az újfajta membránnal a sav-bázis dióda alkalmas lehet arra, hogy gyors és érzékeny iondetektorrá váljon.

Polianilin és politiofén alapú, magnetit tartalmú hibrid vékonyrétegek előállítása és jellemzése

Kormányos Attila, III. évf. kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Visy Csaba egyetemi tanár
Janáky Csaba végzett PhD hallgató
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A vezető polimerek olyan műanyagok, melyek elektromos vezetése széles határok között változtatható. Az elmúlt évtizedben egy új kutatási terület született meg, amely a vezető polimerek különféle anyagokkal alkotott nanokompozitjait vizsgálja. Mágneses vas-oxid nanorészecskéket beépítve a polimer mátrixába egy teljesen új, hibrid anyag jön létre, melynek tulajdonságai az eredeti polimertől jelentősen eltérhetnek, például szuperkapacitív, mágneses vagy elektrokatalitikus viselkedést mutathat.

Tudományos diákköri munkám során a közelmúltban sikerrel alkalmazott eljárás szerint [1] készítettünk magnetit tartalmú vezető polimer kompozitokat. A szintézis során az alkalmazott vezetősó (K-tetraoxalát) kölcsönhatásba lép a magnetittel melynek felületén vegyes Fe(II)/Fe(III)-oxalát anion alakul ki, így a nanorészecskék a töltéskompensáció részeként rögzülnek a polimerbe. Jelen munkában e módszerrel elsőként építettünk be sikeresen magnetit nanorészecskéket a poli(3,4-etilén-dioxitiofén), illetve a polianilin mátrixába, mivel korábban csak polipirrol alapú hibridek esetén alkalmazták ezt a fajta szintézist.

Első lépésben optimalizáltuk a polimerek szintézisét az újfajta vezetősó jelenlétében (monomer-, vezetősó koncentráció, alkalmazott potenciál szempontjából). Ezt követően a nanokompozitokat elektrokémiai úton, potenciosztatikus módszerrel állítottuk elő. A magnetit polimerbe történő beépülését infravörös-, UV-látható spektroszkópiával és elektrokémiai kvarckristály mikromérleg technikával igazoltuk, illetve az elkészült filmekről elektronmikroszkópos képeket készítettünk. A hibridek elektrokémiai viselkedését ciklikus voltammetriával tanulmányoztuk mind oxigén tartalmú, mind oxigénmentes környezetben. Mindkét rendszer esetében megfigyelhető volt a magnetit jelenlétéhez köthető elektrokémiai többlet, mely lehetőséget teremt arra, hogy ezen összetett anyagokat szuperkapacitásként vagy elektrokatalitikus reakciókban alkalmazzuk.

[1] Janáky C., Endrődi B., Berkesi O., Visy C., *J. Phys. Chem. C*, 114, 19338–19344

Párhuzamos töltött rétegek közé adszorbeálódott elektrolitok Monte Carlo szimulációs vizsgálata

Kovács Róbert, IV. évf. vegyészmérnök BSc

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Boda Dezső** egyetemi docens
PE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

A két töltött fal között lévő elektrolit egy szokásos szimulációs elrendezés az elektromos kettősréteg vizsgálatára. Elektromos kettősréteg egy töltött fal és egy elektrolit határfelületén alakul ki. Amennyiben a két fal elég távol van egymástól, a falak mellett kialakuló kettősrétegek egymástól függetlenek és középen kialakul egy semleges tömbfázis.

Ha azonban a két fal közel van egymáshoz (rés, "slit"), a kettősrétegek átlapolódnak és a tömbfázis nem jelenik meg. Ez a geometria nagykanonikus sokaságon vizsgálható jól, ahol a tömbfázis egy adott kémiai potenciálokkal jellemzett virtuális, külső tároló. A valóságban mindig több rés létezik egymás mellett, szilárdfázisú töltött rétegekkel elválasztva egymástól (mint pl. rétegszilikát ásványokban).

A dolgozatban ezt a rendszert vizsgáljuk nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal, sűrűség-, töltés-, elektromos tér, és elektromos potenciál profilok számolásával. Vizsgálataink középpontjában a részrendszer elektromos viszonyai állnak. Megvizsgáljuk, hogy több egymás mellett lévő rés (részrendszer) mennyiben különbözik az elszigetelt réstől.

Mivel a részrendszerbe adszorbeálódó részecskék ionok, ezeknek le kell győzni egy elektromos potenciálgátat, hogy beléphessenek a rendszerbe, ezért azt ebben az esetben korrektebb a rendszert az őt határoló tömbfázisokkal együtt vizsgálni (az elszigetelt részre vonatkozó szimuláció erről nem ad felvilágosítást). A legyőzendő potenciálgát nagysága elsősorban a rendszert határoló kettősrétegek szerkezetétől függ, de azt találtuk, hogy ehhez még hozzáadódik egy a részrendszer külső rétegeinek polarizációjából adódó potenciálkülönbség.

Ciklodextrin–tenzid zárványkomplex képződés termodinamikájának tanulmányozása izoterm titrációs mikrokalorimetriával**László Balázs, II. évf. Vegyész MSc**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Király Zoltán egyetemi docens
SZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A ciklodextrineket a múlt évszázad elején történt felfedezésük óta egyre szélesebb körben alkalmazzák számos kutatásban, valamint különböző ipari célokra. Az egyik legjelentősebb felhasználójuk az illatszer- és élelmiszeripar mellett a gyógyszeripar, ahol már manapság is több, vízben rosszul oldódó, a szervezet számára nehezen hozzáférhető, esetleg instabil gyógyszerhatóanyagot ciklodextrines formulázással hoznak forgalomba, javítva ezzel stabilitásukat és bioelérhetőségüket [1, 2].

Kutatásaink célja, hogy a ciklodextrinek zárványkomplex-képzési reakcióit termodinamikai és koordinációs kémiai oldalról tanulmányozzuk egyszerűbb modellreakciókkal kezdve, majd később összetettebb, gyakorlati szempontból is fontos vegyületeket, például módosított ciklodextrineket, gyógyszerhatóanyagokat alkalmazva. Munkám során a természetes ciklodextrinek tenzidekkel végbemenő zárványkomplex-képződési reakcióit, mint modellreakciókat tanulmányoztam termodinamikai szempontból izoterm titrációs mikrokalorimetriával. Céлом annak a vizsgálata volt, hogy a komplexképződési reakciók sztöchiometriai és energetikai jellemzői hogyan változnak a ciklodextrin üreg-átmérőjének, a tenzid típusának (alkillánc-hossz, fejcsoport jellege) és a hőmérsékletnek a variálásával.

Első lépésként négyféle, azonos alkillánc-hosszúságú tenzid zárványkomplex-képzési reakcióját vizsgáltam a három natív (α -, β - és γ -) ciklodextrinnel 25 °C-on. Meghatároztam a képződő komplexek sztöchiometriáját, a reakciók egyensúlyi állandóját, valamint a reakciókat kísérő entalpia-, szabadentalpia- és entrópiaváltozást. Ezután két további mérésorozattal azt vizsgáltam, hogy β -ciklodextrin és szulfonát típusú tenzid esetén az alkillánc-hossz, valamint a mérési hőmérséklet változtatása milyen hatással van a zárványkomplex-képződés termodinamikai jellemzőire.

[1] H. Dodziuk, *Cyclodextrins and Their Complexes*, Wiley-VCH 2006, Weinheim

[2] A. Vyas, S. Saraf, S. Saraf, *Cyclodextrin based novel drug delivery systems*, *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.* 2008, 62, 23–42

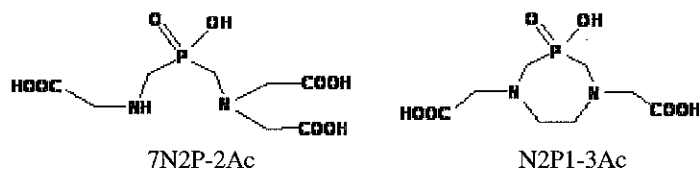
Két bisz(aminometil)foszfinsav származék réz(II) komplexeinek ESR spektroszkópiai vizsgálata

László Csilla, I. évf, vegyészmérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Nagy Nóra Veronika tudományos főmunkatárs
MTA Kémiai Kutatóközpont, Szerkezeti Kémia Intézet

Az orvosdiagnosztikai képalkotó módszerek (MRI, PET) fejlődésével a komplexképző ligandumok kutatásában megjelent egy új kutatási irány, amely a diagnosztikai (esetleg terápiás) célokra használt fémionok (pl. ^{64}Cu és ^{67}Cu) szervezetbe juttatását célozza meg. Ezen kutatások során terminális foszfinát csoportot tartalmazó vegyületeket kezdtek vizsgálni, mint lehetséges kelátorokat. Az általam vizsgált ligandumok ezen komplexképző család alapvegyületei: a 2,2'-(3-hidroxi-3-oxo-1,5,3-diazafoszfépán-1,5-diil)-diécetsav (7N2P-2Ac) és a (N-metil-glicino)(N-metiliminodiacetáto)foszfinát (N2P1-3Ac) (1. ábra).



1. ábra A vizsgált ligandumok szerkezete

Az ilyen komplexképzőknek számos kritériumot kell teljesíteniük, a legfontosabb a komplex termodinamikai és kinetikai stabilitása. Ezért célom az volt, hogy meghatározzam ezen ligandumok réz(II)vel alkotott komplexeinek egyensúlyi viselkedését, stabilitását és szerkezetét. Ehhez a paramágneses vegyületek vizsgálatára igen érzékeny elektronspin-rezonancia spektroszkópia módszerét alkalmaztam. A szobahőmérsékleten, vizes oldatokban végzett titrálás során felvett ESR spektrumok értékelésével [1] megkaptam a rendszerben jelen lévő komplexek képződési állandóját ($\lg\beta$), amely adatokból az egyensúlyi viszonyokra következtettem. Ezen túlmenően az egyes pH-kon kivett oldatminták 77K-en felvett spektrumainak kiértékelésével [2] meghatároztam a g, a réz csatolás, és egyes esetekben a nitrogén csatolások főértékeit. A komplexek geometriájának optimalizálására és az elméleti ESR paraméterek meghatározására DFT számolásokat végeztünk, amely segítséget nyújtott a mérési eredmények értelmezésében.

[1] A. Rockenbauer, T. Szabó-Plánka, Zs. Árkosi, L. Korecz, J. Am. Chem. Soc. 123 (2001) 7646-7654

[2] A. Rockenbauer, L. Korecz, Appl. Magn. Reson. 1996, 10, 29-43

Nafiontartalom hatásának vizsgálata a protoncsere-membrános tüzelőanyag-cellák mikrostruktúrájára**Nemes Ákos, III. évf. kémia BSc**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Inzelt György** egyetemi tanár
Kriston Ákos PhD hallgató
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Munkám során a protoncsere-membrános tüzelőanyag-cella katalizátor rétegének mikrostruktúráját vizsgáltam a katalizátor Nafion-tartalmának függvényében. Ehhez nyolc tüzelőanyag-cellát készítettem el változtatva a katalizátor rétegben a vezető polimer tartalmát. Mindegyik tüzelőanyag-cellának megmértem a teljesítménygörbéjét két különböző nyomáson és három különböző hőmérsékleten, hogy megfelelő statisztikát kapjak. Bevezettem egy fizikai-kémia modellt a struktúra leírására és a mérésekből egy numerikus modell és egy paraméterillesztő algoritmus segítségével meghatároztam három a szerkezetre jellemző paraméter (porozitás, agglomerátumok mérete, térfogati csereáram) értékét.

A mérések kiértékelése során kimutattam, hogy a porozitásnak és az agglomerátumok méretének 30-35% Nafiontartalomnál maximuma van. Ennek magyarázata, hogy a Nafion apoláros szénláncá és poláros oldalláncai kis Nafiontartalomnál részben körbeveszik a Pt/C szemcséket, de nem hoznak létre nagy agglomerátumokat. A kis Pt/C szemcsék jól kitöltik a teret, ezért kicsi a porozitás. 30-35% Nafiontartalomnál már a polimerszálak körbeveszik a Pt/C szemcséket, így nagyobb agglomerátumokat hoznak létre, amelyek viszont nem töltik ki olyan jól a teret, mint a kis Pt/C szemcsék, ezért nő a porozitás. Nagy Nafiontartalomnál az inverz micellák keletkezése megindul, és emiatt már nem nő a porozitás és az agglomerátumok mérete. A térfogati csereáram a Nafion mennyiségének növelésével először csökken, a Nafion a platina felületére történő adszorpciója miatt, majd növekszik, ahogy a Pt kihasználtság növekszik a rétegben.

A vizsgálatokból a három paraméter változásának követése mellett egy új jelenséget sikerült kimutatni egy működő tüzelőanyag-cellában, miszerint a további Nafion hozzáadása nem elsősorban az agglomerátumok felületére tapad, hanem a pórusokon belül képez inverz micellákat.

Anionok hatása a polianilin redoxi átalakításaira, különös tekintettel a vezető állapot kifejlődésére**Samu Gergely Ferenc, III. évf. kémia BSc**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Visy Csaba** egyetemi tanár
Tóth Péter Sándor PhD hallgató
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A vezető polimerek olyan műanyagok, melyek vezetését megfelelő elektrokémiai átalakításokkal képesek vagyunk nagyságrendekkel megnövelni. Ezen polimerek egyik képviselője a polianilin (PANI). A PANI könnyen, olcsón előállítható, vizes közegben szintetizálható és levegőn stabilis. Kompozitjai széles körben alkalmazhatók, ezért is került számos kutatás középpontjába.

A PANI a többi vezető polimerhez hasonlóan a félvezető állapotából redoxi átalakítások révén a vezető állapotába vihető át, de a többi polimerrel ellentétben ez a folyamat protonálódási/deprotonálódási lépéssel párosul. Ezen belső állapotok közötti konverziót a polimer színváltozása is jelzi, és az átalakulást kísérő töltésátmenet következményeként jelentkező tömegváltozás is detektálható.

Tudományos Diákköri munkám során különböző szervesetlen (HClO_4 , H_2SO_4 , HNO_3) és szerves savak (p-TSA, SDS) vizes oldatából vagy ezek elegyéből PANI filmek leválasztását, majd azok *in situ* elektrokémiai vizsgálatát végeztük. A polimerizációt potenciostatikus körülmények között hajtottuk végre. Az így kapott filmek elektrokémiai jellemzése ciklikus voltammetriával történt. A szintézis körülményeit Pt elektródon optimalizáltuk. Az *in situ* spektroelektrokémiai vizsgálatokat ITO (indium-ón-oxid) elektródon folytattunk, az *in situ* vezetési méréseket kerámiahordozóra felvitt Pt/Pd/Ag pasztából készült elektródokon végeztük. Megállapítottuk, hogy a film elektrokémiai aktivitása függ az oldatban jelenlévő anion minőségétől: az anódos és katódos csúcsáramok a szerves savak esetében jelentősen nagyobbak voltak. A spektroelektrokémiai vizsgálatok során kiderült, hogy az SDS/ HNO_3 elegyben leválasztott filmek vastagsága volt a legnagyobb. Az *in situ* vezetésmérés során nem tapasztaltuk a vezetés kialakulásának kinetikai gátoltságát, ugyanis az első oxidációs lépéssel közel egy időben indult meg a vezetés növekedése, ugyanakkor a vezető állapotba történő átalakulás megindulása anionfüggést mutatott. A SDS/ HNO_3 rendszer két *in situ* kombinált mérés technika együttes alkalmazása [1] mellett történő vizsgálata során kimutattuk, hogy a vezetés kifejlődése az aromás szerkezet kinoidális formává alakulásához rendelhető.

[1] E. Peintler-Kriván, P.S. Tóth, C. Visy, *Electrochem Commun.*, 11 1947-1950 2009

Kationadszorpció vizsgálata platinaelektrod felületén elektrokémiai kvarckristály-nanomérleggel

Székely Anna, III. évf. kémia BSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Prof. Dr. Inzelt György egyetemi tanár
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A ciklikus voltammetriás vizsgálatok során leggyakrabban tanulmányozott elektród a platinaelektrod. A tranziens elektrokémiai technikák alkalmazása mellett sok módszert alkalmaztak a vizsgálatára, így az elektrokémiai kvarckristály-nanomérleg (EQCN) módszert is.

Az 1960-as évek során tisztázták a voltammogramok elméleti leírását [1], mostanában pedig a különböző oldatokban való lefutását értelmezzük. A görbék három részre oszthatjuk: a hidrogén előleválási szakaszra (UPD-H), az elektrokémiai kettősréteg-tartományra és az oxidréteg kiépülésére. Az erősen és gyengén kötött hidrogén problémája még mindig nem megoldott, míg a másik két résznél elfogadott az anionadszorpció, illetve az irreverzibilisen kiépülő PtO-réteg kialakulása.

A közelmúltban kevés figyelmet fordítottak az esetleges kationadszorpcióra az UPD-H tartományban. Méréseink során Cs⁺-ion adszorpcióját vizsgáltuk platinaelektrod felületén savas (H₂SO₄) oldatokban. Mivel a pH változtatása is befolyásolja a voltammogramokat, a Cs₂SO₄-ot tartalmazó oldatok pH-ját többé-kevésbé állandó értéken tartottuk.

Az EQCN mérést a ciklikus voltammetriával párhuzamosan végezve, pontos képet kaphatunk a felületen változó tömegről. A frekvenciaváltozás és töltésmennyiség ismeretében ki lehet számolni az adszorbeálódó komponensek moláris tömegét, illetve, feltételezve a Cs⁺-ionok megkötődését a felületen, a felületi borítottság értékére is tudunk közelítő értékeket adni az egyes oldatok esetén.

A végzett mérések és következtetések igen jelentősek, a szakirodalomban eddig még nem publikáltak ehhez hasonlót. Méréseink során a többi (Na⁺, K⁺, Rb⁺) ionnál nem tapasztaltunk a voltammogramokon és a frekvenciagörbéken olyan eltérést, amelyet a Cs⁺-ionnál igen. A mérésekből cikk is készült [2], dolgozatom végső soron ennek a tárgyalása, részletesebb kifejtése.

[1] R. S. Nicholson, I. Shain: Theory of Stationary Electrode Polarography, Analytical Chemistry, 36, 706 (1964).

[2] B. B. Berkes, A. Székely, G. Inzelt, Electrochemistry Communications 12, 1095 (2010).

Kémiai technológia tagozat

Dronátok előállításának optimalása

Aradi Klára, IV. évf. gyógyszeripari szakirány BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Grün Alajos adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: Garadnay Sándor osztályvezető

Neu József főmérnök

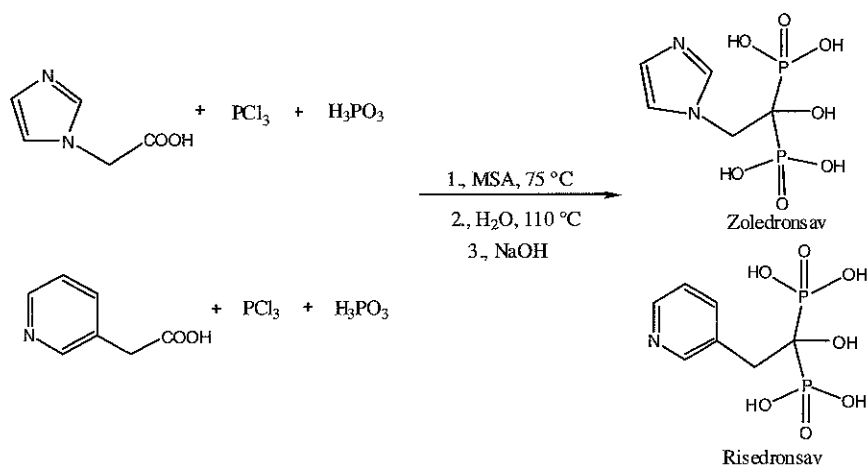
Törley József tudományos tanácsadó

Richter Gedeon Nyrt., Dorog

Napjaink egyik elterjedt súlyos betegsége a csontritkulás, mely a csontok keménységének csökkenésével, és ennek következtében gyakran csonttöréssel jár. A biszfoszfonátok ezen betegség terápiajában mutatnak jótékony hatást, ezért az érdeklődés az elmúlt években jelentős mértékben fokozódott irántuk.

TDK munkám során két biszfoszfonát, a Zoledronsav és a Risedronsav (forgalomban lévő nevük Zometa illetve Actonel) előállításának optimalásával foglalkoztam. Munkám során vizsgáltam a reaktánsok arányának, a reakcióidőnek, és a koncentrációviszonyoknak a hatását a kapott termék mennyiségére és minőségére. Ionos oldószerben megvalósított kísérleteket is végeztem.

Egy olyan eljárást dolgoztunk ki, melyben a megfelelő módosításokkal sikerült hatékonyabbá tenni a jelenleg alkalmazott dronát előállítási módszert.



Fémionokkal módosított, ásványi típusú katalizátorok vizsgálata szerves szintézisekben**Fodor Anna, I. évf. gyógyszervegyész-mérnök MSc****BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar**

Témavezető: **Dr. Hell Zoltán** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Kiss Árpád** PhD ösztöndíjas
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az utóbbi évtizedek szerves kémiai kutatásainak egyik fő iránya olyan új katalizátorok, illetve reagensek keresése, amelyek aktívabbak, szelektívebbek, esetenként újra felhasználhatóak, egyszerűbben kezelhetők, és kevésbé terhelik a környezetet, mint egyes hagyományos katalizátorok. Az elmúlt években egyre nagyobb jelentőségűvé vált a különböző ásványi alapú katalizátorok, például természetes és módosított agyagásványok, zeolitok, vegyes oxidok használata.

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén több éve folynak kísérletek különböző szilárd savak és bázisok felhasználhatóságának vizsgálatára szerves kémiai szintézisekben. E kutatásokba bekapcsolódva feladatom különböző fémionokkal módosított, savas, illetve bázikus karakterű, ásványi típusú szilárd anyagok felhasználhatóságának vizsgálata volt különböző szerves kémiai reakciókban. A tanszéki kutatások során korábban sikeresen valósítottak meg palládiummal módosított Mg-La vegyes oxid bázis jelenlétében szén-szén kapcsolási reakciókat.

Munkám során először a korábban kifejlesztett Pd/Mg-La katalizátor alkalmazhatóságát vizsgáltam az aminok és aril-halogenidek között lejátszódó Buchwald-reakcióban. Megállapítottam, hogy az aminok a reakció körülményei során komplexálják a palládiumot, ezért ez a reakció nem valósítható meg.

A kutatás folytatásaként célul tűztük ki más hordozós fémkatalizátorok vizsgálatát is. Megállapítottuk, hogy a réz 4 Å molekulaszita hordozón kiválóan használható az alkin-aminok előállítására szolgáló A^3 (aldehid-alkin-amin) reakcióban. A reakciókat szobahőmérsékleten, oldószer nélkül vezetve a termékeket kvantitatív termeléssel sikerült kinyerni. A katalizátor könnyen visszanyerhető, és újra felhasználható aktivitásának csökkenése nélkül. Az elért eredmények közlemény alapját képezik [1].

Ezen kívül vizsgáltuk különböző, erősebben vagy gyengébben savas karakterű, agyagásvány típusú hordozó rézzel módosított változatának a felhasználhatóságát alkinek különböző szén-szén kapcsolási reakciókban.

[1] Fodor, A., Kiss, Á., Debreczeni, N., Hell, Z., Gresits, I., *Org. Biomol. Chem*, 8, 4575–4581 (2010)

Foszfinsavak direkt észteresítése – egy új és környezetbarát megközelítés

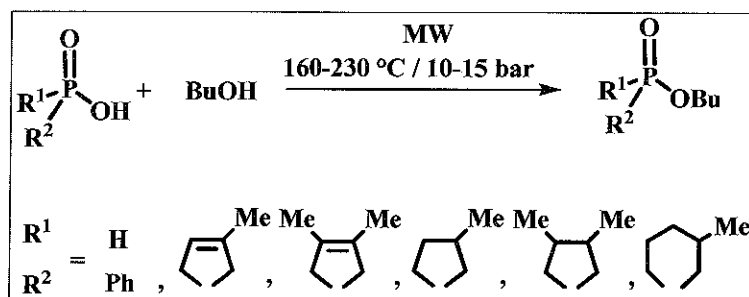
Kiss Nóra Zsuzsa, II. évf. Vegyészmérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Keglevich György egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Tudományos diákköri munkám célkitűzése a mikrohullámú (MW) technika adta különleges előnyök és lehetőségek kihasználása volt.

Mivel a foszfinsavak – a karbonsavakkal ellentétben – nem észteresíthetők direkt módon alkoholokkal, a foszfinsavak észterei, vagyis a foszfinátok előállítása általában foszfinsav-halogenidek alkoholokkal megvalósított reakciójával történik. Ezen savklorid foszfinilezéseknél azonban mindenképp probléma a hidrogén-klorid képződése, ami rontja az atomhatékonyságot, ráadásul a P-halogenidek meglehetősen drágák. Érdekes feladatnak tűnt a foszfinsavak ($R^1R^2P(O)OH$) direkt észteresíthetőségének vizsgálata MW körülmények között.



1. ábra: A vizsgált direkt észteresítések

Azt találtuk, hogy az általunk hozzáférhetővé tett gyűrűs foszfinsavak (foszfolán-, foszfolén- és hexahidrofoszfinin-oxidok) MW besugárzás alkalmazásával erélyes körülmények között (180-230 °C, 10-15 bar), optimalizálás után akár 60%-os kihozattal is észteresíthetők. Tanulmányoztuk a modellvegyületek reakciókészségét is, valamint termikus kontroll kísérleteket is végeztünk, a specifikus MW effektus alátámasztására.

Ez a tapasztalat teljesen újszerű és gazdaságosabb foszfinát szintézist tesz lehetővé.

Gőzrobbantás hatása a biomassza emészthetőségére**Kontos János, III. évf. vegyészmérnök BSc**

Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Dallos András** egyetemi docens
Járvás Gábor okl. vegyészmérnök
Pannon Egyetem Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

Földünk egyre növekvő népességének energiaigényét tisztán fosszilis tüzelőanyagokból ellátni nagy gondot jelent. A hagyományos energiahordozókon kívül szükség van olyan alternatív energiaforrásokra, mint a biogáz, és a bioetanol, melyek képesek a nem megújuló energiahordozók egy részének kiváltására. Munkám során a biomassza alapú biogáz termelés ciklusidejének csökkentését, valamint a gázkihozatal növelést tűztem ki célul potenciális biomassza alapanyagok gőzrobbantásos előkezelésével.

A korábbi tapasztalatainkra támaszkodva, melyeket a termikus kezelési és gőzrobbantási kísérletek során szereztünk, megterveztünk és elkészítettünk egy laboratóriumi méretű gőzrobbantó berendezést. A gőzrobbantás hatására a növényi sejtfal felszakad, a szerves anyagok nagy része a vizes fázisba kerül, megkönnyítve, ezáltal a biomassza emészthetőségét. A sejteket a gőzrobbantás során a nagy hőmérséklet miatt erőteljes termikus, valamint a hirtelen expanzióból eredő mechanikai roncsoló hatások érik.

Gőzrobbantásos kutatásaim során a cukorcirok bagasz mint potenciális biomassza alapanyag roncsolhatóságát vizsgáltam. A gőzrobbantás hatásosságát az oldatba került intracelluláris szerves és szervesetlen anyagok mennyiségéből határoztam meg, melyet kémiai oxigén igény (KOI) és biológiai oxigén igény (BOI) méréssel, illetve induktív csatolású plazma optikai emissziós spektroszkópia (ICP) segítségével mértem. A gőzrobbantott növényi rostok rácsszerkezetében bekövetkező változásokat elektromikroszkópos módszerekkel detektáltam. Vizsgáltam a gőzrobbantás hatását a tényleges biogáz és metán kihozatalra. Méréseim során megállapítottam, hogy a gőzrobbantás - mint korszerű biomassza előkezelés - alkalmas a biogáz termelés növelésére

Szuperkritikus CO₂ által indukált geokémiai reakciók vizsgálata

Lévai György, IV. évfolyam, Vegyészmérnök BSc

BME, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Kózelné Dr. Székely Edit, adjunktus
BME KKFT**Konzulens:** Dr. Szabó Csaba, egyetemi docens
ELTE TTK KGT

Napjaink egyik legtöbbet vitatott, de tagadhatatlanul aktuális kérdése a globális felmelegedés. Egyértelmű a korreláció a Föld átlaghőmérséklete, és az ún. üvegházhatású gázok (CO₂, H₂S, nitrozusgázok, szénhidrogének) légkörben mérhető koncentrációja között. Az ipar az üvegházhatású gázok közül a szén-dioxidot termeli legnagyobb mennyiségben.

Egy átmeneti megoldás lehet a légköri CO₂ koncentráció növekedési ütemének visszafogására a CO₂ tárolása geológiai formációkban, ahol a nyomás és hőmérsékletviszonyoknak megfelelően a CO₂ szuperkritikus állapotba (scCO₂) kerül. Fontos megismernünk a scCO₂ geokémiai hatását az ásványok és a pórusfluidum egyensúlyára és a kőzetek stabilitására annak érdekében, hogy a hosszú távon is biztonságos tárolók hazánkban és külföldön is kijelölhetőek legyenek.

A BME és az ELTE együttműködésével kísérleteket végeztünk valódi, kutató fúrásokból származó homokkő mintákon. A kísérleti feladathoz összeállított nyomástartó bombában érintkeztettem potenciális tárolókőzet mintákat scCO₂-dal 5-37 napos időintervallumokban, 55-65°C-on. A vizsgált nyomástartomány: 70-220 bar. A minták elemzését pásztázó elektronmikroszkóppal, röntgen fluoreszcenciával (XRF), atom adszorpciós spektroszkópiával és induktív csatolású plazma-tömeg spektroszkópiával (ICP-MS) végeztük el.

Az eredmények elsősorban a Na, Ca, Mg, K, Fe és Sr ionok koncentrációiban mutattak jelentős eltérést a scCO₂-os kezelés előtt és után. A homokkő minták felületi elemeloszlásának szórása nagy. A felületi Ca és Mg koncentrációja csökken (XRF), míg a mintákat áztató – pórusfluidumot szimuláló – sósvíz oldat Ca és Sr koncentrációja nő a scCO₂-dal történő érintkeztetés hatására (ICP-MS). Az K és Mg koncentrációk változása egy dinamikus oldódás-kiválás egyensúlyra utal a kőzetminták és az oldat között. A scCO₂-os kezelés hatására az oldat Na koncentrációja csökken, amely a kőzetminták felületén történő Na tartalmú ásvány kiválására utal (pl.: dawsonit).

Az ultrahangos besugárzó fej pozíciójának hatása a biomassza emészthetőségére

Mándli Henrietta, VI. évf. környezettudományi egyetemi

Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Dallos András** egyetemi docens
Szigeti Márton Géza biomérnök hallgató
Pannon Egyetem Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

Fosszilis energiatartalékaink a lakosság számának növekedésével, és az így kialakult növekvő energiaszükséglettel rohamos ütemben apadnak, így a hagyományos energiahordozók mellett más alternatívák kialakítása is szükségessé vált. Ennek köszönhetően egyre nagyobb teret nyer a megújuló energiaforrások felhasználása, köztük a biomassza alapú energiagyártás, a biogáz, a bioetanol, és a biodízel. A biogáz kihozatal jelentősen növelhető, valamint a biogáz termelés ciklusideje jelentősen csökkenthető a biomassza nyersanyagok emészthetőségének javításával. Ez termikus, kémiai és mechanikai előkezelésekkel érhető el, melyek közül az egyik legígéretesebbnek az ultrahangos zöld anyag előkészítés tűnik, mely során a szubsztrát növényi rostjait az ultrahangos besugárzás hatására fellépő kavitációs hatás roncsolja, ezáltal a növényi felület megnő, továbbá a jelentős mennyiségű szerves anyag oldatba vitele növeli a szubsztrát emészthetőségét.

Munkám során az egyik jövőbeni potenciális biogáz nyersanyag, a cukorcirok – kukorica vegyes siló előkezelésével foglalkoztam. A kísérleteket SONICS Vibra Cell VCX-750 típusú ultrahangos feltáró berendezéssel végeztem, besugárzó fej pozíciójának változtatásával. Az ultrahangos feltárás eredményességét a biomassza-víz szuszpenzió vizes fázisa kémiai (KOI) és biológiai oxigénigényének (BOI) mérésével követtem. A roncsolás hatását ICP fotometriás mérésekkel, a kvázi kristályszerkezet megváltozását röntgen diffrakciós vizsgálatokkal, a növényi szövetekben bekövetkező dezintegrációs folyamatokat pedig pásztázó elektronmikroszkópos felvételekkel igazoltam, illetve az előkezelt szubsztrát tényleges emészthetőségét a biogáz termelés mérésével ellenőriztem. Az eredményeink alapján megállapítottam, hogy az ultrahangos előkezelések hatására roncsolódik a biomassza, ennek következtében javul az emészthetősége, ami a belőle történő biogáz előállítás hatékonyságának növeléséhez hozzájárul.

**Nitrilek szelektív, katalitikus hidrogénezése primer aminokká –
A 3,4-dietoxibenzil-cianid hidrogénezése palládiummal****Molnár Bálint**, IV. évf. vegyészmérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Hegedűs László** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A primer aminok fontos és értékes finomkémiai, elsősorban gyógyszer-, műanyag- és növényvédőszeripari intermedierek. Előállításuk sokféle módon történhet, például ammónia alkilezésével, oxovegyületek redukzív aminálásával, de a gyógyszeriparban az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás a nitrilek vagy nitrovegyületek heterogén katalitikus hidrogénezése.

A szakirodalomból régóta ismert, hogy a nitrilcsoport átalakítása primer aminokká viszonylag egyszerűen megoldható, bár a reakció szelektivitása lecsökkenhet a mellékreakcióban keletkező szekunder és terciér aminok miatt. A másod- vagy harmadrendű aminok mennyiségét minimalizálhatjuk, ha a reakciót ammóniás alkoholban (pl. metanol, etanol) végezzük, azonban a jó eredmények eléréséhez legalább 5–6-szoros mennyiségű ammónia szükséges, még a legalkalmasabbnak bizonyult Raney-Ni katalizátor esetében is.

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén új eljárást dolgoztak ki nitrilek katalitikus hidrogénezésére, amelyben aktívszén-hordozós palládium katalizátorral, egymással nem elegyedő oldószerpár (pl. víz/diklórometán) alkalmazásával, savas jellegű adalék (pl. NaH_2PO_4) jelenlétében, enyhe reakciókörülmények között (30–80 °C, 6 bar), teljes konverzió mellett, 80–90%-os termelés és 85–95%-os szelektivitás érhető el a primer aminokra vonatkozóan.

Ezen kutatásba csatlakozva feladatom volt, hogy – a kidolgozott eljárás kiterjesztetőségét tanulmányozva – vizsgáljam a 3,4-dietoxibenzil-cianid palládium-katalizált hidrogénezését. Ennek során egy fontos és értékes gyógyszeripari közti termék – a 2-(3',4'-dietoxi-fenil)etil-amin – képződik, ami a drotaverin-hidroklorid (No-Spa[®]) simaizom görcsoldó hatású gyógyszer kulcsintermediere. Céлом volt, hogy meghatározzam ezen primer amin szelektivitásának és termelésének optimális körülményeit.

Elektrosztatikus nanoszálképzés alkalmazása a gyógyszertechnológiában

Nyúl Katalin, IV. évf. vegyészmérnöki BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Marosi György**, egyetemi tanár
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Nagy Zsombor Kristóf, doktoráns
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A mai gyógyszerkutatás, és azon belül a készítmények fejlesztésének egyik jelentős kihívása a hatóanyagok oldhatóságának javítása, mivel az újonnan felfedezett hatóanyagok nagy része nagyon rosszul vagy egyáltalán nem oldódik vízben. Ennek következtében szilárd gyógyszerkészítményben történő felhasználásukra gyakran nem kerülhet sor. A gyógyszerformulálásnak ezért egyik igen fontos feladata a hatóanyagok oldhatóságának, kioldódásának különböző módszerekkel történő növelése illetve gyorsítása, mely végeredményben a biológiai hasznosulás növekedését eredményezi. Ezen kívül jó vízdékonyságú hatóanyagok esetében a pillanatszerű kioldódás elérése lehetővé teszi bukkális gyógyszerkészítményben való felhasználásukat.

Munkám során az electrospinning, magyar nevén elektrosztatikus szálhúzás gyógyszerformulálásban való alkalmazhatóságát vizsgáltam különböző hatóanyag-hordozó rendszereken. Céлом a hatóanyag amorf formában történő előállítás és nanoszálás hordozóstruktúra létrehozása, illetve ezek révén a kioldódás nagyfokú gyorsítása. Dolgozatomban bemutatom az eljárást, és az ily módon előállított nanoszálás szövetek (továbbiakban filmek) vizsgálatának eredményeit. Figyelemmel követtem a morfológiai tulajdonságokat befolyásoló paramétereket, vizsgáltam a hordozóba ágyazott hatóanyag kristályosságát és a célkitűzés szempontjából legfontosabb tulajdonságot, a kioldódás kinetikáját.

