

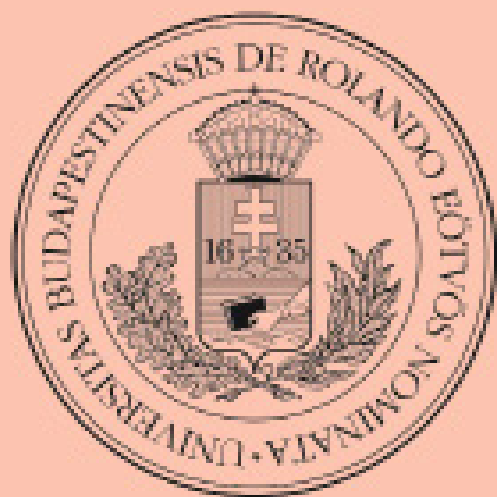
PROGRAMFÜZET ÉS TARTALMI KIVONATOK



Kémiai és Vegyipari
Szekció



35. ORSZÁGOS
TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI
KONFERENCIA 2021



EÖTVÖS LORÁND
TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
KÉMIAI INTÉZET
2021. MÁJUS 17-19.

Szervezőbizottság

Ügyvezető elnök: **Dr. Császár Attila**

Ügyvezető társelnök: **Dr. Szalai István**

Ügyvezető titkár: **Dr. Bánóczy Zoltán**

A szervezőbizottság elnöke: **Dr. Szabados Ágnes**

Hallgatói képviselők: **Kovács Márton és Simkó Irén**

Határon túliak részvételéért felelős munkatárs: **Dr. Gherdán Katalin**

Középiskolás programokért felelős munkatársak: **Dr. Turányi Tamás és Dr. Szalay Luca**

Tagozatokért felelős munkatársak: **Dr. Bánóczy Zoltán, Dr. Vasanits Anikó,
Dr. Vass Gábor, Dr. Vesztergom Soma**

Szakmai titkárok: **Bajcsi Áron, Baranyi Bence, Ferenc Dávid,
Kelemen Ádám, Király Péter, Margócsy Ádám,
Mihálka Zsuzsanna, Petróczy Anna, Simkó Irén, Szobota András**

Roska Tamás Tudományos Előadásért felelős munkatárs: **Kovács Márton**

Pénzügyi felelős: **Kolozsvári Mária**

Szervezésért felelős munkatárs: **Kochis Réka Sarolt**

Online felelős: **Dr. Furtenbacher Tibor**

Informatika: **Tomcsányi Roland, Birizdó Donát, Gyurkovics Ferenc,
Pálinkás Szabolcs, Korpás István, Kiss Balázs, Gál Zoltán**

Sajtókapcsolatokért és médiakommunikációért felelős munkatárs: **Szabó Noémi**

Médiaanyagok: **Papp Dániel**

Narráció: **Prajczér Petra**

Impresszum

Felelős kiadó: **Dr. Kacs Kovics Imre**

Felelős szerkesztő: **Dr. Vass Gábor**

Tördelés és design: **Sándor Emese, Lénárd László**



Fővédnökök



NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI
ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL



INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI
MINISZTERIUM



EMBERI ERŐFORRÁSOK
MINISZTERIUMA

Támogatók



RICHTER GEDEON



UNICAM



FELADATUNK A JÖVŐ

A 35. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekciója az Innovációs és Technológiai Minisztérium támogatásával a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal közreműködésével a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból valósult meg.

Az OTDK, azaz az Országos Tudományos Diákköri Konferencia

A magyarországi és a határon túli felsőoktatási intézményekben évente több ezer fiatal vesz részt a tudományos diákköri tevékenységben, végez kutatómunkát, hogy aztán annak eredményeit az intézményi/kari TDK-konferencián is bemutassa. Ezekon a konferenciákon a legjobbak szereznek jogosultságot az OTDK-ra, ahol a különböző intézményekből jövő, hasonló területen kutató fiatalok megismerik egymás eredményeit, valamint visszajelzést kapnak a szakma legjobbjaitól és egymástól.

A tudományos diákkörök (TDK) közel 70 éve látnak el tehetséggondozó feladatokat a felsőoktatásban. A két évente 16 tudományterületi szekcióban megrendezett Országos Tudományos Diákköri Konferencia a felsőoktatás legnagyobb hallgatói tudományos rendezvénysorozata, amely egyszerre fórum és verseny.

Az OTDK tagozatainak első helyezettjei pályázhatnak a Pro Scientia Aranyéremre, amellyel a teljes hallgatói életpályát ismeri el az Országos Tudományos Diákköri Tanács. Az OTDK évében legfeljebb 48 Pro Scientia és művészeti tevékenységért legfeljebb két Pro Arte Aranyérem, illetve a középiskolai kimagasló eredményekért egy Junior Pro Scientia Aranyérem ítélhető oda. A kitüntetést 1989-ben adták át először, azóta összesen 759 fiatal nyerte el.

A hallgatók mellett fontos az oktatók megbecsülése is, amelyet a Mestertanár Aranyérem jelent. Feltétele a legalább 10 éves eredményes tehetséggondozó tevékenység a felsőoktatásban és a TDK-ban.

A TDK és az OTDK az elmúlt években jelentős minőségi és mennyiségi fejlődésen ment keresztül. Ennek köszönhetően egy-egy OTDK időszakában 12 000-nél több pályamunkát mutatnak be az intézményi TDK-konferenciákon, az OTDK-n pedig 2011-től 4000 fölé emelkedett az elhangzó előadások száma, amelyek értékelésében több mint 3000 bíráló és 1500 zsűritag vesz részt.

Az OTDK funkciói is bővültek: 2019-től középiskolások is jelentős számban vesznek részt az OTDK szekciók programjain, ezzel segítve, hogy megismerkedjenek fiatal kutatókkal és a kutatói életpálya kezdeti szakaszával.

Szintén 2019-től a kutatóvá válás következő lépcsőjének bemutatására elindította az OTDT a Roska Tamás Tudományos Előadást, amelynek megtartására a doktori képzésben részt vevő fiatalok pályázhatnak, és szekciónként egy fő nyerheti el az előadás jogát. Az OTDK-n tehát megjelent a tehetséggondozás kontinuitása, azaz a középiskolás diákok, az egyetemi és főiskolai hallgatók, valamint a doktori képzésben részt vevők találkozása.

A 35. OTDK adatai (2021)

A 35. OTDK-t megelőzően összesen 1858 TDK-konferenciát rendeztek.

Az intézményi TDK-konferenciákon bemutatott pályamunkák száma 12 736 db.

Az OTDK-ra benevezett pályamunkák száma: 4 726 db.

A 2021 tavaszára tervezett 35. Országos Tudományos Diákköri Konferencia a pandémiára tekintettel online zajlik. A személyes találkozásokat sajnos egy időre el kell felejtenuk, de kihasználva az online tér előnyeit az OTDT és a rendező intézmények a teljes konferenciát elérhetővé teszik az érdeklődők számára. Olyan soha nem látott nyilvánosságot teremtve, amire eddig nem volt lehetőség. Ezzel a TDK, a fiatalok és a társadalom digitális kultúrájának fejlődésében is példát mutathat. A részt vevő hallgatók előadásait így láthatják a barátok, az évfolyamtársak, a családtagok is – akiknek eddig nem volt lehetőségük a konferencia helyszíneit személyesen meglátogatni.

A TDK tehát hagyományaihoz híven a kényszer hatására is a hátrányokból előnyt formálva, remélhetően új működési kultúrát épít. Nem hagyjuk magunkat, hiszen a TDK örök!

Prof. Dr. Szendrő Péter
az OTDT elnöke

Dékáni köszöntő



Az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kara nevében szeretettel köszöntöm a XXXV. Országos Tudományos Diákköri Konferencia (OTDK) Kémiai és Vegyipari Szekciójának résztvevőit. Egyetemünk legutóbb 2003-ban láthatta vendégül az OTDK Kémiai és Vegyipari Szekcióját, így különös öröm számomra, hogy karunkon köszönhetem a kémia, a vegyipar és a természettudományok iránt elkötelezett hallgatók újabb nemzedékét.

A Magyar Örökség díjjal kitüntetett TDK mozgalom már 70 éve működik Magyarországon. A diákköri munka során a tehetséggondozás egy kivételes formája valósul meg: létrejön a tanár és a diák konstruktív együttműködése, mely hagyományos értelemben vett tudományos műhelymunkát biztosít, így ezzel minőségi többlettudást, kutatási és alkotási lehetőséget ad a tehetséges és érdeklődő egyetemistáknak.

Bár a Tudományos Diákköri Konferencia versengés – hiszen a pályamunkákat és az előadásokat zsűri értékeli, a legjobb dolgozatok pedig díjazásban és jutalomban is részesülnek –, emellett hangsúlyos szerepet kap a rendezvény tudományos konferencia jellege is. Az előadók többsége számára talán ez a legelső alkalom, hogy széles szakmai nyilvánosság előtt adhat számot kutatási eredményeiről. A szervezők átérzik az esemény fontosságát és kitűzött céljuk a nemzetközi tudományos normáknak megfelelő feltételek biztosítása. Az OTDK kiérlelt szabályai, valamint a zsűrik tekintélyes tagjai garantálják a rendezvény magas színvonalát.