Az előállított elektroporlasztott cseppek és nanoszálak morfológiáját optikai mikroszkóppal, pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) és atomerő mikroszkóppal (AFM) vizsgáltam. A szálak átmérője 100-1000nm tartományba esett. A hatóanyagok kioldódását UV spektrofotométerrel követtem. A filmek vízben pillanatszerűen oldódtak, míg hagyományos módon készült készítmények (öntött film, extrudátum, préselt tabletták) esetén ez akár több mint fél órát is igénybe vesz. A Raman-mikroszkópos, FT-IR, DSC és XRPD vizsgálatok eredményei azt mutatják, hogy a hatóanyag amorf formában van jelen a filmben, mely tulajdonságát több hónap múlva is megőrzi.

Víz hatása a szén nanocsövek CCVD módszerrel történő előállításában**Szilágyi István, V. évf. Vegyészmérnök BSc**

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Horváth Géza** egyetemi docens
PE Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék
Szentes Adrienn PhD Hallgató
PE Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék

A szén nanocsövek a fullerének családjába tartozó szénvegyületek. Két fő csoportra bonthatjuk őket: egyfalú (SWCNTs - single-walled carbon nanotubes) illetve többfalú (MWCNTs - multi-walled carbon nanotubes) szén nanocsövek. Az egyfalú nanocsöveket legkönnyebben úgy lehet elképzelni, mintha egy grafitháló tökéletes hengerré tekeredne fel. A többfalú nanocsövek több egymásban koncentrikusan elhelyezkedő egyfalúból épülnek fel.

Szén nanocsövek előállítására jelenleg három jelentős módszer létezik: lézeres elpárolgatás, ívkisüléses módszer, illetve szénhidrogének katalitikus bontása (CCVD - Catalytic Chemical Vapour Deposition). Ezek közül is a legjelentősebb a CCVD módszer, mivel itt a többi két módszerhez képest kisebb hőmérsékleten és nagyobb mennyiségben lehet többfalú szén nanocsöveket előállítani.

A szén nanocsöveket kísérleteink során CCVD módszerrel állítottuk elő. A katalizátor Fe-Co kétfémes katalizátor volt, talkum hordozón. Szakirodalmak szerint a bevezetett gázhoz megfelelő mennyiségű vízgőz hozzáadásával a katalizátor élettartama jelentősen növelhető. Kísérleteink során a szénforráshoz különböző mennyiségű vízgőzt adtunk és vizsgáltuk annak hatását a termék minőségére és mennyiségére vonatkozóan.

A szén nanocsövek alkalmasak polimer erősítő anyagként kompozitokban, így rendkívül könnyű és erős terméket kapunk. Nem csak kiváló mechanikai tulajdonságai miatt hanem vezető illetve félvezető tulajdonságai miatt is használják polimerek adalékanyagaként.

Triacetin előállítása a biodízelgyártás melléktermékeként keletkező nyers glicerinnel tartalmú fázisból

Tollár Ágnes Nikolett, V. évf. Környezettudományi szak
Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Dallos András** egyetemi docens
Dr. Marton Gyula egyetemi tanár
Szabóné Herseczki Zsanett okl. vegyészmérnök
Környezeti és Informatikai Kooperációs Kutató Központ

Jelenleg a biodízel előállítási költségei meghaladják a kőolaj alapú dízelét. A költségek jelentősen csökkenthetők a gyártási folyamat során keletkező nyers glicerinnel további hasznosításával, ezért intenzív kutatások folynak a nyers glicerinnel átalakításával nyert értéknövelt termékek előállításával kapcsolatban.

Kísérleti munkám célja az volt, hogy ebből a glicerinnel tartalmú melléktermékből triacetint állítsak elő az elérhető legjobb tisztasággal. A triacetint (glicerinnel-triacetát) az ipar számos területén felhasználják, és napjainkban egyre fontosabb vegyületté válik a sokrétű alkalmazhatósága miatt. Kis toxicitású, alacsony illékonyaságú oldószer. Az élelmiszeriparban, parfümiparban, kozmetikai iparban, gyógyszeriparban egyaránt alkalmazzák, továbbá az üzemanyaggyártásban fagyáspontcsökkentő adalékanyagként, és viszkozitási tulajdonságok javítására is használatos.

A kísérletek során megvizsgáltam a különböző katalizátorok (foszforsav, p-toluolszulfonsav, kénsav, Amberlyst 15 és Amberlyst 36) szerepét. A kísérleteket minden esetben tiszta glicerinnel (99,5%) kiindulási alapanyaggal is elvégeztem. A kapott termékösszetétel adatokat referenciaként használtam fel. Megállapítottam, hogy a biodízelgyártás melléktermékeként keletkező nyers glicerinnel tartalmú fázisból, részleges tisztítás után előállítható triacetin a kívánt tisztasággal (>95%). A vizsgált minták elemzése GC-MS-sel történt.

Kolloid és makromolekuláris kémia tagozat

Komplex bevonatok előállítás Langmuir-Blodgett és szol-gél technikával

Balázs Dániel, IV. évf. vegyészmérnök BSc
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr Hórvölgyi Zoltán** egyetemi docens
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Detrich Ádám** doktoráns
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Speciális szerkezetű bevonatok fontos és különleges, optikai, elektromos, mágneses és/vagy kémiai tulajdonságokkal látják el a szilárd hordozókat. Számos módszer ismert filmek szilárd felületen való kialakítására. A Langmuir-Blodgett (LB) technikával tervezett szerkezetű és morfológiájú nanorészecskés bevonatok állíthatók elő. Az LB-filmek gyakorlati alkalmazását korlátozza kis mechanikai stabilitásuk. A mártásos szol-gél-technika egy viszonylag egyszerű módszer mechanikailag ellenálló, vékony bevonatok létrehozására. A film jellemzőit a réteghúzás körülményei és a prekursor szol összetétele szabja meg.

Céлом az volt, hogy e két különböző rétegeképzési technika előnyeit egyesítsem: nanostrukturált és mechanikailag stabil réteget képezsek szilárd felületen. Stöber-szilika nanorészecskékből készült LB-filmeket borítottam be szilika vagy titán-dioxid szol-gél filmmel. Hordozóként mikroszkóp tárgylemezt használtam. A bevonatok mechanikai stabilitását, szerkezetét és felületi morfológiáját tanulmányoztam.

A kombinált bevonatok a „lift-off” vizsgálatok alapján megnövekedett mechanikai stabilitást mutattak az eredeti LB-filmekhez képest. A bevonatok szerkezetéről optikai vizsgálatok szolgáltatottak információt. Az optikai jellemzőket pásztázó szögű reflektometriai és UV-Vis spektroszkópiai módszerekkel vizsgáltam. A kapott reflektancia és transzmittancia görbéket különböző vékonyréteg-optikai modellek illesztésével értékeltem. A felületi morfológiát atomi erő mikroszkóppal tanulmányoztam. A képek különböző - a szol-gél réteg vastagságától függő - felületi érdességet mutattak. Ezek szerint lehetőség nyílik szabályozott nanomorfológiájú bevonatok előállítására.

Összehasonlításként mikroszkopikus részecskékkal is végeztem vizsgálatokat. Ezekkel a hordozó felületén mikrométer-léptékű morfológiát sikerült létrehozni.

Az elektrolit kettős hatása ellentétes töltésű polielektrolitok és tenzidek asszociációjára**Bertalanits Edit**, V. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Mészáros Róbert** egyetemi adjunktus
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Kutatásaink során különböző mennyiségű nátrium kloridot tartalmazó poli(etilén-imin)/nátrium - dodecilsulfát (PEI-NaDS) és poli(sztírol-szulfonát)/ alkil-trimetil-ammónium bromid (PSS-DTAB, PSS-CTAB) elegyekkel foglalkoztunk. Vizsgáltuk a polielektrolit-tenzid asszociátumok elektroforetikus mobilitását, látszólagos hidrodinamikai átmérőjét, valamint a polielektrolit-tenzid elegyek kinetikai stabilitását.

A koaguláció sebességi állandó NaCl koncentrációval történő változása kinetikailag stabil kolloid diszperzió képződésére utal PEI-NaDS és PSS-CTAB elegyeiben tenzid-feleslegben. Mindkét rendszer esetén elektrolit adalék hatására szélesedett a csapadékos koncentráció tartomány nagysága.

Nagy sókoncentráció esetén (0.5-0.6 M) PSS-DTAB és PSS-CTAB elegyeiben a teljes tenzidkoncentráció tartományban transzparens oldatokat kaptunk. Ez az elektrolit mennyiség ugyanakkor PEI és NaDS elegyében tovább növelte a csapadékos koncentráció tartomány nagyságát.

Az elektrolit ellentmondásos hatását a polielektrolit-tenzid rendszerekre gyakorolt kettős hatás képével oldottuk fel, melyben az elektrolit kinetikai stabilitásra, és egyensúlyi fázistulajdonságokra gyakorolt hatása is szerepel.

Tioféntartalmú fahéjsavanalógok önszerveződése ezüstfelületen**Csankó Krisztián V. vegyész**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Pálinkó István** egyetemi docens
SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék

Köztudott, hogy a kénnek akár atomos állapotban, akár molekulákban nagy az átmeneti- és a kora átmenetifémekkel szemben mutatott affinitása. Ezüstfelületeken például, várhatóan kialakul legalább egy monomolekulás réteg, amely Ag–S kovalens kötésekkel rögzül. Ha a vizsgált molekula képes más, például hidrogénhidas vagy van der Waals kölcsönhatásra, akkor összetettebb felületi formációk jöhetnek létre. Munkám során ilyen molekulák, a tienilcsoportot vagy csoportokat tartalmazó α -fenilfahéjsav analógok, ezüstfelületen történő önszerveződése során kialakuló felületi formákat vizsgáltam infravörös mikrospektroszkópiával és atomi térerő mikroszkóppal.

A felületi réteget dip-coating technikával alakítottam ki, amelyhez nagyszámú tienilcsoportot vagy csoportokat tartalmazó α -fenilfahéjsav sztereoizomert használtam (6 molekulát). Ezek a molekulák képesek egymással többféle (O–H...O és C–H...S) hidrogénhidas kölcsönhatásba lépni, és szerkezetükből adódóan lehetőségük van C–H... π és π ... π intermolekuláris kölcsönhatások kialakítására is. Az ezüstfelület lézeres párologtatással készült. A tiszta ezüstfelületet pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM), a borított felületeket infravörös mikroszkóppal (IRM) reflexiós üzemmódban és atomi térerő mikroszkóppal (AFM) a közvetlen érintkeztetés módszerével tanulmányoztam. A molekulák kölcsönhatásait a Hyperchem csomag segítségével modelleztem.

SEM méréseim szerint a tiszta ezüstfelületek jórészt simák, de néhol tartalmaznak cseppszerű egyenetlenséget. Infravörös méréseimből kiderült, hogy a molekulák valóban megkötődtek az ezüstfelületen, és a felületi réteg kialakulása során bomlás sem történt. Az AFM mérések azt mutatták, hogy alapvetően multirétegek alakultak ki a felületen. Bizonyos esetekben ezen túl, föltehetőleg, különleges, körkörös elrendezett felületi formákat is találtam. Modellezési eredményeimből levonható következtetések szerint e formák több tucat, néha több száz a felületre közel merőlegesen, kötegszerűen elrendeződő savdimer asszociációjával alakultak ki.

Sztérikusan stabilizált intelligens mikrogélek szintézise**Kardos Attila, I. évf. vegyész MSc**

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Varga Imre egyetemi adjunktus
ELTE TTK Kémia Intézet

Kutatásom célja olyan sztérikusan stabilizált, intelligens, monodiszperz, töltéssel rendelkező mikrogél részecskék egy lépéses szintézisben történő előállítása volt, melyek megőrzik kolloid stabilitásukat ellentétesen töltött makromolekulákkal (pl. hatóanyagok) szemben.

Az irodalomban eddig is találkozhattunk, olyan mag/héj szerkezetű mikrogélekkel, melyek ellentétesen töltött molekulákkal szemben is megőrizték kolloid stabilitásukat. Azonban e részecskék szintézise több lépésben történt, mely jelentős idő és energia befektetést igényelt [1,2]. Az általam kidolgozott egy lépéses eljárás során e mag/héj szerkezetű részecskék egyszerűen előállíthatóak voltak. Munkám során precipitációs polimerizációt alkalmaztam, mely eljárás biztosítja a monodiszperz méreteloszlást, illetve sokféle komonomer adagolható a rendszerhez. A szintézis során előállított hidrogél részecskék 10 mol% akrilsavat tartalmaztak, illetve különböző mennyiségű felületen kötött polietilénoxid- metilmetakrilátot.

Az alábbi munka végigkíséri a mikrogél részecskék egy lépésben történő előállításának technikáját, a kezdeti lépésektől egészen a kész mikrogél tulajdonságainak ismertetéséig, magában foglalva a mag/héj szerkezetű hidrogélek előállításának pontos részleteit, monodiszperzítés illetve stabilitás vizsgálatait a megfelelő módszerek alkalmazásával.

A munkám során elért eredmények egy olyan kutatás stabil alapkövének tekinthetők, amely a későbbiek folyamán intelligens anyagok gyógyszerhordozó rendszerekként való felhasználását tűzte ki célul. A végső cél megvalósításában fontos szerepet játszik, az általam alkalmazott szintézis technika, illetve a mikrogél részecskék felületének módosítása a felületi kölcsönhatások szempontjából semleges molekulák alkalmazásával.

Munkám fontosságát az elmúlt évek törekvései is alátámasztják, hiszen az utóbbi évtizedben a gyógyszerészeti kutatások fő irányvonalát képviselik olyan gyógyszerhordozó rendszerek kifejlesztése, melyek elnyújtott és célzott hatóanyag bejuttatásra képesek az emberi szervezeten belül. Az ilyen rendszerekkel szemben támasztott fontos követelés, hogy fiziológias körülmények között is stabil rendszerekként viselkedjenek, illetve hogy előnyös tulajdonságaikat ilyen körülmények között is ki tudjuk használni.

[1] Jones, C. D., Lyon, L. A., *Macromolecules*, 36, 1988-1993 (2003)

[2] Jones, C. D., Lyon, L. A., *Langmuir*, 19, 4544-4547 (2003)

Pegilált mágneses folyadékok előállítása MRI diagnosztikai céllal**Kupcsik Edina, I. évf. vegyész MSc**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Tombáczi Etelka** egyetemi tanár**Konzulens:** **Hajdú Angéla** kutató

SZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A mágneses folyadékok a nemzetközi érdeklődés középpontjába kerültek, különösen vizes közegűek, amelyek újszerű orvosi biológiai felhasználásra adnak lehetőséget. A mágneses nanorészecskék (MNPs) alkalmazása a diagnosztikában, például MRI (mágneses magrezonancia képalkotás) kontrasztanyagként előnyös. Az irodalomban ismert a MNPs különböző anyagokkal (pl. citromsav, PEO (polietilén oxid), Pluronic, kettős zsírsavas borítás) való stabilizálása, mely az MRI-ben a kapott jelet, ezáltal a kontrasztképző hatását befolyásolja.

Munkám során, a Vizes kolloidok kutatócsoportjának korábbi tapasztalatai [1] alapján a magnetit nanorészecskék felületének módosítását terveztem a biokompatibilitás fokozása érdekében egy új borítás, a pegilálás kidolgozásával. A kettős olajsav (OA) borítású (2 mmol OA/g magnetit) mintát referenciaként használva egy újabb réteget alakítottam ki polietilén glikol (PEG) segítségével (150 mmol PEG/g magnetit). Az így kapott nanorészecskék MRI készülékben mérhető, a víz protonjainak T1 (longitudinális) és T2 (transzverzális) relaxációjára gyakorolt hatását vizsgáltam. A mágneses rezonancia kísérletek folyamán két ellentétes folyamat játszódik le. Gerjesztéskor az abszorpció, azt követően az egyensúlyi visszarendeződést eredményező relaxáció. A méréseket az Euromedics Diagnostics Szeged Kft., 1,5 T GE Excite HD klinikai MRI készülékén végeztük el. Megállapítottam, hogy a PEG borítás hatására a mágneses magtól a vízmolekulák távolabb kerülnek, így a hidrofilitás növelése ellenére a relaxitás (r_1 , r_2) értékek csökkentek a referencia kettős olajsav borításhoz képest. Tehát a pegilált réteg kiépítésével a magnetit nanorészecskék biokompatibilitása előnyösen változik, a kontrasztképző hatása viszont nem növelhető.

[1] A. Hajdú, E. Tombáczi, E. Illés D. Bica, L. Vékás, Progr. Colloid Polym. Sci., 135: 29-37, (2008)

PMAA-*l*-PIB amfifil polimer kotérhálók előállítása és pH-függő duzzadási tulajdonságaik vizsgálata**Pásztor Szabolcs, I. évf. vegyész MSc.**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető
ELTE TTK Szerves Kémiai Tanszék
és MTA KK AKI Polimer és Anyagtudományi Osztály
Dr. Kali Gergely Áron tudományos munkatárs
MTA KK AKI Polimer és Anyagtudományi Osztály

Munkám egy olyan amfifil polimer kotérháló kifejlesztésének eddigi lépéseit mutatja be, mely például szintetikus izomként és egyedi szabályozórendszerekben, mint pH-szelep kerülhet felhasználásra. Ez az anyag az intelligens jellegű tulajdonsággal bíró polimetakrilsav és a kiváló kémiai ellenálló képességgel és jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkező, biokompatibilis poliizobutilén kovalens kötésekkel való összekapcsolásával készülő amfifil kotérhálós polimer gél (polimetakrilsav-*l*-poliizobutilén, röviden: PMAA-*l*-PIB).

Kutatásaimnak kettős célja volt: egyrészt bifunkciós iniciátor majd ennek segítségével különböző végcsoportokkal ellátott telekelikus poliizobutilének szintézise, majd utóbbi felhasználásával random szerkezetű amfifil kotérhálós polimer gélek (PMAA-*l*-PIB) előállítása és analízise, majd ezek pH-függő longitudinális duzzadásának a tanulmányozása. Ezek a kimagasló biokompatibilitással rendelkező kotérhálók a környezet koncentráció-változására (pH) méretváltozással reagálnak. Munkám során ezt a tulajdonságukat tanulmányoztam. A gélek duzzadását azonban az eddigiek során alkalmazott gravimetriás módszerrel szemben longitudinálisan, hossz-méréssel vizsgáltam.

A kotérhálókat a kiindulási anyagok szintézise, tisztítása, és vizsgálata után két kísérletsorozat keretében szintetizáltam, kísérletenként 4-négy-négy gél. A kapott kotérhálókat tisztítottam, majd a trimetilszilil védőcsoport sósavas eltávolítása után több módon vizsgáltam a kapott géleket.

A pH-függő longitudinális duzzadási vizsgálatok eredményesek voltak. A minták kimagasló hossz-méret növekedést mutattak (150-220%), mely indokolja a további kutatásokat. Munkám eredményei alapján pedig pontosítható a munkavégzésre és pH-szelepként történő alkalmazásra felhasználható PMAA-*l*-PIB amfifil kotérhálók összetétele.

Tuberkulózis elleni hatóanyag és hatóanyag-konjugátum nanokapszulázása

Pribranská Kinga, I. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kiss Éva** egyetemi docens
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A nanotechnológia fejlődése lehetővé tette új anyagok és eljárások megjelenését a korszerű gyógyszerformulálásban, a programozott és célzott hatóanyagtranszport megvalósításában. A kolloidális gyógyszerhordozók előnye, hogy méretük a nanométeres tartományba esik, ezáltal a szervezetben az aktív hatóanyag eloszlása szabályozható, a mellékhatások pedig csökkenthetőek.

A biodegradábilis polimerek a korszerű gyógyszerhordozók fontos alapanyagai, mivel előnyös tulajdonságuk, hogy biokompatibilisek és szabályozható sebességű bomlásuk lehetővé teszi a programozott hatóanyag-felszabadulást, miközben bomlás-termékei nem toxikusak. Nanorészecskéként való előállításukra több módszert kidolgoztak, melyek célja, hogy adott méretű és monodiszperz gyógyszerhordozó rendszert nyerjenek.

Munkánkban egy ilyen biodegradábilis polimerből (tejsav/glikolsav kopolimer, PLGA50/50) nanolecsapási módszerrel állítottunk elő nanorészecskéket és többféle módszerrel jellemeztük a méretüket és méreteloszlásukat (dinamikus fényszórás, SEM, AFM), valamint a kolloid rendszer időbeli stabilitását.

A bioaktív molekula, melynek a nanorészecskébe való kapszulázását tanulmányoztuk, a tuberkulózis elleni izoniazid (INH) hatóanyag. Összehasonlítottuk az INH és az MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoportjában szintetizált INH-konjugátum nanokapszulázását. A kísérleti körülmények változtatásával vizsgáltuk, hogyan befolyásolható az előállított nanorészecskék hatóanyagtartalma és a kapszulázási hatékonyság. Megállapítottuk, hogy a konjugátumban jelenlévő célbajuttató peptid és a hidrofóbicitást növelő palmitinsav molekularészlet előnyösen befolyásolja a nanokapszulázást. Előre tervezhető hatóanyagtartalmú (3-30%) és szűk méreteloszlású gyógyszerhordozó nanorészecskéket nyertünk, melyek előállítása során a kapszulázási hatékonyság igen nagy (70-100%) volt. A további felhasználást segíti, hogy a liofilizált állapotban tárolt gyógyszerhordozó rendszer jó rediszpergálhatóságot is mutatott.

Komplex gyógyszerhordozó nanorészecskék szintézise és jellemzése

Szécsényi Ágnes, III. évf. kémia BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Nagyné Naszályi Livia, tudományos munkatárs
MTA KK Nanokémiai és Katalízis Intézet

A modern gyógyszerkutatásban már nem csak új hatóanyagok előállítása a cél, hanem megfelelő mikro környezet létrehozása is. Olyan hatóanyagok esetében, amelyeknél a terápiás hatás bizonyított, és eddig nem megoldott gyógyászati célt szolgálnak, indokoltá válik az amúgy költséges nanohordozó tervezése.

Tudományos diákköri munkám során feladatom olyan komplex nanohordozók tervezése és kifejlesztése, amelyek adott hatóanyag molekula bezárására és szabályozott leadására alkalmasak intravénás alkalmazás esetén.

Az általam preparált új, komplex nanohordozók középpontjában elhelyezkedő szerves mag/héj részecske biztosítja a hordozó integritását. A középpontra polimerizációval felvitt polimer réteg magába zárja (szolubilizálja és védi), valamint bomlásával egyidejűleg kiereszti a hatóanyagot. A komplex nanorendszerekre fluoreszcens festékmolekulákat kapcsoltam, amelyek lehetővé teszik a hordozók eloszlásának fluoreszcens mikroszkóppal történő vizsgálatát.

A hordozók $\text{SiO}_2/\text{ZrO}_2$ mag/héj középpontjának kifejlesztéséhez irodalomban ismert eljárásokat használtam fel [1]. Az L-(-)-almasav alapú lebomló polimer réteg kialakításához direkt kondenzációs polimerizációt végeztem [2]. A fluoreszcens festék felkapcsolására peptidkémiai használatos eljárásokat alkalmaztam. A minták morfológiai jellemzése transzmissziós elektronmikroszkópiával történt. Dinamikus fényszórás mérésből kaptam információt a részecskék átlagos átmérőjéről és méreteloszlásáról. Infravörös és UV-látható spektroszkópiával követtem a szerves mag/héj kialakulását. A bevitt hatóanyag mennyiségének meghatározására és a kioldódás sebességének tanulmányozására tömegspektrometriát alkalmaztam.

Eredményeim alapján a hatóanyag-leadás kinetikája függ a polimer-bevonat összetételétől, vagyis szabályozható annak megfelelő megválasztásával. A kifejlesztett gyógyszerhordozó nanorészecskéken jelenleg *in vitro* és *in vivo* állatkísérletek zajlanak.

[1] Kim J., Chang S., Kim S., Kim K., *Ceramics International* 35, 1243-1247 (2009).

[2] Kajiyama T., Kobayashi H., Taguchi T., Saito H., Kamatsu Y., Kataoka K., Tanaka J., *Mater. Sci. Eng. C* 24, 815-819 (2004)

Gemini tenzidek jelentősége és tenziométeres minősítése EOR kutatások szempontjából

Tabajdi Réka, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Király Zoltán** egyetemi docens
SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A kőolajtelepeken az elsődleges művelés folyamán, amikor természetes rétegenergiával történik a termelés, a rétegben található kőolaj 50-60%-a kerül felszínre. A kőzetek pórusaiban visszamaradt kőolaj kihozatalát segítik a másodlagos művelési technikák, melynek során gáz- vagy vízbesajtolást alkalmaznak.

A következő lépcsőfok a harmadlagos művelés, amely már magas technikai színvonalat igényel. Ez történhet gáz besajtolással, termikus módszerekkel, vagy kémiai módszerekkel. Ezeket a fokozottan javított műveleti eljárásokat nevezzük EOR műveleteknek (Enhanced Oil Recovery). Ezen eljárásokkal 20-30%-kal növelhető a kőolaj kihozatal.

A kémiai eljárások legújabb területét képezik a tenzides technikák, ezen belül is egy újfajta tenzid csoport a gemini tenzidek, melyekben kettő vagy három hidrofíli csoport kapcsolódik a geometriailag jól meghatározott hidrofób egységekhez. Például az alkil-dodecil-benzol-szulfonát Jeffamin-só (ABSJ), melyet a későbbiekben vizsgálunk.

Jelenleg a tanszéken a MOL Nyrt. megbízásából kutatnak az adott felhasználás szempontjából optimális tulajdonságú gemini tenzid, ill. tenzidkeverékek után. Fő szempont számukra a kritikus micellaképződési koncentráció (cmc) meghatározása. Ezen felül igen lényeges a kút kőzetéből vett sima homokkővön, ill. olajjal telített homokkővön végzett felszívási kísérletek, ahol a tenzid nedvesítési képességét vizsgáljuk.

Munkám során vizsgáltam az ABSJ gemini tenzid micellaképződését desztillált vízben, szintetikus rétegvízben (meghatározott súly- és ionösszetételű elegy) és szűrt algyői rétegvízben Wilhelmy-lemez módszerrel. A felszívódási képességeit is megvizsgáltam mindhárom vízben, valamint megmértem ezen tulajdonságainak a hőmérséklet és koncentráció függését is, ezt a kísérlet sorozatot Washburn-módszerrel végeztem el. Ezek után a tenzid viszkozitásának javítása érdekében polimerrel elegyítettük, majd ezt a keveréket 1 éves hőkezelésnek vetettük alá, hogy a keverék hőstabilitásáról is információt kapjunk, és minden hónapban megmértem a cmc és felületi feszültség változást, ill. megvizsgáltam, hogy a felszívási tulajdonságaiban történt-e változás.

Koordinációs kémia tagozat

Körömvirágból (*Calendula officinalis* L.) szuperkritikus szén-dioxiddal extrahált faradiol-észterek ciklodextrines komplexálásának vizsgálata

Baffi Bálint, II. évf. vegyészmérnök MSc
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Simándi Béla egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A körömvirág egy széles körben használt gyógynövény, amelynek napjainkban számos pozitív élettani hatást tulajdonítanak. Célul tűztem ki egy olyan eljárás kidolgozását, amely segítségével a körömvirág triterpén gyulladásgátló hatóanyagait (faradiol-észterek, amelyek vízben való oldhatósága csekély, ami korlátozza az elérhető *in vivo* koncentrációjukat, ezzel hatékonyságukat) komplexálni tudom különböző ciklodextrinekben. Munkámat megkülönbözteti az irodalomban ismertetett különböző komplexálási eljárásoktól, hogy nem egy tiszta vegyületet használtam fel alapanyagként, hanem egy összetett növényi kivonatot, amely több száz vegyületet tartalmaz.

Az eddig leírt komplexálási eljárások mellett új módszerrel is kísérleteztem, amelynek lényege, hogy az extrahált kivonatot egy nagy fajlagos felületű hordozóra viszem fel, és ezen bocsátunk át szuperkritikus szén-dioxidot, amely az egyes komponenseket ismét feloldja. A fluidumot ezután egy ciklodextrines ágyra vezetem rá, ahol a komponensek komplexet képeznek a ciklodextrinnel. A módszer előnye, hogy a komplexet készen kapjuk, nem igényel utólagos kezelést. Három alapvető technológia, azaz a légekőri nyomáson vizes szuszpenzióban, illetve a szakaszos és dinamikus reaktorokban szuperkritikus szén-dioxidos közegben történő komplexálásnak hatékonyságát összehasonlítottam egymással, nagy hangsúlyt fektetve a ténylegesen komplexált és a csak adszorbeált faradiol-észterek elkülönítésére. A kísérletek kiértékelése HPLC-s mérésekkel történt.

Végül az eredmények értékelésekor azt kaptam, hogy a szakaszos szuperkritikus szén-dioxidos technológia képes felülmúlni a dinamikus reaktoros módszert az általam használt körülmények között. Öröndetes ugyanakkor, hogy a még az elterjedés fázisában lévő, zöld technológiának tekinthető szuperkritikus komplexálás ez esetben hatékonyabbnak bizonyult a hagyományos szuszpenziós eljárásnál. Megállapítottam, hogy a β -ciklodextrin képes 1000 ppm nagyságrendbe komplexet képezni a faradiol-észterekkel, míg a γ -ciklodextrin az általam használt körülmények között nem.

Amilinfragmensek oldategyensúlyi vizsgálata

Dávid Ágnes, I. évf. vegyész MSc

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kállay Csilla posztdoktor
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A 37 aminosavból felépülő amilin a hasnyálmirigyben keletkező hormon, melynek biológiai szerepe a II. típusú cukorbetegséghez kapcsolható. A II. típusú cukorbetegség során ugyanis a hasnyálmirigy Langerhans-szigeteiben a peptidlánc aggregációja következik be, melynek mechanizmusa és oka eddig még nem ismert. Érdekes azonban, hogy a patkány amilinje nem mutat hajlamot ilyen plakkok képzésére. Az emberből és a patkányból izolált amilin szekvenciája hat aminosavban tér el egymástól. Annak ellenére, hogy a patkány-amilin peptidlánca nem tartalmaz olyan horgonycsoportokat, amelyek elősegítenék a réz(II)ion kötődését, mégis azt találták az amilin 17-29 és a VRSSNN hexapeptid fragmens vizsgálata során, hogy réz(II)ion jelenlétében bekövetkezik az amidnitrogének deprotonálódása és koordinációja. Így felvetődik a peptidben lévő, poláris oldalláncú aminosavak (az arginin, a szerin és az aszparagin) lehetséges szerepe.

Diákköri munkám során ennek felderítésre egyrészt azt vizsgáltuk, milyen hatással van a képződő komplexek stabilitására az, ha egy kérdéses oldalláncból több is jelen van. Ezért vizsgáltuk a három szerin oldalláncot is tartalmazó triszerin ligandumot különböző átmenetifém-ionokkal. Másrészt azt is vizsgáltuk, hogy milyen hatása van a különféle poláris oldalláncok együttes jelenlétének. Ez utóbbit az amilin arginin-, aszparagin-, és szerinoldalláncot is tartalmazó fragmenseinek (VRSS, VRAA, VASS, SSNN) komplexképzésén keresztül tanulmányoztuk. Emellett célunk volt az amilinfragmensek komplexképzését kvantitatíve és kvalitatíve is leírni, így két független módszerrel végül stabilitási állandókat is tudtunk meg határozni a réz(II)ion megkötő fragmensek esetében.

Eredményeink arra engednek következtetni, hogy a poláris csoportok együttes jelenléte okozhatja a koordinációt, ezek hozzájárulása azonban nem egyenlő mértékű. A VRSS mutánsainak vizsgálata kapcsán megállapíthattuk, hogy az arginin szerepe a legkisebb. A VRSSNN hexapeptid fragmensének C-terminális részét, az SSNN tetrapeptidet tanulmányozva pedig felmerült az aszparagin és a szerin jelentősebb szerepe is a polipeptid réz megkötő képességében. Eredményeinkből ezért arra következtethetünk, hogy az SSNN szekvencia modellezhető az amilin fémmegkötő helyét.

Rákellenes [bisz-indazol-rutenát(III)]komplexek kölcsönhatásának vizsgálata humán szérum albuminnal kötőhely markerek segítségével

Dömötör Orsolya, V. évfolyam gyógyszerész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Enyedy Éva Anna egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

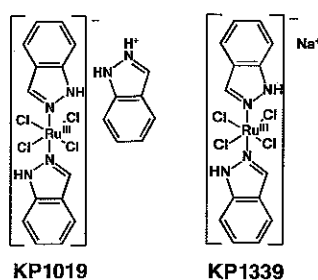
A nem-platina alapú rákellenes fémkomplexek közül kiemelkedő jelentőségűek a ruténium(III)-tartalmú [bisz-indazol-rutenát(III)] komplexek (KP1019 és KP1339), melyek sikeresen túljutottak számos klinikai fázis I vizsgálaton [1].

Egy gyógyszer farmakokinetikáját a szérum-fehérjékkel, elsősorban a legnagyobb koncentrációban jelenlévő humán szérum albuminnal (HSA) való kölcsönhatás is befolyásolja. A HSA a leg-

fontosabb nem specifikusan kötő szállítófehérje a vérben. A II.A doménban lévő hidrofób kötőhelyén („site I”) főként nagyméretű heterociklusos negatív töltésű anyagok, míg a III.A doménban lévő kötőhelyen („site II”) jellemzően kisméretű aromás karbonsavak kötődnek meg. A KP1019 komplex intravénás beadást követően több mint 90%-ban albuminhoz kötődik. Ezért vizsgáltuk a KP1019, és a tőle csak ellenionban különböző KP1339 komplex HSA-hoz való közvetlen kötődésének erősségét és helyét elsősorban spektrofluorimetriásan, ugyanakkor ultraszűrés-UV és kapilláris elektroforézis módszereket is használtunk kiegészítésként.

Kompetíciós vizsgálatokat végeztünk ún. kötőhely marker anyagok (warfarin és danzilglicin) bevonásával. Mivel a HSA által szállított egyik fontos endogén vegyület a bilirubin, ezért vizsgáltuk a KP1019 és KP1339 komplexek vele való kompetícióját is.

A fluorimetriás mérési módszer alkalmazhatósága és az adatfeldolgozási lehetőségek áttekintéséhez egyszerűbb modellvegyületeket is bevontunk a vizsgálatba, mint pl. az acetyl-szalicilsav és a folsav.



[1] Hartinger, C.G., Jakupec, M.A., Zorbas-Seifrieda, S., Groessl, M., Egger, A., Berger, W., Zorbas, H., Dyson, P.J., Keppler, B.K., Chemistry & Biodiversity, 5, 2140-2155 (2008)

Kéntartalmú ligandumok vanadátkomplexeinek egyensúlyi vizsgálata

Fischer Gabriella, II. évf. kémia BSc

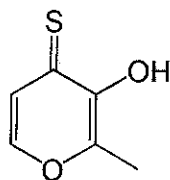
SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Jakusch Tamás egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

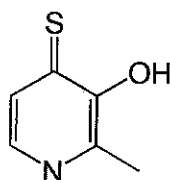
A világon napjainkban 200 millió cukorbeteg él, a diabetes gyógymódját, kezelési lehetőségeit számos helyen kutatják. Vanádiumtartalmú komplexek antidiabetikus hatásuk révén potenciális szájon át bevehető gyógyszerek a diabetes úttörő kezelésében.

Számos kéntartalmú bidentát ligandum^[1] VO(IV) komplexeit már részletesen tanulmányozták, vanadátkomplexeinek kémiája azonban még nem ismert. TDK munkámhoz ezért választottuk a tiomaltol (3-hidroxi-2-metil-4-tiopirán) és tdhp (3-hidroxi-1,2-dimetil-4-tiopiridin) ligandumokat.

A ligandumokat, mivel kereskedelmi forgalomban nem voltak kaphatóak, szintetizáltuk; a tiomaltolt maltolból és P₂S₅, míg a tdhp-t a tiomaltol és metilamin reakciójával állítottuk elő.



tiomaltol



tdhp

Ezen ligandumok V^V – el alkotott komplexeinek egyensúlyát pH-potenciometriás és ⁵¹V-NMR spektroszkópiai mérésekkel vizsgáltuk meg. Mindkét esetben – még ligandumfelesleg esetén is – a pH 6,5 - 9 tartományban csak a [VO₂OHL]⁻ összetételű monokomplexet figyeltünk meg. Ez a tény azért meglepő, mivel a maltol esetében – adott pH tartományban –

a biszkomplexek képződése még 1:1 fém ligandum arány mellett is kedvezményezett.

Savas tartományban egyik ligandum esetében sem sikerült egyensúlyi vizsgálatokat végezni, mivel csapadékképződés következett be. A tiomaltol esetében a semleges komplex, [VO₂L] oligomerizációját valószínűsítjük, míg a tiomaltol esetében a feleslegben található ligandumot a fémion oxidálja.

[1] V. Monga, K. H. Thmpson, V. G. Yuen, V. Sharma, B. O. Patrick, J. H. McNeill, C. Orvig, Inorg. Chem. 2005, 44, 2678-2688

Vízoldható mangán-porfirin komplexek fotokémiai és fotofizikai vizsgálata

Fodor Melinda Anna, III. évf. kémia BSc

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Horváth Ottó** egyetemi tanár
PE Kémia Intézet, Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

A porfirin-vegyületek és származékaik fontos szerepet játszanak a növények és állatok anyagcsere folyamataiban (hemoglobin, klorofill, citokrómok). A porfirin-vázat 4 pirrol-gyűrű alkotja, melyek metilidin-hidakon keresztül kapcsolódnak egymáshoz. E konjugált kötésrendszert tartalmazó váznak köszönhetően a porfirin-származékokat – többek között – fényérzékenyítőként illetve foto- és termikus katalizátorként alkalmazzák.