Jelen kötet a 15 tagozatban folyó konferencia 138 előadásának kivonatát tartalmazza, egyúttal bepillantást nyújtva a hazai felsőoktatásnak a kémia szakterületén folyó legszínvonalasabb kutatásaiba. Az előadások a kémia szinte teljes spektrumát felölelik, az elméleti számolásoktól kezdve a Covid-19 járvánnyal kapcsolatos kutatásokig, de születtek a vas- és acéliparral, a gluténmentes diétával, a nanorészecskékkel, az elektrokémiai rendszerek fejlesztésével, a szerves és szervetlen szintézisekkel, vagy a gyógyszeripari eljárásokkal foglalkozó eredmények is.

Ebben az évben a Covid-19 okozta világjárvány nem teszi lehetővé, hogy a konferenciát személyes részvétel mellett rendezzük meg. Ez komoly kihívások elé állítja mind a konferencia szervezőit, mind előadóit. Meggyőződésem, hogy a személyes jelenlét hiánya mellett a konferencia online formája korábban nem elérhető lehetőségekkel is színesíti az eseményt. Látogatóinkat ezen lehetőségek maximális kihasználására, valamint az aktív részvételre buzdítom, és bízom abban, hogy számos élménnyel, tapasztalattal gazdagodnak a Karunk Kémiai Intézete, valamint a Hevesy György Kémia Doktori Iskola által szervezett rendezvény során, melynek támogatói között megjelenik a Vegyész Oktatásért Alapítvány is. Nem maradnak el a tanácskozás tudományos részét kísérő programok sem, csupán az online térbe költöznek.

A konferenciához minden résztvevőnek sok sikert kívánok!

Dr. Kacs Kovics Imre
egyetemi tanár,
az ELTE Természettudományi Kar dékánja

Roska Tamás Tudományos Előadás



„Énekeljete az elmétekkel”

A „Roska Tamás Tudományos Előadás”

bevezetéseként próbáljuk meg felidézni,
ki volt ő, mire tanít életpéldája?

Nem véletlen, hogy ezt a rangos díjat Roska Tamásról nevezték el.

Roska Tamás Széchenyi- és Bolyai-díjas akadémikus, professzor, a celluláris hullámszámítógép architektúrájának megalkotója, a Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai és Bionikai Karának alapító dékánja, a hazai bionikai képzés megteremtője. Tudományos tevékenységét számtalan hazai és nemzetközi díjjal ismerték el.

A száraz adatok ugyanakkor nem adják vissza az embert, a tudóst, aki fiatalok generációit indította el a világ-színvonalú kutatómunka felé.

Tudós és kutató volt a szó teljes értelmében, s erre a „szellemi kalandra” hívta tanítványait, munkatársait. „Valami egészen új kell!” – vallotta mindig. Fontosnak tartotta ugyanakkor, hogy a teljes emberhez forduljon – a minőségi, a „legkiválóbb amerikaival, indiaival és kínaival is versenyző”, kitartó munka mellett az igazi erkölcsi hozzáállást is próbálta élővé tenni. Meggyőződése volt, hogy az ember megértéséhez az „igaz” három különböző dimenzióját együtt szemlélve kerülhetünk közelebb. „Hajlamosak vagyunk a mai korban azt hinni, hogy csak az az igaz, amit a természettudományok megmutatnak. Úgy gondolom, hogy nem. Ha meghallgatjuk Mozart Requiemjét, akkor tudjuk, hogy ez igaz. Vagy, ha elolvassunk egy Arany- verset, vagy ránézünk egy Munkácsy-képre, akkor tudjuk, hogy ez igaz. Vagy, ha látunk valakit, aki a családját nemes értékekre neveli, akkor tudjuk, hogy igaz.”

Hite, lelkesedése, a segítő társakra is, akiket hívott, villámgyorsan átragadt. Megérintette őket alázatos, önzetlen munkája, elkötelezettsége, s a teljes bizalom, amivel feléjük fordult. Mély emberséggel megélt szolgálatával az egyetemes tudományt és mindenkit, aki találkozott vele, személyesen is gazdagított élete során.

Mindig meglátta a lehetőséget a fiatal tehetségekben és teret adott nekik, hogy kibontakoztat-hassák a bennük rejlő képességeket.

Fontosnak tartotta, hogy „olyan kutató legyen, akinek kaland egy új minőség létrehozása”. „Közben bent van az ember a világ élvonalának a történeteiben.”

Sosem a saját, önös érdekei mozgatták – a tudomány, és egy erkölcsi alapokon nyugvó, az embert szolgáló új társadalom építésén dolgozott.

Saját szakmai területén messze túlmutató tevékenysége legyen inspiráció és példakép az Önök számára, akik a jövő tudósai! Ebben a szellemben hallgassuk üzenetét:

„Ti vagytok családoknak és a nagy közösségnek, ennek a nemzetnek a reménységei. Itt ülnek köztetek a jövő sikeres kutatói, feltalálói, tanárai, felelős vezetői. A család, a tudás, az igazi művészet és a nemes erkölcsi értékek megbecsülése és támogatása a ti boldogulásotok és az ország felemelkedésének sarkköve. Sokan küzdünk ezért az értékrendért, és bár nem tudjuk mindig elég hitelesen felmutatni, de az értékek tisztelete kötelez bennünket. ... A fenti értékekre épül a XXI. század új gazdasága, a koncepció vezérelte gazdaság. A sikeres szakemberek felkészülésében, a szakmai ismeretek mellett a klasszikus értékek mentén található humán műveltségnek, az irodalomnak, a zenének, a képzőművészetnek ugyancsak fontos szerepe van. Csodálatos élmény e két világ összekapcsolása. Mindezt egy szép Szent Pál-i hasonlattal kifejezve: énekeljete az elmétekkel! ... Kívánom, hogy sikerüljön nektek. A marsallbot a zsebetekben van”

**Kémiai és Vegyipari
Szekció**

Balog Ádám

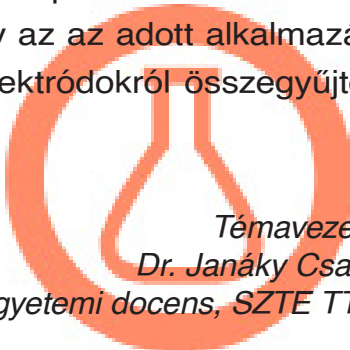
Szegedi Tudományegyetem
SZTE TTIK Kémia Doktori Iskola
PhD hallgató
balogadam@chem.u-szeged.hu



Félvezetőkben lévő hibahelyek tanulmányozása és azok hatása az elektrokémiai tulajdonságokra

A 21. század egyik nagy kihívása a fosszilis tüzelőanyagok felhasználásának csökkentése és azok megújuló energiákkal történő helyettesítése. Ezek közül a legfontosabb a napenergia, mely a globális energiafelhasználásnál éves szinten 6500-szor nagyobb mennyiségű energiát juttat a Földre. Egy elektrokémikus szemszögéből nézve ezen energia elektromos, illetve kémiai energiává történő átalakítása a legfontosabb, melynek megvalósításában a félvezetőknek nélkülözhetetlen szerepük van.

A félvezetőkben megvilágítás hatására lyukak, illetve elektronok jönnek létre, melyek elkülönülnek egymástól. A napelemek esetén ezek egy külső áramkörön keresztül áramként kinyerhetők, míg a fotoelektrokémiai alkalmazások esetén ezen töltéshordozók az oldatban lévő reaktáns elektrokémiai átalakítására fordíthatók. A különböző félvezető anyagok sajátosságainak megismerését célzó kutatásokban azonban gyakran figyelmen kívül marad, hogy csak nagyon ideális esetekben érvényesül, hogy a félvezetők vegyérték- és vezetési sávját elválasztó tiltott sáv nem tartalmaz hibahelyeket. Biztonsággal kijelenthető, hogy ezek jelenléte nagyban befolyásolja az elektrokémiai tulajdonságokat, a kérdés már csak az, hogy vajon milyen irányban. Ennek megválaszolását tűztük ki célul a kutatások kezdeti szakaszán különböző számú és típusú hibahelyeket tartalmazó félvezetők esetén. Ezen kívül célunk volt magyarázni a változások pontos okait, melyet valós idejű, úgynevezett in situ elektrokémiai módszerek alkalmazásával kívántunk megtenni. Az említett technikákkal ugyanis nyomon követhetők a különböző tulajdonságok a potenciál változtatásával, ezek ismeretében pedig pontosan meg tudjuk adni az adott félvezető optimális működési körülményeit, illetve akár hangolni is tudjuk annak sajátosságait, hogy az az adott alkalmazási területhez a legmegfelelőbb legyen. Előadásom során a TiO_2 elektródokról összegyűjtött eredményeimet fogom bemutatni.



*Témavezető:
Dr. Janáky Csaba
egyetemi docens, SZTE TTIK*

**Kémiai és Vegyipari
Szekció**

Tartalomjegyzék

Szervezőbizottság	2
Impresszum	2
Fővédnökök, támogatók	3
Az OTDK, azaz az Országos Tudományos Diákköri Konferencia	4
Dékáni köszöntő	5
A „Roska Tamás Tudományos Előadás”	6
Az OTDT Kémiai és Vegyipari Szekciójának szakmai bizottsága	14
A 35. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekciójának bíráló bizottságai és résztvevői	15
Áttekintő program	22
Részletes program	25
Tartalmi kivonatok	39
Analitikai kémia I.	40
Tápközegek minőségi és mennyiségi elemzése Raman kémiai térképezéssel	41
Valós idejű spektroszkópiai mérések és kemometriai módszerek alkalmazása gyógyszerkioldódás predikciójára	42
Kinurénsav és legújabb származékainak mennyiségi meghatározása in vitro vér–agy gát modellen végzett permeabilitási vizsgálati mintákból; módszerfejlesztés és alkalmazás	43
The investigation of the effect of the column and carrier gas parameters on linear retention index	44
Jód adagolás hatása fóliasátorban nevelt paradicsomnövények elemfelvételére	45
Alacsony molekulatömegű heparin meghatározása affinitás kapilláris elektroforézis alkalmazásával	46
Pseudomonas törzsből izolált lipid-A szerkezetének és hőmérsékletfüggésének felderítése kapcsolt tömegspektrometriás módszerekkel	47
Egy ciszteintartalmú peptid szintézise és trisz(2-karboxietil)-foszfin jelenlétében képződő bomlástermékeinek vizsgálata UHPLCMS technikával	48
Elektrofil funkciós csoportok és tiol-modellvegyületek reakciója	49
Analitikai kémia II.	50
Szén-dioxid nyomás alatti keverékrendszerek olvadáspontmérése: módszerfejlesztés	51
Adatértékelési és minta-előkészítési módszerek fejlesztése fehérjék poszt-transzlációs módosításainak vizsgálatára	52
Kálium-ferrát analitikai vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával és röntgendiffraktometriával	53
Mikrofluidikai eszközök fejlesztése nanorészecskék egyrészecskés ICP–MS (spICP–MS) módszerrel történő on-line karakterizálása céljára	54
Kvarcüveg hordozón kovalensen rögzített makrociklus alapú direkt optód polimermembrán fejlesztése és alkalmazása Zn-ionok spektrofluorimetriás analízisében	56
Prediktív in vitro kioldódás vizsgálati módszer fejlesztése szilárd gyógyszerkészítmények vizsgálatára	57

A lineáris retenciós index retenciót befolyásoló tényezőktől való függésének vizsgálata a gázkromatográfiában	58
In-line alkalmazható spektroszkópiai módszereket befolyásoló tényezők vizsgálata szálas minták folyamatos feldolgozásánál	59
Anyagtudomány	60
Intermolekuláris kölcsönhatások szabályozott hatóanyag-leadású rendszerekben	61
Ezüst-foszfát alkalmazása bioaktív üveg mátrixban és azok fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságainak vizsgálata	62
Szén nanoszerkezetek hatása a hidroxiapatit adszorpciós és deszorpciós tulajdonságaira	63
Kémiaailag módosított kitozánbevonatok fejlesztése korrózióvédelmi alkalmazásokra	64
Ca(II)-alginát aerogél hidratációs folyamatai	65
Platina nanorészecskék hatása 2D WSe ₂ nanolapok fotoelektrokémiai aktivitására	66
Ioncserélő gyanták fém-ion megkötési tulajdonságainak összehasonlító vizsgálata	67
Biokémia	68
Cinkujj fehérje fémion-kötésének vizsgálata FluoZin-3 fluoreszcens festékkel	69
Rekombináns, nem-kanonikus aminosavat tartalmazó fenilalanin-ammónia-liáz (PAL) előállítása	70
Genom szintű uracil beépülési mintázatok vizsgálatára alkalmas szenzorfehérje továbbfejlesztése és alkalmazásának finomítása	71
A fenilalanin-ammónia-liáz termostabilitásának növelése iteratív telítési mutagenézissel	72
A mikobakteriális dUTPáz enzim szerepének vizsgálata	73
Organokatalízisben alkalmazott cinkona alkaloidok citotoxicitásának tesztelése parentális és multidrog rezisztens malignus sejtvonal páron	74
Onkogén mutációt hordozó KRAS fehérjék csökkent GTPáz funkciójának helyreállítására tervezett GAP fehérje mutánsok vizsgálata	75
GnRH fehérje-hatóanyag biokonjugátumok szintézise és tumorelles hatásvizsgálata	76
SARS-CoV-2 stabilitás vizsgálat RT-PCR módszerrel orr- és garat nyálkahártya mintából	77
Máj uptake transzporterek szteroid alapú inhibitorainak vizsgálata	78
Sejthalált moduláló rekombináns SMAC fehérje bioszintézise	79
Biotechnológia és élelmiszer-kémia	80
Modell rendszer létrehozása a bakteriofág dUTPáz aktivitás horizontális géntranszferre gyakorolt hatásának vizsgálatára Staphylococcus aureus-ban	81
Egy búzán túlmutató probléma: rozs és árpa prolaminok szerepe a gluténanalitikában	82
Anódpotenciál-vezérelt exoelektrogén mikroba-szelekció bioelektrokémiai rendszerekben	83
Reaktorfejlesztés exoelektrogén biofilm kialakítására és hidrogén bioelektrokémiai előállítására	84
Fajtaszelekciós módszertan kidolgozása gluténmentes diétába illeszthető zabfajták azonosításához	85
Gyógy-és fűszernövények antioxidáns hatásának és flavonoid tartalmának spektrofotometriás vizsgálata	86
Potenciális antivirális oltóanyag fejlesztése vírus burokfehérje és flagellin fuzionálásával	87

Hőkezelés hatása a zab technológiai tulajdonságainak és lipid romlási folyamatainak alakulására	88
Poli(vinil-alkohol) alapú prekursorok optimalizálása enzimesapdázásra alkalmas nanoszálak előállítására	89
Flavivírus burokfehérje kötő doménjének rekombináns előállítása célmolekulaként irányított evolúcióhoz	90
In vitro toxikológiai májmodellek: HepG2 és HepaRG sejtvonalak alkalmazhatósága	91
Elméleti kémia	92
Multipólus közelítés vizsgálata intermolekuláris kölcsönhatás leírására	93
A $\text{OH} + \text{CH}_4$ és C_2H_6 reakciók tanulmányozása a standard kvantumkémian túl	94
α, β -telítetlenséget tartalmazó inon-vegyületek 1,2-redukciójának vizsgálata	95
Integrals for lower bounds to the exact energy	96
Az 1,4-diaminobenzol vezetőképességének vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel	97
Bizmut- és antimonhelyettesített foszfaketének szerkezete és reaktivitása	98
Kölcsönhatás 2D (π) és 3D (σ) aromás rendszerek között a karborán vegyületeiben	99
Penténsavakhalogénezéses gyűrűzárásának vizsgálata számítógépes kémiai módszerekkel	100
Foszfortartalmú ambidens nukleofilek reaktivitásának kvantumkémiai vizsgálata	101
Szén-dioxid redukciójának mechanizmusa Cu_4 klaszteren	102
Fizikai kémia I.	103
Kén-hidrogén–alkán elegyek adszorpciós elválasztásának molekuláris szimulációs vizsgálata csak szilíciumot tartalmazó zeolitokon	104
Kitozán térhálósításának vizsgálata elektrokémiai módszerrel cink hordozón	105
Metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyedési tulajdonságainak vizsgálata számítógépes szimulációs módszerekkel	106
1:1 hidrogén-kötéses [H, C, N] és [H, C, N, O] komplexek mátrixizolációs IR-spektroszkópiás vizsgálata	107
Koordinációs kémiával a biztonságosabb betegdiagnosztikáért – Az OPCPA ligandum szintézise és fizikai kémiai jellemzése	108
A fenalenil-gyök vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával	109
Vegyes összetételű micellák képződésének vizsgálata kalorimetriás módszerrel	110
Új lehetőségek természetileg releváns in vitro permeabilitás modell kidolgozására	111
Különböző talajtípusok foszfátmegkötésének vizsgálata heterogén izotópcserével	112
Elektrokémiai mérőrendszer összeállítása ferrationok képződésének vizsgálatához	113
Fizikai kémia II.	114
3-klórmandulasav olvadási hőmérsékletének vizsgálata szuperkritikus szén-dioxid és szerves oldószerek nagynyomású elegyében	115
Furfurol homogén ruthénium katalizált hidrogénezésének reakciókinetikai vizsgálata	116
Tranziens módszerekkel kapott korróziósebességek összehasonlító vizsgálata	117
Az iminoacetonitril izomerek egymásba alakulásának vizsgálata hidrogénezési/dehidrogénezési katalitikus ciklusokon keresztül	118