A mangán vegyületeiben egyedülállóan széles tartományban képes változtatni oxidációs állapotát. Több mangán-komplex mind oxidációs, mind redukciós folyamatokban alkalmazható katalizátorként. A mangán +2-es oxidációs állapotban a legstabilabb termodinamikailag, illetve a természetben előforduló vegyületeiben is többnyire ilyen oxidációs állapotú. Az általam vizsgált mangán-porfirin esetében azonban a +3-as oxidációs állapotot stabilizálja a négyfogú porfirin ligandum.

Munkám célja olyan reduktív fotokatalitikus vizes rendszer létrehozása volt, melyben a katalizátor mangán-porfirin. Ennek érdekében előállítottam és vizsgáltam anionos és kationos mangán(III)-porfirin komplexeket. Fotofizikai tulajdonságaik vizsgálata mellett, a kationos mangán(III)-5,10,15,20-tetrakis(1-metilpiridínium-4-il)-porfirin fotoredoxi átalakulását is sikerült megvalósítani mangán(II)-porfirinné megfelelő reduktív kioltó jelenlétében, látható fény hatására. Folytonos és időfelbontásos emissziós vizsgálatokkal kimutattuk, hogy a mangán(III)-komplex gerjesztett állapota statikus kioltás révén reagál, s az így megjelenő rövid élettartamú köztermék tranzien elnyelési színeképét lézer villanófény fotofizissal detektáltuk. A képződött mangán(II)-komplex ugyancsak fotoaktívnek bizonyult; gerjesztése a porfirin ligandum bomlását idézte elő, mely folyamat oxidatív kioltó jelenlétében visszaszorult, s helyette elektronátadás következett be a mangán(II) centrumról. Így visszanyertük a kiindulási mangán(III)-komplexet, és a fotoredoxi ciklus kezdődött előlről, s mindaddig működött, míg elegendő reduktív kioltó volt a rendszerben.

További vizsgálataink célja az oxidatív kioltóra közvetített elektron hasznosításával hidrogén fejlesztése vízből, mely révén megvalósítható a napenergia látható és ibolyántúli tartományba eső sugárzásának átalakítása és tárolása környezetbarát üzemanyag formájában.

Egy rendkívül stabilis makrociklusos tallium(III) komplex, a [Tl(DOTA)]**Fodor Tamás, II. évf. vegyész MSc**

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Tóth Imre egyetemi tanár
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A munka során a $Tl(DOTA)^-$ komplex egyensúlyi állandóját mértük kompetíciós módszerrel, Br^- és CN^- segédligandumokkal UV-VIS spektrofotometria és ^{205}Tl NMR módszerekkel. A komplex nagy stabilitása miatt a DOTA ligandum kiszorítását csak erélyes körülmények közt sikerült elérni, ahhoz nagy feleslegben alkalmazott bromid ion és erősen savas közeg volt szükséges. A makrociklusos komplex lassú képződési- és disszociációs reakciói miatt az egyensúly beállítására hosszú időt kellett várni.

A bromidionok erősen savas közegben képesek kiszorítani a DOTA-t, a reakció lassú, 1-2 hét alatt kerül egyensúlyba a rendszer. A fotometriás mérésekből $lgK \sim 60$ stabilitási állandó számolható, ami több mint 20 nagyságrenddel nagyobb a $Tl(edta)^-$ komplex állandójánál ($lgK = 37$). Eltérő tulajdonság az is, hogy a $Tl(DOTA)^-$ rendszerben nem mutatható ki vegyeskomplexek képződése sem OH^- , sem Br^- ionnal. Ez arra utal, hogy a törzskomplexben nincs koordinált vízmolekula.

A cianidionokkal végzett mérések alátámasztják a nagy lgK értéket, ezzel a segédligandummal nem szorítható ki a DOTA. Ugyanakkor lúgos közegben $Tl(DOTA)(CN)^{2-}$ vegyeskomplex képződik. A folyamatban valószínűleg a DOTA egyik karboxilát-csoportja válik szabaddá. A $Tl(DOTA)(CN)^{2-}$ vegyeskomplex stabilitási állandója ($K \sim 8$), ez kb. nyolc nagyságrenddel kisebb, mint a megfelelő $Tl(edta)(CN)^{2-}$ vegyeskomplexé ($K = 10^{8.7}$).

Megállapítottuk, hogy a $Tl(III) - DOTA - X^-$ rendszerekben (ahol $X = CN, Br$ vagy acetát) $pH > 5$ esetében a $Tl(DOTA)^-$ komplex képződése viszonylag gyors, a rendszer percek alatt eléri az egyensúlyt. Ezt tudva, oldatban egyszerűen előállítható a makrociklusos vegyület.

Előállítottunk szilárd $NaTl(DOTA)$ -t több úton is elfogadható kitermeléssel, a röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás még nem fejeződött be.

A $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ kölcsönhatása citráttal**Hüse Dániel, II. évf. vegyészmérnök BSc**

DE TEK Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: **Dr. Buglyó Péter** egyetemi docens
DE TEK Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Jelenleg intenzív kutatás folyik olyan gyógyszerek kifejlesztésére, melyek hatásosan alkalmazhatók daganatos betegségek kezelésére. Ezek közül egy fontos területet jelenthetnek az átmenetifém komplexek alkalmazásai; egyes Ru(III) vegyületek már a klinikai kipróbálás I. fázisában vannak. Újabb kutatások keretében fémorganikus Ru(II) komplexeket vizsgálunk. Ezek a vegyületek a szervezetbe bejutva számos kis és nagy biomolekulával léphetnek kölcsönhatásba.

A citromsav is egy ilyen jelentős kelátképző kismolekula a szervezetben, ezért munkám során a potenciálisan rákellenes hatású félszendvics ruténium(II) komplexek disszociációja során képződő $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ kölcsönhatását vizsgáltam citráttal. A rendszer minél alaposabb megismerése végett a $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ – citrát rendszert szilárd és oldatfázisban egyaránt vizsgáltam különféle módszerekkel. Szilárd fázisban röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálati módszert alkalmaztunk, míg oldatfázisban pH-potenciometriás, $^1\text{H-NMR}$ és ESI-MS méréseket végeztünk.

A pH-potenciometriás mérések eredményeit kiértékelve meghatároztuk a $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})]^{2+}$ – citrát rendszerben képződő komplexek összetételét és stabilitási szorzat értékeit. A kapott modell háromféle, 1:1 összetételű, de eltérő protonáltságú részecske keletkezését támasztja alá. A savas pH-n kialakuló $[\text{MAH}]$ összetételű komplexnél (COO^- , COO^-) koordinációt feltételezünk. Ebből alakul ki a harmadik karboxilcsoport deprotonálódásával az $[\text{MA}]^-$ részecske, amelynél (COO^- , COO^- , COO^-) kötésmód valószínűsíthető. Az $[\text{MAH}_1]^{2-}$ az alkoholos hidroxilcsoport deprotonálódásával jön létre, ami egy (COO^- , COO^- , O) koordinációjú komplexet eredményez. Erről a részecskéről azt állapítottuk meg, hogy stabil és pH ~ 10-ig a fémion jelentősebb hidrolízisét is meggátolja vizes oldatokban. A $^1\text{H-NMR}$ és ESI-MS vizsgálatok eredményei is alátámasztották a pH-potenciometriás modellt.

A fémion és a citrátion reakciójában képződő szilárd, 1:1 összetételű komplexből sikerült egykristályt növesztenünk és szerkezetét röntgendiffrakciós módszerrel meghatároztunk. A semleges molekulában a ligandum (COO^- , COO^- , OH) donoratomokon keresztül koordinálódik, miközben a harmadik karboxilcsoport protonált formában van jelen.

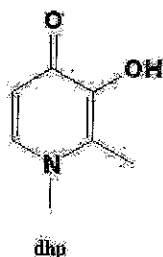
A vanadát(V)-dhp komplexek egyensúlyi vizsgálata

Kozma Károly, II. évf. kémia BSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Jakusch Tamás egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az elmúlt évtizedekben a vanádiumvegyületek inzulinutánczó tulajdonságát számos kutatócsoport vizsgálta. Bár a hatásmechanizmus nem ismert, a vanádiumnak elsősorban a +4-es és a +5-ös oxidációs állapotú komplexeiről feltételezhető, hogy alkalmazhatóak lesznek szájon át szedhető gyógyszerként a jövőben. A komplexekben a vanádium az aktív rész, a ligandum csak hordozó szerepet lát el, többek között valószínűsíthetően segíti a felszívódást. A ligandumok közül a bidentát vegyületeket vizsgálták nagy számban, mint például a maltolt, az etilmaltolt vagy a dhp-t (1,2-dimetil-3-hidroxi-4(1H)-piridinon), a koordinatív kötés a vanádium és az egyszeresen deprotonált ligandum oxigénjei között jön létre.



Mind a vanádium(IV)- [1] mind a vanadát(V)-dhp [2],[3] egyensúlyi rendszereket részletesen vizsgálták, ennek ellenére az utóbbi két közleményben azonban pl. hibásan számolt látszólagos stabilitási állandókat közöltek a vanadát(V)-dhp komplexekre, és számos esetben az ^{51}V -NMR spektrumokon megjelenő csúcsokat sem azonosították.

A pH-potenciometriás titrálás mellett ^{51}V -NMR spektroszkópiai módszert használtunk az egyensúly követésére. A vizsgált oldatokban a domináns részecskék a következő

mono- és biszkomplexek voltak: $[\text{VO}_2\text{OH}(\text{dhp})]$, $\text{VO}_2(\text{dhp})(\text{H}_2\text{O})_x$, illetve $[\text{VO}_2(\text{dhp})_2]$, $\text{VO}(\text{OH})(\text{dhp})_2$, és $[\text{VO}(\text{dhp})_2]^+$, melyeknek mindkét módszerrel meghatároztuk a stabilitási állandóit. Sikerült azonosítani új részecskéket is, három dimert, pl. a $[(\text{VO}_2(\text{dhp}))_2(\text{OH})]^-$ összetételűt, egy trimert, valamint egy $[\text{V}(\text{OH})(\text{dhp})_3]^+$ szerkezetű triszkomplexet is a savas pH-tartományban. A $[\text{VO}_2(\text{dhp})_2]^-$ káliumsójából egykristályt is növesztettünk, szerkezetét röntgendiffrakciós méréssel határozták meg.

[1] P. Buglyó, T. Kiss, E. Kiss, D. Sanna, E. Garribba, G. Micera, J. Chem. Soc., Dalton Trans., 2002, 2275-2282

[2] M. M. C. A. Castro, F. Avecilla, C. F. G. C. Geraldes, B. de Castro, M. Rangel, Inorg. Chim. Acta, 2003, 356, 142-154

[3] F. Avecilla, C. F. G. C. Geraldes, M. M. C. A. Castro, Eur. J. Inorg. Chem., 2001, 3135-3142

Hidroxil-amin alapú ligandumok Mo(VI)- és U(VI)-komplexeinek egyensúlyi vizsgálata

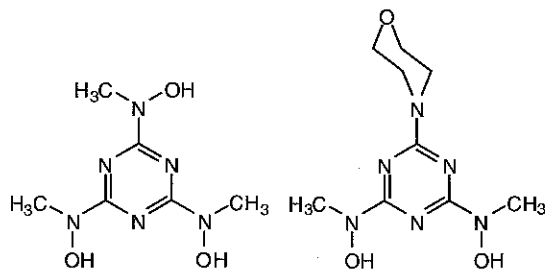
Oncsik Tamás, I. évf. Vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Jakusch Tamás egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Az SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszéke és a görög University of Ioannina-val való együttműködés keretein belül vizsgálták a két hidroxil-amin alapú ligandum vanadátkomplexeit. A két vegyület komplexkémiai viselkedése rendkívül hasonlatos, mindkettő a pH 2-12 tartományban nagy hidrolitikus stabilitással rendelkező komplexeket alkot (O, N, O) tridentát típusú koordinációval, mely két deprotonált hidroxil-amin-O-atom és a közbelső triazin-N-atom révén valósul meg.

Munkám során a VO_2^+ ionhoz hasonlóan dioxidó kationos formában is létező, bár ekkor kétpozitív töltésű Mo(VI)- és U(VI)-ionok az ábrán látható ligandumokkal alkotott komplexeinek vizes oldatbeli egyensúlyi viszonyait vizsgáltuk. Három módszert alkalmaztunk; pH-potenciometriát, UV-VIS spektroszkópiát valamint $^1\text{H-NMR}$ spektroszkópiát. Meghatároztuk a képződő komplexek összetételét, és stabilitási állandóit.



A két ligandum: a H_2thy és a Hbhy

A Mo(VI) ionokkal kizárólag a pH 2-6 tartományban képződik a vanadátnál megfigyelt (O, N, O) tridentát típusú koordinációval rendelkező monokomplex, amely a Hbhy esetében valószínűleg az oldalláncok kölcsönhatása miatt dimerizálódik.

Az U(VI) esetében nemcsak mono-, de a bidentát típusú koordináció következtében biszkomplexek is létrejönnek, melyek protonáltsági állapota rendkívüli tág határok között változhat.

A V(V) ionnal ellentétben ligandumok analitikai alkalmazási lehetőségei Mo(VI)- és U(VI)-ionokkal korlátozottak.

**Neodímiumion síkon kívüli porfirin-komplexének képződése,
fotofizikai és fotokémiai vizsgálata vizes közegben****Szentgyörgyi Csanád, III. évf. vegyészmérnöki BSc**

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Valicsek Zsolt** egyetemi adjunktus
Dr. Horváth Ottó intézetvezető egyetemi tanár
PE Kémia Intézet, Általános és Szeretlen Kémia Intézeti Tanszék

A Nap sugárzó energiáját a fotoszintézis során porfirin-származékok kötik meg és használják fel oxigén és szerves anyagok előállításában. A porfirin összetett vegyület, amelyben négy pirrolt kapcsolnak össze metilidin-hidak, így kialakítva egy gyűrűs molekulát konjugált π -elektronrendszerrel. Középső üregébe a négy nitrogénhez fémionok koordinálódhatnak. A természetben leggyakrabban vas- és magnéziumion fordul elő központi atomként.

Emellett kutatások indultak olyan fémionok körében, mint a lantanoidák, melyek nagyobb méretük következtében nem tudnak beilleszkedni a gyűrűbe, ezért arra „ráülnek” SAT („sitting-atop”) vagy síkon-kívüli komplexet képezve. Ebből az egyszerű szerkezetből a ligandum torzulása és a fémion magas koordinációs száma révén többmagvú szendvicsszerkezetek alakulhatnak ki. Emellett a lantanoida-kontrakció még lehetőséget kínál a fémion pozíciójának hangolására a ligandumhoz képest, és a különböző jellemzők ebből adódó változásának vizsgálatára.

A SAT komplexekben fény hatására töltésszeparáció valósul meg, és a redukált fémion nem képes komplexben maradni, így az oldatba erős redukáló ágensként kerülve olyan reakciókat iniciálhat, melyek normál körülmények között nem játszódna le. Így ezen metallo-porfirinek katalizátorként is alkalmazhatók, mert megfelelő regenerálószerrel a kialakuló porfirinyökök is visszaalakítható.

Kutatásaim során neodímium-komplexekkel foglalkoztam, és ezen eredményeket vettem össze a korábbi, cériumionnal végzett kísérleteim tapasztalataival. A komplex kialakulásának kinetikáját két hőmérsékleten és két különböző közegben vizsgáltam, melyek pufferáló - ionerősség-szabályozó szerepük mellett a metallo-porfirin kialakulását, illetve a fémion oligomerizációs hajlamát is befolyásolják. A komplex kialakulása spektrofotometriásan követhető. Az elnyelési színeképek változását figyelve információt kapunk a folyamatos koncentrációeloszlás-változásról, így nyomon követhető a folyamatos átalakulás, és számolható a komplex stabilitása, képződésének sebességi állandója. A fotofizikai és fotokémiai kísérletek követése is spektrofotometriásan történik, így megfigyelhető a fém-porfirin fénykissugárzása, illetve fotoindukált disszociációja és gyűrűszakadása .

Toxikus fémionok eltávolításában potenciálisan felhasználható dodekaeptid kölcsönhatása higany(II)ionokkal

Angyal Anikó, III. évf. kémia BSc

Szunyogh Dániel Mihály, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Jancsó Attila egyetemi adjunktus
Dr. Gyurcsik Béla egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A környezetünkbe kerülő toxikus fémionok eltávolításának egy ígéretes, új lehetősége a szennyezett területek bioremediációja, amely olyan mikroorganizmusok (baktériumok, gombák) alkalmazásán alapul, melyek bioszorpcióval vagy egyéb módon kivonják a szennyezett talajokból vagy vizekből a fémionokat. Ha egy adott fémkötő fehérje génjének baktériumba juttatásával a fehérje túltermelését biztosítjuk, az megnövelheti a sejt toxikus fémion(ok)al szembeni tűrőképességét, illetve elősegítheti a fémion(ok) akkumulációját a sejtben [1]. A munkánk célkitűzése higany(II)ionok megkötésére alkalmas rövid oligopeptid(ek) tervezése/előállítás és a fémionnal való kölcsönhatásának jellemzése, illetve az ezen peptidszekvencia(k) biokémiai úton való túltermeltetése baktériumokban fúziós fehérjék formájában. Utóbbi célunk a vizsgált peptidszekvenciát kódoló gén DNS hordozóba (vektor) való beépítése és baktériumba juttatása révén valósítható meg.

Egy, a MerR fémionszabályzó fehérjék családjába tartozó, CueR fehérje fémionkötő szakaszának [2] alapján megterveztük az ábrán bemutatott négy szekvenciát és előállítottuk a PS ligandumot.

PP = S C P G D Q G S D C P I	}	V cholerae CueR
PS = S C P G D Q G S D C S I		A tervezett
HS = S C H G D Q G S D C S I		mutáns
HP = S C H G D Q G S D C P I		szekvenciák

Vizsgálataink (pH-metria, UV-, SRCD, ESI-MS, NMR- és PAC spektroszkópia) eredményei a Hg²⁺-ion és a peptid közötti rendkívül erős kölcsönhatást mutatták, a komplexképződés már pH 2 alatt teljes mértékben végbemegy. A ligandum Hg²⁺-kötésének erősségét ligandum-kompetíciós vizsgálatokkal (jodidionok segítségével), UV-spektroszkópia alkalmazásával jellemeztük. A PS szekvencia baktériumokkal való túltermeltetése GST-fúziós fehérje formájában történik.

[1] M. Mejára, L. Bülow, Trends Biotechnol., 19 (2), 67-73 (2001)

[2] A. Changela, K. Chen, Y. Xue, J. Holschen, C.E. Outten, T.V. O'Halloran, A. Mondragón, Science, 301, 1383-1387 (2003)

Kalcium komplexek stabilitási állandójának meghatározása oldhatósági mérések alapján

Tasi Ágost Gyula, II. évf. kémia BSc

SZTE Temészettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Sipos Pál és Dr. Pálinkó István
SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A vizes oldatokban képződő komplexek stabilitási állandójának egyik lehetséges meghatározási módja az oldat és egy vele egyensúlyban lévő szilárd kristályos anyag vizsgálatán alapul. Ha a szilárdfázis összetételét ismerjük, és az oldatfázis egyensúlyi koncentrációját mind komplexképző ligandum jelenlétében, mind ligandummentes rendszerben meghatározzuk, akkor a koncentrációkülönbségekből az oldatban lévő komplexek összetétele és egyensúlyi állandója kiszámítható.

Munkánk során először házilag egy olyan oldhatóság meghatározására alkalmas berendezést terveztünk, építettünk és teszteltünk, amelyben (i) a hőmérsékletet nagy pontossággal állandó (± 0.01 °C), és széles tartományban (5 – 80 °C) szabályozható; (ii) párhuzamosan 15 oldat szabályozott sebességű (lassú) kevertetése lehetséges, és (iii) agresszív (pl. erősen lúgos vagy korrozív) reakcióelegyek vizsgálatára is alkalmas. A berendezés teszteléséhez a tájékozódó méréseket $\text{Ca}(\text{OOC})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ -val végezték el. Ennek folytatásaként diákköri munkám során először $\text{Ca}(\text{OH})_2$ egyensúlyi oldhatóságát határoztam meg 25.00 ± 0.01 °C-on, 0.5 M – 3 M koncentrációjú NaOH-oldatokban. A szilárd fázis összetételét XRD mérésekkel ellenőriztem és megállapítottam, hogy az általunk alkalmazott reakciókörülmények között az oldatok $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -dal (és nem az eredetileg az oldathoz adott, kihevített CaO-dal illetve a még elvben lehetséges, de ki nem mutatható CaCO_3 -tal) kerülnek egyensúlyba. Az oldatok Ca(II)-tartalmát ICP-AES módszerrel határoztuk meg, amiből kiszámítottuk a $\text{Ca}(\text{OH})_2$ egyensúlyi oldhatóságát és megállapítottuk, hogy az általunk kapott és mások által az irodalomban közölt adatok (*Powder Technology*, **123**, 2002, 33) között szisztematikus eltérés mutatható ki. Az oldhatóság $[\text{OH}^-]$ függése alapján meghatároztuk a $\text{Ca}(\text{OH})_2$ oldhatósági szorzatát és a CaOH^+ hidroxokomplex képződési állandóját is, amelyek jó egyezést mutattak független irodalmi adatokkal. Végül előkísérleteket folytattunk néhány, a cementgyártásban használatos cukor-karboxilát típusú ligandum lúgos közegben képződő Ca(II) komplexe stabilitási állandójának meghatározására is.

Hisztidintartalmú peptidok és fémkomplexeik a mikroállandók tükrében

Tóth Eszter, III. kémia BSc

SZTE Temészettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Gyurcsik Béla** egyetemi adjunktus
SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A természetes fehérjék és fémionok rendszereinek oldategyensúlyi vizsgálata számos gyakorlati akadályba ütközik. Előállításuk vagy izolálásuk természetes rendszerekből nehézkes, nagy molekulatömegük miatt csak kis moláris koncentrációjú oldatok készíthetők. A protonálható, illetve fémionok megkötésére alkalmas aminosavak nagy száma pedig a mérési eredmények kiértékelését bonyolítja meg. Ezen okok miatt a kisebb méretű oligopeptideket előszeretettel alkalmazzák a metalloproteinek és metalloenzimek termodinamikai, szerkezeti és funkcionális modellezésére.

A hisztidin számos fehérje fémionkötő helyén megtalálható. E fehérjék modellezése hisztidintartalmú peptidok és fémionok kölcsönhatásán keresztül lehetőséget teremtett arra, hogy jobban megértsük pl. olyan neurodegeneratív betegségek kialakulását mint a prion betegségek vagy az Alzheimer-kór, de enzimek mesterséges modelljei is előállíthatók (pl. Cu,Zn-SOD és egyéb redoxi, illetve nukleáz enzimek).

A peptidok vizsgálata során szintén számos probléma merülhet fel. Egyrészt a fémion-indukálta amid-deprotonálódás (réz(II)), másrészt a fémionok hidrolízise (cink(II)) is gyakori a peptidok jelenlétében, míg a fehérjék fémkomplexeire e folyamatok nem jellemzőek. Több hisztidint tartalmazó, alkalmasan megválasztott szekvenciájú peptidokkal ez elkerülhető, ám itt a donorcsoportok nagy száma miatt szinte minden esetben kötési izomerek kialakulásával kell számolni, ami miatt a mérési eredmények molekuláris szinten történő értelmezése komoly kihívást jelent. Az irodalomban többször is előfordul, hogy a peptidok, illetve a komplexek makroszkópikus protonálódási állandók értékei, illetve ezek összehasonlítása alapján következtetéseket vonnak le a komplexek kötémódjára nézve. A makroállandók azonban nem rendelkeznek adott funkciós csoport protonálódási folyamatához, mikroállandókat pedig csak a legegyszerűbb esetekben tudunk meghatározni. A fentiekből kiindulva egyszerűsített módszerrel számolt új típusú állandót vezettünk be, és vizsgáltuk meg alkalmazhatóságát nagyszámú irodalmi adatra. Egy már ismert rendszer esetében pH metria, cirkuláris dikroizmus és ESR spektroszkópia alkalmazásával egyértelmű kerestünk az izomerek képződésére, és megkíséreltük azok egyensúlyi viszonyait meghatározni.

**Klórpropilezett szilikagélen kovalens kötéssel immobilizált Co^{2+} -
védett aminosav komplexek szintézise és szerkezetvizsgálata**

Varga Gábor, III. évf. kémia BSc

SZTE Szerves Kémia Tanszék

Témavezető: **Dr. Kiss T. János** egyetemi docens
SZTE Szerves Kémia Tanszék

Munkám célja olyan komplexek előállítása volt, amelyek aktivitása és szelektivitása összevethető a fémion kofaktort tartalmazó elektrontranszfer sajátságú enzimekével, azonban szélesebb hőmérséklet- és pH tartományban is használhatók. Fontos szempont, hogy a katalizátor visszanyerhető és többször felhasználható legyen. A megoldást a komplexek szilárd felülethez kötése jelentheti.

Munkám során kobalt-védett aminosav komplexeket rögzítettem kovalens kötéssel, módosított szilikagélen. A szilikagél, mint hordozó a fehérjeváz utánzására is szolgál [1]. Először a megfelelően védett aminosavakat kötöttem a felületre. A reakciók az N-védett aminosavak esetén észterképződéssel, a C-védetteknel pedig N-alkilezéshez hasonló folyamattal mentek végbe. Az aminosavak felületre kötését követően a fémion-aminosav komplexek kialakítását végeztem el, ligandumban szegény (csak felületen kötött aminosav-származékok vehettek részt a komplexképződésben) és ligandumban gazdag (a szintéziselegy tartalmazott felületre nem kötött aminosav-származékokat is) körülmények között.

A szintézisen kívül feladatomban volt a létrehozott rendszerek szerkezetvizsgálata is. Ezen célra a komplexeket az infravörös spektroszkópia módszerével vizsgáltam, diffúz reflexiós méréstechnikával. A spektrumokat elemeztem, a megfelelő felületen nem kötött védett aminosavak színképeivel összehasonlítottam, és így valószínűsítettem az adott koordinációs szférát. Az IR spektroszkópiai vizsgálatok azt mutatták, hogy a fémion-aminosav komplexek előállítása minden esetben sikeres volt.

Feladatomban volt még a kialakított komplexek szuperoxid dizmutáz (SOD)-aktivitásának vizsgálata is, erre a Fridovich-Beauchamp tesztreakciót használtam, a reakciót UV-VIS spektrofotométerrel követtem. Minden szintetizált anyag mutatott SOD aktivitást. Némelyik egészen kiemelkedőt, reményt nyújtva arra, hogy alkalmazható lesz egyéb, például finomkemikáliákat előállítását célzó elektrontranszfer reakciókban, az enzimreakcióknál szigorúbb körülmények (szerves oldószer, magasabb hőmérséklet, atmoszféránál nagyobb nyomás) között is.

[1] J. Kirby, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 35 (1996) 706

Az antitumor hatású Triapin és származékainak átmenetifém-ionokkal képzett komplexekének összehasonlító oldategyensúlyi vizsgálata

Zsigó Éva, II. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Enyedy Éva Anna egyetemi adjunktus
SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A klinikai fázis II-ben lévő rákellenes hatású α -N-heterociklusos tiószemikarbazon (TSK) kemoterapiás gyógyszermolekula, a Triapin és két N-terminálisan dimetilált származéka (PTSC, APTSC) kölcsönhatását vizsgáltuk réz(II), cink(II) és vas(II)-ionokkal vizes fázisban. A biológiai aktivitás alapja a ribonukleotid reduktáz enzim inhibíciója és nemcsak a ligandumok, hanem azok fémkomplexei is hatásosak. Az α -N-heterociklusos TSK vegyületek fémkomplexeikben elsősorban háromfogú ligandumként (N,N,S) donoratomokon keresztül koordinálódnak.

A ligandumok deprotonálódási folyamatait és kétértékű átmenetifém-ionokkal (Cu, Zn, Fe) való komplexképzését pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás, ESR, ^1H NMR és ESI-MS módszerekkel követtük nyomon 30% dmsó/víz elegyben. Meghatároztuk a savi disszociációs állandókat és a különböző protonáltsági fokú részecskékhez (H_2L^+ , HL, L) tartozó egyedi UV-látható spektrumokat, valamint a képződő fémkomplexek összetételét, stabilitási állandóit és a legvalószínűbb kötésmódokat.

Legfontosabb eredményeink:

Mono- ($[\text{MLH}]^{2+}$, $[\text{ML}]^+$, $[\text{ML}(\text{OH})]$, $[\text{ML}(\text{OH})_2]^-$) és *bisz-* ligandum ($[\text{ML}_2\text{H}]^+$, $[\text{ML}_2]$, $[\text{ML}_2(\text{OH})]^-$) komplexek képződnek a vizsgált rendszerekben. A Cu(II) esetén egy kétmagvú $[\text{Cu}_2\text{L}_3]^+$ összetételű részecske képződését is sikerült igazolnunk az ESI-MS és ESR mérések alapján. A dimetil származékok hatásosabb fémmegkötők, mint az alap Triapin molekula. Mindhárom ligandum a cinkionnal képi a legkisebb stabilitású komplexeket, míg a vas(II)-komplexek stabilitása valamivel meghaladja a rézkomplexek stabilitását.

A kapott stabilitási állandók segítségével különböző koncentrációeloszlási görbéket számoltunk, melyek alapján megállapítottuk, hogy a fiziológias pH tartományban a cink(II)-, és vas(II)ionokkal elsősorban a semleges *bisz-* ligandum $[\text{ML}_2]$ komplexek, míg a réz(II) esetén a $[\text{Cu}_2\text{L}_3]^+$ komplex képződése a kedvezményezett. Ugyanakkor a biológiailag aktív koncentráció tartományban (μM) jelentős a *mono* komplex jelenléte is.

Környezeti kémia és környezettan tagozat

ZVI tartalmú rendszerek remediációs hasznosításai**Antal Péter**, II évfolyam, biológus MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Kesserű Péter osztályvezető

Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közalapítvány Biotechnológiai Intézet

Az *in situ* abiotikus remediációs eljárások egyre terjedő módja a zéró valent vas (ZVI) barrier zónákban történő alkalmazása. A ZVI technológia redukív erejének fokozására alapuló újszerű eljárásokban nano méretű zero valent vas szuszpenziókat használnak (NZVI), bár a technológia költséges és fokozott redukтивitása miatt toxikus az élő környezetre.

A felületnövelés egy másik lehetséges módja ZVI gélek alkalmazása. Munkám során az általunk kifejlesztett speciális vasgél (ZVIG) redukív hatékonyságát vizsgáltam különböző abiotikus és biotikus tesztrendszerekben. A ZVIG technológia redukív képességét kezdetben abiotikus nitrát redukcióval vizsgáltuk. A gél felületnövelő hatásának köszönhetően az oldatban jelenlévő 113 mg/l-nyi nitrát-N 18,8 %-a NH₃-N-né alakult, míg azonos mennyiségű ZVI-t tartalmazó kontroll rendszerekben (natív vas és vaspor) a redukció csak 0,1 és 1,2 %-osnak volt mérhető 48 óra alatt. A nitrát redukációs képesség nyomon követését oszlopreaktorokkal is elvégeztük, mely során az alkalmazott vasgél és vaspor redukációs profiljainak eltérését tapasztaltuk.

Mivel a ZVI eljárásokat főleg halogénezett szennyezőanyagok ártalmatlanítására használják, vizsgáltuk a ZVIG redukív hatékonyságát különféle klórozott szénvegyületek degradációjával kapcsolatban abiotikus és biológiai rendszerekben. A legnagyobb katalitikus aktivitást mutató ZVIG rendszer az oldatban jelen lévő metolaklór (8,4 mg/l) 94 %-áról volt képes a halogént a GC-ECD mérés eredményei alapján leválasztani 24 óra alatt. Az említett metolaklór mellett szintén vizsgáltuk a ZVIG atrazinra és triklór-eténre gyakorolt hatását is.

A ZVI rendszerek alkalmazhatósága szempontjából kiemelkedően fontos annak vizsgálata, hogy hogyan befolyásolják a mikrobiális életközösségeket. Ennek érdekében mikrokozmosz rendszerekben vizsgáltuk a ZVIG CO₂ termelésre és bakteriális populációra gyakorolt hatását.

A ZVIG rendszerek az abiotikus kísérletek során bizonyították a fokozott redukív erejüket, miközben a vizsgált mikroflórákra nem fejtettek ki toxikus hatást. Mindez kiválóan megalapozza alkalmazhatóságukat későbbi bioremediációs eljárások során.

A beltéri aeroszol jellemzése egy egyetemi előadóteremben**Dosztály Katinka, I. évf. vegyész MSc**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Salma Imre** egyetemi tanár
ELTE TTK Analitikai Kémiai Tanszék

Dolgozatomban az ELTE TTK Ortway-előadóteremben lévő, beltéri aeroszol vizsgálatával és kapcsolatrendszerének felderítésével foglalkoztam. 2010. április 8. és 15. között, a szorgalmi időszakban nagy időfelbontású méréseket végeztünk on-line műszerekkel a PM₁₀ méretfrakciójú aeroszol tömegkoncentrációja, a részecskeszám és méreteloszlás, a CO₂ koncentráció és alapvető meteorológiai jellemzők meghatározása céljából. A mérések mellett aeroszol mintákat is gyűjtöttünk. Jelen dolgozatomban az on-line adatok feldolgozásával, kiértékelésével és előzetes következmények megállapításával foglalkoztam.

Megállapítottam, hogy a PM₁₀ aeroszol tömegkoncentrációja 1,5 és 101 µg/m³ között változott 15,4 µg/m³ medián értékkel. Szignifikáns különbségeket tapasztaltam a munkanapok és munkaszüneti napok, illetve a terem zárt és nyitott állapota között. Adatainkat a kültérre vonatkozó, 24 órás egészségügyi határértékekhez (50 µg/m³) viszonyítottam. Megvizsgáltam a szellőzés hatását a koncentrációra, és megállapítottam, hogy a legnagyobb, sőt kiugróan nagy koncentrációk akkor alakultak ki, amikor a szellőző berendezés ki volt kapcsolva napközben. A részecskeszám koncentráció a 6–1000 nm mobilitásai átmérettartományban 1,34×10³ és 17,5×10³ cm⁻³ között változott 3,7×10³ cm⁻³ medián értékkel. Ezek az adatok jelentősen kisebbek a Budapest belvárosára jellemző tipikus szinteknél. Az ultrafinom részecskék (D_p<100 nm) átlagos járuléka és szórása a teljes részecske koncentrációkhoz (69±7)%, ami jelentősen kisebb a kültéri levegőben mért járuléknál. A különbség a szellőzéssel magyarázható. A CO₂ koncentrációja szintén jelentősen, 373 és 1374 ppm érték között ingadozott 393 ppm medián értékkel. Ezt az adatsort a teremben lévő személyek számának becslésére használtuk. A PM₁₀ és a CO₂ koncentrációk napi menetén azonos változások voltak megfigyelhetők, amelyek az előadások kezdetén és végén, intenzív helyváltoztatásokkal, valamint a teremben zajló tevékenységekkel kapcsolatosak. Legnagyobb értékek, az előadások közötti, rövidebb szünetekben fordulnak elő. A részecskeszám koncentrációja nem követte ezeket a napi meneteket, ami a részecskeszám eltérő forrástípusával magyarázható.

További terveim között szerepel az aeroszol minták kémiai analízise, az átlagos részecskeszám méreteloszlások meghatározása, és az adatok együttes értelmezése, valamint a fő forrástípusok meghatározása.

**Hulladéklerakóban alkalmazható polimer rendszerek fejlesztése
/Polimer hulladékok értéknövelő újrahasznosítása/****Fejős Márta**, II. évf. környezetmérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Bodzey Brigitta doktorjelölt
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Hulladéklerakók szabványos kialakítása számos műanyag elem alkalmazását igényli (pl. aljzat- és fedőszigetelés), amelyeknek komoly jogi és műszaki követelményeknek kell megfelelniük. Ugyanakkor felmerül a kérdés, hogy miért alkalmaznánk egy hulladéklerakóban primer alapanyagból gyártott geoműanyagokat, ha hulladékból is elő lehet állítani azokat? Kutatómunkám célja olyan - kommunális lerakókban alkalmazható – szigetelő (geomembrán), illetve szerkezeti elemek kifejlesztése, amelyek túlnyomórészt újrahasznosított anyagokat tartalmaznak. Egy hulladéklerakónál az öngyulladásból származó tüzeset gyakori jelenség, ezért kiemelkedő figyelmet fordítottam az égésgátlásra.

Nemzetközi és hazai kutatási pályázatok keretein belül aprított, és sűrűség szerint frakcionált autóiipari műanyag hulladék összetételét elemeztem, hogy megállapítsam, melyik frakció a legalkalmasabb anyagában történő hasznosításra. Ezt követően módosító adalékok alkalmazásával a geomembrán esetében a rugalmasságra, míg a szerkezeti elemnél a szilárdság növelésére törekedtem. Flexibilitás növelésére etilénvinil-acetát kopolimert és hulladék gumi őrleményt, mechanikai jellemzők (pl. rugalmassági modulus) növelésére pedig bazaltszál-hulladékot használtam. A geomembrán esetében egyrétegű rendszert alakítottam ki, míg a szerkezeti elemek fejlesztésénél többretegű rendszerrel értem el jobb eredményeket. Égésgátló adalékként poliuretán hulladékot tartalmazó felhabosodó rendszereket alkalmaztam.