A szabad és az aerogélen immobilizáltCu(II)-ciklén komplex katalizátorok hatásmechanizmusának vizsgálata	119
1,4-Benzokinon-származékok redoxi- és fotokémiai sajátosságai	120
Developing a computer controlled potentiostat with dynamic current ranging	121
Kémiai reakció és a közegmozgás kölcsönhatásának modellezése szilárd–folyadék rendszerben	122
Merevgerincű pikolinát-csoportot tartalmazó Mn ²⁺ -alapú MRI kontrasztanyag-jelölt előállítás és koordinációs kémiai jellemzése	123
Nitrogén-monoxid átalakulásait szénhidrogének jelenlétében leíró reakciómechanizmusok vizsgálata	124
Elektrokémiai mérőrendszer összeállítása ferrationok képződésének vizsgálatához	125
Kémiai technológia	126
Folyamatos porhomogenizálás digitális ikerpárjának fejlesztése neurális hálókkal és tartózkodási idő eloszlás modellekkel	127
Alacsony hatóanyag-tartalom valós idejű mérése folyamatos nedves granulálás során gépi látás segítségével	128
Impinging jet technológia fejlesztése reakcióelegy folyamatos kristályosításához	129
Oldószercsere áramlásos körülmények között közel szobahőmérsékleten	130
Folyamatos gyógyszeripari poradagolás szabályozásának fejlesztése valós idejű képelemzés alkalmazásával	131
Algaszuszpenzió sűrítésének vizsgálata habflotálással	132
Acetil-szalicilsav porok és tiszta hatóanyagot tartalmazó kapszulák kioldódásának jóslása a szemcseméret-eloszlás ismeretében	134
Elektrosztatikus szálképzéssel előállított hatóanyag tartalmú minták folyamatos homogenizálása	135
Környezeti kémia és környezettechnológia	136
Kationos farmakonok eltávolítása vizes oldatokból polielektrolit/grafén-oxid multirétegekkel módosított nanoszűrő membránokkal	137
Higanygőzlámpa és LED fényforrások összehasonlítása ZnO és TiO ₂ fotokatalizátorok alkalmazása során	139
TiO ₂ alapú fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata	140
Ipari szennyvizek kezelése réteges kettős hidroxidokkal	141
Fenol toleráns Rhodococcus opacus PD630 fermentációjának vizsgálata és fenol-szenzor vezérelt rátáplálásos rendszer megépítése	142
Új aeroszol részecskék keletkezésének és növekedésének magassági kiterjedése	143
Vákuum-ultraibolya tartományban sugárzó fényforrások jellemzése, összehasonlítása és alkalmazhatóságának vizsgálata antibiotikum hatóanyagok átalakításában	144
A COVID–19 járványügyi intézkedések hatása Budapest levegőminőségére	145
Polimerkémia- és technológia	146
Kinetic investigation on the synthesis of thioether containing copolymers	147
Organocatalytic depolymerization of poly(ethylene terephthalate)	148
Hibrid polipropilén kompozitok: merevség, ütésállóság, deformációs folyamatok	149

Flibanszerin folyamatos formulációja közvetlenül áramlásos reakcióelegyből	150
Természetes szálak értéknövelt felhasználása polimer kompozitokban: szerkezet és tulajdonságok	151
Hidrogén/szintézisgáz előállítása csomagolóipari többkomponensű polimer hulladékok katalitikus pirolízis-reformálásával	153
Szerves kémia I.	154
Szén–szén kötés kialakítása nitroxidok jelenlétében Baylis–Hillman-reakcióval	155
Ferrocénekkal a rák ellen?	156
Biciklo[1.1.1]pentán vázrészt tartalmazó anyagok előállítása	157
Izoindolinon-foszfónatok és izoindolinon-foszfin-oxidok szintézisének tanulmányozása	158
Diszubsztituált aminosavakhoz vezető intermedierek organokatalitikus szintézise és optimalizálása	159
Norbelladin analógok szintézise	160
Tiolok és származékaik előállítása elemi kénnel elektronhiányos kettős kötést tartalmazó vegyületekből	161
Magas fluortartalmú építőelem szintézise HFO-1234ze ipari hűtőgázból és fotokémiai felhasználása	162
1,3-dihidro-2H-2λ6,3,4-benzotiadiazepin-2,2-dion származékok előállítása	163
Szerves kémia II.	164
Potenciális KRAS-G12C kovalens inhibitorok szintézise	165
Fenolszármazékok szelektív fluoralkilezési reakcióinak vizsgálata új hipervalens jodóniumsó segítségével	166
Biológiai jelentőségű aminok alkalmazása nukleofil reagensként palládiumkatalizált aminokarbonilezési reakciókban	167
Cinkona-négyzetamid organokatalizátorok poli(glicidil-metakrilát) szemcsékhez való rögzítése és alkalmazása	168
Tioéter-aminofoszfin ligandumok alkalmazása allil-éterek palládium-katalizált enantioszelektív szintézisében	169
Photochromic switching of a [4n] π electron system	170
Trifluoretil-szubsztituált terminális alkinek szintézise és szerkezeti vizsgálata	171
Elemi kén alkalmazása multikomponensű reakciókban	172
Látható fénnel indukált célzott hatóanyagleadásra és valós idejű optikai nyomonkövetésre képes konjugátumok előállítása	173
Szerves kémia III.	174
Új generációs, biomolekulák jelölésére alkalmas fluoreszcens festékek előállítása	175
Eukaliptol: új, biológiai eredetű oldószer palládium-katalizált karbonilatív keresztkapcsolási reakciókhoz	176
Szteránvázás N-pikolil-amidok előállítása homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakcióban	177
Design, synthesis and analysis of novel fluorescent probes for two-photon zinc imaging	178
Cinkona és prolin alapú organokatalizátorok szintézise és alkalmazása sztereoszelektív reakciókban	179
Feltételesen fotoaktiválható vegyületek szintézise és vizsgálata	180

Mikroszkóp lézer által indukált fotooxidatíván aktiválható jelzővegyületek szintézise	181
Új fotokatalizátorok szintézise és alkalmazása látható fénnel kiváltott szerves kémiai átalakításokban	182
Hidrobenzoin-alapú, újrahasználható királis fázistranszfer katalizátorok szintézise és alkalmazása	183
Új, szteránvázás heterociklusok előállítása és vizsgálata	184
Szteroidok aza-Michael addíciós reakciója reverzibilis ionfolyadékok jelenlétében	185
Szervetlen kémia	186
Grafén felületének módosítása réz klaszterekkel	187
Oxidálóanion-tartalmú vas(III)-karbamidkomplex sók szintézise, szerkezete és tulajdonsága	188
Dibizmutátok mint építőegységek: kvantumkémiai számítások	189
A Monenzin A – egy természetes antibiotikum fémkomplexei	190
Egy (N,N) donoratomokat tartalmazó Schiff-bázis és félszendvics fémorganikus komplexeinek oldatkémiai vizsgálata és kölcsönhatásuk bioligandumokkal	191
Az [Mn(OPC2AM ^{sarc})] oldategyensúlyi vizsgálata: egyensúly, kinetika és relaxáció	192
Vízoldható terbium(III)-porfirin komplexek fotofizikai és fotokémiai vizsgálata	193

**Az Országos Tudományos Diákköri Tanács
Kémiai és Vegyipari Szekciójának
szakmai bizottsága**

A Szakmai Bizottság elnöke: **Skodáné Dr. Földes Rita** egyetemi tanár, PE MK

A 35. OTDK Kémiai és Vegyipari szekciójának

ügyvezető elnöke: **Dr. Császár Attila** egyetemi tanár, ELTE TTK

ügyvezető társelnöke: **Dr. Szalai István** egyetemi tanár, ELTE TTK

ügyvezető titkára: **Dr. Bánóczy Zoltán** egyetemi adjunktus, ELTE TTK

hallgatói képviselője: **Kovács Márton** egyetemi hallgató, ELTE TTK

és **Simkó Irén** egyetemi hallgató, ELTE TTK

Intézményi képviselők:

Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár, BME VBK

Mészárosné Dr. Tőrincsi Mercédesz egyetemi adjunktus, BME VBK

Zeller Bálint egyetemi hallgató, BME VBK

Dr. Kiss Attila egyetemi docens, DE TTK

Bunda Szilvia PhD hallgató, DE TTK

Dr. Harmat Veronika egyetemi adjunktus, ELTE TTK

Szobota András PhD hallgató, ELTE TTK

Dr. Jedlovsky Pál egyetemi tanár, EKE

Dr. Murányi Zoltán főiskolai tanár, EKE

Smuczer Fanni egyetemi hallgató, EKE

Dr. Viskolcz Béla főiskolai tanár, ME

Dr. Sarka Lajos főiskolai tanár, NyE

Dr. Ősz Katalin egyetemi docens, PTE TTK

Horváth Éva PhD hallgató, PTE TTK

Dr. Jakusch Tamás egyetemi adjunktus, SZTE TTK

Mészáros János Péter PhD hallgató, SZTE TTK

Dr. Jedlovsky-Hajdú Angéla tudományos munkatárs, PSA Társaság

Dr. Gyepes Róbert egyetemi docens, SK SJE

Dr. Paizs Csaba egyetemi tanár, RO BBTE

Dr. Szabó Gabriella egyetemi adjunktus, RO BBTE

Dr. Tonk Szende egyetemi docens, RO EMTE

A 35. Országos Tudományos Diákköri Konferencia Kémiai és Vegyipari Szekciójának résztevői és bíráló bizottságai

Résztevő intézmények:

Babeş-Bolyai Tudományegyetem – RO BBTE
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem – BME
Debreceni Egyetem – DE
Dunaújvárosi Egyetem – DUE
Eötvös Loránd Tudományegyetem – ELTE
Eszterházy Károly Egyetem – EKE
Kisvárdai Bessenyei György Gimnázium és Kollégium
Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem – MATE
Miskolci Egyetem – ME
Pannon Egyetem – PE
Pázmány Péter Katolikus Egyetem – PPKE
Pécsi Tudományegyetem – PTE
Selye János Egyetem – SK SJE
Szegedi Tudományegyetem – SZTE
Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem – RO EMTE
Univerzita Karlova – CZ UKP
Újvidéki Egyetem – RS UE

Tagozatok, zsűrik és résztvevők

Analitikai kémia I.

Elnök:	Dr. Pokol György	BME	professor emeritus
Tagok:	Dr. Galbács Gábor	SZTE	egyetemi tanár
	Dr. Mihucz Viktor	ELTE	egyetemi docens

Bornemissza Zsuzsanna	BME
Horváth Livia	BME
Kmetykó Noémi	SZTE
Koshman Yelena	ELTE
Kovács Vanda Viktória	ELTE
Molnár Katalin	CZ UKP
Úrmös Bettina	PTE
Varga Judit Debóra	ELTE
Varga Petra Regina	BME

Analitikai kémia II.

Elnök:	Dr. Szalai István	ELTE	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Horváth Viola	BME	egyetemi docens
	Dr. Muránszki Gábor	ME	egyetemi docens

Béri János	BME
Bugyi Fanni	ELTE
Herczeg Bence	ELTE
Kajner Gyula	SZTE
Koskai Martin József	DUE
Kovács Korinna	BME
Szabó Réka	BME
Széles Aliz	BME
Záhonyi Petra	BME

Anyagtudomány

Elnök:	Dr. Hernádi Klára	SZTE	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Sinkó Katalin	ELTE	tudományos főmunkatárs
	Dr. Szilágyi András	BME	egyetemi docens

Bulátkó Anna	BME
Debreczeni Diána	SZTE
Farkas Noémi Izabella	RO BBTE
Márton Péter	BME
Papp Vanda	DE
Szabó Gábor	SZTE
Tamás Bence Benedek	ME

Biokémia

Elnök:	Dr. Paizs Csaba	RO BBTE	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Bősze Szilvia	ELTE	tudományos főmunkatárs
	Dr. Deák Veronika	BME	egyetemi adjunktus

Albeck Gyula	SZTE
Boros Krisztina	RO BBTE
Holub Eszter	BME
Horváth Ilka	RO BBTE

Lóczy Hanna	BME
Pósa Szonja Polett	BME
Sólyom Ildikó	BME
Szabó Boglárka	ELTE
Szép Evelin	RO EMTE
Ungvári Orsolya	BME
Váncsa Klára	RO EMTE

Biotechnológia és élelmiszer-kémia

Elnök:	Simonné Dr. Sarkadi Lívია	MATE	egyetemi tanár
	Bélafiné Dr. Bakó Katalin	PE	egyetemi tanár
	Dr. Molnár Mónika	BME	egyetemi docens

Angyal Viola Zsuzsanna	BME
Komenda Zsófia – Tóth Anikó Réka	BME, BME
Kovács Laura	PE
Magasmarti Karina Lúcia	PE
Mucsi Edina – Szegő Zsuzsanna	PPKE, BME
Nyitrai Regina	PTE
Orosz Ágnes	PE
Solymos Fanni	BME
Tóth Gergő Dániel	BME
Tóth Otília	PE
Varga Dóra	BME

Elméleti kémia

Elnök:	Dr. Nyulászi László	BME	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Bakó Imre	ELKH TTK	tudományos tanácsadó
	Dr. Szidarovszky Tamás	ELTE	tudományos munkatárs

Barcza Bónis	ELTE
Gruber Balázs	SZTE
Hümpfner Evelyn	BME
Ireland, Robbie	ELTE
Jelenfi Dávid Péter	ELTE
Kertész Erik	BME
Kovács Máté Barnabás	BME
Laczkó Gergely	ELTE
Lőrincz Balázs	BME
Szalay Máté	BME

Fizikai kémia I.

Elnök:	Dr. Turányi Tamás	ELTE	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Lente Gábor	PTE	egyetemi tanár
	Dr. Hófler Lajos	BME	egyetemi docens

Bucsei Dóra	PE
Gyéresi Ibolya Kreszcencia	RO BBTE
Horváth Réka Anna	BME
Keresztes Barbara	ELTE
Lakatos Gergő	DE
Schneiker Anita	ELTE
Seres László	SZTE
Simon Eszter	BME
Vörös Zoltán János	DE
Zsubrits Ábel	ELTE

Fizikai kémia II.

Elnök:	Dr. Kubinyi Miklós	BME	professor emeritus
Tagok:	Dr. Jedlovszky Pál	EKE	egyetemi tanár
	Dr. Szabó Gabriella	RO BBTE	egyetemi adjunktus

Arany Dóra	BME
Árvai Csaba	BME
Baccilieri Dávid	PE
Balbisi Mirjam	ELTE
Balogh Zoltán	DE
Jenei Laura Barbara	PTE
Kis Zoltán Sándor	ELTE
Papp Paszkál	SZTE
Sajtos Gergő	DE
Veres-Ravai Ákos	ELTE
Zsubrits Ábel	ELTE

Kémiai technológia

Elnök:	Dr. Mika László Tamás	BME	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Abonyi János	PTE	egyetemi tanár
	Dr. Sági András	SZTE	egyetemi adjunktus

Beke Áron Kristóf	BME
Ficzere Máté	BME
Joó Ádám Viktor	BME
Kántor Petra	BME
Madarász Lajos	BME
Major Kitti	PE
Takács Piroska	PE
Vészi Blanka	BME
Záhonyi Petra	BME

Környezeti kémia és környezettechnológia

Elnök:	Dr. Felsing Attila	PTE	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Kéri Mónika	DE	egyetemi adjunktus
	Dr. Hoffer András	PE	tudományos főmunkatárs

Gyenes Péter	SZTE
Hlogyik Tamás	SZTE
Kocsis Gábor	PE
Nagy Péter	SZTE
Török Tivadar Péter	BME
Varga Péter Tibor	ELTE
Varga Virág	SZTE
Vörösmarty Máté	ELTE

Polimerkémia- és technológia

Elnök:	Dr. Dékány Imre	SZTE	professor emeritus
	Dr. Zsuga Miklós	DE	professor emeritus
	Dr. Gyarmati Benjámin	BME	egyetemi docens

Aitkazina Aiman	ELTE
Daicu Diana	BME
Ferdinánd Milán	BME
Fügedi Kata Dorina	BME
Horváth Csilla	BME
Kovács Tamás	PE
Zsinka Viktória	PE

Szerves kémia I.

Elnök:	Skodáné Dr. Földes Rita	PE	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Volk Balázs	EGIS	hatóanyagfejlesztési igazgató
	Dr. Hegedűs László	BME	egyetemi docens

Balázsi Áron	PTE
Gelle Donát	SK SJE
Jobbágy Dorina	ELTE
Rávai Bettina	BME
Richter Dóra	BME
Szabó Bence	ELTE
Szabó Renáta	BME
Szalai Péter	ELTE
Teski Tamara	BME

Szerves kémia II.

Elnök:	Dr. Keglevich György	BME	egyetemi tanár
Tagok:	Dr. Lovász Tamás	RO BBTE	egyetemi docens
	Dr. Szabó Dénes	ELTE	egyetemi docens

Csorba Noémi	BME
Englert Dóra Fanni	ELTE
Erdélyi Ádám	PTE
Fehér Zsuzsanna	BME
Guóth Mária	PE
Kalapos Péter Pál	ELTE
Kiss Etelka	RO BBTE
Szabó Renáta	BME
Verkman András	BME

Szerves kémia III.

Elnök:	Dr. Hudecz Ferenc	ELTE	professor emeritus
Tagok:	Dr. Farkas Gergely	PE	egyetemi docens
	Dr. Bálint Erika	BME	egyetemi adjunktus

Ágoston Henrietta	SZTE
Batha Bálint	BME
Bede Fanni	PTE
Csomos Attila	ELTE
Dargó Gyula	BME
Domahidy Farkas	BME
Kern Dóra	ELTE
Nagy Bálint	ELTE
Oláh Attila László	BME
Szele Boglárka	PE

Szervetlen kémia

Elnök:	Dr. Veszprémi Tamás	BME	professor emeritus
Tagok:	Dr. Jancsó Attila	SZTE	egyetemi adjunktus
	Dr. Szoboszlai Norbert	ELTE	egyetemi adjunktus

Barhács Balázs Marcell	BME
Béres Kende Attila	ELTE
Fekete Csilla	BME
Kis Máté Levente	SZTE
Köhler Fanni	PPKE
Nagy Antónia	DE
Váradi Márk	PE

Pótzsúri tagok

Dr. Csanádi János	RS UE	egyetemi tanár
Dr. Császár Attila	ELTE	egyetemi tanár
Dr. Kardos Levente	SZIE	egyetemi adjunktus
Dr. Szalay Roland	ELTE	egyetemi adjunktus

Áttekintő program

2021. május 17. hétfő

kezdő záró

időpont

8:00 9:00

Megnyitó

9:00 10:20

Biotechnológia és élelmiszer-kémia

Biokémia

Analitikai kémia I.

10:20 10:50

Kávészünet

10:50 12:10

Biotechnológia és élelmiszer-kémia

Biokémia

Szerves kémia I.

Fizikai kémia II.

12:30

Analitikai kémia I.

12:30 13:00

Ebédészünet

13:00 13:45

Pódiumbeszélgetés

13:45 14:00

„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése

14:00 15:00

Biotechnológia és élelmiszer-kémia

Biokémia

Szerves kémia I.

15:20

Fizikai kémia II.