Hulladékokban alkalmazható funkcionális polimer rendszerek kialakítása műanyag hulladékból megoldást jelenthet a polimer hulladék egyes frakcióinak értéknövelő újrahasznosítására.

**Gázfázisú illékony szerves vegyületek lebontása UV és látható
fényel megvilágított, rögzített titán-dioxid alapú
fotokatalizátorokon**

Gácsi Attila, I. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: **Dr. Mogyorósi Károly** tudományos munkatárs
Veréb Gábor Ph. D. hallgató
SZTE Szerzetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Napjainkban komoly környezeti probléma az illékony szerves vegyületek (VOCs – Volatile Organic Compounds) által okozott légszennyezés. A VOC kibocsátásának káros hatása például abban jelentkezik, hogy lényegesen nőtt a földközeli ózonkoncentráció (elsősorban a motorizáció, a vegyipar fejlődése következtében), aminek már a környezetre és az emberi szervezetre is egyértelműen káros hatása van. Bizonyos VOC vegyületek lehetnek továbbá rákkeltőek is, így a káros hatások csökkentése érdekében szükségessé vált ezen vegyületek ártalmatlanítása. Ennek megvalósítására az egyik megoldás lehet a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások alkalmazása. Ezek közül a heterogén fotokatalízis titán-dioxid alapú fotokatalizátorok alkalmazásával egy ígéretes megoldást szolgáltatathat.

E módszer alkalmazhatóságát vizsgáltam laboratóriumi körülmények között. Munkám során fotokatalizátorokat rögzítettem (immobilizáltam) a kutatócsoport által szintetizált, valamilyen fémes ill. nemfémes anyaggal adalékolt titán-dioxid fotokatalizátorok felhasználásával. Arannyal (Au/P25 TiO₂), ezüsttel (Ag/P25 TiO₂), nitrogénnel (TiO₂-N) dópolt, valamint kereskedelmi forgalomban kapható Kronos vlp7000 TiO₂-ot, referenciamérésekhez pedig Degussa P25, Aeroxide TiO₂ és Aldrich anatóz fotokatalizátorokat alkalmaztam. Ezeket a fotokatalizátorokat megfelelő körülmények között impregnációs technikával üveglapon illetve kerámiapapíron rögzítettem. Vizsgáltam a kiválasztott szerves vegyület (acetaldehid) adszorpcióját és UV, illetve látható fényel megvilágított fotokatalizátorokon bomlásának mértékét. A fotokatalízis hatékonyságát, az adszorpció és az oxidáció előrehaladtát a vizsgált anyag gázfázisbeli koncentrációváltozásának mérésével, gázkromatográfiásan követtem nyomon. A vizsgálatokat egy egyszerű reaktorban végeztem. Kísérleteim eredményei egyértelműen bizonyítják azt, hogy a felületen rögzített titán-dioxid fotokatalizátorok alkalmasak gázfázisú szerves szennyezők ártalmatlanítására.

Állati hulladékok feldolgoása során keletkező szennyvizek tisztíthatóságának vizsgálata

Gulyás Gábor, I. évf. környezetmérnök MSc

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kárpáti Árpád** egyetemi docens
PE Környezetmérnöki Intézet
Fazekas Bence Egyetemi tanársegéd
PE Környezetmérnöki Intézet

Környezetünk védelme az elmúlt két évtizedben meghatározó szerephez jutott, melynek eredménye, hogy minden beruházásnál, gyártási folyamatnál, technológiánál alapvető követelmény a természeti értékek, erőforrások, illetve az emberi egészség védelme, és a környezeti rendszerek zavartalan működésének fenntartása.

Ezen belül is, talán az egyik legfontosabb terület a szennyvíztisztítás. A tudomány fejlődésének köszönhetően mára már olyan technológiákat, rendszereket fejlesztettek ki a szennyvizek megtisztítására, melyek nagy biztonsággal garantálják a befogadók, és ezen keresztül az egész természet védelmét.

Dolgozatomban ipari szennyvizek tisztíthatóságát vizsgálom különböző körülmények között. Az ilyen szennyvizek összetétele és szennyezettsége jelentősen eltér a lakossági szennyvizekétől. Az állati hulladékok feldolgoása során keletkező szennyvizek tisztíthatóságáról eddig csak néhány dolgozat született. Mivel azonban a tetemek elszállítása, kezelése és ártalmatlanítása mára gyakorlattá vált, fontosnak tartottuk egy ilyen kísérleti rendszer felállítását és az általunk elért eredmények megosztását.

A laboratóriumi körülmények között négy teljesen azonos, automata vezérlésű reaktor folyamatos üzemeltetésével a tisztítási hatékonyság változását vizsgáltam különböző üzemeltetési hőmérséklet esetén. A feladott szennyvíz összetétele és mennyisége minden esetben megegyezett, így a vizsgálati paraméter hatását el tudtam különíteni. Az elfolyó tisztított vizek minőségét rendszeresen vizsgáltam annak érdekében, hogy információkat kapjak a tisztítási hatékonyságról, illetve arról, hogy melyek azok az optimális körülmények, amelyek mellett a legnagyobb mértékű tisztítás tapasztalható.

Amennyiben a kísérletek eredményesen zajlanak, tervezzük az említett szennyvizek tisztíthatóságának vizsgálatát egyéb körülmények között is.

Toxikus elemek eltávolítása vizekből biotechnológiai úton**Kozmér Zsuzsanna, III. évf. kémia BSc**

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Gyurcsik Béla egyetemi adjunktus
SZTE Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Mindannyiunk számára fontos ivóvizeink megfelelő minősége, amihez hozzátartozik az abban jelenlévő toxikus elemek ionjainak minimális, vagy legalábbis a megengedett határérték alatti szinten tartása. Ilyen toxikus hatású pl. az As(III), illetve As(V). Bár az előbbi mérgező hatása nagyobb, az ivóvízben a teljes As-koncentráció az EU szabályok szerint nem haladhatja meg a 10 µg/liter határértéket. Magyarországon leginkább a Dél-alföldi térség talajvize tartalmaz ezen értéknél nagyobb koncentrációban arzént. A Hg(II)-re a határérték 1,0 µg/liter, a Cd(II)-re 5,0 µg/liter. Ezen ionok biológiai hatásukat többek között a fehérjék kéntartalmú donorcsoportjaihoz kötődve fejtik ki a létfontosságú fémionokkal szemben hatékonyan versengve. E mérgezések elkerülése érdekében fontos nemcsak az ivó-, hanem a talaj-, a felszíni és az ásványvizek ellenőrzése, és szükség esetén tisztítása.

Az előbbieken felsorolt toxikus ionok vizekből való eltávolítására munkám során egy új módszert próbáltam ki módosított baktériumok segítségével. A baktériumokba olyan tervezett gént juttattam, mely a belőle képződő fehérje C-terminális végéhez egy 24-tagú peptidet fűz hozzá. Ez utóbbi (L7) peptid két, egymáshoz közeli ciszteint, illetve ezek oldalláncaiban S-donoratomokat tartalmaz, ezáltal fémionok megkötésére lehet képes.

Kísérleteim során a megfelelő körülmények között tápoldatban szaporított, módosított baktériumok toxikus ionokkal történő mérgezését vizsgáltam As(III), Hg(II), illetve Cd(II) jelenlétében. Spektrofotometriával követtem a baktériumok szaporodási képességét a hozzájuk adott ion koncentrációja és az idő függvényében, valamint méréseket végeztem a baktériumokban akkumulált, illetve a tápoldatban maradt ionok mennyiségének meghatározása céljából ICP-AES módszerrel. A mérések azt mutatták, hogy a Hg(II)-ion hatása a legnegatívabb a három ion közül, ugyanis e mintákban a baktériumok már kis koncentrációjú mérgezőanyag hatására pusztulni kezdtek, míg a többi mintában a szaporodás zavartalannak tűnt. TDK munkámban a fenti eredményeket összegeztem és értelmeztem.

[1] D.K. Nordstorm, *Science*, 296, 2144-2146 (2002)

[2] 201/2001.(X.25.) számú kormányrendelet az ivóvíz minőségi követelményeiről és az ellenőrzés rendjéről

A légköri humusszerű anyag kiralitása és eredete**Mészáros Tímea, II. évf. vegyész MSc**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Salma Imre** egyetemi tanár
ELTE TTK Analitikai Kémiai Tanszék

Vízoldható szerves vegyületeket tartalmazó finom méretű aeroszol részecskék fontos szerepet játszhatnak a Föld energiamérlegében. Közülük a légköri humusszerű anyagok (HULIS) csoportja az egyik legjelentősebb összetevő. Éghajlati szerepük ellenére a HULIS keletkezési mechanizmusairól kevés ismerettel rendelkezünk. Az elképzelések között szerepel a biomassa termikus degradációjából származó, közvetlen emisszió. HULIS keletkezhet a levegőben gázok kémiai reakciói és a termékek oligomerizációja révén. Erdős környezetben terpének, míg városokban elsősorban az aromás szénhidrogének játszhatnak szerepet. A cellulóz mint a biomassa fő anyaga optikailag aktív. Erdős területeken megfigyelték a legnagyobb mennyiségben lévő terpén, az α -pinén egyik enantiomerjének kismértékű dúsulását, tehát a belőle keletkező HULIS gyenge optikai aktivitással rendelkezhet. A városokban lezajló légköri reakciók azonban tipikusan racém elegyeket hoznak létre. Az optikai aktivitás tanulmányozása tehát lehetőséget adhat a keletkezési mechanizmusokba való betekintésbe is.

Munkám során városi környezetben, vidéki háttérben és az Amazonas medencében trópusi biomassa égetéskor gyűjtött, $PM_{2.5}$ méretfrakciójú aeroszol mintákból vízoldható szerves szén (WSOC) és HULIS-t izoláltam. A kapott mintákat teljes szerves szén analizátorral, továbbá elektromos és rezgési cirkuláris dikroizmus (ECD és VCD) spektroszkópiával vizsgáltam. Megállapítottuk, hogy a HULIS légköri koncentrációja vidéki háttérhelyen $1,7$, városban $2,2 \mu\text{g m}^{-3}$ volt, míg biomassa égetés során elérte az $52 \mu\text{g m}^{-3}$ értéket. A HULIS széntartalma 35 , 48 és 70% -kal járult hozzá a WSOC mennyiségéhez vidéki, városi és biomassa égetésből származó minták esetében. Meghatároztuk a szerves anyag/szerves szén tömegkonverziós tényezőt biomassa égetésből származó HULIS esetében, és 2.04 ± 0.06 átlagértéket és szórást kaptunk. Az ECD spektrumban a városi mintánál gyakorlatilag az alapvonalat mértük, a vidéki mintánál nagyon gyenge jelet kaptunk, míg a biomassa égetésből származó HULIS és a standard fulvósav esetén nem mutatkozott effektus. A VCD spektrumokban a városi és vidéki minták nem mértünk optikai aktivitást, a biomassa égetésből származó HULIS spektrumában azonban nagy negatív sávot kaptunk. A kapott eredmények arra utalnak, hogy a biomassa égetésből származó HULIS jobban hasonlít a fulvósavra, mint a másik két típusú HULIS-ra. Mindez összefüggésben áll hasonló eredetükkel: a biomassa termikus degradációjával, illetve anaerob biodegradációjával.

Egy újabb fémkor hajnalán**Miczán Vivien**, II. évf. molekuláris bionika BSc

PPKE Információs Technológiai Kar

Témavezetők: **Dr. Bondár Elek** nyugalmazott középiskolai tanár
Váci Mihály Gimnázium, Szakközépiskola és Kollégium
Görgei-Sirilo Lívía középiskolai tanár
Váci Mihály Gimnázium, Szakközépiskola és Kollégium

Környezetünkben egyre inkább növekszik a fémtárgyak száma, ezzel párhuzamosan az antropogén hatásoknak hála növekszik a vizek, a levegő, s így a bioakkumuláció révén az élőlények fémtartalma is. A biogén elemek szükségesek a szervezet működéséhez (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , nyomelemek, stb.), ám például a nehézfémek (Pb, Hg, Ni) kifejezetten károsak lehetnek, enyhébb esetben allergiás reakciókat, súlyosabb esetben mérgezést indukálhatnak.

Ezen allergiás és toxikus reakciók mechanizmusa és okai még nem teljesen tisztázottak. Dolgozatomban megkísérlem körüljárni a fémallergia kialakulásának lehetséges okait, ehhez a hazai és nemzetközi szakirodalmat valamint egy saját felmérést hívok segítségül. Ezen kívül modellezni kívánom az embereket érő környezeti fémterhelést is, tehát a tápcsatormán, a légzőszervrendszeren illetve a bőrön keresztül való szervezetbe jutást.

Korábban már vizsgáltam egyes biogén fémek koncentrációváltozásait a levegőben harmatvizsgálatok segítségével. Most ezen vizsgálódást terjesztettem ki néhány allergén nehézfémre is, (pl. katalizátorfémekre, mint a nikkel, platina, ólom stb.), ennek keretén belül csapadék- és ülepedő pormintákat véve a Miskolci Egyetemen HPLC módszerrel, illetve atomabszorpciós spektrofotométerrel mértük az adott minták fémtartalmát.

A környezeti terhelést szerettem volna tanulmányozni, ezért egymástól eltérő jellegzetességet pl. különböző közúti terhelést, eltérő domborzatot, esetlegesen eltérő agrokultúrát mutató mintavételi helyeken gyűjtöttem vizsgálati adataimat.

Állati szövetekkel végzett inkubációs kísérletekben megfigyeltem az adszorpciós és diffúziós folyamatokat, amelynek eredményeiből próbáltam következtetni ezzel analóg emberi allergiás, vagy mérgezési esetekre.

Vizsgálataim célja, hogy felhívjam környezetem figyelmét a növekvő, egyre több különleges helyzetet eredményező fémterhelésre, az esetlegesen ebből eredő allergiás, vagy toxikus hatásokra.

Alkáli újrahasznosítás határréteg szeparációs módszerrel**Paor Dávid, IV. évf. vegyészmérnöki BSc**

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Rippelné Dr. Pethő Dóra**, egyetemi tanársegéd
PE Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet,
Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék

A dolgozatban az ipari szennyvizek kezelésére egy új megoldást mutatok be, amelyet témavezetőm javaslatára határréteg szeparációs módszernek (BLSM) neveztünk el. Felhasználtam azt a jelenséget, hogy elektromosan töltött elektród felületén a határrétegben az ionok feldúsíthatóak a fázishoz képest. A módszer lényege, hogy alkalmasan megválasztott sebességgel a határréteg sérülés nélkül kiemelhető a szennyvízből és az ionokban gazdag határréteg recirkuláltatható. A módszer az elektroszorpció jelenségén alapul, amely felületi jelenség. Akkor használható jó hatásfokkal, ha az elektródok elektrokémiaihoz hozzáférhető felülete nagy.

A munkám során két nagyfelületű nikkell elektródot állítottunk elő. Megbecsültük az elektródok elektrokémiai szempontból hatásos felületének nagyságát és meghatároztuk az elektrolitikus kettősréteg kapacitását. A dolgozatban bemutatom a határréteg szeparációs módszerrel történő iontranszportot, melyet ciklikus műveletként valósítottunk meg. Vizsgáltuk a ciklusszám, a műveleti idő és a polarizációs potenciál hatását az anyagtranszportra. A kísérletekhez automata elektroszorpció berendezést építettünk és használtunk. A modell oldatok mellett ipari szennyvízzel is végeztünk kísérleteket.

Modellkísérletek szerves szennyező vegyületek és a talajkolloidok közötti kölcsönhatás tanulmányozására**Samu Gyöngyi, I. évf környezetmérnöki MSc**

PE Mérnöki Kar

Témavezető: **Szakácsné Dr. Földényi Rita** egyetemi docens
PE Föld- és Környezettudományi Intézeti Tanszék

Kutatásom szerves szennyező anyagok és talajkolloidok kölcsönhatásának tanulmányozására irányul, aminek fontos része az oldat stabilitásának vizsgálata, valamint ehhez kapcsolódóan a felületi feszültség meghatározása.

Vizsgálataim során egy anionos peszticid formázószer, a Supragil WP (nátrium-(diizopropil-naftalinszulfonát)), és egy kationos, detergens tulajdonságú anyag, a Cetrimide (cetil-trimetil-ammonium-bromid) talajoldatbeli viselkedését figyeltem meg. Az anyagokat homoktalaj, barna erdőtalaj és csernozjom 0,01 M-os foszfát pufferrel (pH=7) készített kivonataiban vizsgáltam. A talajbeli viszonyokat különböző koncentrációjú fulvosav (FA), ill. huminsav-nátriumsó (HANa) desztillált vizes és pufferelt oldataival is modelleztem.

A tenzid koncentrációk beállításához az anyagok oldhatósági adatait, valamint korábbi szakdolgozatokban meghatározott kritikus micellaképződési koncentrációit (c.m.c.) használtam fel.

Az oldatok stabilitását a bennük mért zéta-potenciál alapján állapítottam meg, amelyet Zetasizer Nano-ZS (Malvern) műszer segítségével mértem. A szakirodalom alapján egy oldat akkor tekinthető stabilnak, ha -30 mV-nál kisebb vagy +30 mV-nál nagyobb értékeket mérünk. A stabilitás mellett vizsgáltam a felületi feszültség változását is, ezáltal meghatároztam a c.m.c. értékeket a humuszanyagtartalmú modelloldatokban.

Vizsgálataim eredményei azt mutatják, hogy mindkét felületaktív anyag valamennyi vizsgált közegben jelentős mértékben befolyásolja a kolloid stabilitást. A detergensnek anionos, illetve kationos jellegüknek megfelelően változtatták meg a stabilitást. Supragil WP nagy koncentrációja mellett erősen stabilizálódtak az oldatok. Cetrimide jelenléte áttöltést eredményezett, azaz a zéta-potenciál kezdeti negatív értéke a felületaktív anyag növekvő koncentrációjának következtében pozitívvá vált.

A kritikus micella koncentrációt a humuszanyagot tartalmazó modelloldatokban csak Cetrimide esetében tudtam meghatározni, Supragil WP tartalmú oldatokban csak ún. premicella képződési koncentrációt állapítottam meg. A kapott értékek mindkét felületaktív anyagnál alacsonyabbak voltak, mint a tiszta vízben mért értékek.

Fenilalanin fotodegradációja**Somogyi Katalin, II. évf. vegyész MSc**

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet** egyetemi adjunktus
PE Általános és Szervetlen Kémiai Intézeti Tanszék
Dr. Horváth Attila egyetemi tanár
PE Általános és Szervetlen Kémiai Intézeti Tanszék

Az L-fenilalanin aromás gyűrűt tartalmazó aminosav, mind a három funkciós csoportja reakcióba léphet a katalizátor gerjesztésekor képződő különböző reaktív részecskékkel: (i) az aminocsoport képes a gerjesztett félvezető vezetési sávjából elektront „átvenni”, (ii) a karboxilcsoport a vegyértéksávban képződő lyuknak elektront adhat át, (iii) a fenilcsoportot a lyuk és a vízmolekulák reakciójában képződő hidroxilgyök támadhatja meg. Aromás vegyületek fotodegradációjakor fontos kérdés, hogy mely részecskék indítják el a gyűrű felnyílását. Aktív reaktáns lehet a hidroxilgyök, a szuperoxid-gyökanion/hidroperoxilgyök, de akár a szingulett oxigén is. A modellvegyület vizes szuszpenziójának anaerob és aerob körülmények között végzett megvilágításakor kapott kísérleti adatok alapján igyekszünk a fentebb megfogalmazott kérdésre választ adni.

A fotokatalitikus reakciókat a folyadék fázis pH-jának és TOC-tartalmának mérésével, a képződő NH_4^+ koncentrációjának meghatározásával, valamint a spektrális változások detektálásával és értékelésével követtem nyomon.

HPLC-MS vizsgálatokkal kimutattuk, hogy hidroxí (pl. L-tirozin)-, illetve dihidroxí (pl. L-dopa) intermedierek keletkeznek, melyek argonnal kevert rendszerekben felhalmozódnak, míg levegő jelenlétében degradálódnak. Az L-tirozin és az L-dopa fotokatalitikus reakcióinak vizsgálata elősegíti az L-fenilalanin fotobomlási mechanizmusának feltárását, a gyűrűfelnyílást indító lépés és a gyűrű felnyílásáért felelős aktív oxigén-tartalmú részecske azonosítását.

Ezüstionokat tartalmazó TiO_2 szuszpenziókban UV-A sugárzás hatására a fémionok redukálódnak, csökken az elektron-lyuk pár rekombinációjának valószínűsége. Az Ag^+ ionok jelenlétében végrehajtott kísérletek során lehetőség nyílik a reakciók mechanizmusának mélyebb, nevezetesen a lyukak és a belőlük képződő hidroxilgyökök szerepének megismerésére. Másfelől rámutathatunk azokra az elsődleges elektronátadási folyamatokra is, amelyek ezüstionok jelenlétében nem játszódnak le, az ezüst leválást követően, vagy ezüstöt nem tartalmazó reakcióelegyekben pedig mérhető mennyiségű közti-, vagy végtermékeket eredményeznek.

Antimonformák speciációs meghatározása városi szálló porból

Szabó József, V. évf. biológus

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: **Dr. Posta József** egyetemi tanár
DE Szervetlen Kémiai és Analitikai Tanszék

Munkák során Debrecen város levegőjének szálló porát vizsgáltuk széles körben. A pormintákat a debreceni DKCE kft. bocsátotta rendelkezésünkre nagy mennyiségben. Az általuk alkalmazott technológiához a levegő gyakorlatilag teljes pormentesítésére van szükség, amit 180 darva és ugyanennyi finomszűrő segítségével vitelezték ki. A szűrők, amiket kaptunk 28 milliárd m³ levegőből származó port tartalmaztak, így egy éves átlagra meg tudtuk mondani a városlakok különböző szennyezőkre vonatkozó kitétséget. Vizsgálataink kiterjedtek a porok morfológiájára, szemcseméret eloszlásra, a vízoldható frakció vizsgálatára, elemanalízisre, Pt fémek vizsgálatára.

Feladatom a porok antimontartalmának jellemzése volt. Irodalmi adatokból tudtuk, hogy külön ki lehet oldani az egyes antimonformákat illetve roncsolással meghatározható az összantimon. Az antimon(III)-oxidot 0,5 M borkősav oldattal 120 perces ultrahangos rázatással oldottuk ki, míg az antimon(III)-szulfid és oxid együttes mennyiségét 6 M sósavval való 60 perces ultrahangos rázatással választottuk le. Az összes antimont mikrohullámmal elősegített nedves roncsolással oldottuk le.

Eredményeink szerint a porminták 35,21 µg antimon(III)-oxidot, 2,2 µg antimon(III)-szulfid és 3,65 µg egyéb antimonformát tartalmaznak grammonként. Bár ezek az értékek magasnak tűnhetnek, 1m³ levegőre vonatkoztatva nem haladják meg a határértéket.

Eredményeinket összevetettük a korábban Budapesten mért értékekkel és a három vegyértékű formák közötti arány eltolódását tapasztaltuk az antimon(III)-oxid felé. Ez valószínűleg azzal magyarázható, hogy a mintáink a szálló porok mérettartományába estek, melyek jobban ki vannak téve a légköri oxidánsok hatásainak.

Műanyagkémia tagozat

Szén nanocsövek és szén nanoszálak képződése polimer hulladékok lézerpirolízise során**Bocz Katalin**, II. évf. környezetmérnöki MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Bodzey Brigitta PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az e-hulladékok kezelésének jogi szabályozásában kitűzött célok elérése érdekében az elhasznált elektronikus berendezésekben található műanyagok (kb. 21%) minél nagyobb részének hasznosítása (anyagában vagy energetikailag) napjaink egyik kiemelt feladata. A technológiai és gazdasági szempontból is optimális hasznosítási mód kiválasztásához a hulladékok megfelelő szeparációjára, valamint analizésére van szükség.

Munkám kezdetén az előzetesen sűrűségfrakciókra szétválasztott elektronikai műanyag hulladékok és töltőanyagaik teljes körű azonosítását végeztem el, majd a kutatócsoportunk által kifejlesztett lézerpirolízis (LP)-FTIR kapcsolt rendszerrel modelleztem a hulladék polimerek adalékanyagainak hatását a pirolitikus bomlásra. A lézerpirolízis során a több agyagásvány típusú adalékanyagot tartalmazó hulladékfrakció esetében szenesedést figyeltem meg. A kialakult szenes szerkezetéről készült pásztázó elektronmikroszkópos (SEM) képeken szén nanocső jellegű képződmények voltak láthatóak. A szakirodalom alapján lehetséges, hogy a többfalú szén nanocsövek egy jóval egyszerűbb előállítási módját sikerült felfedeznem.

Kísérleteim során a szálszerű képződmények szerkezetét és kialakulási folyamatát vizsgáltam. Különböző polimer mátrixokban többféle szerkezetű és összetételű agyagásványt alkalmaztam az optimális kompozit meghatározása érdekében. Vizsgáltam a körülmények (nyitott, vagy zárt pirolíziscella; különböző atmoszféra és lézerteljesítmény) hatását a kialakult szén nanoszálak átmérőjére, hosszára és szerkezetére. A képződött szén nanoszálakat Raman mikroszkóp, transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM) és termoanalitikai (TG) vizsgálatok segítségével is jellemeztem.

Eredményeim egy új, költséghatékony, speciális körülményeket nem igénylő szén nanocső előállítási módot vetnek fel, mely egyben megoldást jelenthet az elektronikai műanyag hulladék egyes frakcióinak értéknövelő újrahasznosítására.

Lenszál és kenderszál karbonizálása**Bora Ágnes**, III. évf. vegyészmérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Borsa Judit** egyetemi tanár**Dr. László Krisztina** egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A növényi alapú szénszálak talajjavításra és – aktivált állapotukban – adszorbensként használhatók. Ezek a termékek – az olaj alapúaktól eltérően – szén-dioxidra nézve semlegesek (elégetésükkor annyi szén-dioxid keletkezik, amennyit a növény fotoszintézis útján megkötött), továbbá a karbonizált növények („biochar”) bekeverése a talajba nem csak javítja annak minőségét, hanem a növény által megkötött szén-dioxid egy részét ki is vonja a körforgásból, tehát a folyamat szén-dioxid mérlege negatív.

A karbonizált növényi alapanyag minősége az alkalmazás szempontjából fontos kérdés. Az irodalom szerint a növények karbonizálásának eredménye, nevezetesen a porozitás nem csak a fő komponensek arányától, hanem a komponensek egymásra hatásától is függ [1]. A növényi rostok lazítására alkalmazott ultrahangos, ill. lúgos/ultrahangos kezelés megváltoztatja a komponensek kölcsönhatását, ezért indokolt ezen kezeléseknél a karbonizálásra gyakorolt hatását vizsgálni.

A *natív, ultrahanggal, ill. lúggal és ultrahanggal kezelt szálak* karbonizálásának körülményeit TG-MS vizsgálatokkal határoztam meg. Vizsgáltam a kiválasztott paraméterek (hőmérséklet, idő) hatását a kitermelésre, a karbonizált szál sűrűségére, nitrogén adszorpciós kapacitására és morfológiájára (SEM, porozitás).

Az előkezelések hatására az eredeti szál nitrogén adszorpciós kapacitása a $p/p_0 \approx 0,3$ relatív nyomás feletti tartományban a *len* esetén csökkent, a *kender* esetén növekedett. A hatás mindkét esetben a kombinált lúgos ultrahangos kezelés esetén volt a nagyobb.

A kétféle szál jellemzőinek eltérő irányú változása a karbonizálás után is megmaradt. A kezeléseket növelték a karbonizált *kender* pórustérfogatát, a kombinált kezelés megháromszorozta azt. A *len* esetében az ultrahangozás, illetve a kombinált kezelés hatása ellentétes: előbbi kismértékben csökkentette, utóbbi kismértékben növelte a pórustérfogatot.

A *len*- és *kenderszál* esetén a tapasztalt eltérő változások felhívják a figyelmet az ultrahangos kezelésben rejülő ellentmondásokra, ami további kutatások témája lehet.

[1] Cagnon B, Py X, Guillot A, Stoeckli F, Chambat G (2009), *Biores. Technol.* 100, 292-298 (2009)

Mikromechanikai deformációs folyamatok PLA alapú biokompozitokban

Dora Gábor Csaba, II. évf. vegyészmérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Pukánszky Béla tanszékvezető egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A politejsav kopolimerei, keverékei és kompozitjai iránti érdeklődés folyamatosan növekedett az utóbbi időszakban. A PLA számos előnyös tulajdonsággal rendelkezik a hagyományos polimerekkel szemben: megújuló erőforrásokból előállítható, újrafeldolgozható, komposztálható és tulajdonságai széles tartományban módosíthatóak, aminek köszönhetően viszonylag nagyszámú lehetőség nyílik alkalmazására. A PLA felhasználásának egyik fontos területe a természetes szállal erősített kompozitokban való alkalmazása mátrixanyagként.

A munkám során különböző természetes eredetű töltőanyaggal erősített PLA mátrixú kompozitokat vizsgáltam. A kompozitok mátrix anyagaként NatureWorks Ingeo 4032D típusú politejsavat, míg töltőanyagként lignocellulóz szálakat használtam. A töltőanyagokat különböző technológiákkal körültekintően jellemeztem (kémiai összetétel, szemcseméret, méreteloszlás és alaki tényező). A komponensek homogenizálása belső keverőben történt (180 °C, 50 rpm, 10 perc), amit 1 mm-es lapok préselése és próbatestek kivágása követett. A mechanikai vizsgálatok és SEM felvételek alapján jellemeztem a határfelületi kölcsönhatást és a szerkezet-tulajdonság közötti kapcsolatot, az akusztikus emissziós mérésekből pedig meghatároztam a domináló mikromechanikai deformációs folyamatokat. A kompozitok szerkezetét a próbatestek törési felületéről készült SEM és POM felvételekkel tanulmányoztam.

A PLA/lignocellulóz kompozitok mechanikai tulajdonságait rendkívül jelentősen befolyásolja a töltőanyag és/vagy erősítőanyag szemcséinek alaki tényezője és belső szilárdsága. A komponensek kémiai karaktere miatt erős kölcsönhatást várnánk közöttük, azonban valódi erősítést nem sikerült elérni a vizsgált kompozitokban. Az akusztikus emissziós mérések eredményei azt mutatják, hogy a szálak törése iniciálja a minták tönkremenetelét, amit a SEM és POM felvételek is megerősítettek. A kölcsönhatás erősségére jellemző B paraméter alapján megállapítottam, hogy a PLA/faliszt kompozitokban erősebb a kölcsönhatás, mint a kapcsolóanyagot nem tartalmazó poliolefin/faliszt kompozitokban, ugyanakkor gyengébb, mint kapcsolóanyagot tartalmazó változatukban. Ezért a kutatómunka további célja ezen kölcsönhatás javítása és erre alkalmas kapcsolóanyag keresése.

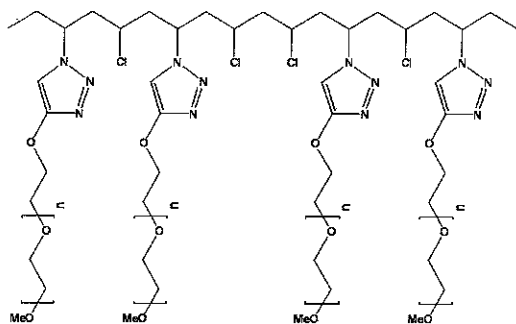
A poli(vinil-klorid) láncmenti módosítási reakciói

Galát Márk, II. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár
 ELTE TTK Szerves Kémia Tanszék és
 tudományos osztályvezető
 MTA KK AKI Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály
Szarka Györgyi tudományos segédmunkatárs
 MTA KK AKI Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

A dolgozatban bemutatott kutatás egy olyan új polimer előállítását célozza meg, mely egyesíti magában a poli(vinil-klorid) (PVC) előnyös mechanikai és a poli(etilén-glikol) (PEG) hidrofil, testbarát tulajdonságait. A megcélzott polimer előállításához egyfajta click reakciót, a Huisgen-féle 1,3-dipoláris cikloaddíciót terveztük alkalmazni. Ennek kivitelezéséhez szükség van egy azid és egy alkin csoporttal rendelkező „alkotóelemre”. A szintézissor első lépésében a PVC láncmenti klóratomjait cseréltük le részlegesen azidcsoportokra, majd ennek azidáltsági fokát egy új, korábban nem alkalmazott módszerrel kvantitatíve meghatároztuk. Vizsgálatokat kezdtünk továbbá az azidálás konverziójának időfüggése felderítésére is. Második lépésben kétféle monofunkciós PEG-et szintetizáltunk a click kapcsolás céljából egy propargilálási reakcióval. A harmadik lépés az azidáltsági vizsgálati reakció tapasztalatait felhasználva a PVC-PEG ojtott kopolimer előállítását és szerkezetének igazolását célozta meg. A kívánt terméket sikerült előállítani. Jövőbeli terveink közé tartoznak a reakcióparaméterek és a tisztítási folyamat optimalizálása, illetve a polimeren végzett szerkezeti, termoanalitikai és mechanikai vizsgálatok annak eldöntésére, hogy a kapott termék milyen tulajdonságokkal rendelkezik, és a célkitűzéseinknek megfelelően későbbi gyógyászati, vagy másféle felhasználásra alkalmas-e.



A célmolekula: PVC-g-PEG

Új típusú amfifil polimer kotérhálók szintézise "click" kémiai kapcsolási reakcióval

Illés Gergely, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék
és MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály
Szanka István tudományos segédmunkatárs
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Napjainkra a polimer kotérhálók, ezen belül az amfifil polimer kotérhálók iránti érdeklődés ugrásszerű növekedésnek indult. Különleges nanofázisú szerkezetükből adódóan nanotechnológiai alkalmazásukon kívül szövetbarát tulajdonságuknak köszönhetően felhasználhatók implantátumok, szabályzott gyógyszerhordozók és szövetpótló anyagok előállítására is.

Céлом kvázielő atomátadásos gyökös polimerizáció (ATRP) és "click" kémia [1,2] kombinációjával olyan új típusú amfifil polimer kotérhálók előállítása volt, amelyek jól definiált szerkezettel rendelkeznek. Tetrafunkciós iniciátort alkalmazva, kvázielő ATRP-vel négyágú poli(*n*-butilakrilát) és polisztirol csillag polimereket állítottam elő. Az így kapott csillag polimereken funkciós csoport módosítást, azidálást hajtottam végre, majd a funkcionált csillag polimereket Huisgen-féle 1,3-dipoláris cikloaddíciós "click" reakcióval propargil telekelikus poli(etilén-glikol) molekulákkal kapcsoltam össze. Elemanalízis eredmények igazolták a megcélzott összetételű kotérhálók képződését. Duzzadási vizsgálatokkal pedig igazoltam a kapott kotérhálók amfifil tulajdonságát. Gyógyszerkibocsátási modellkísérleteim eredményei alapján megállapítható az is, hogy az új kotérhálók szerkezetüktől és összetételüktől függő módon szabályozott gyógyszerkibocsátó mátrixként alkalmazhatóak.

Összességében elmondható, hogy elsőként sikerült láncvégi "click" reakcióval polimer kotérhálókat szintetizálnom, és egyúttal bizonyítani a "click" reakció alkalmasságát különböző, jól definiált szerkezettel rendelkező, új típusú amfifil kotérháló létrehozására. Ezek az új anyagok feltehetően alkalmazhatók lehetnek különféle nanoszerkezetű anyagi rendszerek alkotóiként és gyógyászati területeken.

[1] H. C. Kolb, M. G. Finn, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 40, 2004-2021 (2001)

[2] C. E. Hoyle, C. N. Bowman, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 49, 1540-1573 (2010)

Környezetben lebomló műanyagok – A bomlás körülményei és a szerkezet változásának összefüggése

Kocsis Krisztina IV. évf. vegyészmérnöki BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Vargha Viktória** ny. tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A dolgozat célja különböző adalékanyagok hatásának vizsgálata kissűrűségű polietilén alapú fóliák bomlására. A minták öregítése különböző igénybevételek, nevezetesen hő, UV fény, külső környezeti körülmények hatására történt. A lebomlást a mechanikai tulajdonságok, a szerkezet és a molekulatömeg változásának mérésével követtük nyomon.

A dolgozat ismerteti a témához kapcsolódó irodalmak egy részét, amelyek támpontot adnak a degradálódott minták lehetséges viselkedéséről, tulajdonságainak változásáról.

A mechanikai tulajdonságok vizsgálata a szakítószilárdság és szakadási nyúlás alapján, Instron berendezéssel történt. Nagymennyiségű minta szakítási vizsgálatainak eredménye alapján választottuk ki a környezetben legnagyobb mértékű bomlást szenvedett mintákat további vizsgálatokhoz.

A szerkezetben bekövetkező kémiai változások nyomkövetésére elsősorban FTIR spektroszkópia szolgált. A felvett spektrumok alapján következtettünk az öregedés során bekövetkező oxidáció mértékére a minta karbonil – indexének meghatározásával. A láncördelődésre a vinilcsoportok megjelenéséből következtettünk. A reprodukálhatóság szempontjából a kiválasztott mintákat újbóli öregítésnek vetettük alá. A szakítás során tapasztalt mechanikai tulajdonságok közel azonosak, azonban az infravörös spektrumon már eltérés figyelhető meg. Tehát a szerkezetben bekövetkezett kémiai változások rendkívül komplexek. Az anyag tönkremegy, emellett a fóliák vastagsága is csökken. A dolgozat további részében ezen megfigyelések okait különböző mérési módszerek alkalmazásával kerestük.