Környezeti kémia és környezettechnológia

15:20 15:50

Kávészünet

15:50 16:50

Szerves kémia I.

Fizikai kémia II.

17:30

Környezeti kémia és környezettechnológia

17:30 18:00

Vacsoraszünet

18:00 18:45

Pódiumbeszélgetés

18:45 19:00

„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése

Áttekintő program

2021. május 18. kedd

kezdő záró

időpont

9:00	10:00	Fizikai kémia I.
	10:20	Szerves kémia II.
		Analitikai kémia II.
10:20	10:50	Kávészünet
10:50	12:10	Elméleti kémia
		Fizikai kémia I.
	12:30	Szerves kémia III.
		Analitikai kémia II.
11:10	12:10	Szerves kémia II.
12:30	13:00	Ebédészünet
13:00	13:45	Pódiumbeszélgetés
13:45	14:00	„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése
14:00	15:00	Szerves kémia II.
		Elméleti kémia
		Szerves kémia III.
		Fizikai kémia I.
	15:20	Kémiai technológia
15:20	15:50	Kávészünet
15:50	16:50	Szerves kémia III.
		Elméleti kémia
	17:30	Kémiai technológia
17:30	18:00	Vacsoraszünet
18:00	18:45	Pódiumbeszélgetés
18:45	19:00	„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése

Áttekintő program

2021. május 19. szerda

kezdő záró

időpont

9:00 10:20

Szervetlen kémia

Anyagtudomány

Polimerkémia- és technológia

10:20 10:50

Kávészünet

10:50 11:50

Szervetlen kémia

Anyagtudomány

Polimerkémia- és technológia

15:30 16:15

Roska Tamás előadás

16:30 18:00

Ünnepélyes díjkiosztó és zárás

Részletes program

2021. május 17. hétfő

8:00	9:00	Megnyitó		
9:00	9:20	Biotechnológia és élelmiszer-kémia		
		Orosz Ágnes	PE	<i>Potenciális antivirális oltóanyag fejlesztése vírus burokkfehérje és flagellin fuzionálásával</i>
		Biokémia		
		Ungvári Orsolya	BME	<i>Máj uptake transzporterek szteroid alapú inhibitorainak vizsgálata</i>
		Analitikai kémia I.		
		Horváth Livia	BME	<i>Valós idejű spektroszkópai mérések és kemometriai módszerek alkalmazása gyógyszerkioldódás predikciójára</i>
9:20	9:40	Biotechnológia és élelmiszer-kémia		
		Solymos Fanni	BME	<i>Hőkezelés hatása a zab technológiai tulajdonságainak és lipid romlási folyamatainak alakulására</i>
		Biokémia		
		Boros Krisztina	RO BBTE	<i>Rekombináns, nem-kanonikus aminosavat tartalmazó fenilalanin-ammónia-liáz (PAL) előállítása</i>
		Analitikai kémia I.		
		Varga Petra Regina	BME	<i>Elektrofil funkciós csoportok és tiol-modellvegyületek reakciója</i>
9:40	10:00	Biotechnológia és élelmiszer-kémia		
		Angyal Viola	BME	<i>Modell rendszer létrehozása a bakteriofág dUTPáz aktivitás horizontális géntranszferre gyakorolt hatásának vizsgálatára Staphylococcus aureus-ban</i>
		Biokémia		
		Sólyom Ildikó	BME	<i>Onkogén mutációt hordozó KRAS fehérjék csökkent GTPáz funkciójának helyreállítására tervezett GAP fehérje mutánsok vizsgálata</i>
		Analitikai kémia I.		
		Kovács Vanda Viktória	ELTE	<i>Jód adagolás hatása fóliasátorban nevelt paradicsomnövények elemfelvételére</i>

10:00 10:20 **Biotechnológia és élelmiszer-kémia**

Magasmarti Karina Lúcia

PE

Reaktorfejlesztés exoelektrogén biofilm kialakítására és hidrogén bioelektrokémiai előállítására

Biokémia

Pósa Szonja Polett BME

Organokatalízisben alkalmazott cinkona alkaloidok citotoxicitásának tesztelése parentális és multidrog rezisztens malignus sejtvonal páron

Analitikai kémia I.

Molnár Katalin CZ UKP

Alacsony molekulatömegű heparin meghatározása affinitás kapilláris elektroforézis alkalmazásával

10:20 10:50 **Kávészünet**

10:50 11:10 **Biotechnológia és élelmiszer-kémia**

Kovács Laura

PE

Anódpotenciál-vezérelt exoelektrogén mikroba-szelekció bioelektrokémiai rendszerekben

Biokémia

Szép Evelin

RO EMTE

SARS-CoV-2 stabilitás vizsgálat RT-PCR módszerrel orr- és garat nyálkahártya mintából

Szerves kémia I.

Volk Balázs

Egis Zrt.

Megnyitó

Fizikai kémia II.

Veres-Ravai Ákos

ELTE

Nitrogén-monoxid átalakulásait szénhidrogének jelenlétében leíró reakciómechanizmusok vizsgálata

Analitikai kémia I.

Varga Judit Debóra ELTE

Egy ciszteintartalmú peptid szintézise és trisz(2-karboxietil)-foszfin jelenlétében képződő bomlástermékeinek vizsgálata UHPLCMS technikával

11:10 11:30 **Biotechnológia és élelmiszer-kémia**

Tóth Gergő Dániel BME

Poli(vinil-alkohol) alapú prekursorok optimalizálása enzimesapdázásra alkalmas nanoszálak előállítására

Biokémia

Horváth Ilka

RO BBTE

A fenilalanin-ammónia-liáz termostabilitásának növelése iteratív telítési mutagenézissel

Szerves kémia I.

Jobbágy Dorina

ELTE

Biciklo[1.1.1]pentán vázrészt tartalmazó anyagok előállítása

		Fizikai kémia II.		
		Baccilieri Dávid	PE	<i>Tranziens módszerekkel kapott korróziósebességek összehasonlító vizsgálata</i>
		Analitikai kémia I.		
		Yelena Koshman	ELTE	<i>The investigation of the effect of the column and carrier gas parameters on linear retention index</i>
11:30	11:50	Biotechnológia és élelmiszer-kémia		
		Varga Dóra	BME	<i>In vitro toxikológiai májmodellek: HepG2 és HepaRG sejtvonalak alkalmazhatósága</i>
		Biokémia		
		Szabó Boglárka	KDOSZ	<i>GnRH fehérje-hatóanyag biokonjugátumok szintézise és tumorellenes hatásvizsgálata</i>
		Szerves kémia I.		
		Szabó Renáta	BME	<i>Tiolo és származékaik előállítása elemi kénnel elektronhiányos kettős kötést tartalmazó vegyületekből</i>
		Fizikai kémia II.		
		Zsubrits Ábel	ELTE	<i>Hol keletkeznek a ferrationok? Vas és öntöttvas minták transzpasszív oldódásának vizsgálata erősen lúgos közegben</i>
		Analitikai kémia I.		
		Űrmös Bettina	PTE	<i>Pseudomonas törzsből izolált lipid-A szerkezetének és hőmérsékletfüggésének felderítése kapcsolt tömegspektrometriás módszerekkel</i>
11:50	12:10	Biotechnológia és élelmiszer-kémia		
		Mucsi Edina, Szegő Zsuzsanna	PPKE, BME	<i>Fajtaszelekciós módszertan kidolgozása gluténmentes diétába illeszthető zabfajták azonosításához</i>
		Biokémia		
		Albeck Gyula	SZTE	<i>Cinkujj fehérje fémion-kötésének vizsgálata FluoZin-3 fluoreszcens festékkel</i>
		Szerves kémia I.		
		Balázsi Áron	PTE	<i>Szén-szén kötés kialakítása nitroxidok jelenlétében Baylis-Hillman-reakcióval</i>
		Fizikai kémia II.		
		Jenei Laura Barbara	PTE	<i>1,4-Benzokinon-származékok redoxi- és fotokémiai sajátosságai</i>

Analitikai kémia I.

Kmettykó Noémi SZTE

*Kinurénsav és legújabb származékainak mennyiségi meghatározása in vitro vér-agy gát modellen végzett permeabilitási vizsgálati mintákból; módszerfejlesztés és alkalmazás*12:10 12:30 **Analitikai kémia I.**

Bornemissza Zsuzsanna BME

*Tápközegek minőségi és mennyiségi elemzése Raman kémiai térképezéssel*12:30 13:00 **Ebédszünet**13:00 13:45 **Pódiumbeszélgetés** Prof. Peter Schreiner, a Német Kémiai Társaság elnöke13:45 14:00 **„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése**

Barankai Márton: A kémia jelene az emberiség jövője

14:00 14:20 **Biotechnológia és élelmiszer-kémia**

Tóth Otília PE

*Flavivirus burokfehérje kötő doménjének rekombináns előállítása célmolekulaként irányított evolúcióhoz***Biokémia**

Holub Eszter BME

*Genom szintű uracil beépülési mintázatok vizsgálatára alkalmas szenzorfehérje továbbfejlesztése és alkalmazásának finomítása***Szerves kémia I.**

Gelle Donát SK SJE

*Ferrocénnel a rák ellen?***Fizikai kémia II.**

Balogh Zoltán DE

*A szabad és az aerogélen immobilizált Cu(II)-ciklén komplex katalizátorok hatásmechanizmusának vizsgálata***Környezeti kémia és környezettechnológia**

Nagy Péter SZTE

*Ipari szennyvizek kezelése Réteges Kettős Hidroxidokkal*14:20 14:40 **Biotechnológia és élelmiszer-kémia**

Nyitrai Regina PTE

*Gyógy-és fűszernövények antioxidáns hatásának és flavonoid tartalmának spektrofotometriás vizsgálata***Biokémia**

Lóczi Hanna BME

*A mikobakteriális dUTPáz enzim szerepének vizsgálata***Szerves kémia I.**

Teski Tamara BME

1,3-dihidro-2H-2λ6,3,4-benzotia-diazepin-2,2-dion származékok előállítása

Fizikai kémia II.