Az anyag felületi szerkezetét XPS, a felület morfológiáját SEM módszerrel vizsgáltuk. A molekulatömeg változását dinamikus reometria módszerével követtük. A várakozásoknak megfelelően az öregedés során a molekulatömeg csökkenését tapasztaltuk.

A kémiai szerkezet és a termikus stabilitás közötti összefüggést TGA készüléken, inert körülmények között kerestük.

A kiindulási és öregített mintákban jelen lévő kristályos és amorf fázisok arányát, illetve az olvadási, kristályosodási jellemzőket DSC készüléken végzett mérésekkel vizsgáltuk.

Hiperelágazásos polisztirol előállítása sztírol és divinil-benzol karbokationos kopolimerizációjával környezetileg előnyös reakciókörülmények között

Németh Brigitta, II. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár
ELTE Szerves Kémiai Tanszék
és MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály
Verebélyi Klára tudományos segédmunkatárs
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Napjainkban a polimer kémiai kutatások egyik egyre jelentősebbé váló területe a sok elágazást tartalmazó polimerek, mint a hiperelágazásos polimerek és a dendrimerek előállítására irányul. Munkám során egy újnak számító módszert kíséreltem meg alkalmazni hiperelágazásos polimerek szintézisére az egyik legnagyobb mennyiségben felhasznált monomer, a sztírol szobahőmérsékleten kivitelezett, divinil-benzollal zajló kopolimerizációja révén kvázielő karbokationos körülmények között. A polimerizációs reakciót két különböző oldószerben végeztem: a hagyományosnak számító, környezetre ugyanakkor hátrányos diklór-metánban (DCM), valamint a környezetileg előnyös benzotrifluoridban (BTF). Vizsgáltam mindkét oldószerben a koiniciátor valamint az iniciátor/bifunkciós monomer koncentrációjának hatását a hiperelágazásos polisztirol képződésére. Az optimális reakciókörülmények kiválasztásával méretnövelést is megkíséreltem úgy, hogy további reakciókra alkalmas, el nem reagált vinil-csoportokat csoportokat tartalmazó hiperelágazásos makromolekulák keletkezzenek.

A tudásunk szerint a világon elsőként kifejlesztett és megvalósított eljárás alkalmas környezetileg előnyös oldószerben, rövid reakcióidő alatt, további növekedésre képes csoportokat tartalmazó hiperelágazásos polisztirol előállítására a hagyományoshoz hasonló konverzióval. A polimerizáció a hagyományos, hűtést igénylő módszerekkel ellentétben külön energiabefektetés nélkül, szobahőmérsékleten játszódott le, így a későbbi felhasználás során jelentős energiamegtakarítás érhető el vele. A tovább módosítható vinil-csoportok révén pedig a termék alkalmas lehet peptidkémiai vagy gyógyszerkémiai felhasználásra, ugyanakkor további polimerizációk makroiniciátoraiként is alkalmazható.

A poli(N-izopropil-akrilamid) mint intelligens anyag**Osváth Zsófia**, II. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár
ELTE Szerves Kémiai Tanszék
és MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály
Dr. Kali Gergely tudományos munkatárs
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Napjainkban az intelligens anyagok világszerte az érdeklődés középpontjába kerültek. A hőmérsékletérzékeny poli(N-izopropil-akrilamid) talán a legtöbbet vizsgált intelligens anyag, mivel felhasználása igen sokrétű. Alkalmazható az orvosi biológiában, géllüveggént, szenzorként vagy akár akkumulátorként is.

A polimer kémiában a mai napig kihívást jelent a polimerek tudatos tervezése. Nagyon fontos ugyanis, hogy a polimer szegmensek közel azonos hosszúságúak legyenek, mivel tulajdonságaik jelentősen függenek a molekulatömegüktől és a molekulatömeg-eloszlásuktól. Munkám fő célkitűzése ennek a problémának a megoldására irányult. Először lineáris poli(N-izopropil-akrilamid)ot szintetizáltam a hagyományosnak tekinthető szabad gyökös polimerizációval. Második lépésben egy kváziélő polimerizációs eljárással, a kváziélő reverzibilis addíciós-fragmentációs láncátadásos (RAFT) [1] gyökös polimerizációval állítottam elő ugyanezt a polimert, a polimerizációhoz szükséges láncátadászerek szintézise után. A kapott polimereket gélpermeációs kromatográfiás (GPC) és $^1\text{H-NMR}$ spektroszkópiás alálízisnek vettem alá, melyek igazolták a várt eredményeket.

Dinamikus fényszóródásméréssel meghatároztam a polimerek alsó kritikus oldhatósági hőmérsékletét (LCST), amely a szabad gyökös polimerizáció esetében jól egyezik az irodalmi adatokkal [2], viszont hidrofób csoporttal rendelkező RAFT láncátadásos alkalmazásakor 4 °C csökkenést tapasztaltam, ami már kismértékű hidrofób csoport jelentős hatását mutatja a polimer LCST értékére. Ez az eredmény az LCST ily módon történő szabályozási lehetőségét veti fel.

[1] Chiefari, J.; Chong, Y. K.; Ercole, F.; Krstina, J.; Jeffery, J.; Le, T. P. T.; Mayadunne, R. T. A.; Meijs, G. F.; Moad, C. L.; Moad, G.; Rizzardo, E.; Thang, S. H. *Macromolecules*, 31, 5559–5562 (1998)

[2] H. Alarco'n, S. Pennadam, C. Alexander, *Chem. Soc. Rev.*, 34, 276-285 (2005)

Reakciókinetika és katalízis tagozat

Formiácion oxidációja perjodácion és ozmium-tetroxid elegyével**Bajusz Dávid, III. évf. kémia BSc**

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: **Dr. Lente Gábor** egyetemi docens
DE Szeretlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A metán metanollá történő oxidálása egy régen fennálló kihívás és egyelőre megoldatlan probléma a kémikusok számára. [1] A metán a földgáz fő komponense, amelyet üzemanyagként és nyersanyagként is hasznosítanak. Tárolás és szállítás szempontjából azonban jobb alternatívát nyújt a folyékony metanol, amelynek felhasználása ráadásul rohamosan növekszik az utóbbi időkben. A metán metanollá történő átalakítása az erős C–H kötés, illetve a metanol további oxidációja miatt bonyolult feladat, amelyet sokféleképpen próbáltak már megoldani, homogén és heterogén reakciók útján egyaránt.

A közelmúltban Dr. James M. Mayernek és társainak sikerült metánt metanollá oxidálni nátrium-perjodát és ozmium-tetroxid elegyével; kutatómunkájuk eredményeit 2006-ban publikálták. [2]

Kutatócsoportunk munkájának célja a perjodácion és az ozmium-tetroxid egymást segítő, szinergikus hatásának a tanulmányozása oxidációs reakciók kinetikai vizsgálatával (külön-külön ugyanis a két oxidálószer nem alkalmas a reakció kivitelezéséhez).

Kutatómunkánk során a perjodácion/ozmium-tetroxid rendszer formiácionnal való reakciójának kinetikáját vizsgáltuk, elsősorban UV/VIS spektrofotometria segítségével. Összehasonlításképpen megvizsgáltuk a perjodácion és a formiácion közötti reakciót is, ozmium-tetroxid nélkül, de egyébiránt azonos körülmények között. A két reakció mechanizmusa egymástól lényegesen különböző, így mindkét folyamatra meghatároztuk a reakciósebesség függését a reaktánsok koncentrációjától és az eredmények értelmezésére kinetikai modellt állítottunk fel. A kinetikai modellek összehasonlításával értelmezhetjük az ozmium-tetroxid szerepét a reakcióban: az eddigi eredmények alapján azt valószínűsítjük, hogy az ozmium-tetroxid a perjodácion – oxidatív reaktivitás szempontjából jelentősen eltérő – tetraéderes, illetve oktaéderes formái közötti reakciót katalizálja.

[1] Olah, G. A.; Goepfert, A.; Surya Prakash, G. K.: *Beyond oil and Gas: The Methanol Economy*, Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

[2] Osaka, T.; Watson, E. J.; Dehestani, A.; Bales, B. C.; Mayer, J. M. *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 7593.

Bakteriális kemotaxismodellek érzékenységtanulmányozása**Danis Judit**, IV. évf. biológia BSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Turányi Tamás** egyetemi tanár
ELTE Kémia Intézet

A kemotaxis a sejtek kémiai anyag által irányított mozgása. A folyamat lehetővé teszi a baktériumok számára az élelem megtalálását, és a veszélyek (pl. mérgek) elkerülését. A kemotaxis folyamata során a receptorok érzékelik a környezetben lévő anyagokat, és egy több fehérjéből álló foszforilációs kaszkádon keresztül módosul a sejt mozgásállapota. A bakteriális kemotaxis biokémiai reakciómechanizmusokon alapuló modelljei egyszerű példái a biológiai jelátviteli rendszereknek, és alapot adnak a magasabbrendű szervezetek jelátviteli útvonalainak feltárásához.

Munkám során Rao és munkatársai *E. coli* és *B. subtilis* kemotaxis modelljeit [1] vizsgáltam meg érzékenységtanulmányozás segítségével. Kimutattam, hogy a kemotaxisban fontos szerepet játszó anyagfajta koncentrációlefutására mely reakciósebességi együtthatók értékének kis megváltoztatása van nagy hatással. A COPASI program segítségével számítottam az érzékenységi függvényeket, majd azok megfelelő hányadosainak képzésével megvizsgáltam, hogy az *E. coli* és a *B. subtilis* modelljénél fennállnak-e összefüggések az érzékenységi függvények között? Mindkét modellnél találtam lokális és globális hasonlóságot [2] is az érzékenységi függvények bizonyos csoportjaira. Megmutattam, hogy a globálisan hasonló érzékenységi függvényű paraméterek egymás megváltoztatásának hatását kompenzálni képesek. Biológiai rendszerek modelljeinél az érzékenységi függvények globális hasonlósága azért fontos, mert ez egy lehetséges magyarázat a biológiai rendszer robusztusságára [3], hiszen azt mutatja, hogy külső okokból (pl. hőmérsékletváltozás miatt) megváltozó paraméterek hatását más paraméterek megfelelő megváltoztatásával teljesen kompenzálni lehet.

[1] C. V. Rao, J. R. Kirby, A. P. Arkin, *PLOS Biology*, 2, 239-252 (2004)[2] I. Gy. Zsély, J. Zádor, T. Turányi, *J.Phys.Chem. A*, 107, 2216-2238 (2003)[3] A. Lovrics, I. Gy. Zsély, A. Csikász-Nagy, J. Zádor, T. Turányi, B. Novák, *Int.J.Chem.Kinet.*, 40, 710-720 (2008)

Stopped-flow készülék kalibrációja**Ditrói Tamás, III. évf. kémia BSc**

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: **Dr. Lente Gábor** egyetemi docens
DE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A gyors-kinetikai folyamatok tanulmányozására már 80 éve léteznek módszerek, ezek közül az általunk is vizsgált technika a megállított áramlásos, azaz stopped-flow módszer, amely a reaktánsok nagyon gyors áramlással végzett összekeverésén, majd az áramlás megállításán alapul. Ez a fajta módszer csekély oldatigényű technika, amely során a reaktánsok keverése 1 milliszekundumos időtartam alatt történik.

A készülék is rendelkezik felső méréshatárral: saját mérésünk alapján mintegy 500 s^{-1} nagyságú elsőrendű sebességi állandójú reakciókig lehet nagy pontossággal mérni. Ennél gyorsabb folyamatok helyes tanulmányozásához azonban korrekcióra van szükség, amelyre már egy 1974-es cikkben felhívták a figyelmet [1].

A korrekcióhoz fontos a készülék megfelelő paramétereinek meghatározása, ezeket kalibrációs mérésekkel végezhetjük. Munkám során a készülék kalibrációját végeztem el egy 1977 óta publikált [2] és még máig használt kalibrációs reakcióval. Ez a diklórfenol-indofenol redukciója savas közegben aszkorbinsavval pseudo-elsőrendű körülmények között, redukálószer-koncentráció változtatásával.

A korábban javasolt eljárás egyetlen időparaméterre, a holtidőre koncentrált. Saját eredményeink azt mutatták, hogy a pontos munkához még további két időparaméterre van szükség, ezek a küvettafeltöltési idő és az időeltolás. Módszert fejlesztettünk ki ezek egyidejű meghatározására, és megmutattuk, hogy a korábban használatos eljárás jelentősen torzítja a holtidő becslését. Az általunk kifejlesztett módszerrel meghatározott adatok összhangban vannak a készülék fizikai paramétereivel (küvetta- és holtterefogatok aránya, becsülhető dugattyúmozgási sebesség). Nagyon gyors reakciónál (1000 s^{-1}) a küvetta belüli oldat inhomogenitásának nem hanyagolható el.

Elvégeztük a készülék maximális mérési idejének kísérleti megállapítását is, amelyet a mintaoldatokból a reakciócella irányába (vagy visszafelé) történő diffúzió korlátoz. A technikával még biztosan mérhető leghosszabb reakcióidő 150 s körülinek adódott.

[1] Lin, C. T., Rorabacher, D. B. *J. Phys. Chem.* 78, 305. (1974)

[2] Tonomura, B., Nakatani, N., Ohnishi, M., Yamaguchi-Ito, J., Hiromi, K., *Analytical Biochemistry*, 84, 370 (1978)

Merrifield-gyantán immobilizált Co–aminosav komplexek készítése, szerkezeti jellemzése és szuperoxid dizmutáz aktivitása**Elek Gábor** gimnáziumi tanuló (12. osztály) [jelenleg I. vegyészmérnök BSc]

Deák Ferenc Gimnázium – SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Dr. Pálinkó István** egyetemi docens
SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék

Aktív és szelektív katalizátorok készítése régóta az alap- és alkalmazott kutatások központi kérdése. Ilyen katalizátorok készítéséhez sokféle mintát lehet használni, de a legalkalmasabbak mindkét szempontból az enzimek. A sokféle enzim közül mi a fémion kofaktort tartalmazó elektrontranszfer sajátosságú enzimeket választottuk mintának. Olyan katalizátorokat készítettünk, amelyekben a fémion képes az oxidációs állapotát és a koordinációs számát változtatni, a ligandumok a lehető legegyszerűbbek, de még/már mutatják a polipeptid-környezet katalitikus sajátosságait, ugyanakkor bírják a "szigorúbb" kísérleti körülményeket (magasabb hőmérséklet, különféle oldószerek, stb.) és a reakcióelegyből könnyen visszanyerhetők, így újrafelhasználásuk biztosítható. Fémionként a Co(II)-iont, ligandumként C-védett aminosavakat (C-védett ciszteint, cisztint és hisztidint) vagy azok keverékét, hordozóként Merrifield-gyantát választottuk. Az aminosavat vagy azok keverékét kovalens kötéssel rögzítettem a gyantára, és ezután építettem ki a fémkomplexet egyrészt úgy, hogy csak felületen rögzített ligandumok álltak rendelkezésre, másrészt úgy, hogy feleslegben lévő, nem rögzített C-védett aminosavak is szerepelhettek ligandumként. A kapott immobilizált komplexek szerkezetét FT-IR spektroszkópiával tanulmányoztam. A spektrumok vizsgálata, a felületi komplexek színe és a kémiai intuíció segített a koordinációs szám és a koordinálódó csoportok valószínűsítésében. A kapott anyagok szuperoxid dizmutáz aktivitását egy biokémiai tesztreakció segítségével tanulmányoztam. Azt tapasztaltam, hogy azok a komplexek, amelyek aminosav-keveréket tartalmaztak ligandumként aktívabbak voltak, mint az egyfajta aminosavat tartalmazók, és ezek közül is azok mutattak kiemelkedő aktivitást, amelyeknél ligandumként csak felületen rögzített védett aminosavak jöhettek szóba.

Kondenzált gyűrűs vegyületek szelektív oxidációja Cr-SBA-15 mezopórusos katalizátorokon

Lajter Ildikó, V. évf. vegyész

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők: Dr. Halász János egyetemi docens
Bangó Adrienn PhD hallgató
SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Szerves kémiai reakciókban a megfelelő szelektivitás katalizátorok alkalmazásával érhető el, ami egyrészt jelentheti egy adott termék előállítását szelektív oxidáció eredményeként, másrészt pedig – például környezetszennyező komponensek ártalmatlanításakor – a melléktermékek nélküli teljes oxidációt. A nehezen oxidálható szerves komponensek hidrogén-peroxiddal megvalósított katalitikus oxidációjában ez az elv érvényesül.

A kondenzált gyűrűs vegyületek (naftalin, dekalin, tetralin) szelektív oxidációjával értékes termékek (naftolok, tetralon, stb.) állíthatók elő, azonban megfelelő pórusméretű katalizátor szükséges a reakció megvalósításához. Az utóbbi évtizedekben sikeresen alkalmazzák a mezopórusos katalizátorokat (megfelelő aktív centrum bevitelével) hasonló reakciókban, ezért tartottuk célszerűnek vizsgálni aktivitásukat ezekben a folyamatokban.

A különböző módon [impregnálással(1) és izomorf szubsztitúcióval(2)] előállított Cr-SBA-15 katalizátorokat, a szintézist követően röntgendiffraktometriás, nitrogén-adszorpciós és TEM mérésekkel jellemeztük. A vegyületek oxidációját ultrahangos keveréssel, 80 °C hőmérsékleten (tetralin esetében 60-40 °C hőmérsékleten is), különböző reaktáns:H₂O₂ mólarány alkalmazásával, metanol (protikus) és acetonitril (aprotikus) oldószerekben, a két katalizátor jelenlétében valósítottam meg. A reakcióelegyek analízisét gázkromatográfiás úton végeztem.

A reaktánsok közül a naftalin az adott körülmények között a legstabilisabb, csak kismértékben alakul át, ez az aromás rendszer hatásának tulajdonítható. A dekalin is viszonylag stabilis, de a termékspektrum szélesebb. Az oxigén szelektív beépülése (hidroxil- vagy oxovegyület kialakulása) mindkét szubsztrát esetén detektálható, ez bizonyította a reakció lejátszódására. Ezen folyamatok a beépített átmenetifémek jelenlétének tulajdoníthatók.

A tetralin oxidációjában Cr-SBA-15(1) és Cr-SBA-15(2) katalizátorok alkalmazása esetén nagy szelektivitással kaptuk az ipari szempontból jelentős (növényvédőszer és gyógyszer intermedier) 1-tetralont, ami lehetőséget nyújthat a gyakorlati megvalósításra, természetesen a reakciókörülmények optimalizálását követően.

A Ce(IV) fotoreakciói vizes oldatokban**Michnyóczki Judit, II. évf. vegyész MSc**

DE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Ósz Katalin** egyetemi adjunktus
DE Fizikai Kémiai Tanszék

A Ce(IV) ionok savas kémhatású vizes oldatában polikromatikus fény hatására lejátszódó fotokémiai folyamatokat vizsgáltuk. Kinetikai méréseinket egy HP-8543 típusú diódasoros spektrofotométerben végeztük, mellyel egyidőben tudtuk iniciálni és a spektrális változások alapján követni a fotoreakciókat.

Vizsgáltuk a Lambert-Beer törvény érvényességét az oldatok Ce(IV) koncentrációjára vonatkozóan, melynek során azt tapasztaltuk, hogy az összefüggés nagyon jó közelítéssel egyenest ad. Ugyanakkor ha a kénsav koncentrációja nem megfelelően nagy az oldatban, akkor a Ce(IV) hidrolízise miatt némileg eltérhetünk a lineáris összefüggéstől.

Az oldattérfogattól való függés fotokémiai reakcióknál lényeges. Ennek vizsgálata során azt tapasztaltuk, hogy nagyobb térfogat esetén a kezdeti reakciósebesség kisebb. Az adatokból kiszámoltuk a reakció fényintenzitásra vonatkozó rendűségét, ami 1-nek adódott.

A megvilágítási időtől való függést többféle koncentrációjú Ce(IV) oldat esetében megvizsgáltuk. A $2,2 \cdot 10^{-4}$ mol/dm³ Ce(IV) oldat esetén közel lineáris összefüggést kaptunk a kezdeti sebesség és a megvilágítási százalék között. Emiatt ez esetben kvantumhasznosítási tényezőt számítottunk, mely $\Phi=0,12$ -nek adódott. Megfigyelhető volt ugyanakkor, hogy a reakció fény nélkül is lejátszódik. Az $1,4 \cdot 10^{-3}$ mol/dm³ töménységű Ce(IV) oldat esetén ez az összefüggés már nem lineáris, hanem egy telítési görbét kaptunk. Az ennél töményebb Ce(IV) oldatok esetén a telítés még kisebb megvilágítási százalék esetén bekövetkezik.

Adott Ce(IV) koncentráció mellett a H₂SO₄ koncentrációjának a növelésével a reakció szintén gyorsítható.

A hőmérsékletfüggés vizsgálata során bebizonyítottuk, hogy a reakciónak vannak nem fotokémiai lépései is, hiszen magasabb hőmérsékleten a kezdeti reakciósebesség jelentősen megnőtt.

Ezen kívül megvizsgáltuk a Ce(III) ionok jelenlétének hatását, mely egyértelműen azt mutatta, hogy növekvő Ce(III) koncentráció esetén a folyamat lelassul.

Ezen munka a **TÁMOP 4.2.1/B-09/1/KONV-2010-0007** támogatásával készült.

A 3,4-dihidroxifenil-ecetsav és a vas(III) ion közötti reakció kinetikája

Miskovics Adrienn, II. évf. gyógyszerész

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: Dr. Lente Gábor egyetemi docens és Kalmár József doktori hallgató
DE TTK Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

A 3,4-dihidroxi-fenil-ecetsav az élő szervezetben termelődő vegyület, amely az egyik legfontosabb ingerületátvivő anyagnak, a dopaminnak a fő anyagcsereterméke. A dopamin a központi idegrendszerben fejt ki hatását, az ingerület-átvitelben játszik fontos szerepet. A dopamin akkor szabadul fel, amikor valamilyen pozitív hatás éri az élőlényt. A 3,4-dihidroxi-fenil-ecetsav (DOPAC) eredete a szervezetben valószínűleg kettős: részben az ételekből származó, részben pedig a szimpatikus idegekben szintetizált dopamin származéka.

Korábbi munkákban a dopamin reakcióját peroxomonoszulfát-ionnal és vas(III) ionnal kinetikai szempontból is megvizsgálták. [1-2] Saját munkánkban hasonló kísérletsort hajtottunk végre a 3,4-dihidroxifenil-ecetsav alapvető reaktivitási sajátságainak spektrofotometriás és stopped-flow módszerekkel.

A peroxomonoszulfát-ionnal végzett kezdeti kísérleteink során komoly reprodukálhatósági problémáink adódtak. Ezen nehézség leküzdése érdekében EDTA-oldatot alkalmaztunk, amely bár javította, meg nem oldotta a problémát, így a továbbiakban Fe^{3+} -oldatot használtunk oxidálószerként.

Előkísérleteink során megállapítottuk, hogy savas körülmények között nem történik katalitikus autooxidáció, így a méréseink nem igényeltek oxigénmentes körülményeket. Emellett a fotokémiai reakció lehetőségét is kizártuk. A kezdeti reakciósebesség koncentrációfüggésének vizsgálatok tapasztaltak arra utaltak, hogy a kezdeti szakasz Fe^{3+} -ra nézve elsőrendű, míg a dihidroxi-fenil-ecetsavra nézve telítési jellegű kinetikát mutat. A kísérleti tapasztalatokat összegezve megállapítottuk a folyamat tapasztalati sebességi egyenletét, amelynek magyarázata és így a kinetikai modell felállítása azonban még további kísérleti munkát igényel.

[1] El-Ayaan, U., Herlinger, E., Jameson, F., Linert, W., *Dalton Trans.* 2813-2818 (1997)

[2] Simon Adrienn: Dopaminszármazékok oxidálása peroxomonoszulfát-ionnal, vas(III) katalizátor jelenlétében, diplomamunka, Debreceni Egyetem (2009)

A hidrogén égésénél fontos reakcióparaméterek bizonytalanságának hőmérsékletfüggése**Sedyó Inez**, I. évf. vegyész MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezetők: **Turányi Tamás** egyetemi tanár
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék
Zsély István Gyula egyetemi adjunktus
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Gázfázisú elemi reakciókat tartalmazó mechanizmusokkal leírhatók a különböző anyagok égései és a légkörkémiái folyamatok, felhasználásukkal lehet környezetkímélő eljárásokat fejleszteni és vegyipari folyamatok hatékonyságán javítani. Sokan tanulmányozták és tanulmányozzák ma is az egyes elemi reakciókat, és rengeteg kísérleti adat áll azokról rendelkezésre.

A reakciókinetikai paraméterek fontos jellemzője azok bizonytalansága, hiszen segítségével kiszámítható a reakciómechanizmusokat felhasználó modellek eredményének megbízhatósága. Nagy Tibor PhD értekezésében [1] levezetett egy összefüggést a sebességi együttható hőmérsékletfüggő bizonytalansága, illetve az Arrhenius-paraméterek szórása és korrelációs együtthatói között. Ezt az összefüggést fel lehet használni arra, hogy a kísérleti adatok bizonytalanságából meghatározzuk az egyes elemi reakciók Arrhenius-paramétereinek bizonytalanságát.

Dolgozatomban a következő gázfázisú elemi reakciókat vizsgáltam: $\text{HO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$, $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$, $\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$, $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$ és $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{OH}$. Mindegyik reakció alapvetően fontos a hidrogén gyulladásának kvantitatív leírásához. Több reakciókinetikai adatgyűjtemény felhasználásával mindegyik reakcióhoz összegyűjtöttem az összes kísérleti és elméleti adatot (reakciónként jellemzően 40–100 meghatározott Arrhenius-paraméter-készlet). Az adatok kritikai értékelésével minden egyes elemi reakcióhoz meghatároztam a sebességi együtthatók és azok bizonytalanságának hőmérsékletfüggését, majd kiszámítottam az Arrhenius-paraméterek korrelációs mátrixát. Meghatároztam a fordított irányú reakciók Arrhenius-paramétereinek bizonytalanságát is a termodinamikai adatok bizonytalanságának felhasználásával.

A kapott bizonytalansági adatok korábban nem álltak rendelkezésre. Ezek az információk felhasználhatók a reakciókinetikai modellek bizonytalanságának sokkal pontosabb meghatározásához.

[1] Nagy, T., *Reakciókinetikai modellek bizonytalanságanalízise és redukciója*, PhD értekezés, (2009)

A gamma-valerolakton előállítása a levulinsav katalitikus hidrogénezésével

Strádi Andrea, II. évf. környezettudomány MSc

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Mika László Tamás** egyetemi adjunktus
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

A XVIII–XIX századi ipari és technológiai forradalom óta bolygónk lakossága és vele együtt az energetikai és vegyipari termékek iránti igényei is jelentősen megnöttek. A földgáz és a kőolaj mindkét ipar fontos nyersanyaga, így a lelőhelyek kimerülése kettős nehézségeket vet fel. Az ezek kiváltását célzó innovatív megoldások tehát égetően szükségesnek bizonyulnak.

A biomassa könnyen kezelhető, szén-tartalmú vegyületekké való átalakítása igen gyorsan fejlődő ágazat a fenntartható kémiában. Horváth István Tamás Professzor Úr kutatócsoportja segítségével sikeresen állította elő cukrokból a levulinsavat, majd annak katalitikus hidrogénezésével az energetikai- és vegyipar számára egyaránt hasznosítható gamma-valerolakton, amely bizonyítottan tovább alakítható alkánokká.¹ Az élelmiszeriparban már ismert és alkalmazott vegyület kellemes, édeskés illata könnyen felismerhetővé teszi, míg környezetbarát mivoltát alátámasztja, hogy vízzel korlátlanul elegyedik, ezért a természetben gyorsan lebomlik. Mivel előállítása biomasszából is történhet, így a mezőgazdasági növényi hulladékok felhasználására potenciálisan alkalmas. Alacsony az olvadáspontja és a gőznyomása, illetve magas a forráspontja, biztonságosan tárolható és szállítható. Felhasználása sokoldalú, lehetséges gyújtófolyadékként (az említett kutatócsoport szabadalma) vagy benzin-adalékként energetikai célokra, illetve alkánokká átalakítva vegyipari alapanyagként hasznosítani.

Kutatásom célja, hogy a zöldkémia alapelveit figyelembe tartva, oldószermentesen, különböző szelektív katalizátorokkal (valamint azok összehasonlításával) és a reakciók konverzióinak összevetésével olyan módszert alakítsak ki, amely iparilag is alkalmazható lehet. Méréseimet gázkromatográfia és NMR spektroszkópia segítségével is nyomon követem.

[1] Mehdi, H.; Fábos, V.; Tuba, R.; Bodor, A.; Mika, L. T.; Horváth, I. T., *Top.Catal.*, **2008**, p.48-49.

**Klór-szubsztituált (*E*)-2,3-difenilpropénsav származékok
enantioszelektív hidrogénezése cinkonidinnel módosított palládium
katalizátoron; a sav-adszorpció módjának kísérleti kimutatása**

Szabados Erika, I. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Szöllösi György** tudományos főmunkatárs
MTA-SZTE Sztereo-kémiai Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék

A szintetikus szerves kémiában napjainkra egyre fontosabb követelmény lett az optikailag tiszta királis vegyületek előállítása, melyet többek között enantioszelektív heterogén katalitikus eljárásokkal oldanak meg. A heterogén katalizátorok előnye újrafelhasználhatóságuk miatt kereskedelmi és környezetvédelmi szempontból is jelentős a homogén katalizátorokkal szemben. Munkám során vizsgáltam prokirális telítetlen karbonsavak, ezen belül is az (*E*)-2,3-difenilpropénsav klór-szubsztituált származékainak hidrogénezését cinkonidinnel módosított palládium katalizátoron.

Az (*E*)-2,3-difenilpropénsav és származékainak hidrogénezése kiemelkedő, akár 96%-os enantioszelektivitást is eredményezett korábbi vizsgálatok során, ám ezek egyike sem mutatott rá pontosan a sav fémfelületen való adszorpciójának módjára, az adalék amin pontos hatására, valamint a felületi sav-cinkonidin átmeneti komplex szerkezetére sem. Ezek vizsgálatára az (*E*)-2,3-difenilpropénsav 11 db különböző helyzetű klór-szubsztituált változatát választottuk, figyelembe véve egyrészt az eddig vizsgált származékok esetében kapott szubsztituens-hatást, másrészt azt, hogy vélhetően milyen helyettesítési pozíciók adhatnak információt a sav adszorpciójának mikéntjéről.

Az eredmények alapján megállapítható, hogy az α -fenil gyűrűn mind az *orto* mind a *para* helyzetű szubsztituens csak kis mértékben hasad le, tehát ez a gyűrű nem lapjával adszorbeálódik a fémkatalizátor felületén. A β -fenil gyűrűn található *para* helyzetű szubsztituens viszont rendkívül gyorsan lehasad, amely a β -fenil gyűrű lapjával való adszorpciójára utal a katalizátor felületén. Vizsgálataink nem csak az adszorpció módjára mutattak rá, hanem arra is, hogy az általunk használt módszer β -fenil gyűrűn klórral helyettesített 2,3-difenilpropionsavak előállítására nem alkalmas a szubsztituens gyors hidrogenolízise miatt, ám kiválóan alkalmazható az α -fenilen klórral szubsztituált telített savak kinyerésére, mégpedig jó kitermeléssel és megfelelő optikai tisztasággal.

Reakció-diffúzió mintázatok a Landolt reakció bővített változataiban

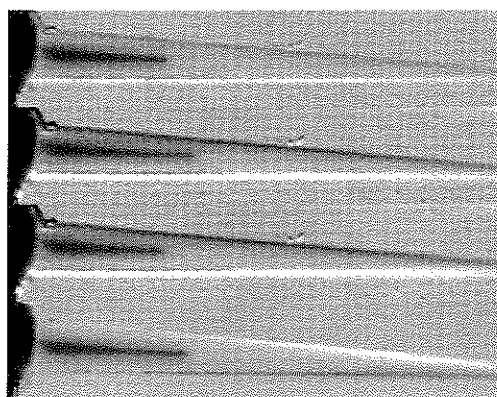
Takács Nándor, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Szalai István egyetemi adjunktus
ELTE TTK Kémiai Intézet, Analitikai Kémiai Tanszék

Az autokatalitikus kémiai reakciók számos érdekes jelenséget produkálnak. Ezek közül az egyik leglátványosabb a kémiai mintázatképződés. A kémiai mintázatokhoz hasonló struktúrákat a természetben számtalan helyen találhatunk: kőzetek belsejében kialakuló periodikus struktúrák, az állatok külsején látható jellemzően foltok, csíkok. Az egyszerűbb kémiai reakciókban megfigyelhető mintázatok modellként jó kiindulási pontot adnak a bonyolultabb biológiai és geológiai jelenségek megértéséhez.

A Landolt reakció (jodátion-szulfition) bővített változatai megfelelő körülmények között alkalmasak kémiai minták előállítására. A reakció-diffúzió rendszerek viselkedését alapvetően meghatározzák a peremfeltételek és a reaktor geometriája. Munkám a (kálium-(hexacianoferrát(II))-tal (FIS) és tiokarbamiddal (TuIS) bővített rendszerek kúpban és hengerben tapasztalható viselkedésének vizsgálata és az eredmények magyarázata volt. A kúp alakú gélekben elvégzett kísérletekkel a méretfüggés mintázatokra gyakorolt hatását vizsgáltam. Az eredményeket kétféle méretű henger alakú gél segítségével ellenőriztem. A két, alapvetően hasonló reakció-diffúzió rendszer viselkedésében lényeges különbségeket figyeltem meg, amelyeket részben kinetikai okokra tudtam visszavezetni.



Periodikusan mozgó front a kúp alakú gélben (FIS reakció)

Az ozmium-tetroxid és a perjodátion szinergikus hatásának vizsgálata jodidionnal szemben

Timári István, I. évf. vegyész MSc

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Lente Gábor egyetemi docens
DE TTK Szerzetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Vizsgálataink során a jodidion és az ozmium-tetroxid/perjodátion elegy közötti reakciót tanulmányoztuk. Az ozmium-tetroxid és a perjodátion oxidációs reakcióiban tapasztalható szinergikus hatást az irodalomban a metánnak metanollá való átalakítása során észlelték [1], azonban ezen érdekes jelenség okára még nem találtak választ. A metánnak metanollá való oxidálása ipari szempontból nagy jelentőséggel bíró folyamat, ezért is fontos a szinergikus hatás mechanizmusának értelmezése.

Mi a két oxidálószer hatását jodidionnal szemben vizsgáltuk meg. Kísérleteink során azt tapasztaltuk, hogy az ozmium-tetroxid/perjodátion elegy gyorsabban oxidálja a jodidiont, mint ha a két oxidálószeret önmagában alkalmazzuk. A legnagyobb relatív különbséget bórax pufferes közegben tapasztaltuk, ezért kísérleteink nagy részét ilyen körülmény mellett végeztük.

Kinetikai vizsgálataink során tanulmányoztuk a dolgozat témáját képező reakció kezdeti sebességének függését az ozmium-tetroxid, a perjodátion és a jodidion koncentrációjától, illetve a pH-tól.

A kinetikai effektusok kézenfekvő magyarázata lenne, hogy a perjodátion és az ozmium-tetroxid között valamiféle adduktum alakul ki, és ennek a koncentrációja összemérhető a meghatározó reagens koncentrációjával. Kiterjedt egyensúlyi kísérleteink folyamán azonban az ozmium-tetroxidot és perjodátiont is tartalmazó reakcióelegyben spektrofotometriás, pH-potenciometriás, ^{127}I NMR spektroszkópiás és ESI-TOF tömegspektrometriás módszerrel sem tudunk semmiféle komplex részecskét kimutatni.

Magyarázatként felvethető az is, hogy az ozmium-tetroxid a jodidion-perjodátion reakcióban keletkező egyik köztitermékkel reagálva fejt ki katalitikus hatását. A reakciórendszer pontos mechanizmusleírásának kulcskérdése, hogy az OsO_4 milyen részecskével reagál közvetlenül. Ilyen tekintetben eddigi kísérleteink csak negatív irányban nyújtanak támogatást: az oldott fém-oxiddal reagáló részecske nem lehet sem a perjodátion, sem a jodátion, sem a jodidion.

[1] Osako, T., Watson, E. J., Dehestani, A., Bales, B. C., Mayer, J. M., *Angewandte Chemie*, 118, 7593-7596 (2006)

Hidrodehalogénezési reakciók áramlásos mikroreaktorban**Torma Krisztián Gábor**, IV. évf. kémia BSc

DE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kathó Ágnes** tudományos főmunkatárs
DE Fizikai Kémiai Tanszék

A halogénezett szénhidrogének között számos toxikus, rákkeltő hatású van. Mivel természetes lebomlásuk rendkívül lassú, a szennyezések eltávolítása, ártalmatlanítása elengedhetetlen a környezet megóvásának szempontjából. Az alkalmazott kémiai folyamatok közül jelentősek a hidrodehalogénezési reakciók, melyeket gyakran úgy végeznek, hogy megfelelő heterogén katalizátor jelenlétében, állandó keverés mellett reagáltatják az átalakítandó vegyületet H_2 gázzal.

Dolgozatomban a szakaszos reaktor helyett folyamatos áramlásos reaktorban vizsgáltam a benzilklorid, klór- és brómbenzol valamint az 1,2-dibrómbenzol halogénmentesítését különböző hőmérsékleteken, nyomásokon valamint áramlási sebességek mellett. A vizsgálatokhoz a ThalesNano Zrt. által kifejlesztett mikrofluidikai reaktort (H-Cube[®]) használtam, melyben a reakciók cserélhető katalizátor oszlopokon mennek végbe.

A benzilklorid hidrodehalogénezését azonos körülmények között részletesen tanulmányoztam Raney-Ni és 10% Pd/C katalizátorral. Megállapítottam, hogy 20 bar H_2 nyomáson és 30 °C hőmérsékleten a Raney-Ni az aktívabb katalizátor, de sem a nyomás, sem a hőmérséklet növelésével nem fokozható az átalakulás. A Pd/C katalizátorral azonban a hőmérséklet emelésével jelentősen nőtt a konverzió, a nyomás fokozásával pedig teljessé vált a reakció. Bár további tízenhat katalizátorral is vizsgáltam a benzilklorid hidrodehalogénezését, céljaimnak a 10% Pd/C bizonyult a legalkalmasabbnak.

Így, a klór- és brómbenzol halogénmentesítéséhez is ezt használtam. Adataim az elvárásokat támasztják alá: a./ az aromás magban szubsztituált halogénvegyületek hidrodehalogénezése nehezebben megy végbe, mintha a halogén a benzilcsoporthoz kapcsolódna b./ a brómbenzol lényegesen enyhébb körülmények között dehalogénezhető, mint a megfelelő kloro-származék.

A brómbenzol és az 1,2-dibrómbenzol azonos körülmények között meghatározott konverzióit összehasonlítva, a kétszeresen halogénezett vegyület nagyobb mértékben alakul át. Ez arra utal, hogy az első halogén leszakítása könnyebb, mint a brómbenzol dehalogénezése.

Atmoszférikus H_2 nyomáson, $T = 35^\circ C$ -on szakaszos üstreaktorban dehalogéneztem az 1,2-dibrómbenzol oldatát az H-Cube[®] készülék töltetével megegyező mennyiségű katalizátor jelenlétében: öt perc alatt kaptam olyan termékelegyet (42,1% benzol, 14,9% brómbenzol), mely ezen a hőmérsékleten és nyomáson 13 mp tartózkodási idő mellett képződik az H-Cube[®] mikroreaktorban.

Reakciókinetikai szimulációk a PrIME adatbázis alapján**Varga Tamás**, III. évf. kémia BSc

ELTE Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Turányi Tamás** egyetemi tanár

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Zsély István Gyula egyetemi tanár

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Összetett reakciómechanizmusok vizsgálata esetén fontos és nagyon munkaigényes feladat a mechanizmuson alapuló modellek szimulációja számos különböző kísérleti körülménynél és az eredmények összehasonlítása a mért adatokkal. A mechanizmusvizsgálatban hasznos és hatékony eszköz az érzékenységvizsgálat [1]. Az érzékenységvizsgálat segítségével meg tudható, hogy az egyes paraméterek megváltoztatása mekkora változást idéz elő adott körülmények között egy szimulációs eredményben.

Munkám során elkészítettem egy Matlab programot, amely a PrIME adatbázisban [2] található, kísérleteket leíró adatfájlok alapján automatikusan elvégzi a szimulációt, táblázatosan és grafikusán összehasonlítja a mért és számított eredményeket, valamint érzékenységvizsgálatot is végrehajt. A programom segítségével szisztematikusan megvizsgáltam a PrIME adatbázisban található, a H_2/O_2 rendszerek gyulladását leíró kísérleti adatokat. Összesen 354 lökéshullám-csővel végzett kísérlet adatait dolgoztam fel és érzékenységanalízissel megállapítottam, hogy az egyes kísérleti eredmények mely elemi reakciólépés sebességi együtthatójának pontosításához használhatók fel.

A programom képes arra is, hogy tetszőleges PrIME adatfile alapján, tetszőleges kísérleti ponthoz polinomközelítésen alapuló válaszfelületet számítson. Egy válaszfelület [3] a modell paramétereinek függvényében fejezi ki egy szimuláció eredményét. Ezeket a válaszfelületeket alkalmazni lehet majd mechanizmus-optimalizáló eljárásokban.

A programom segítségével sokkal jobban felhasználhatóvá vált a Prime adatbázis, valamint gyorsabbá, egyszerűbbé és hatékonyabbá vált összetett gázkinetikai reakciómechanizmusok fejlesztése és tesztelése.

[1] Saltelli, A., M. Scott, K. Chen, *Sensitivity analysis*. Chichester: Wiley. (2000)

[2] <http://www.primekinetics.org/>.

[3] Davis, S. G., Mhadeshwar, A. B., Vlachos, D. G., Wang, H.,
Int. J. Chem. Kinet., **36**, 94-106 (2004)

A γ -valerolakton hidroxilgyökökkel végbemenő gázfázisú elemi reakciójának kinetikai vizsgálata gyorsáramlásos mérőberendezéssel**Zsibrita Dóra, III. évf. vegyészmérnök BSc****BME Vegyész- és Biomérnöki Kar**

Témavezetők: **Dr. Dóbbé Sándor** egyetemi magántanár
MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet
Farkas Mária tudományos segédmunkatárs
MTA KK Anyag- és Környezetkémiai Intézet

Napjainkban az egyik legnagyobb problémát jelenti Földünk fosszilis energiatarolékainak kimerülése. Ez arra ösztönzi a vegyipart, hogy minél több, lehetőleg új, a környezetre és egészségre nem ártalmas, biomasszából előállítható, megújuló nyersanyagforrásokat találjon. Az ígéretes, új biovegyületek sorába tartozik a γ -valerolakton (GVL). A GVL igazi környezetbarát molekula, régóta alkalmazzák élelmiszeradalékként.

Szembesülnünk kell viszont azzal a problémával, hogy nem ismerjük a molekula légkörkémiai hatásait, ezért a széleskörű felhasználás előtt alaposan meg kell vizsgálni a GVL fizikai-kémiai tulajdonságait és reakcióinak kinetikáját. Légkörkémiai szempontból elsősorban a hidroxilgyökökkel végbemenő reakciót kell tanulmányoznunk, mert az OH-gyök köztudottan a troposzféra egyik legreaktívabb szabadgyöke.

Kutatásaim célja az OH + GVL reakció sebességi együtthatójának meghatározása volt, mivel korábbról irodalmi adat nem állt rendelkezésre erre a reakcióra. A reakciókinetikai méréseket gyorsáramlásos mérőberendezéssel végeztem. A módszer különlegessége, hogy a reakció gyors gázáramban megy végbe, valamint a reakcióidőt a reaktánsok kontaktideje határozza meg. Az áramlási csőreaktorba bevezetett GVL a keveredési pontnál reakcióba lép az injektorból jövő OH-gyökkel. A gyök koncentrációval arányos OH-jel nagyságát a keveredési ponttól ismert távolságokban rezonancia-fluoreszcenciás detektálási módszerrel mértem.

Az egyes mérésekből kapott pseudo-elsőrendű sebességi együtthatókat a GVL koncentráció függvényében ábrázolva egyenest kaptam, melynek meredeksége arányos a bruttó reakció sebességi együtthatójával. A kapott sebességi együttható szobahőmérsékleten $(3,17 \pm 0,42) 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molekula}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

További terveim közé tartozik az OH + GVL reakció sebességi együtthatójának meghatározása a hőmérsékletfüggés tanulmányozásával, valamint a gyorsáramlásos technika mellett impulzuslézer fotolízissel is.

Szerves kémia I. tagozat

3,4-Dihidro- β -karbolinok és 1,3-dipólok reakciójának vizsgálata**Ábrányi-Balogh Péter**, IV. évf. vegyészmérnök BSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Milen Mátyás** tiszteletbeli oktató, kutató-fejlesztő vegyész
EGIS Gyógyszergyár Nyrt.

Dr. Keglevich György egyetemi tanár
BME-VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Dr. Mucsi Zoltán** senior kutató
Servier Research Institute of Medicinal Chemistry (SRIMC)

Dr. Körtvélyesi Tamás egyetemi docens
SZTE-TTIK Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A β -karbolinváz számos természetes és szintetikus eredetű vegyületben megtalálható. Ezeket a főleg alkaloid-jellegű anyagokat széleskörűen alkalmazzák a gyógyászatban biológiai aktivitásuk miatt, így szintézisük jelentős figyelmet kapott. Kísérleteink célja az volt, hogy új β -karbolinváz vegyületeket állítsunk elő (oxaza- és diazaharmicin-származékok), melyek öttagú D gyűrűjében több heteroatom is található.

Ezeket a vegyületeket a könnyen hozzáférhető 3,4-dihidro- β -karbolinokból terveztük előállítani a reakcióban *in situ* keletkező 1,3-dipólok segítségével, cikloaddíciós reakcióval.

Munkám során 4-fluorbenzolkarboximidoil-kloriddal reagáltattunk 3,4-dihidro- β -karbolinokat. Az 1-es szénatomon szubsztituálatlan vegyületek esetén megfigyeltük a kapott tetraciklus savkatalizálta izomerizációját és vizes közegben történő bomlását. A reakciót kiterjesztetük szubsztituált 3,4-dihidro- β -karbolin-származékokra is, az oxazaharmicin-származékokat 90 % feletti termeléssel nyertük ki. Két ekvivalens reagenssel végezve a reakciót egy érdekes triazol-*N*-oxid melléktermék keletkezésére lettünk figyelmesek.

A reakciómechanizmusok-elemzése során kiderült, hogy érdekes és ritka módon a dipóloktól várt 1,3-dipoláris koncertikus cikloaddíció helyett egy újszerű, ionos mechanizmusú nem koncertikus, kvázi kétlépéses addíció megy végbe és így jön létre a főtermék, majd abból egy újabb nitril-oxid addíciójával a melléktermék.

Vizsgáltuk a reakciót egy másik dipóllal, nitril-iminnel is. A diazaharmicin-származékokat 70-90 %-os termeléssel izoláltuk, mellékreakciókat nem tapasztaltunk. A reakciómechanizmus megegyezett nitril-oxid esetén leírtakkal.

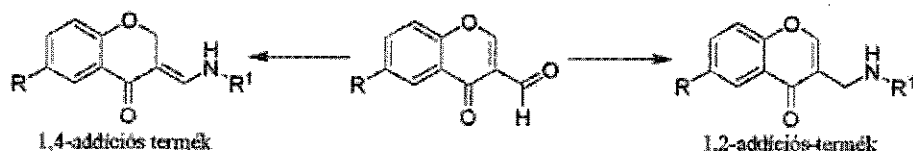
3-Formilkromonok redukív aminálásai**Balogh Fruzsina, I. évf. vegyész MSc**

DE Természettudományi Kar

Témavezetők: Dr. Kónya Krisztina adjunktus

DE Szerves Kémiai Tanszék

Munkám során a 3-formilkromonból redukív aminálással szekunder aminokat állítottunk elő, melyhez a kiindulási 3-formilkromonokat Vilsmeier-Haack reakcióval 2'-hidroxiacetofenonból módosított Harnisch eljárásnak megfelelően szintetizáltuk.^{1,2} Alifás és aromás aminokkal végrehajtva a reakciókat megfigyeltük, hogy nem minden esetben a várt szerkezetű terméket kaptuk. Megállapítottuk, hogy a redukciós lépésben a hidrid-ion belépése 1,4- vagy párhuzamos 1,2- és 1,4-addícióval valósul meg, attól függően, hogy az amino-csoporthoz alifás vagy aromás csoport kapcsolódik. ¹H-NMR, COSY-NMR és röntgendiffrakciós vizsgálatokkal igazoltuk a vegyületek szerkezetét.



Megfigyeltük, hogy az anilin származékok esetén az aromás gyűrűhöz kapcsolódó elektronküldő- vagy elektronszívó-csoportok hatással vannak a termék arányra. Így 17 eddig az irodalomban nem ismert vegyületet állítottunk elő. Négy vegyület szintézisét robotizált módszerrel is végrehajtottunk.

[1] (a) S. Sato, T. Sakamoto, E. Miyazawa, Y. Kikugawa, *Tetrahedron*, 60, 7899 (2004); (b) B. T. Cho, S. K. Kang, *Tetrahedron*, 61, 5725 (2005); (c) B. Miriyala, S. Bhattacharyya, J. S. Williamson, *Tetrahedron*, 60, 1463 (2004); (d) R. Apodaca, W. Xiao, *Org. Lett.*, 3, 174 (2001).

[2] (a) G. E. Ryschkewitsch, E. R. Birnbaum, *Inorg. Chem.*, 4, 575 (1965); (b) R. A. Baldwin, R. M. Washburn, *J. Org. Chem.*, 26, 3549 (1961).

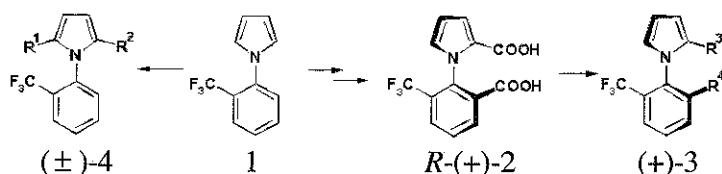
Bifunkciós 1-[2-(trifluormetil)fenil]pirrol származékok szintézise

Deák Szilvia, I. évf. gyógyszervegyész-mérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Mátravölgyi Béla doktoráns
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A BME SzKT Tanszékén működő kutatócsoportban már több éve folynak új arilpirrol származékok előállítását és tulajdonságaik vizsgálatát célzó kutatások. Munkám során 1-[2-(trifluormetil)fenil]pirrol (**1**) bifunkciós származékainak szintézisét valósítottam meg. Célom volt a **2** vegyületből kiindulva új eljárás kidolgozása a karboxil-csoportok szelektív átalakítására új, optikailag aktív származékok ((+)-**3**) szintéziséhez. Vizsgáltam továbbá alapvegyületem (**1**) szelektív brómozási lehetőségeit is. A bevitt brómatomok - fémorganikus úton - különböző funkciós csoportokra történő cseréje révén ugyanis új szerkezetű atropizomereket (**4**) állíthatunk elő.



Kutatócsoportunkban ezidáig **1** olyan amino- és hidroxil-csoportot is tartalmazó származékait állították elő, amelyekben az aminometil-csoport mindig a pirrol-gyűrűhöz kapcsolódik.

Kísérleteim során a szimmetrikusan szubsztituált diészter származék (**3**, $R^3=R^4=COOMe$) fenil-gyűrűhöz kapcsolódó funkciójának szelektív hidrolízisére dolgoztam ki hatékony eljárást. Ezt felhasználva megvalósítottam olyan, eddig még nem ismert szerkezetű származékok jó hozamú szintézisét, melyben a savamid-, illetve az amino-csoport a fenil-gyűrűn keresztül kapcsolódik a molekulához.

Kidolgoztam két, különböző szerkezetű dibrom származék (**3** és **4**, $R^n = Br$) jó termelésű szintézisét, és az egyik származék (**4**) halogénatomjainak szelektív cseréjével új származékokat, köztük foszfin típusú vegyületeket állítottam elő.

Az előállított vegyületek egyes csoportjai bizonyos reakciókban aszimmetrikus indukcióval rendelkezhetnek, ezért a C_1 -szimmetriájú katalizátor ligandumok valamint organokatalizátorok egy új csoportját alkotják.

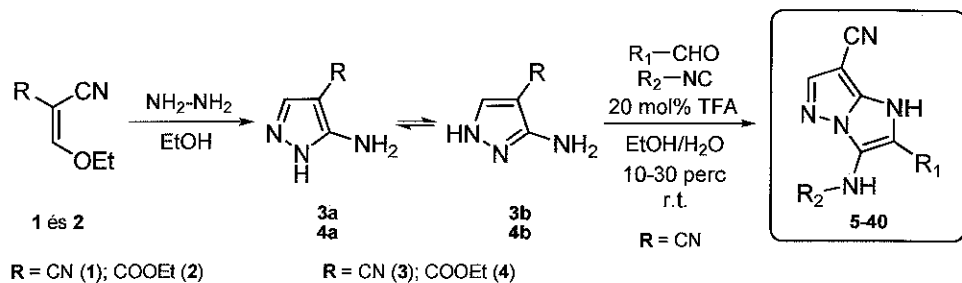
Imidazo[1,2-*b*]pirazol-származékok előállítása GBU reakcióval

Demjén András, II. évf. vegyész MSc.

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: Dr. Wölfling János tanszékvezető egyetemi docens
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

Az izocianid alapú multikomponensű reakciók (IMCR's), például az Ugi-reakció, széles körben elterjedt kémiai módszerek, melyekkel nagy tagszámú, nagy diverzitású, farmakológiailag releváns vegyületkönyvtárak alakíthatók ki [1]. Az Ugi-reakció egy speciális változata a Groebke-Blackburn-Ugi (GBU) reakció, amellyel amin szubsztitúált *N*-heterociklusok intramolekuláris gyűrűzárással biciklusos vegyületekké alakíthatók [2,3]. Figyelembe véve az aminopirazolok meglehetősen hiányos GBU-irodalmi háttérét, célunk volt egy reakciótermék kiválásával járó, hatékony módszer fejlesztése, valamint egy nagy tagszámú vegyületkönyvtár felépítése.



$\text{R}_1 = \text{Ph}; 3\text{-CF}_3\text{-4-F-Ph}; 4\text{-CF}_3\text{-Ph}; 2\text{-F-4-CF}_3\text{-Ph}; 3,4\text{-F-Ph}$
 $2,4,6\text{-OMe-Ph}; 4\text{-Me-Ph}; 2,3,4,5,6\text{-F-Ph}; (E)\text{-}(2\text{-fenilprop-1-enil})$
 $\text{R}_2 = t\text{-butil}, t\text{-oktil}, \text{ciklohexil}, \text{CH}_2\text{COOMe}$

1. ábra. Imidazo[1,2-*b*]pirazolok előállítása

Eredmények: 36 új imidazo[1,2-*b*]pirazol-származékot állítottunk elő. A reakciók 30 perc alatt, 31-87% hozammal játszódtak le. Az 1:1 arányú víz/etanol elegy és katalitikus mennyiségű TFA (20 mol%) alkalmazásával a termékeket egyszerű szűréssel és vizes mosással nyertük. A feldolgozás során szerves oldószert nem használtunk.

[1] A. Dömling, I. Ugi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 39, 3168-3210 (2000)

[2] C. Blackburn et al., *Tetrahedron Lett.*, 39, 3635-3638 (1998)

[3] L. El Kaim, L. Grimaud, *Tetrahedron* 65, 2153-2170 (2009)

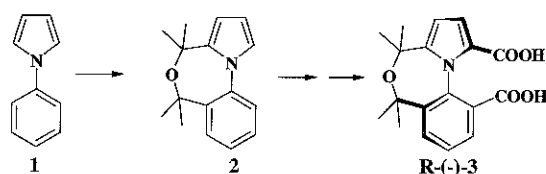
4,4,6,6-Tetrametil-4*H*,6*H*-pirrolo[1,2-*a*][4,1]benzoxazepin származékok szintézise

Erdélyi Zsuzsa, I. évf. gyógyszervegyész-mérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: Dr. Faigl Ferenc egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Mátravölgyi Béla doktoráns
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A pirrolobenzoxazepinek központi idegrendszerre való hatására több példa található az irodalomban. Az alapváz savkatalizált funkcionálizálása sokszor gyenge termeléssel adja a várt terméket, a pirrol-gyűrű savérzékenysége (bomlása) miatt. Ezért a BME SzKT Tanszékén kutatásokat folytatnak pirrolobenzoxazepin-származékok fémorganikus reakciókkal történő előállítására. Megfigyelték, hogy az alapvegyület (**2**) α -, és/vagy a fenil-gyűrű *orto*-helyzetébe beépített szubsztituens meggátolja a C-N kötés körüli rotációt. Ennek megfelelően célom volt a **2** vegyület előállítása és szintézisek kidolgozása új, gátolt rotációjú származékok előállítására.



Kutatómunkám során az 1-fenilpirrolból (**1**) kiindulva fémorganikus reakcióúton keresztül jó termeléssel állítottam elő a **2** modellvegyületet. A triciklusos vegyület további metallálásával α -, illetve α - és *orto*-helyzetben egyaránt szubsztituált származékok szintézisét valósítottam meg. Kidolgoztam a kapott karbonsav származékok nagy hatékonyságú elválasztását.

Kísérleteket végeztem a racém **3** dikarbonsav enantiomerjeinek (atropizomerek) elválasztására. Vizsgáltam a rezolváló ágens minőségének, a molarányoknak, az oldószereknek, valamint az időnek a szerepét. Előállítottam a tiszta dikarbonsav enantiomereket (pl. (-)-**3**), és tudományos együttműködés keretében meghatároztuk abszolút konfigurációjukat [1]. A karboxil-funkciók átalakításával a vegyületcsalád több új képviselőjét is előállítottam.

[1] Hessz Dóra, Diplomamunka, BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 2009.

Nitrilek szintézise oxigéntartalmú heterociklusokból Cu(I)-katalizált mikrohullám-aktivált reakciók segítségével

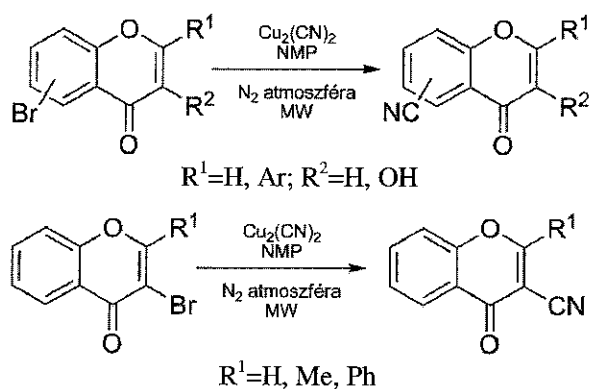
Kondor Zoltán, II. évf. vegyész MSc

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Patonay Tamás tanszékvezető egyetemi tanár
Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék

Vizsgálataim célja a múlt században felfedezett Rosenmund-von Braun reakció oxigéntartalmú heterociklusos vegyületek terén történő alkalmazhatóságának vizsgálata volt. Ezt a Cu(I) ionok jelenlétében végbemenő szubsztitúciós reakciót eddig alig használták ebben a vegyületkörben, bár az így elérhető nitrilszármazékok értékes kiindulási anyagok bonyolultabb szerkezetű származékok előállításának során.

A kiindulási anyagokból Rosenmund-von Braun reakcióval mikrohullámú reaktorban állítottam elő a nitrileket:



Kísérleteimet a 3-brómflavon, 6-brómflavon, 7-brómflavon, 3-bróm-2-metil-kromon, 3-bróm-kromon, 6-bróm-kromon, 7-bróm-kromon, 8-bróm-kromon, 3-bróm-4'-metilflavon, 3-bróm-4'-klórflavon, 6-bróm-3-hidroxi-flavon, 3-bróm-7-metoxi-flavon reaktánsokkal végeztem el. Tanulmányoztam a reakciókörülmények hatását és optimalizáltam a feldolgozási módszereket.

A bróm-nitril csere lejátszódott a vizsgált vegyületeknél, a flavonszármazékok esetén lényegesen magasabb (~70%-os) hozammal. A keletkezett termékek szerkezetét $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$, és IR-spektroszkópiás módszerekkel bizonyítottam. Megállapítottam, hogy mikrohullámú aktiválással a reakcióidő lényegesen lecsökkenthető.

A reakció kiterjesztése további származékokra és oxigén heterociklusokra folyamatban van.

Xilopiranozilidén-spiro-izoxazolin származékok szintézise**Kulcsár László, III. évf. Vegyészmérnök Bsc.**

DE TEK TTK

Témavezető: Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta egyetemi adjunktus
DE TEK TTK Szerves Kémiai Tanszék

Kutatómunkám során a glikogén foszforiláz enzim új szénhidrátanalóg inhibitorainak [1] szintézisét vizsgáltam. Az előállított szénhidrát származékok hozzájárulhatnak a II. típusú *diabetes* egy hatékonyabb kezelési lehetőségének kifejlesztéséhez, valamint a gátlás mechanizmusának pontosabb feltérképezéséhez.

Munkám célja xilopiranozilidén-spiro-izoxazolin származékok szintézise volt, melyek az irodalomból ismert glükopiranozilidén-spiro-izoxazolinokhoz hasonlóan a glikogén foszforiláz enzim hatékony inhibitorai lehetnek.

A xilopiranozilidén-spiro-izoxazolinok előállítását a peracetilezett-*exo*-xilál és az aromás-aldoximokból *in situ* képzett nitril-oxidok 1,3-dipoláris cikloaddíciós reakciójával terveztük. Ehhez első lépésben szintetizáltuk az 1,2,3,4-tetra-*O*-acetyl-D-xilózt, amit jégecetes hidrogén-bromid oldattal alakítottunk át a 2,3,4-tri-*O*-acetyl- α -D-xilozil-bromiddá. Ezt követően a bróm származékot higany-cianiddal reagáltatva a 2,3,4-tri-*O*-acetyl- β -D-xilopiranozil-cianidot nyertük, melynek Raney-Ni mellett, tozilhidrazin jelenlétében végzett reakciója a C-(2,3,4-tri-*O*-acetyl- β -D-xilopiranozil)-aldehid-tozilhidrazont szolgáltatva. Az tozilhidrazon Bamford-Stevens reakciójában előállítottuk a 3,4,5-tri-*O*-acetyl-2,6-anhidro-1-dezoxi-D-glüko-hex-1-enitolt. A benzaldehidet, a 2-naftaldehidet és az 1-naftaldehidet hidroxil-amminal reagáltatva nyertük az aromás-aldoximokat. Az aldoximokat nátrium-hipoklorit jelenlétében a 3,4,5-tri-*O*-acetyl-2,6-anhidro-1-dezoxi-D-glüko-hex-1-enitollal reagáltatva szintetizáltuk az (1R)-2,3,4-tri-*O*-acetyl-1,5-anhidro-D-xilitol-spiro[1,5]-3-aryl-4,5-dihidro-izoxazolokat. Végül az enzimkinetikai vizsgálatok elvégzéséhez a Zemplén-módszerrel eltávolítottuk a xilopiranozilidén-spiro-izoxazolinok acetyl védőcsoportjait, és így az (1R)-1,5-anhidro-D-xilitol-spiro[1,5]-3-aryl-4,5-dihidro-izoxazolokat nyertük.

[1] Somsák, L.; Czifrák, K.; Tóth, M.; Bokor, É.; Chrysina, E. D.; Alexacou, K. M.; Hayes, J. M.; Tiraidis, C.; Lazoura, E.; Leonidas D. D.; Zographos, S. E.; Oikonomakos, N. G. *Curr. Med. Chem.*, 15, 2933-2983 (2008).

Aminoflavonok és aminosavval kapcsolt flavonok szintézise Buchwald-Hartwig reakcióval

Pajtás Dávid, I. évf. Vegyész MSc

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: **Prof. Dr. Patonay Tamás** tszv. egyetemi tanár
DE Szerves Kémiai Tanszék

Kutatómunkám során sikerrel alkalmaztam a Buchwald-Hartwig reakciót a 6- és 7-brómflavon aminálására számos primer és szekunder alifás (nyílt láncú, gyűrűs) amin, illetve anilinszármazék esetén. Kimutattam, hogy a 7-brómflavon kapcsolása vagy közel azonos, vagy jobb hozammal ment végbe, mint a 6-brómflavon esetében. Bizonyítottam, hogy az alifás aminok α -helyzetű oldalláncai sztérikusan gátolják a kapcsolást, amit a butil-amin izomerek reakcióival igazoltam.

Megvizsgáltam a 6- és 7-klórflavon reaktivitását az azonos szubsztitúciójú brómszármazékokhoz képest és igazoltam, hogy a brómflavonok reaktivitása számottevően meghaladja az azonos szubsztitúciójú klórszármazékok reakcióképességét, valamint, hogy a 6-os és 7-es pozíciók reaktivitásbeli különbségei a klórflavonokra fokozottan érvényesek.

Kísérleteket folytattam a 7-bróm-4'-metoxiflavon aminálására is, és bebizonyítottam, hogy a B-gyűrűben *para* helyzetben lévő elektronküldő csoport pozitívan befolyásolta a hozamokat, bár ez a jobb izolálhatósággal is magyarázható.

A reakciót kiterjesztettem brómflavonok védett aminosavval történő kapcsolására is. Míg a 7-brómflavon védett aminosavval történő aminálását sikerrel megoldottam, a 6-brómflavon kapcsolására ezidáig nem sikerült megfelelő hozamot eredményező körülményt találnom. A 6-os és 7-es pozíciók közti reaktivitásbeli különbség itt bizonyult a legnagyobbak. A 6-brómflavon esetében a 7-es pozícióban kapcsolt termék is keletkezett, melynek szerkezetét ^1H - és ^{13}C -NMR méréssel egyértelműen igazoltam. Ezt a „halogéntánc” effektussal magyaráztam.

Kísérletsorozatot végeztem alternatív bázisok alkalmazhatóságára és ennek eredményeképpen sikerült visszaszorítani az aminosavval kapcsolt termék racemizációját.

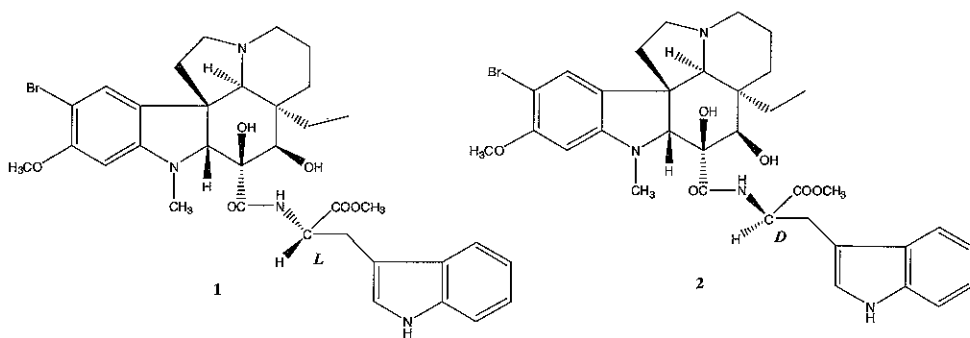
Eddigi munkám során 41, az irodalomban ismeretlen vegyületet állítottam elő, és szerkezetüket spektroszkópiai módszerekkel igazoltam.

Új dihidro-vindolin származékok szintézise**Péter Lilla, I. évf. MSc, Gyógyszervegyész-mérnök szak****BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki kar****Témavezető:****Dr. Hazai László** egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék**Konzulens:****Dr. Szántay Csaba** akadémikus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A kutatócsoportban korábban már szintetizálták a vindolin 16-os helyzetben aminosavakkal kapcsolt származékait. Ezek közül a 10-brómvindolin triptofánnal összekapcsolt származéka jelentős daganatellenes hatást mutatott.

Az irodalmi adatok alapján ismert a dihidrovinblastin is, melynek egyik komponense a 14,15-dihidrovindolin. A dihidrovinblastin esetén gyengébb citosztatikus hatást találtak, mint a vinblastinnál, viszont a toxicitása is kisebbnek bizonyult.

Ezen adatok ismeretében célul tűztük ki a 14,15-dihidrovindolin 10-brómszármazékának triptofán-metilészterekkel összekapcsolt származékai (**1** és **2**) szintézisét.



A dolgozatban bemutatjuk a téma irodalmi háttérét, valamint beszámolunk a szintézis menetéről.

Az előállított származékok (**1** és **2**) farmakológiai vizsgálata jelenleg folyamatban van.

1-Arilftalán származékok előállítása oxa-Pictet-Spengler reakcióval**Pilling Dávid**, IV. évf. vegyészmérnök BSc

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: **Dr. Kurtán Tibor** egyetemi adjunktus
DE TEK TTK Szerves Kémiai Tanszék

Irodalmi analógia alapján vizsgáltuk 1-aril-1,3-dihidroizobenzofurán származékok előállítását különbözőképpen szubsztituált benzilalkoholok és aromás aldehidek oxa-Pictet-Spengler reakciójával [1]. A 2,5-, 2,3-, és 3,4-dimetoxibenzilalkoholok oxa-Pictet-Spengler gyűrűzárási reakciója p-toluolszulfonsavval és $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ -tal nem vezetett a várt dihidroizobenzofurán származékok keletkezéséhez. A 3,5-dimetoxibenzil alkoholt választottuk következő kiindulási anyagunknak, melynek a reaktivitása feltehetően a korábbi dimetoxi származékok és trimetoxi származék között lehet. A 3,5-dimetoxibenzil alkoholt reagáltattuk p-nitrobenzaldehyddel és $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ Lewis savval, így alacsony kitermeléssel megkaptuk a kívánt gyűrűzárt terméket. A sikeres gyűrűzáráshoz mind a kiindulási benzil alkohol és az aldehid (v. acetál) reaktivitását meg kellett növelnünk. A termelés javítására két másik Lewis savat (TMSOTf , TiCl_4) is alkalmaztunk a gyűrűzárási reakcióban. A TiCl_4 esetén jelentős javulást értünk el a kitermelésben. Ezt követően a TiCl_4 katalizátorral végeztük el különböző aromás aldehidekkel az oxa-Pictet-Spengler gyűrűzárási reakciót, számos esetben izoláltuk az 1,3-dihidroizobenzofurán terméket, azonban néhány aldehid esetében nem tapasztaltunk átalakulást, így a reaktívabb dimetil-acetállal származékokkal ismételtük meg az oxa-Pictet-Spengler reakciót. Az előállított racém származékokat királis HPLC-én vizsgáltuk és lemértük az elválasztott enantiomerek online HPLC-CD-it, ami lehetőséget nyújtott a kiroptikai adatok és a sztereokémiai közötti összefüggések megfogalmazásához.

[1] Guiso, M.; Bianco, A.; Marra, C.; Cavarischia, C. *Eur. J. Org. Chem.* 2003, 3407.

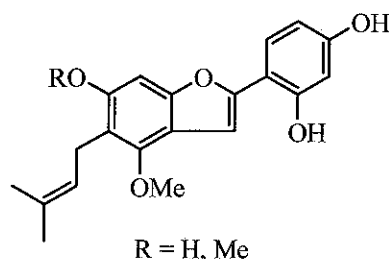
Kísérletek biológiailag aktív benzo[b]furán vázas természetes vegyületek analogonjainak előállítására Sonogashira keresztkapcsolással

Szabados Péter, I. évf. vegyész MSc

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai kar

Témavezető: **Dr. Juhász László** egyetemi adjunktus
Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszék

Az édesgyökérből izolált 2-arylbenzo[b]furán vázas vegyületek (1, 2) jelentős PPAR γ agonista hatással rendelkeznek [1], így szintézisükkel, és hatás-szerkezet összefüggés vizsgálatokhoz szolgáló analogonok előállításával felderíthetjük a biológiai hatásért fontos farmakofor egység szerkezetét.



A vegyületek retroszintetikus analízisével meghatároztuk a lehetséges szintézis utakat, és a reakciók kulcslépése a Sonogashira kapcsolásra [2] épülő diaril-acetilének előállítása.

Könnyen hozzáférhető vegyületekből modellvegyületeket állítottunk elő a kapcsolási körülmények optimalizására. Vizsgáltuk az acetilén komponens (TMS-acetilén; fenil-acetilén); a palládium forrás és a foszfinligandum szerepét a kapcsolási reakciókban.

A TMS-acetilén alkalmazásával a kívánt aril-acetilén származékok, és a vizsgálható gyűrűrendszer előállítását a TMS-acetilén hidrolitikus instabilitása miatt egyelőre nem sikerült megvalósítani.

Fenil-acetilén alkalmazásával optimalizáltuk a 2-arylbenzo[b]furán váz kiépítésére szolgáló „one pot” szintézis utat. A benzokondenzált gyűrűrendszer C-5 pozíciójában lévő prenil oldallánc kiépítésére kettős Wittig-reakción [3] alapuló stratégia kidolgozását kezdtük meg, mely módszerrel biztosíthatjuk a kívánt oldallánc regioselektív kiépítését a célmolekulákban.

[1] Minpei Kuroda, Yoshihiro Mimaki, *Bioorg. & Med. Chem. Lett.* 13, 4267-4272 (2003)

[2] K. Sonogashira et al., *Tetrahedron Lett.* 16, 4467 (1975)

[3] Wittig, U. Schöllkopf, *Ber.* 87, 1318 (1954)

3-, 4-Brómkuarinok aminokkal lejátszódó Pd-katalizált Buchwald-Hartwig kapcsolási reakciójának tanulmányozása

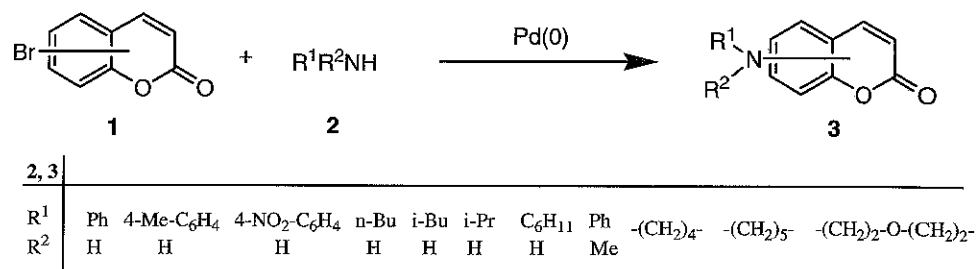
Szalóki Dóra, III. évf. kémia BSc

DE TEK Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva egyetemi tanársegéd
DE Szerves Kémiai Tanszék

Az utóbbi évtizedekben számos (hetero)aromáshalogén származékok és különböző nitrogén tartalmú vegyületek (aminok, amidok vagy más N-tartalmú heterociklusok) között lejátszódó átmenetifém katalizált kapcsolási reakciót fejlesztettek ki. Ezen eljárások közül a legkiemelkedőbb a Pd-katalizált Buchwald-Hartwig reakció.[1]

Mivel az irodalomban eddig *O*-tartalmú heterociklusok ilyen típusú kapcsolási reakcióira mindössze néhány példa található, ezért a munkánk során különböző helyzetben szubsztituált **1** bróm-kuarinokat állítottunk elő, majd ezen származékok különböző **2** primer és szekunder aminokkal lejátszódó Pd-katalizált C-N kapcsolási reakcióját tanulmányoztuk.