Balbisi Mirjam ELTE *Az iminoacetonitril izomerek egymásba alakulásának vizsgálata hidrogénezési/dehidrogénezési katalitikus ciklusokon keresztül*

Környezeti kémia és környezettechnológia

Kocsis Gábor PE *TiO₂ alapú fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata*

14:40 15:00 **Biotechnológia és élelmiszer-kémia**

Komenda Zsófia, Tóth Réka

BME *Egy búzán túlmutató probléma: rozs és árpa prolaminok szerepe a gluténanalitikában*

Biokémia

Váncsa Klára RO EMTE *Sejthalált moduláló rekombináns SMAC fehérje bioszintézise*

Szerves kémia I.

Szalai Péter ELTE *Magas fluortartalmú építőelem szintézise HFO-1234ze ipari hűtőgázból és fotokémiai felhasználása*

Fizikai kémia II.

Papp Paszkál SZTE *Kémiai reakció és a közegmozgás kölcsönhatásának modellezése szilárd-folyadék rendszerben*

Környezeti kémia és környezettechnológia

Varga Virág SZTE *Vákuum-ultraibolya tartományban sugárzó fényforrások jellemzése, összehasonlítása és alkalmazhatóságának vizsgálata antibiotikum hatóanyagok átalakításában*

15:00 15:20 **Fizikai kémia II.**

Arany Dóra BME *3-klórmandulasav olvadási hőmérsékletének vizsgálata superkritikus szén-dioxid és szerves oldószerek nagynyomású elegyében*

Környezeti kémia és környezettechnológia

Hlogyik Tamás SZTE *Heterogén fotokatalízis alkalmazása imidaklopid és tiaklopid vizes oldatának kezelésére*

15:20 15:50 **Kávészünet**15:50 16:10 **Szerves kémia I.**

Rávai Bettina BME *Izoindolinon-foszfónatok és izoindolinon-foszfin-oxidok szintézisének tanulmányozása*

Fizikai kémia II.

Kis Zoltán Sándor ELTE *Developing a computer controlled potentiostat with dynamic current ranging*

Környezeti kémia és környezettechnológia

Gyenes Péter SZTE *Kationos farmakonok eltávolítása vizes oldatokból polielektrolit/grafén-oxid multirétegekkel módosított nanoszűrő membránokkal*

16:10 16:30 **Szerves kémia I.**

Szabó Bence ELTE *Norbelladin analógok szintézise*

Fizikai kémia II.

Sajtos Gergő DE *Merevgerincű pikolinát-csoportot tartalmazó Mn²⁺-alapú MRI kontrasztanyag-jelölt előállítás és koordinációs kémiai jellemzése*

Környezeti kémia és környezettechnológia

Varga Péter ELTE *Új aeroszol részecskék keletkezésének és növekedésének magassági kiterjedése*

16:30 16:50 **Szerves kémia I.**

Richter Dóra BME *Diszubsztituált aminosavakhoz vezető intermedierek organokatalitikus szintézise és optimalizálása*

Fizikai kémia II.

Árvai Csaba BME *Furfurol homogén ruthénium katalizált hidrogénezésének reakciókinetikai vizsgálata*

Környezeti kémia és környezettechnológia

Vörösmarty Máté ELTE *A COVID-19 járványügyi intézkedések hatása Budapest levegőminőségére*

16:50 17:10 **Környezeti kémia és környezettechnológia**

Török Tivadar Péter BME *Fenol toleráns Rhodococcus opacus PD630 fermentációjának vizsgálata és fenol-szenzor vezérelt rátáplálásos rendszer megépítése*

17:10 17:30 **Környezeti kémia és környezettechnológia**

Hlogyik Tamás SZTE *Higanygőzlámpa és LED fényforrások összehasonlítása ZnO és TiO₂ fotokatalizátorok alkalmazása során*

17:30 18:00 **Vacsoraszünet**

18:00 18:45 **Pódiumbeszélgetés** Prof. Angela Wilson, az Amerikai Kémiai Társaság elnöke

18:45 19:00 **„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése**

Bálint Gyopár – Krecht Hanna Regina: Kémia. De másképp.

2021. május 18. kedd

9:00	9:20	Szerves kémia II. Kotschy András Servier Zrt. <i>Megnyitó</i>
		Analitikai kémia II. Széles Aliz ELTE <i>A lineáris retenciós index retenciót befolyásoló tényezőktől való függésének vizsgálata a gázkromatográfiában</i>
		Fizikai kémia I. Horváth Réka Anna BME <i>Metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyedési tulajdonságainak vizsgálata számítógépes szimulációs módszerekkel</i>
9:20	9:40	Analitikai kémia II. Szabó Réka BME <i>Prediktív in vitro kioldódás vizsgálati módszer fejlesztése szilárd gyógyszerkészítmények vizsgálatára</i>
		Szerves kémia II. Erdélyi Ádám PTE <i>Biológiai jelentőségű aminok alkalmazása nukleofil reagensként palládiumkatalizált aminokarbonilezési reakciókban</i>
		Fizikai kémia I. Keresztes Barbara ELTE <i>1:1 hidrogén-kötéses [H, C, N] és [H, C, N, O] komplexek mátrixizolációs IR-spektroszkópiás vizsgálata</i>
9:40	10:00	Szerves kémia II. Kalapos Péter Pál ELTE <i>Photochromic switching of a [4n] π electron system</i>
		Analitikai kémia II. Herczeg Bence ELTE <i>Kálium-ferrát analitikai vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával és röntgendiffraktometriával</i>
		Fizikai kémia I. Simon Eszter BME <i>Új lehetőségek természetileg releváns in vitro permeabilitás modell kidolgozására</i>
10:00	10:20	Szerves kémia II. Guóth Mária PE <i>Tioéter-aminofoszfín ligandumok alkalmazása allil-éterek palládium-katalizált enantioszelektív szintézisében</i>
		Analitikai kémia II. Béri János BME <i>Szén-dioxid nyomás alatti keverékrendszerek olvadáspontmérése: módszerfejlesztés</i>
10:20	10:50	Kávészünet

10:50	11:10	Szerves kémia III.	Bogsch Erik	Richter Nyrt.	<i>Megnyitó</i>
		Analitikai kémia II.	Kovács Korinna	BME	<i>Kvarcüveg hordozón kovalensen rögzített makrociklus alapú direkt optód polimermembrán fejlesztése és alkalmazása Zn-ionok spektrofluorimetriás analízisében</i>
		Elméleti kémia	Gruber Balázs	SZTE	<i>A OH + CH₄ és C₂H₆ reakciók tanulmányozása a standard kvantumkémiaán túl</i>
		Fizikai kémia I.	Zsubrits Ábel	ELTE	<i>Elektrokémiai mérőrendszer összeállítása ferrátionok képződésének vizsgálatához</i>
11:10	11:30	Szerves kémia II.	Verkman András	BME	<i>Látható fénnel indukált célzott hatóanyagleadásra és valós idejű optikai nyomonkövetésre képes konjugátumok előállítása</i>
		Szerves kémia III.	Oláh Attila László	BME	<i>Hidrobenzoin-alapú, újrahasználatos királis fázistranszfer katalizátorok szintézise és alkalmazása</i>
		Analitikai kémia II.	Záhonyi Petra	BME	<i>In-line alkalmazható spektroszkópai módszereket befolyásoló tényezők vizsgálata szálas minták folyamatos feldolgozásánál</i>
		Elméleti kémia	Kertész Erik	BME	<i>Bizmut- és antimonhelyettesített foszfaketének szerkezete és reaktivitása</i>
		Fizikai kémia I.	Lakatos Gergő	DE	<i>Koordinációs kémiával a biztonságosabb betegdiagnosztikáért – Az OPCPA ligandum szintézise és fizikai kémiai jellemzése</i>
11:30	11:50	Szerves kémia II.	Englert Dóra Fanni	ELTE	<i>Fenolszármazékok szelektív fluoralkilezési reakcióinak vizsgálata új hipervalens jodóniumsó segítségével</i>
		Szerves kémia III.	Bede Fanni	PTE	<i>Szteránvázas N-pikolil-amidok előállítása homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakcióban</i>

Analitikai kémia II.

Bugyi Fanni ELTE *Adatértékelési és minta-előkészítési módszerek fejlesztése fehérjék poszt-transzlációs módosításainak vizsgálatára*

Elméleti kémia

Laczkó Gergely ELTE *Penténsavak halogénezéses gyűrűzárásának vizsgálata számítógépes kémiai módszerekkel*

Fizikai kémia I.