- [1] (a) Jiang, L.; Buchwald, S.L. in *Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions*, 2nd Ed., de Meijere, A.; Diederich, F., Eds., Wiley-VCH, Weinheim, pp. 699-760, (2004). (b) Kienle, M.; Dubbaka, S.R.; Brade, K.; Knochel, P. *Eur. J. Org. Chem*, 4166-4176, (2007). (c) Hartwig, F. in *Handbook of Organopalladium Chemistry for Organic Synthesis*, Negishi, E., Ed., Wiley-Interscience, New York, 2002, pp. 1051-1096. (d) Muci, A.R.; Buchwald, S.L. *Top. Curr. Chem.* 219, 131-209, (2002).

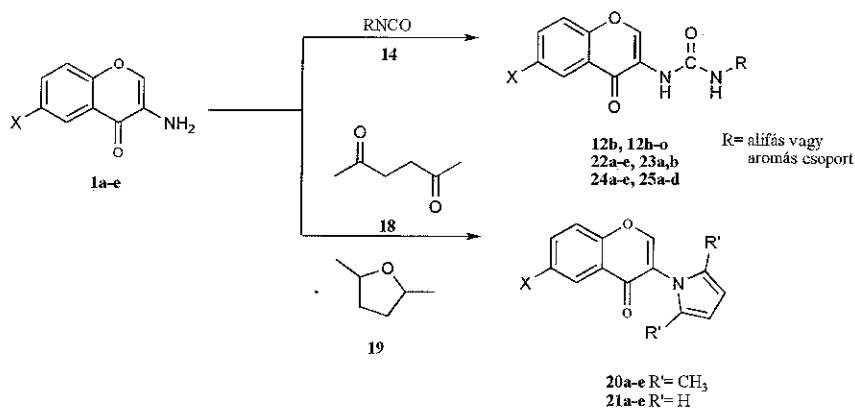
Oxigéntartalmú heterociklusos vegyületkönyvtár előállítása robotizált módszerrel

Szász Tímea, I. évf. vegyész MSc

DE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kónya Krisztina egyetemi adjunktus
DE Szerves Kémiai Tanszék

Munkám során feladatul tűztük ki a 3-aminokromon (**1a-e**) és szubsztituált analógjai (**1b-e**), valamint különböző módon szubsztituált aromás, illetve alifás izocianátok (**14**) között lejátszódó addíciós reakció tanulmányozását, karbamidszármazékok előállítását. Vizsgálni kívántuk az **1a-e** kromonok és a 2,5-hexándion (**18**), illetve 2,5-dimetoxitetrahydrofuran (**19**) között lejátszódó kondenzációs reakciót 3-(2,5-dimetil-1-pirroli)kromon (**20a-e**) és 3-(1-pirroli)kromon (**21a-e**) előállítására céljából.



1, 20, 21	a	b	c	d	e	12	22	23	24	25	
X	H	MeO	Cl	F	Me	X	H	MeO	Cl	F	Me

Az **1a-e** 3-aminokromonok és a **14** izocianátok szobahőmérsékleten absz. piridines, absz. toluolos, vagy absz. dioxános oldatban végzett reakciói változó hozammal a megfelelő karbamid származékokat adták, klasszikus és robotizált módszerrel egyaránt. Az előállított 24 karbamid származék az irodalomban eddig ismeretlen vegyület. Sikertült megfelelő reakció körülményt kidolgoznunk 3-(1-pirroli)- (**21a-e**), és 3-(2,5-dimetil-1-pirroli)kromon (**20a-e**) származékok 3-aminokromonokból (**1a-e**) történő jó hozamú előállítására. Az előállított 10 pirroli származék az irodalomban szintén ismeretlenek voltak.

**A piridingyűrű 4-es helyzetében szubsztituált új optikailag aktív
piridino-18-korona-6-éterek szintézise enantiomer-felismerés
tanulmányozása céljából**

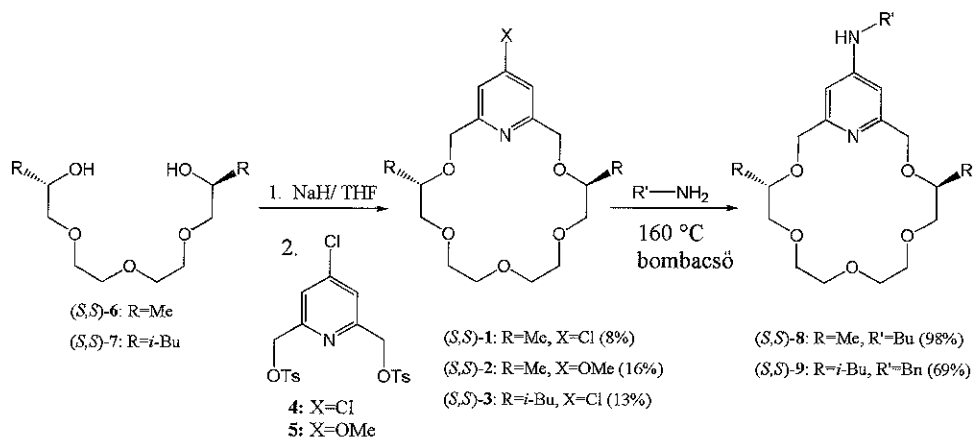
Székely Kata, I. évf. vegyészmérnöki MSc

BME Vegyészmérnöki Kar

Témavezető: Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A piridingyűrű 4-es helyzetében klóratomot, illetve metoxicsoportot tartalmazó (S,S) -1 – (S,S) -3 enantiomertiszta piridino-18-korona-6-étereket szintetizáltam, majd ezeket olyan származékokká alakítottam, amelyek alkalmassá teszik azokat szilika-gélhez történő rögzítésre.

Új módszert dolgoztam ki az (S,S) -1 koronaéter szintézisére: a piridingyűrű 4-es helyzetébe a funkciós csoportot még a makrogyűrű kialakítása előtt vittem be. Ezt a módszert alkalmaztam a (S,S) -2 és (S,S) -3 új koronaéterek szintézisére is. Az (S,S) -1 – (S,S) -3 koronaétereket **4**, ill. **5** piridin-2,6-dimetanol-ditozilátból és (S,S) -6, ill. (S,S) -7 tetraetilénglikol-származékból állítottam elő.



Az (S,S) -1 és az (S,S) -3 makrociklusokból a megfelelő aminnal reagáltatva állítottam elő az (S,S) -8 butilamino- ill. az (S,S) -9 benzil-aminocsoporttal szubsztituált koronaétereket, melyek szenzor- és szelektormolekulák kiindulási anyagául szolgálnak.



Szerves kémia II. tagozat

Királis koronaéterek enantiomer-felismerésének vizsgálata kiroptikai módszerrel

Csordás Barbara, II. évf. vegyész MSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Farkas Viktor** tudományos munkatárs
MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport

Az enantiomer-felismerés alapja, egyben a királis koronaéterek gyakorlati jelentősége is, hogy lehetőséget teremtenek bizonyos racém vegyületek – királis gyógyszeralapanyagok, aminosavak sói és származékai - enantiomerjeinek elválasztására. Manapság rutinszerűen alkalmazott folyadékkromatográfiában, ezen belül HPLC technikában már alkalmaznak koronaéter makrociklusokat. Szilikagélhez kötve királis állófázisok alakíthatók ki, célzottan a protonált primer ammónium- és aminosav sók enantiomerjeinek elválasztására [1]. Ma, a széleskörűen alkalmazott szerkezetvizsgáló módszerek közül a kiroptikai módszerekkel hatékonyabban tanulmányozhatók és ismerhetők fel a kiralitással összefüggő tényezők. Az ECD-spektroszkópia alkalmazhatóságának egyik fő területe a biomolekulák, biomolekuláris kölcsönhatásának, abszolút konfigurációjának, konformációs mozgékonyságainak, annak környezeti hatásainak tanulmányozása. [2].

Kutatásaim során modellvegyületként alkalmazott királis koronaéter gazdamolekula származékok protonált szerves ammóniumsókkal, valamint egy aminosav-észterrel alkotott komplexeinek, enantioszelektivitását vizsgáltam.

ECD-spektroszkópiával 1:1 sztöchiometriájú komplexek spektrumát vizsgáltam, a piridingyűrűhöz 4'-helyzetben bróm-, klór-, ciano-, valamint metoxi-szubsztituens komplexképződésre gyakorolt hatásának meghatározására törekedtem.

Célom volt még deprotonálható koronaéterek, mint folyadéktömb-membrán transzportban részt vevő jelölt ionofórok vendégmolekulákkal alkotott komplexeinek vizsgálata, gyűrűikbe épített foszfinsav/etil-foszfínát csoport, valamint kiralitás-centrumaik oktil- és metilcsoportjaik szerepének, továbbá a gazdamolekulák különböző oldószerekben mutatott viselkedésének tanulmányozása.

[1] Seyhan, S., Turgut, Y., Merdivan, M., Hosgören, H., *Tetrahedron: Asymmetry*, 17, 1700-1704 (2008)

[2] Steed, J. W., Atwood, J. L., *Supramolecular Chemistry: An Introduction*; Wiley & Sons Ltd., (2000)

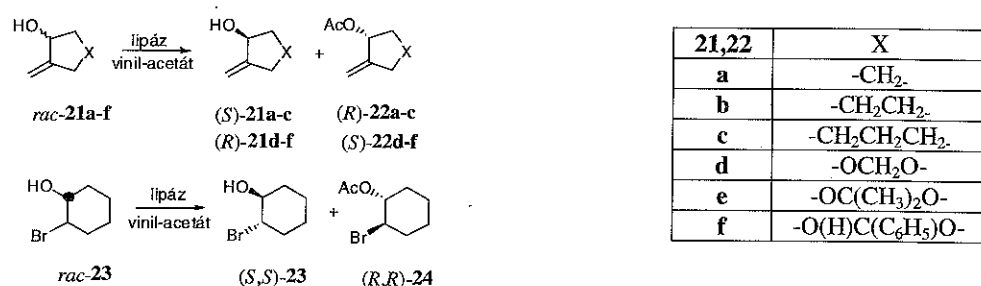
Szekunder alkoholok lipáz-katalizált kinetikus reszolválása szakaszos és folyamatos átfolyásos reakciókban

Dorkó Zsanett, I. évf. gyógyszervegyész-mérnök MSc

BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Hornyánszky Gábor** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Poppe László egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjainkban egyre fontosabbá válik a tiszta enantiomerek előállítása, ennek egyik ígéretes módszere az enzimkatalizált kinetikus reszolválás. Ezek többségét szakaszos módszerrel valósították meg, de automatizálhatóságuk miatt valószínűsíthető a folyamatos reaktorok térnyerése.



1. ábra: Racém cikloalkanolok lipáz-katalizált kinetikus reszolválása

Munkánk során racém gyűrűs szekunder alkoholok enzimikus reakcióit vizsgáltuk szakaszos és folyamatos technológiával. A folyamatos reaktorban végzett reakciók produktivitása rendre nagyobbak bizonyult, míg a szelektivitás a két módban hasonlóan adódott. Megállapítottuk, hogy a gyűrű tagszáma jelentősen befolyásolja az enzimek aktivitását és szelektivitását. Az enzimikus reakciókat továbbá nem csak az aszimmetriacentrummal szomszédos szubsztituens mérete befolyásolja, hanem a szomszédos szénatom hibridállapotának is komoly hatása van. Az eredmények egy közlemény alapját képezik [1].

[1] Tomin, A.; Hornyánszky, G.; Kupai, K.; Dorkó, Zs.; Ürge, L.; Darvas, F.; Poppe, L.: *Process Biochemistry* 45, 859-865 (2010)

**Királis savamidok előállítási lehetőségeinek vizsgálata
kemo-enzimatis kaskád rendszerben****Falus Péter**, II. évf. vegyészmérnöki MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: **Dr. Poppe László** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A XXI. században a szerves kémia egyik legnagyobb kihívása a biológiailag aktív vegyületek gazdaságos szintézise. A gyógyszeripar mellett a műanyag-, kozmetikai- és élelmiszeriparban is rendkívül fontos az enantiomerek nagytisztaságú előállítása, hiszen a felesleges enantiomer jelenléte akár jelentős problémákat okozhat (Contergan). Az optikailag aktív aminok, melyek gyógyszerhatóanyagok fontos építőkövei lehetnek, egyik korszerű és környezetbarát előállítási lehetősége a folyamatos reaktorban történő enzimkatalizált kinetikus rezolválás.

Munkám során különböző racém aminok folyamatos reaktorban történő enzimkatalizált acilezésének körülményeit vizsgáltam *Candida antarctica* B lipázzal (CalB), az oldószer, az acilezőszer és a hőmérséklet, mint paraméterek függvényében. Az enantiomer szelektivitás hőmérséklettől való függésében a várt monoton csökkenés helyett 40°C körül maximumot találtam a vizsgált -10–60°C-os intervallumban.

Emellett új módszert dolgoztam ki az aminok, mint kiindulási anyagok ketonból történő redukzív aminálására egy lépéses reakcióban, az eredeti Leuckart és Leuckart-Wallach reakciók módosításával. Az oxocsoport helyzetétől függően különböző ketonokat vizsgáltam, mely ketonok között volt alifás, cikloalifás, aromás és heteroaromás is. A reakciót ammónium-formiáttal különböző fémkatalizátorok jelenlétében, különböző hőmérsékleteken valósítottam meg, melynek során vizsgáltam a víz reakcióra gyakorolt hatását is. Megfigyeléseim szerint az aromás gyűrűhöz képest α -helyzetben lévő oxocsoport esetében a Zn, míg a többi esetben a Pd/C katalizátor melléktermék nélkül képi a kívánt amint. A Pd/C katalizálta reakciókat folyamatos, átfolyásos reaktorban is megvalósítottam.

Szteránvázas azidok réz-katalizált 1,3-dipoláris cikloaddíciója egyszerű alkinekkel és ferrocénszármazékokkal

Fehér Klaudia, III. évf. vegyészmérnök BSc

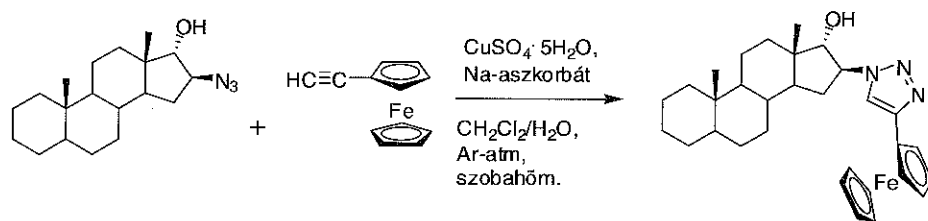
PE Mérnöki Kar

Témavezetők: Skodáné Dr. Földes Rita egyetemi tanár
PE Szerves Kémia Intézeti Tanszék
Balogh János tudományos segédmunkatárs
PE Szerves Kémia Intézeti Tanszék

Az 1,3-dipoláris cikloaddíció különféle öttagú heterociklusok kialakítására alkalmas módszer. Azidok és alkinek reakciójában 1,4- illetve 1,5-diszubsztituált, regioizomer 1,2,3-triazolok keletkeznek. Réz katalizátor alkalmazásával a reakció szelektíven az 1,4-diszubsztituált származékot eredményezi. A módszer előnye, hogy a legtöbb esetben enyhe reakciókörülmények között végrehajtható és kitűnő hozammal szolgáltatja a termékeket.

Kutatásaim során szteránvázas azidok réz-katalizált reakcióját vizsgáltam különféle alkin reakciópartnerekkel. Bár az oldalláncban heterociklust tartalmazó szteroidok sok képviselője rendelkezik kedvező biológiai hatással, a réz-katalizált azid-alkin cikloaddíciót csak néhány esetben használták hasonló típusú vegyületek előállítására.

Reakciópartnernként az egyszerű alkinek mellett ferrocéntartalmú vegyületeket is alkalmaztam. A szteroid-ferrocén konjugátumok elektrokémiai detektálásra alkalmasak, így az előállított vegyületek bioszenzorok alapelemei is lehetnek.



A szteránvázas azidokat a megfelelő epoxidokból szintetizáltam. Az egyik ferrocéntartalmú alkint is magam állítottam elő Co-katalizált karbonilezési reakcióval.

A termékek szerkezetét különféle spektroszkópai módszerekkel igazoltam. Megállapítottam, hogy a reakció mind ferrocént tartalmazó, mind pedig egyszerű, nem ferrocéntartalmú alkinekkel jó hozammal kivitelezhető.

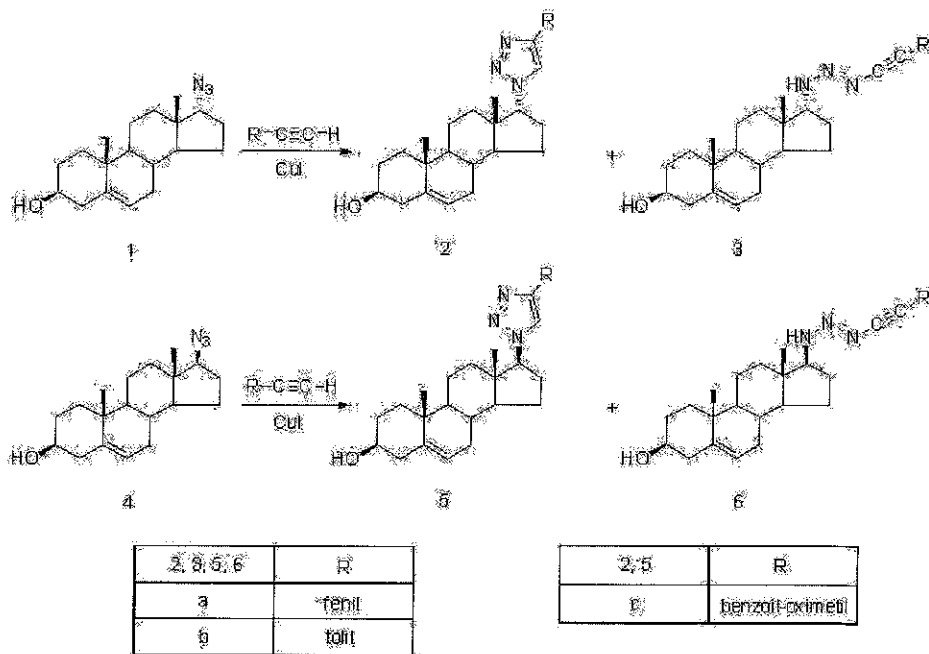
Gátolt térhelyzetű azidoszteroidok 1,3-dipoláris cikloaddíciója

Görbe Tamás, I. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Schneider Gyula** egyetemi tanár
SZTE Szerves Kémiai Tanszék

A 17 α - és 17 β -azidoandroszt-5-én-3 β -olok (**1**, **4**) terminális acetilént tartalmazó reagensekkel végzett dipoláris cikloaddíciója jó lehetőséget kínál a megfelelő 17 α - és 17 β -triazolil származékok (**2a-b**, **5a-b**) előállítására. A hasonló szerkezetű, 17-helyzetben *exo*-heterociklust tartalmazó szteroidok gátolják az androgénfüggő betegségek, így a *benignus prostata hyperplasia* kialakulását.



Azt találtuk, hogy a 17 α - és 17 β -azido-androszt-5-én-3 β -ol (**1**, **4**) homogén-fázisban, Cu(I) jelenlétében végrehajtott cikloaddíciója mérsékelt termeléssel vezetett a megfelelő 17 α - és 17 β -triazolil származékokhoz (**2a-c**, **5a-c**). A homogén reakcióban alkalmazott bázis minőségétől függően ugyanakkor jelentős mennyiségű nyílt láncú vegyület (**3a-b**, **6a-b**) képződését is tapasztaltuk. Az 1,3-dipoláris cikloaddíció során kapott vegyületek képződését értelmeztük, szerkezetüket ^1H - és ^{13}C -NMR felvételekkel, és tömegspektroszkópiás méréssel igazoltuk.

Kísérletek D-glüko- L-ido konfigurációs átalakításra konformációs inverzióval

Kovács Tamás IV. évf. Gyógyszerész

DE Gyógyszerésztudományi Kar

Témavezető: Dr. Borbás Anikó tudományos főmunkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék

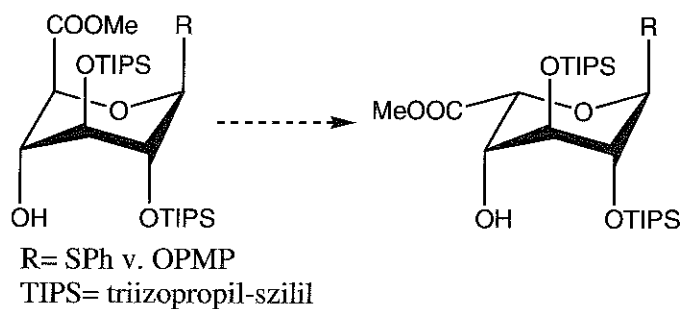
A heparin egy véralvadásgátló hatással rendelkező poliszacharid, mely az antritrombin-III aktiválása révén fejti ki hatását. Szintetikus heparinoidok előállítása során komoly problémát jelent az L-iduronsav építőelem szintézise, így célul tűztük ki új, hatékony L-iduronsav előállítási módszerek kidolgozását.

Az L-idoz csak az 5-ös szénatom konfigurációjában tér el a D-glükóztól, így kézenfekvő a szintézist D-glükózból kiindulva megvalósítani.

A C-5 konfigurációs inverzióhoz nagy térkitöltésű szomszédos szilil csoportokkal ${}^1\text{C}_4$ konformációban rögzített [1] glükuronsav-származékot állítottunk elő; ebben a konformációban az L-ido konfiguráció energetikailag kedvezőbb a D-glüko konfigurációnál, a karboximetil-csoport ekvatoriális térállása miatt.

Az epimerizációt lúgos közegben deprotonálással kívántuk végrehajtani. A reakció feltétele, hogy C-5 szomszédságában elektronszívó csoport legyen, így az 5-ös hidrogén lazítottá válik, és így lehasítható. A β -elimináció kiküszöbölése érdekében a 4-OH csoportot szabadon hagytuk.

A deprotonálási kísérleteket NaOMe-tal metanolban [2], valamint Li-diizopropil-amiddal tetrahydro-furánban hajtottuk végre.



[1] Yamada, H., Tanigakiuchi, K., Nagao, K., Okajima, K., Mukae, T. *Tetrahedron Lett.* 45, 9207-9209 (2004)

[2] Westerduin, P., van Boeckel, C. A. A., et al. *Bioorg. Med. Chem.* 2 1267-1280 (1994)

Androsztán vázas karbonsavamidok szintézise palládium-katalizátorok jelenlétében

Pálinkás Noémi, II. évf. kémia BSc

PTE Természettudományi Kar

Témavezető: Dr. Kollár László egyetemi tanár
PTE Szervetlen Kémia Tanszék

Az átmenetifém-organikus kémia az elmúlt ötven évben látványos fejlődésen ment keresztül, és manapság már általánosan alkalmazzák a szintetikus szerves kémiában, ahol áttörést jelentenek a különböző átmenetifémek jelenlétében lejátszódó homogénkatalitikus reakciók. Ezekben a reakciókban a kiindulási anyag és a katalizátor azonos fázisban van. Ma már ritkán találkozunk olyan újszerű szintetikus reakcióval, ahol a homogén katalízis nem játszik szerepet.

A dolgozat alapvető célja az androsztán vázas vegyületek homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakciói, azaz a szteránváz új funkciós csoportjainak olyan homogénkatalitikus úton történő kiépítése, melyet hagyományos szintetikus módszerekkel nem, vagy csak igen körülményesen, több lépésben lehetne elvégezni. A kapott származékok a 3-as és a 17-es pozícióban tartalmazznak szubsztituenseket. Ezek a származékok a bizonyítottam 5α -reduktáz inhibitor sajátságú vegyületek analógjainak tekinthetők.

Megállapítást nyert, hogy a hidrazon-jódalkén reakcióúton előállított származékok palládium-katalizátorok jelenlétében aminokarbonilezési reakcióba vihetők, így a 3-as és a 17-es pozícióban azonos karbonsavamid funkciós csoportok nyerhetők. Ez primer és szekunder aminokkal is sikeresnek bizonyult.

További cél volt a 3-as pozíció etilén-ketál formájában történő ideiglenes védelme a 3,17-diketál intermedieren keresztül, majd a már említett hidrazon-jódalkén úton előállt a kívánt 17-jódvinil-3-(etilén-ketál) származék. Ezt a vegyület *terc*-butilaminnal homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakcióba vihető, palládium-katalizátorok mellett. Ezt követően a ketál hidrolízisével visszaállt a kiindulási 3-keto-4-én szerkezeti egység. Végül a 3-as helyzetben egy, a 17-es pozícióban található karbonsavamidtól különböző amid funkciós csoport kialakítása, azaz 'vegyes' diamidok nagyhatékonyságú szintézise.

A termékek azonosítását különböző analitikai módszerek segítették (^1H - ^{13}C -NMR, GC-MS, IR).

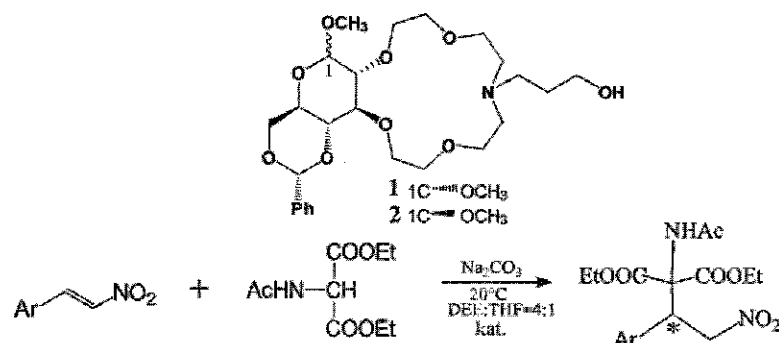
D-glükóz-alapú koronaéterek szintézise és alkalmazása aszimmetrikus Michael-addícióban

Sóti Péter Lajos, II. évf. vegyészmérnöki MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Bakó Péter egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Munkám során néhány különböző gyűrűmagyságú, D-glükózból felépülő királis koronaétert szintetizáltam. Előállítottam az α -D-glükopiranozidból és β -D-glükopiranozidból felépülő monoaza-15-korona-5 típusú lariat étereket (**1** illetve **2**) több lépésben, valamint α -D-glükopiranozidot és antrakinon vázat tartalmazó makrociklusokat melyek alkalmasak lehetnek UV, illetve fluoreszcencia spektroszkópiás vizsgálatokra.



Az **1**, **2** vegyületeket és korábban szintetizált királis koronaétereket fázistransfer katalizátorként alkalmaztam aszimmetrikus reakciókban. A koronaéterek akkor alkalmasak erre a célra, ha a reakció mechanizmusában egy komplexszálásra alkalmas fémion is szerepet játszik. Ilyen reakciók a Michael-addíciók. Ezek között találtunk egy reakciót melyben a monoszacharid-alapú koronaéterek jelentős aszimmetrikus indukciót tudtak kifejteni. A C-H savas dietil-2-acetamidomalonátot β -nitrosztírolra és szubsztituált származékaira addicionáltattam, szilárd-folyadék heterogén fázisú reakciókban. A folyadék fázist a szerves oldószerben oldott reaktánsok képezték, a szilárd fázis pedig a bázisként használt nátrium-karbonát volt. Az optikai tisztaság meghatározása királis HPLC-vel történt. Legjobb hatású katalizátornak **1** vegyület bizonyult, melynek jelenlétében 34-87%, optimális oldószerrelégy esetén 99% enantiomer felesleggel nyertem a Michael adduktot.

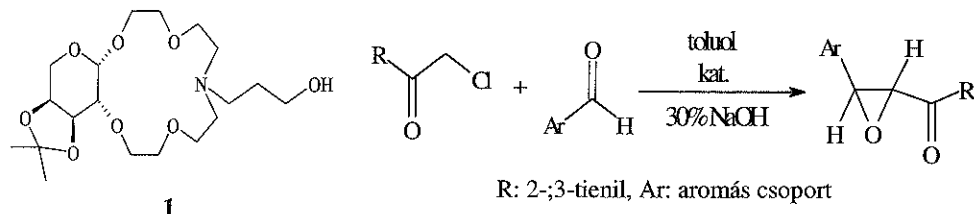
Szénhidrát alapú koronaéterek szintézise és alkalmazása aszimmetrikus Darzens-kondenzációkban

Szabó Tamás, I. évf. Gyógyszervegyész-mérnök MSc

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető: Dr. Bakó Péter egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Munkám célja volt monoszacharid alapú koronaéterek királis fázistranszfer-katalizátorként való alkalmazását vizsgálni α -klóracetil-tiofének és különböző aromás aldehid-származékok Darzens-kondenzációjában folyadék-folyadék kétfázisú rendszerben (1. ábra).



1. ábra

Szintetizáltam egy α -D-glükopiranozidból felépülő monoaza-15-korona-5 típusú makrociklust négy lépésben, ismert módszerek alapján, majd ennek mintájára előállítottam egy arabinopiranozidból felépülő lariát étert (**1**) amely az irodalomban ismeretlen volt. Vizsgáltam ezen katalizátorok aszimmetrikus indukcióját különböző fázistranszfer reakciókban.

Előállítottam a Darzens-kondenzációk kiinduló vegyületeit, két α -klóracetil-tiofén izomert. Vizsgáltam a 2-klóracetil-tiofén 2-metilbenzaldehiddel lejátszódó aszimmetrikus Darzens-kondenzációját fázistranszfer-reakcióban több cukoralapú koronaéter katalizátor jelenlétében. A legjobb katalizátor a α -D-glükóz-alapú nitrogénen hidroxipropil-csoporttal szubsztituált molekula volt (64% ee).

Vizsgáltam továbbá a 2-klóracetil-tiofén Darzens-kondenzációját szubsztituált benzaldehid-származékokkal, valamint egyéb aromás aldehidekkel. A legnagyobb optikai tisztaságot piperonából kiinduló reakcióban értem el (85% ee). Röntgendiffrakcióval sikerült meghatározni a 2-Me-benzaldehiddel, és piperonállal keletkező tiszta enantiomerek abszolút konfigurációját, ami (2R,3S)-nek bizonyult.

Összehasonlítva a 2- és 3-klóracetil-tiofénből kiinduló Darzens-kondenzációkat megállapítható, hogy az utóbbi reagenssel kisebb optikai termeléseket tapasztaltam.

Szteroid-ferrocén konjugátumok előállítása

Szánti-Pintér Eszter, II. évf. vegyész MSc

PE Mérnöki Kar

Témavezető: Skodáné Dr. Földes Rita egyetemi tanár
PE Szerves Kémia Intézeti Tanszék

A szteroid-ferrocén konjugátumok több szempontból is jelentősek lehetnek: bizonyították folyadék-kristályos viselkedésüket, antibakteriális hatásukat. A ferrocén jelenléte az emberi szervezetben előforduló szteroidhormonok elektrokémiai detektálását is lehetővé teszi. Másrészt a szteroidok heterociklusos származékai kedvező biológiai aktivitással rendelkezhetnek, 1,2,3-triazolilcsoportot tartalmazó vegyületek esetén HIV-ellenes, antibakteriális, allergiaellenes, béta-laktamáz inhibitor hatást mutattak ki.

Munkám során céлом hasonló vegyületek előállítása volt olyan homogénkatalitikus reakciókkal, melyeket korábban nem alkalmaztak szteroid és ferrocén összekapcsolására.

Kezdetben jód-ferrocén és etinil-szteroidok palládium-katalizált, karbonilezési körülmények között lejátszódó Sonogashira kapcsolási reakcióját vizsgáltam, mivel az így keletkezett alkinil-kezonok kiindulási vegyületet szolgáltathatnak heterociklusos származékok előállításához. A termékek azonban nem minden esetben keletkeztek jó hozammal, így a kapott vegyületek továbbalakítása heterociklust tartalmazó vegyületté jelentős anyagvesztéssel járt volna. Ennek kiküszöbölésére egy másik reakcióutat választottam, a réz-katalizált azid-alkin cikloaddíciót, mellyel közvetlenül jutottam heterociklust tartalmazó származékokhoz.

Elsőként rendelkezésemre álló etinil-szteroidokkal, valamint általam előállított ferrocén-azid származékkal vizsgáltam a cikloaddíciós reakció lejátszódását. További, új alkinil-szteroidokat magam állítottam elő aminokarbonilezési reakcióval. Az azid-alkin cikloaddíciós reakcióban az alkinil-szteroidok jelentős átalakulást mutattak a Sonogashira kapcsolási reakcióhoz képest. A kapott termékek új vegyületek, melyek biológiai hatással rendelkezhetnek.

A reakciók lejátszódását vékonyréteg-, illetve gázkromatográfias módszerrel követtem. Az általam előállított vegyületek szerkezetét $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ spektroszkópiával, illetve tömegspektrometriával igazoltam.

Foszfán-foszforamidit ligandumok szintézise és alkalmazása aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban

Tóth Attila, V. évf. vegyészmérnök BSc

PE Mérnöki Kar

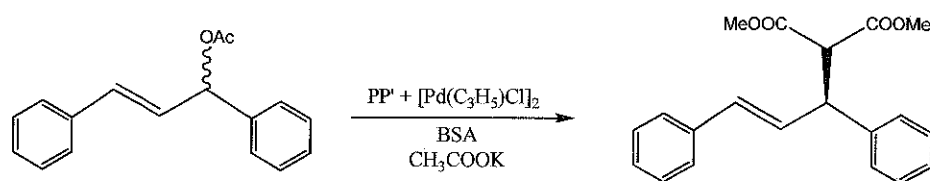
Témavezetők: Dr. Bakos József egyetemi tanár

Balogh Szabolcs PhD hallgató

PE Szerves Kémia Intézeti Tanszék

Az optikailag aktív vegyületek gyakran biológiailag is aktívak. A szintetikus úton előállított királis molekulák elsősorban a gyógyszeripar számára jelentősek. A szintézisek során a szelektivitás és a gazdaságosság mellett a zöld kémia 12 alapelvének alkalmazása is fontos tényezővé vált.

Az aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúció (1. ábra) általános eljárás szén-szén, illetve szén-heteroatom kötések kialakítására [1].



1. ábra Allil-helyzetű szubsztitúció

Átmenetifém-katalitikus aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúció során a fématomhoz koordinálódó királis módosító ligandum optikai tulajdonságokat örökít át a szubsztrátumnak, így racém elegyből kiindulva az egyik enantiomer képződése túlsúlyba kerül. A nemrég felfedezett foszfán-foszforamidit típusú ligandumok [2] eredményesen alkalmazhatók homogénkatalitikus aszimmetrikus reakciókban.

Kutatásunk során új, kétfogú, C_1 szimmetriájú foszfán-foszforamidit ligandumokat szintetizáltunk. A ligandumok és komplexeik különös előnye az, hogy levegőn igen stabilisak, kiemelkedő katalitikus eredményeket nyújtanak enantioszelektív szintézisekben. Munkám során az új ligandumokkal módosított Pd-komplexek katalitikus tulajdonságait vizsgáltam allil-típusú szubsztitúciós reakciókban. A kísérletek alapján megállapítottam, hogy az új katalitikus rendszer az eddig ismert katalizátorokkal megközelítőleg azonos szelektivitású, de aktivitása kiemelkedő.

[1] B. M. Trost, *Chem. Pharm. Bull.*, 50, 1-14 (2002)

[2] X. Jia, X. Li, W. S. Lam, S. H. L. Kok, L. Xu, G. Lu, C.-H. Yeung, and A. S. C. Chan, *Tetrahedron: Asymmetry*, 15, 2273–2278 (2004)

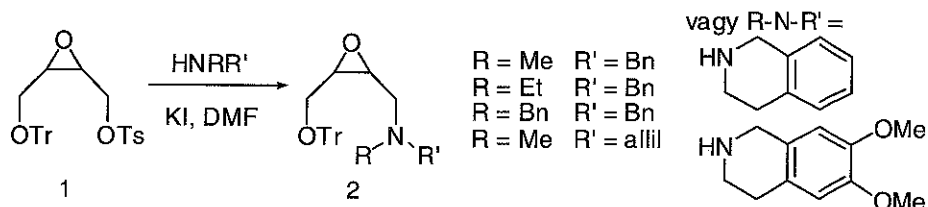
Diasztereoselektív azetidín szintézis

Turczel Gábor, IV. évf. vegyészmérnök BSc

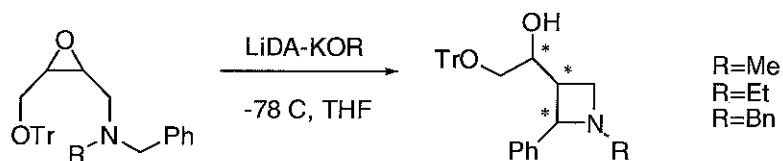
BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Kovács Ervin doktoráns
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A kutatócsoportban végzett munkám során *cisz*-2,3-diszubsztituált-oxirán származékok (**2**) lítium-diizopropilamid és kálium-*tert*-butoxid keverékével (LiDA-KOR szuperbázissal) kiváltott izomerizációját, illetve az izomerizáció diasztereoselektivitását vizsgáltam. A fémorganikus reakcióhoz szükséges kiindulási anyagokat több lépésen keresztül állítottam elő az **1** intermedieren keresztül. Így több, eddig az irodalomban ismeretlen vegyületet is szintetizáltam.



A **2** oxiránok szuperbázissal kiváltott gyűrűzárási reakciójáról megállapítottam, hogy a vizsgált esetekben a metallálás mindig az aminocsoporthoz kapcsolódó benzil helyzetű szénatomon történt és a keletkezett fémorganikus vegyület intramolekuláris reakcióban, sztereoselektív módon olyan új azetidín-származékokat szolgáltatott, amelyekben az azetidíngyűrű 2- és 3-helyzetű szubsztituensei kizárólag *transz*-térállásúak voltak. Az azetidinek szerkezetét két dimenziós NMR spektroszkópiai mérésekkel támasztottuk alá az alábbi három származék esetében.



Előállítottam az *N*-Boc védett és a nitrogénen allil és metil helyettesítőket tartalmazó oxiránokat is. Az *N*-Boc-származékot a fentiekkel azonos körülmények között, az *N*-allil származékot pedig LiC-KOR szuperbázissal izomerizáltam azetidinné.

Szerves kémia III. tagozat

ACC-Oxidáz enzim működési mechanizmusának vizsgálata

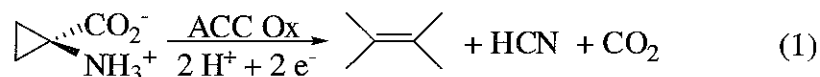
Bogáth Dóra II. évfolyam kémia BSc

PE Mérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Kaizer József** egyetemi docens**Dr. Baráth Gábor**

PE Szerves Kémia Intézeti Tanszék

Az etilén növényi hormon, a gyümölcsök érését gyorsítja, és a növények virágzására hat. A magvak csírázását, és a hagymák, gumók kihajtását befolyásolja. Az etilént a kertészetben és a gyümölcsstermesztésben is felhasználják hormonhatása miatt, mivel a zölden szedett gyümölcsöknek (például a banánnak) segíti az utóérését, és időzíthető vele egyes dísznövények virágzása (bizonyos határok között). A növényekben az etilén bioszintézisének utolsó lépése az 1-aminociklopropán-1-karbonsav (ACC) átalakítása, melyet az ACC-Oxidáz enzim katalizál (1) [1].



Az enzim röntgendiffrakciós mérései alapján az aktív centrumban a központi fémhez 2 hisztidin és egy aszparaginsav (2N, 1O) koordinálódik egyfogú ligandumként [2]. Az irodalomban csupán néhány példa található vastartalmú enzim-szubsztrát komplexre, amelyek oxidációja etilént eredményez, katalitikusan működő rendszer azonban ezidáig nem ismert [3].

Vizsgálatainkat 2-amino-izovajsavval (AIB) – amely alternatív szubsztrátum-ként szolgál a fenti enzimreakció modellezésére –, 1-aminociklopropán-1-karbonsavval (ACC) és alaninnal (ALA) is elvégeztük. Katalizátorként $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{salen})\text{Cl}]$ komplexet (salenH₂: szalicilsav-etiléndiamin), oxidálószerként pedig hidrogén-peroxidot használtunk. A reakciók nyomkövetése és a termékek azonosítása gázkromatográfiás módszerrel történt. Az eredmények alapján megállapítható, hogy mindhárom esetben az enzimátikus útnak megfelelő termékeket kaptuk. A részletes reakciókinetikai vizsgálataink alapján javaslatot tettünk a reakció(k) lehetséges mechanizmusára vonatkozólag.

[1] D. O. Adams, S. F. Yang, *PNAS*, **76**, 170 (1979)[2] Z. Zhang, J. S. Ren, I. J. Clifton, C. J. Schofield, *Chem. Biol.*, **11**, 1383 (2004)[3] Y. Nishida, T. Akamatsu, T. Ishii, Y. Oda, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, 496 (1992)

Nitroxidokkal módosított rezveratrolok szintézise és vizsgálata

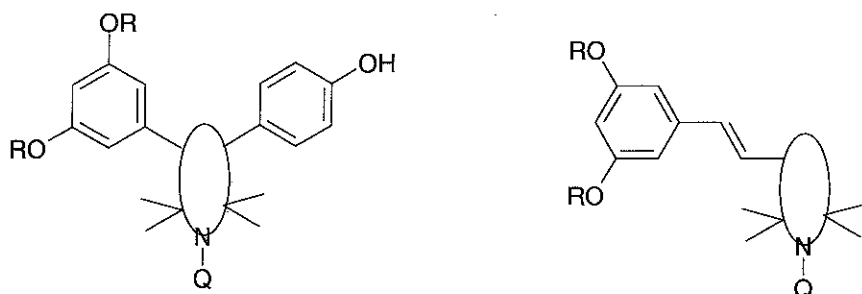
Borza Erzsébet, IV. évf. gyógyszerész

PTE Általános Orvostudományi Kar

Témavezető: Dr. Kálai Tamás egyetemi tanár
Szerves és Gyógyszerkémiai Intézet

Heck-, Suzuki- és Wittig-reakcióval új, nitroxidokkal [1] és diamágneses elővegyületeikkel (pre-nitroxidokkal) módosított rezveratrolokat állítottunk elő. Vizsgáltuk a vegyületek ABTS-gyökkation [2] redukáló képességét. Az *in vitro* mérések alapján megállapítottuk, hogy:

- minél több fenolos OH-csoport található a vegyületen, annál hatékonyabb antioxidáns (elektron- és H⁺-donor)
- a nitroxidok és az *N*-hidroxilamin elővegyületek is rendelkeznek a fenolos hidroxilcsoporthoz hasonló antioxidáns hatással
- a rezveratrol analogonok elérték, illetve meghaladták a rezveratrol antioxidáns aktivitását.

Q: H, OH, O[•]R: H, CH₃

- [1] Hideg, K., Kálai, T., Sár, P. C. *J. Heterocyclic Chem.* 42, 437-450 (2005).
[2] Re, R., Pellegrini, N., Prottegente, A., Pannala, A., Yang, M., Rice-Evans, A. *Free Rad. Biol. Med.* 26, 1231-1237 (1999).

Bioortogonális ligációra alkalmas tirozin-jelölő molekulák szintézise**Cserép Balázs Gergely, II. évf. vegyész MSc**

ELTE Természettudományi Kar

Témavezető: **Dr. Kele Péter** egyetemi adjunktus
ELTE Kémiai Intézet

Biopolimerek *in vivo* fluoreszcens jelölésére és nyomon követésére a leghatékonyabb módszerek a bioortogonális ligáción alapuló eljárások. A jelenleg ismert bioortogonális reakciók közül a legelterjedtebbek és sebességüket figyelembe véve az egyik leggyorsabbak az úgynevezett Cu(I) katalizált alkin-azid 1,3 dipoláris cikloaddíciók (CuAAC). A bioortogonális ligációk fontos feltétele, hogy a jelzővegyületek csak a célvegyület megfelelő funkciós csoportjával reagáljanak. Tekintve, hogy a természetes vegyületekben számos funkciós csoport található, célszerű az érdeklődésünk központjában álló biovegyületet előzőleg olyan mesterséges vegyülettel, kémiai hírvívóval módosítani, ami a természetben ritkán előforduló funkciós csoportot tartalmaz, amely a továbbiakban szelektíven módosítható a jelzővegyülettel. A költségek és a lehetőségek tekintetében érthető, hogy a peptid- és fehérjekutatásokban az egyes aminosavakra specifikus, azaz csak a célzott oldallánccal reagáló funkciós csoportokkal ellátott jelölőmolekulákra való igény az utóbbi években egyre nő.

Munkám során a közelmúltban megjelent eredmények alapján tirozin-specifikus módosítást lehetővé tevő kémiai hírvívók szintézisét valósítottam meg allil-acetát funkciós csoport felhasználásával. Munkám eredményeként előállítottam egy Tyr-specifikus motívumot tartalmazó mega-Stokes fluorofórt (1), ezt követően pedig olyan bifunkciós kémiai hírvívókat szintetizáltam, melyek a Tyr-specifikus funkció mellett azid (2), illetve alkin csoportot (3) tartalmaztak. Ezen kémiai hírvívóvegyületek a tirozin módosítást követően a továbbiakban CuAAC reakcióval fluoreszcens jelzővegyülettel kapcsolhatóak.

Molekuláris motorok építőelemeinek az előállítása és jellemzése

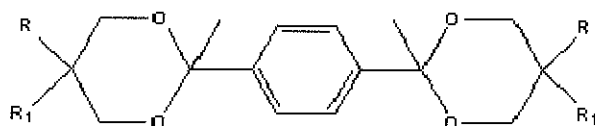
Dénes Emese, IV. évf. vegyészmérnöki BSc

Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők: **Dr. Grosu Ion** egyetemi professzor
Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Szerves kémia tanszék
Cîrcu Monica doktorandus
Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár,
Kémia és Vegyészmérnöki Kar, Szerves kémia tanszék

A biológiai folyamatok, amelyek egyre inkább modellt képeznek a kémiai folyamatok esetében is, kiemelték olyan rendszereket, amelyek segítségével molekuláris (szupramolekuláris) szinten a hagyományos energiaformák átalakíthatóak mechanikai munkává. Ezekből a példákból kiindulva kutatócsoportunk is ilyen, úgynevezett *technomimetikus molekulák* előállításával foglalkozik. Ezek a molekuláris motorok két részből állnak: egy pedálból és egy nyújtható egységből, ezeket pedig egy linker köt össze. A pedál rész akiváltható úgy kémiailag mint fotokémiailag és két formája lehet: egy zárt és egy nyitott, ez a strukturális változás a pedál szintjén meghatároz egy strukturális változást a nyújtható egység esetében is.

Az alábbi dolgozat célja olyan molekulák bemutatása, amelyek nyújtható egységként funkcionálhatnak, előállításuk és jellemzésük. Ebben az esetben az alábbi molekula:



Nyújtható egységként funkcionáló dioxán származék

ahol az $R=CH_3$, $R_1=CH_2OH$, tölti be a nyújtható egység szerepét.

Poli-N-acetil- β -(1 \rightarrow 6)-D-glükózamin hexaszacharid fragmensének szintézise és konjugálása fehérjéhez**Eszenyi Dániel, I. évf. vegyész MSc**

DE Természattudományi Kar

Témavezetők: **Dr. Borbás Anikó** Tudományos Főmunkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék – MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoport
Dr. Fekete Anikó Tudományos Főmunkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék – MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoport

A *Staphylococcus aureus* és a *S. epidermidis* a leggyakoribb kórokozói a nozokomiális, azaz a kórházban szerzett bakteriális fertőzéseknek. Ezek a baktériumok képesek megtapadni különböző orvosi eszközök, implantátumok, katéterek felületén, úgynevezett biofilm kialakulása révén, amely megvédi a mikroorganizmust a gazdasejt immunrendszerétől és az antibiotikumoktól is. [1] A *Staphylococcus* fertőzések kialakulása oltóanyag kifejlesztésével megelőzhető lenne.

A sejtfelszíni poliszacharid antigént tartalmazó vakcinák hatékonyan alkalmazhatók bakteriális fertőzések ellen. Bár a poliszacharid vakcinák által kiváltott immunválasz gyenge, megfelelő immunválasz érhető el ha kovalens kötéssel egy megfelelő fehérje hordozóhoz kötjük ezeket a vegyületeket. [2] Ezenkívül a baktériumból izolált kapszuláris poliszacharidok kisebb tagszámú fragmensei is alkalmasak vakcinálásra.

A *Staphylococcus* baktériumok esetében oltóanyag kifejlesztésére alkalmas egyik sejtfelszíni poliszacharid antigén a poli-N-acetil- β -(1 \rightarrow 6)-glükózamin (PNAG), amely egyben a baktériumot körülvevő biofilm réteg főkomponense. T. Maira Litran és munkatársai által végzett állatkísérletekkel bebizonyították, hogy a tisztított PNAG megfelelő védő immunitást biztosít, ezért potenciális vakcina jelöltnek javasolják a *Staphylococcus* fertőzésekkel szemben. [3]

A dolgozatban leírt kutatómunka során megvalósítottuk a PNAG hexaszacharid fragmensének a szintézisét, ezután acetállal védett formil-heptil spacerrel meghosszabítottuk az előállított oligoszacharidot. Végül a védőcsoportok eltávolítása után a haptént bovine serum albuminhoz (BSA) kapsoltuk redukzív aminálással. A dolgozat elkészítéséhez a támogatást az OTKA (PD 73064) nyújtotta.

[1] Huebner, J.; Goldmann, D.A.; *Annu. Rev. Med.*, 50 223-236 (1999)

[2] Avery, O. T.; Goebel, W. F.; *J. Exp. Med.*; 54 437-447 (1931)

[3] Maira-Litran, T., Kropec, A., Goldmann, D.A., Pier, G.B., *Vaccine*, 22 (2004) 872-879

Galaktán-típusú hexaszacharid szintézise monoklonális antitestek jellemzésére

Hadházi Ádám, III. évf. kémia BSc.

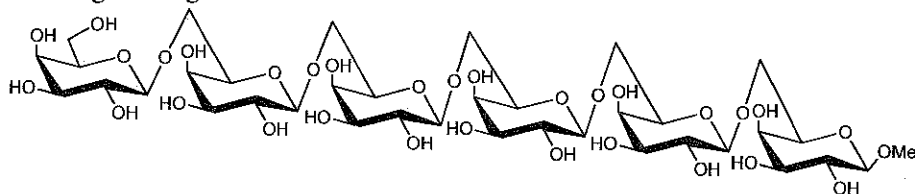
DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: **Dr. Lipták András** professor emeritus
DE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Fekete Anikó tudományos főmunkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Csávás Magdolna tudományos munkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék

Észak-Amerika egyik legnépszerűbb gyógynövénye a lángvörös kasvirág (*Echinacea purpurea*), melyből készült gyógyhatású készítményeket elterjedten használják felső légúti megbetegedések megelőzésére, mivel fokozza a szervezet ellenálló képességét vírusos és bakteriális fertőzések ellen.

Farmakológiai vizsgálatok során megállapították, hogy az *E. purpurea* kivonat növényi sejtfalban előforduló, nagy molekulatömegű komponensének, az arabinogalaktán proteineknek (AGPs) jelentős humán immunrendszert stimuláló hatásuk van. [1] Az arabinogalaktán proteinek poliszacharid részének fő komponense 3-, 6-, 3,6-elágazást tartalmazó β -D-galaktopiranozid, amely α -L-arabinofuranoziddal szubsztituált. [2]

A dolgozat célja olyan β -(1 \rightarrow 6) kötésű hexagalaktán előállítás volt, mely alkalmas lehet a Kiel-i Egyetem Farmakológiai Intézetében Dr. Birgit Classen vezetésével végezett növényi sejtfalfelderítéshez használt monoklonális antitestek [3] immunológiai vizsgálatához.



- [1] Hoheisel, O., Sandberg, M., Bertram, S., Bulitta, M., Schafer, M., *Europ. J. Clin. Res.*, 9, 261-268 (1997)
- [2] Gaspar, Y., Johnson, K.L., McKenna, J.A., Bacic, A., Schultz, C.J., *Plan Mol. Biol.*, 47, 161-176 (2001)
- [3] Knox, J.P., *Int. J. Cytol.*, 171, 79-120 (1997)

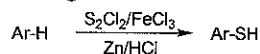
Aril-perfluoralkil-szulfidok szintézise

Harsányi Antal, III. évf. kémia BSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

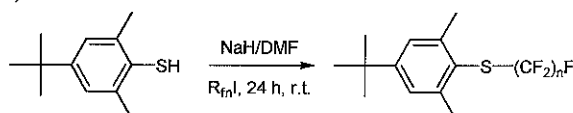
Témavezető: Dr. Rábai József egyetemi docens *
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

A modern gyógyszer- és növényvédőszer-ipar által tervezett új molekulák egyre nagyobb hányadában található fluor-tartalmú funkciós csoportokat. A trifluorometiltio csoport egyike ezeknek a csoportoknak, több szabadalmaztatott gyógyszer és növényvédőszer molekulában is megtalálható [1-3]. Munkám során először polialkyl-aryl-merkaptánok szintézisével foglalkoztam. Új, hatékony és gazdaságos módszert dolgoztam ki (1. ábra) több tri- és tetraalkil-tiofenol szintézisére, a módszert optimalizáltam valamint méretnövelési kísérleteket végeztem. A módszer segítségével közepes/jó hozammal állíthatunk elő aromás merkaptánokat aromás szénhidrogénekből.



1. ábra: Új módszer trialkil- és tetraalkil-tiofenolok előállítására.

Feladatomban volt, hogy az új módszerrel előállított 4-*tert*-butil-2,6,-dimetiltiofenolból irodalmi recept [4] analógiájára előállítsam a (4-*tert*-butil-2,6,-dimetilfenil)-perfluoralkil-szulfidok teljes sorozatát (2. ábra, n=4,6,8,10), valamint a trifluorometil-származékot is. Az irodalmi módszer alkalmazásával a hosszú láncú aril-perfluoralkil-szulfidokat jó termeléssel (70-86 %) állítottam elő.



2. ábra: (4-*tert*-Butil-2,6,-dimetilfenil)-perfluoralkil-szulfidok szintézise.

A (4-*tert*-butil-2,6,-dimetilfenil)-trifluorometil-szulfid előállítására a hosszabb láncú származékokra alkalmazott módszer módosított változatát használtam. A nátrium-(4-*tert*-butil-2,6-dimethyl)tiofenolát DMF-es oldatát tartalmazó lombikot ismert tömegű (1,3 ekvivalens) CF₃I-t tartalmazó léggömbbel lezártam és a reakcióelegyet egy éjszakán át kevertetem. A reakcióelegy feldolgozása vízgőz-desztillációval történt, ami 82%-os termeléssel eredményezte a kívánt aril-trifluorometil-szulfidot. Az előbbi trifluorometil-szulfid előállítására kidolgozott módszerrel számos, különféle funkciós csoportokkal rendelkező aril-trifluorometil-szulfidot állítottam elő jó/kiváló termeléssel (75-89 %). A módszer előnye a korábbi eljárásokhoz képest az, hogy nem igényel semmilyen különleges berendezést (nyomásálló edény, UV-lámpa, stb.) valamint, hogy a vízgőz-desztillációt követően a termék 97-99 %-os tisztaságú (GC), további tisztítást nem feltétlenül igényel.

*Ez a munka az OTKA K 062191 számú "Fenntartható fluoros kémia" program részét képezi.

- [1] Becker, A.: *Inventory of Industrial Fluorobiochemicals*, Eyrolles, Paris, 23-32, (1996)
 [2] Kirsch, P.: *Modern Fluoroorganic Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 131-135 (2004)
 [3] Boiko, V. N.: *Beilstein J. Org. Chem.*, 6, 880-921 (2010)
 [4] Feiring, A. E.: *J. Fluorine Chem.*, 24, 191-203 (1984)

Bioortogonális jelölésre alkalmas fluoreszcens jelölőmolekulák előállítása és vizsgálata

Herner András, I. évf. Kémia Doktori Iskola

ELTE Természettudományi Kar

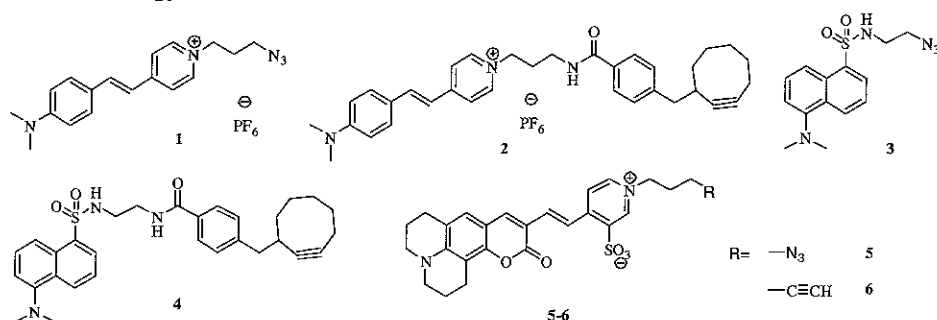
Témavezető: Dr. Kele Péter egyetemi adjunktus
ELTE-TTK Kémiai Intézet

Munkám során fluoreszcens jelölőmolekulák tervezésével, szintézisével és tesztelésével foglalkoztam. Hat különböző, vegyület szintézisét tűztem ki célul, majd ezekkel végeztem kapcsolási kísérleteket modell-biomonomerekre, illetve sejtekre. [1]

Két tulajdonságnak kellett megfelelni a molekuláknak: (i) jó fluoreszcencia paraméterek (magas hullámhosszon gerjesztődik és emittál, utóbbi lehetőleg NIR tartományban és nagy a kvantumhasznosítási tényezője), illetve (ii) enyhe körülmények között, szelektíven és nagy hatásfokkal legyen kapcsolható biomolekulákhoz, azaz megfeleljen a bioortogonalitás feltételeinek. [2] Utóbbira jelen esetben az 1,3-dipoláris-cikloaddíción alapuló azid-alkin konjugáció különösen alkalmas, ezt használtam fel a célvegyületek tervezésekor.

A dolgozatban kiderül, hogy mindegyik fluoreszcens jelölőmolekula alkalmas biológiai jelölésre, akár sejtszinten, fehérjék/poliszacharidok érzékeny vizsgálatára.

A hat célvegyület:



[1] P. Kele, X. Li, M. Link, K. Nagy, A. Herner, K. Lőrincz, Sz. Béni, O. S. Wolfbeis, *Org. Biomol. Chem.* **2009**, *7*, 3486-90.

[2] a) J. A. Prescher, C. R. Bertozzi, *Nat. Chem. Biol.* **2005**, *1*, 13-21. b) P. V. Chang, J. A. Prescher, M. J. Hangauer, C. R. Bertozzi, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 8400-8401. c) K. L. Kiick, E. Saxon, D. A. Tirrell, C. R. Bertozzi, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2002**, *99(1)*, 19-24 d.) Kurpiers, T.; Mootz, H. D., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2009**, *48*, 1729-1732.

Aldehyd-4-(2,3,4,6-tetra-*O*-acetyl- β -D-glükopiranozil)-szemikarbazon származékok szintézise**Kaszás Tímea, IV. évf. vegyészmérnök BSc**

DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Vágvölgyiné Dr. Tóth Marietta egyetemi adjunktus
DE TEK TTK Szerves Kémiai Tanszék

A 2-es típusú vagy nem inzulin függő *diabetest* korunk egyik legsúlyosabb betegségeként tartják számon. Kezelése jelenleg csak tüneti szinten lehetséges, mely során a normális vércukorszintet diétával, testmozgással, hipoglikémiás szerek, illetve végső esetben inzulin alkalmazásával próbálják fenntartani [1]. A 2-es típusú cukorbetegség egyik lehetséges terápiás kezelési módja a glikogén lebontását katalizáló glikogén foszforiláz enzim gátlásán alapszik.

Laboratóriumunkban több, mint tíz éve folynak kutatások a glikogén foszforiláz enzim glükózanalóg inhibitorainak szintézise terén [1]. Munkámmal ebbe a kutatásba kapcsolódtam be.

Kísérleteink során aromás aldehyd-4-(β -D-glükopiranozil)-szemikarbazonok szintézisét terveztük, melyek potenciális vércukorszint csökkentő hatásuk révén alkalmasak lehetnek a 2-es típusú *diabetes* kezelésére. Az előállításra 2 szintézisutat terveztünk. Először a kiindulási glükóz származékot, a 2,3,4,6-tetra-*O*-acetyl- β -D-glükopiranozil-izocianátot állítottuk elő több lépésen keresztül az 1,2,3,4,6-penta-*O*-acetyl- β -D-glükózból [2]. Ezután a reagensként alkalmazott aldehyd-hidrazonokat szintetizáltuk. Következő lépésben a 2,3,4,6-tetra-*O*-acetyl- β -D-glükopiranozil-izocianát aldehyd-hidrazonokkal végzett reakciójában jó hozammal nyertük az aldehyd-4-(2,3,4,6-tetra-*O*-acetyl- β -D-glükopiranozil)-szemikarbazon származékokat. A szemikarbazonok acetyl védőcsoportjait Zemplén-módszerrel távolítottuk el, és kiváló hozammal izoláltuk a két aldehyd-4-(β -D-glükopiranozil)-szemikarbazont.

A másik lehetséges szintézisúthoz szükséges 4-(2,3,4,6-tetra-*O*-acetyl- β -D-glükopiranozil)-szemikarbazidot a 2,3,4,6-tetra-*O*-acetyl- β -D-glükopiranozil-izocianát hidrazin-hidrokloriddal végzett reakciójával nyertük.

[1] Somsák, L.; Czifrák, K.; Tóth, M.; Bokor, É.; Chrysina, E. D.; Alexacou, K. M.; Hayes, J. M.; Tiraidis, C.; Lazoura, E.; Leonidas D. D.; Zographos, S. E.; Oikonomakos, N. G. *Curr. Med. Chem.*, 15, 2933-2983 (2008)

[2] Ichikawa, Y., Matsukawa, Y.; Nishiyama, T.; Isobe, M. *Eur. J. Org. Chem.*, 3, 586-591 (2004)

O-Glikopeptidok szintézise**Kovács Anita**, I. évf. vegyész MSc

SZTE Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető: **Prof. Dr. Tóth Gábor** egyetemi tanár
SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet

A glikoziláció a fehérjék legjelentősebb, leggyakoribb poszttranszlációs módosítási folyamata. Az emberi fehérjék több mint 50%-a glikozilált. Mivel az evolúció során fennmaradt ez az igen komplex, bonyolult enzimatikus módosítási folyamat, igen fontos funkciót kell betöltenie, azonban még ma sem ismerjük általános jelentőségét. A biológiai kutatásokhoz tehát szükség van szintetikus glikopeptidekre, amelyek előállítására több okból is problematikus: a szénhidrátészlelő-, a cukor- és peptidészlelő összekapcsolási nehézségei miatt. Gondot okoz a szekvenciákban előforduló trifunkciós aminosavak oldalláncának védelme, és védőcsoport-eltávolításának glikozidos kötés melletti megoldása. Eddig sikerült szintézismódszert kifejlesztenünk a Glu, Asp és Ser-tartalmú glikopeptidek szintézisére, amelyhez munkánk során az aggregált fehérje legerősebben glikozilezett régiójából származó repetitív szekvenciát használtuk föl (GVEDIS*GLPSG, *: a glikoziláció helye). Az aggregált porc alapállomány egyik fő makromolekuláris komponense, a rheumatoid arthritis egyik lehetséges autoantigénje. Megállapítottuk, hogy a szerin oldalláncában lévő hidroxil-csoport védelmére a Bn és a TBDMS védőcsoport megfelelő, az aminodikarbonsavak ω -karboxil-csoportjának védelmére pedig a 4-(N-(1-(4,4-dimetil-2,6-dioxociklohexilidén)-3-metilbutil)amino)benzil-észter (Dmab). A szénhidrátészlelő védőcsoportjainak eltávolítása Bu_2SnO -dal vihető végbe.

Ezek után célul tűztük ki egy, az egyéb trifunkciós aminosavakat (Lys, His, Thr, Tyr, Arg) tartalmazó glikopeptid szintézisének kidolgozását. Ebben az esetben modellként a humán Sp1 transzkripciós faktorból származó két fragmenst választottunk ki: a KRFMRS*DHLS*KHIKTHQN-t és a GKVYGKT*S*HLRAHLRWHTG-t. Az Sp1 transzkripciós faktor egy olyan fehérje, amely tartalmaz egy DNS-kötő domént, amelyen belül három Cys_2His_2 -típusú, $\beta\beta$ szerkezettel rendelkező cink-ujj motívum van. A fent említett két szekvencia ezen cink-ujjak részei; glikoziláció nélküli térszerkezetüket NMR spektroszkópiás módszerrel határozták meg. Célunk tehát a Lys, His, Thr, Tyr, Arg aminosavak oldalfunkciói védelmének optimalizálása a glikoziláció mellett, valamint sikeres szintézis után ezen fragmensek térszerkezetének megállapítása, mivel a glikoziláció többek között a fehérje ezen tulajdonságát is megváltoztathatja.

Ez idáig megállapítást nyert, hogy a Lys védelmére a Dde-csoport, a His és a nem glikozilált Thr oldallánc pedig Bn-csoporttal oldható meg ideálisan.

A transzkripciós faktorból a Ser és Thr N-acetil-2-glükózaminnal van glikozilálva; a glikozilált aminosavakat ebben az esetben Koenigs-Knorr reakcióval állítottuk elő.

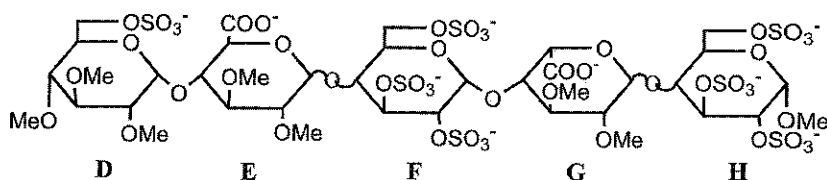
Szulfonsav-tartalmú heparinoid triszacharid szintézise

Mező Erika, II. évf. vegyész MSc

Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető: Dr. Lázár László tudományos munkatárs
MTA-DE Szénhidrátkémiai Kutatócsoport

A heparin egy természetes eredetű heteropoliszacharid, amit véralvadást gátló szerként alkalmaznak a gyógyászatban. Kutatások során felfedezték, hogy az antikoaguláns hatást, a heparin egy egyedi pentaszacharid része fejt ki. Ennek ismeretében szintetikus származékok előállítását célzó programok indultak el. Ezek közül is a legígéretesebbnek a teljesen *O*-metilezett és *O*-szulfatált Idraparinux bizonyult [1]:



Az MTA-DE Szénhidrátkémiai Tanszéki Kutatócsoport egyik kutatási területét képezi ezen pentaszacharid szulfonsav analógjainak szintézise. E munka részeként előállították az Idraparinux nemredukáló végi triszacharid egységét (**DEF**). A szintézisterv szerint az építőelemek kapcsolási sorrendje **DE+F** volt. Ennél a glikozilezési reakciónál azonban nem várt problémák léptek fel, a **DE** donor 2-es helyzetében található résztvevő csoport jelenléte ellenére a szelektivitás teljes hiányát tapasztalták. Feladatom ennek a problémának a megoldása volt. Azt feltételeztük, hogy a felmerülő problémát az **E** egységen található karboxil-metil-észter illetve az **F** egységén található szulfonsav-metil-észter csoport együttes jelenléte által fellépő sztérikus gátlás okozta. Emiatt új stratégiát kellett kidolgozni. Megcseréltük a kapcsolások sorrendjét: **DE+F** helyett **D+EF**, valamint a 6'OH karbonsavvá történő oxidálását csak az **E** és **F** monoszacharid egységek kapcsolását követően végeztük el. A **EF** diszacharidon elvégeztük a megfelelő átalakításokat, majd ezt követően kapcsoltuk a **D** egységgel.

[1] Maurice Petitou and Constant, A. A. van Boeckel: *Angewandte Chem. Int. Ed.*, 43, 3118-3133 (2004)

A *Helicobacter pylori* fertőzésben szerepet játszó szénhidrát-ligandumok szulfonsav analógjainak szintézise

Pap Gergely, VII. évf. vegyész

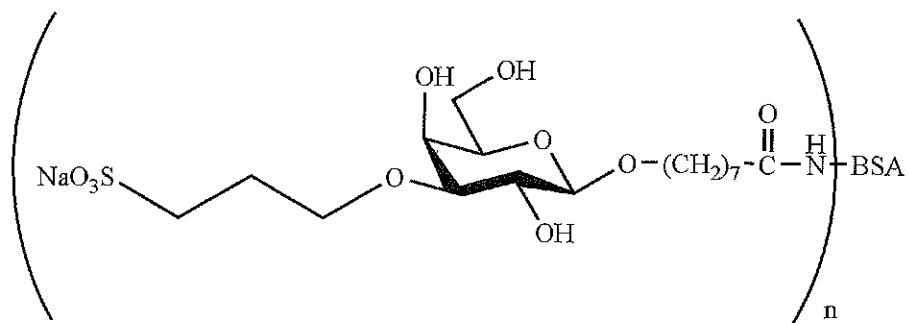
DE Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők: **Dr. Borbás Anikó** tudományos főmunkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék
Dr. Csávás Magdolna tudományos munkatárs
DE Szerves Kémiai Tanszék

A *Helicobacter pylori* [1] fertőzés nagymértékben felelős gasztroenterológiai betegségek kialakulásáért. A baktérium megtelepedésében kulcsszerepet játszanak a gyomor-nyálkahártya szulfatált és szialilezett oligoszacharid egységei. Célunk ezen szénhidrát ligandumok szulfonsav mimetikumainak előállítása, hiszen ezek alkalmazhatóak lennének antiadhéziós terápiára.

Sikeresen állítottunk elő olyan híd-molekulához kapcsolt galaktozidot, mely 3-as helyzetben alkilsulfonsav csoportot tartalmaz. A szulfonsav-funkciót az allil-csoport kettős kötésén végrehajtott gyökös szulfidaddícióval alakítottuk ki. A szulfonsavtartalmú galaktozidot redukzív aminálással BSA fehérjéhez konjugáltuk [2].

A munkánk során változatos védőcsoport-stratégiát alkalmazva az irodalomból még nem ismert vegyületeket állítottunk elő. Az itt szerzett szintetikus tapasztalatok felhasználhatóak lesznek további, nagyobb tagszámú glikokonjugátumok előállítására.



[1] Marshall, B.J., J. R. Warren, J.R., *Lancet*, 1, 1311-1315 (1984)

[2] Clausen, M. H., Madsen, R., *Carbohydr. Res.*, 339, 2159-2169 (2004)

Egy hexamer acilpeptid-hidroláz szerkezete, a méretszelektivitás újszerű módja

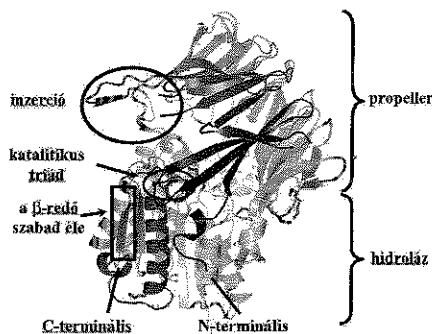
Tichy-Rács Éva, V. évf. vegyész

ELTE Természettudományi Kar

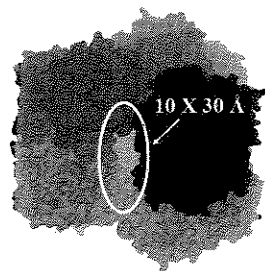
Témavezető: Dr. Harmat Veronika egyetemi adjunktus
ELTE TTK, Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium

Az acilaminoacil-peptidáz (AAP) fehérje a prolil-oligopeptidáz (POP) családba tartozik. Biológiai szerepe és jelentősége az, hogy bizonyos oligopeptidok hasításával részt vesz a peptidhormonok és a neuropeptidok szintjének szabályozásában. Ezen kívül kapcsolatba hozható egyes rákfajtákkal, valamint a memóriánövelő gyógyszerek kutatásának egyik célpontja. Munkám során a *Pyrococcus horikoshii* nevű termofil ősbaktériumból származó AAP fehérjét (PhAAP) vizsgáltam.

A szerkezetfinomítás során 570 aminosav, 372 vízmolekula, 6 1,6-hexándiol, és 3 Mg^{2+} -ion koordinátáit határoztam meg. R-faktor = 0,183. A fehérjekomplexet hat monomer alkotja, melyek egyenként 622 aminosavból állnak. Egy monomeren belül két domén található [1. ábra]. Egyik a β -propeller domén, amely hét lapátból áll, másik a hidroláz domén, melynek a központi részét nyolc β -szál alkotja. A szélső β -szál után helyezkedik el a katalitikus triád hisztidinje. A β -propeller domén 3. lapátjába beékelődő hurok (inzerció) szoros kölcsönhatásban van ezzel a szélső β -szállal.



1. ábra: A monomer szerkezete



2. ábra: A hexamer oldalán található pörusok.

A monomerek közötti kölcsönhatások érintik mindkét domént: 3-3 fehérje β -propeller, illetve 2-2 hidroláz doménje érintkezik szorosan, melyek így szimmetrikus hexamert alkotnak [2. ábra]. Általában a POP családban a két domén között dinamikus mozgásra van lehetőség, ezáltal valósul meg a méretszelektivitás. A PhAAP-ban azonban a két domén egymáshoz viszonyítva félig nyitott helyzetben van rögzítve, és a komplex oldalán található nyílások szabják meg, hogy mekkora oligopeptidok jutnak el a szubsztrátkötő zsebig. Tehát a PhAAP fehérje esetében új működési mechanizmust ismerhetünk meg.