Seres László SZTE *Vegyes összetételű micellák képződésének vizsgálata kalorimetriás módszerrel*

11:50 12:10 **Szerves kémia III.**

Batha Bálint BME *Eukaliptol: Új, biológiai eredetű oldószer palládium-katalizált karbonilatív keresztkapcsolási reakciókhoz*

Analitikai kémia II.

Koskai Martin József DE *A vas és acéliparban alkalmazott alap és nyersanyagok valamint a félkész és kész termékek átfogó minta előkészítése mikrohullámú roncsolással és vizsgálata icp-es készülékkel*

Elméleti kémia

Szalay Máté BME *Szén-dioxid redukciójának mechanizmusa Cu₄ klaszteren*

Szerves kémia II.

Szabó Renáta BME *Elemi kén alkalmazása multikomponensű reakciókban*

Fizikai kémia I.

Schneiker Anita ELTE *A fenalenil-gyök vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával*

12:10 12:30 **Szerves kémia III.**

Csomos Attila ELTE *Design, synthesis and analysis of novel fluorescent probes for two-photon zinc imaging*

Analitikai kémia II.

Kajner Gyula SZTE *Mikrofluidikai eszközök fejlesztése nanorészecskék egyrészecskés ICP-MS (spICP-MS) módszerrel történő on-line karakterizálása céljára*

12:30 13:00 **Ebédszünet**

13:00 13:45 **Pódiumbeszélgetés** Prof. Gilberte Chambaud, A Francia Kémiai Társaság elnöke

13:45 14:00 **„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése**

Hajdú Péter Ákos: Szénszálak készítése és felhasználása

14:00	14:20	Szerves kémia II.		
		Csorba Noémi	BME	<i>Potenciális KRAS-G12C kovalens inhibitorok szintézise</i>
		Elméleti kémia		
		Robbie Ireland	ELTE	<i>Integrals for lower bounds to the exact energy</i>
		Szerves kémia III.		
		Dargó Gyula	BME	<i>Cinkona és prolin alapú organokatalizátorok szintézise, és alkalmazása sztereoszelektív reakciókban</i>
		Fizikai kémia I.		
		Vörös Zoltán János	DE	<i>Különböző talajtípusok foszfátmegkötésének vizsgálata heterogén izotópcserével</i>
		Kémiai technológia		
		Kántor Petra	BME	<i>Oldószercseré áramlásos körülmények között közel szobahőmérsékleten</i>
14:20	14:40	Szerves kémia II.		
		Kiss Etelka	RO BBTE	<i>Trifluoretil-szubsztituált terminális alkinek szintézise és szerkezeti vizsgálata</i>
		Szerves kémia III.		
		Szele Boglárka	PE	<i>Szteroidok aza-Michael addíciós reakciója reverzibilis ionfolyadékok jelenlétében</i>
		Elméleti kémia		
		Kovács Máté	BME	<i>Kölcsönhatás 2D (π) és 3D (σ) aromás rendszerek között a karbonán vegyületeiben</i>
		Fizikai kémia I.		
		Bucsai Dóra	PE	<i>Kén-hidrogén–alkán elegyek adszorpciós elválasztásának molekuláris szimulációs vizsgálata csak szilíciumot tartalmazó zeolitokon</i>
		Kémiai technológia		
		Major Kitti	PE	<i>Algaszuszpenzió sűrítésének vizsgálata habflotálással</i>
14:40	15:00	Szerves kémia III.		
		Nagy Bálint	ELTE	<i>Új fotokatalizátorok szintézise és alkalmazása látható fénnel kiváltott szerves kémiai átalakításokban</i>
		Szerves kémia II.		
		Fehér Zsuzsanna	BME	<i>Cinkona-négyzetamid organokatalizátorok poli(glicidil-metakrilát) szemcsékhez való rögzítése és alkalmazása</i>
		Elméleti kémia		
		Barcza Bónis	ELTE	<i>Multipólus közelítés vizsgálata intermolekuláris kölcsönhatás leírására</i>

Fizikai kémia I.

Gyéresi Ibolya Kreszcencia

RO BBTE

Kitozán térhálósításának vizsgálata elektrokémiai módszerrel cink hordozón

Kémiai technológia

Vészi Blanka

BME

Acetil-szalicilsav porok és tiszta hatóanyagot tartalmazó kapszulák kioldódásának jóslása a szemcseméret-eloszlás ismeretében

15:00 15:20 **Kémiai technológia**

Záhonyi Petra

BME

Elektrosztatikus szálképzéssel előállított hatóanyag tartalmú minták folyamatos homogenizálása

15:20 15:50 **Kávészünet**

15:50 16:10 **Szerves kémia III.**

Domahidy Farkas

BME

Feltételesen fotoaktiválható vegyületek szintézise és vizsgálata

Elméleti kémia

Lőrincz Balázs

BME

Foszfortartalmú ambidens nukleofilek reaktivitásának kvantumkémiai vizsgálata

Kémiai technológia

Takács Piroska

PE

Anaerob hulladékáramok energetikai hasznosítása bio-elektrokémiai rendszerekben

16:10 16:30 **Szerves kémia III.**

Kern Dóra

ELTE

Mikroszkóp lézer által indukált fotooxidatíván aktiválható jelzővegyületek szintézise

Elméleti kémia

Jelenfi Dávid Péter

ELTE

Az 1,4-diaminobenzol vezetőképességének vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel

Kémiai technológia

Madarász Lajos

BME

Folyamatos gyógyszeripari poradagolás szabályozásának fejlesztése valós idejű képelemzés alkalmazásával

16:30 16:50 **Szerves kémia III.**

Ágoston Henrietta

SZTE

Új generációs, biomolekulák jelölésére alkalmas fluoreszcens festékek előállítása

Elméleti kémia

Hümpfner Evelyn

BME

α,β -telítetlenséget tartalmazó inon-vegyületek 1,2-redukciójának vizsgálata

Kémiai technológia

Ficzere Máté BME

Alacsony hatóanyag-tartalom valós idejű mérése folyamatos nedves granulálás során gépi látás segítségével

16:50 17:10 **Kémiai technológia**

Beke Áron Kristóf BME

Folyamatos porhomogenizálás digitális ikerpárjának fejlesztése neurális hálókkal és tartózkodási idő eloszlás modellekkel

17:10 17:30 **Kémiai technológia**

Joó Ádám Viktor BME

Impinging jet technológia fejlesztése reakcióelegy folyamatos kristályosításához

17:30 18:00 **Vacsoraszünet**

18:00 18:45 **Pódiumbeszélgetés**

Simonné Dr. Sarkadi Livia,
a Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke

18:45 19:00 **„A kémiás véleményvezér” középiskolás pályamű vetítése**

Dézsai Fábián: Mi mindenre hasznosíthatjuk a kémiát?

Drótos András: kémia a hétköznapokban

2021. május 19. szerda

9:00 9:20 **Szervetlen kémia**

Barhács Balázs Marcell

BME

Grafén felületének módosítása réz klaszterekkel

Anyagtudomány

Papp Vanda

DE

Ca(II) - alginát aerogél hidratációs folyamatai

Polimerkémia- és technológia

Fügedi Kata Dorina BME

Flibanszerin folyamatos formulációja közvetlenül áramlásos reakcióelegyből

9:20 9:40 **Szervetlen kémia**

Béres Kende Attila ELTE

Oxidálóanion-tartalmú vas(III)-karbamidkomplex sók szintézise, szerkezete és tulajdonságai

Anyagtudomány

Farkas Noémi Izabella

RO BBTE

Szén nanoszerkezetek hatása a hidroxipatit adszorpciós és deszorpciós tulajdonságaira

Polimerkémia- és technológia

Daicu Diana

BME

Organocatalytic depolymerization of poly(ethylene terephthalate)

9:40	10:00	Szervetlen kémia		
		Nagy Antónia	DE	<i>Az [Mn(OPC2AM^{sarc})] oldategyensúlyi vizsgálata: egyensúly, kinetika és relaxáció</i>
		Anyagtudomány		
		Szabó Gábor	SZTE	<i>Platina nanorészecskék hatása 2D WSe₂ nanolapok fotoelektrokémiai aktivitására</i>
		Polimerkémia- és technológia		
		Kovács Tamás	PE	<i>Polikarbonát-poliamid blendek összeférhetőségének javítása</i>
10:00	10:20	Szervetlen kémia		
		Köhler Fanni	SZTE	<i>Egy (N,N) donoratomokat tartalmazó Schiff-bázis és félszendvics fémorganikus komplexeinek oldatkémiai vizsgálata és kölcsönhatásuk bioligandumokkal</i>
		Anyagtudomány		
		Bulátkó Anna	BME	<i>Intermolekuláris kölcsönhatások szabályozott hatóanyag-leadású rendszerekben</i>
		Polimerkémia- és technológia		
		Aiman Aitkazina	ELTE	<i>Kinetic investigation on the synthesis of thioether containing copolymers</i>
10:20	10:50	Kávészünet		
10:50	11:10	Szervetlen kémia		
		Kis Máté Levente	SZTE	<i>A Monenzin A - egy természetes antibiotikum fémkomplexei</i>
		Anyagtudomány		
		Tamás Bence Benedek	ME	<i>Ioncserélő gyanták fém-ion megkötési tulajdonságainak összehasonlító vizsgálata</i>
		Polimerkémia- és technológia		
		Ferdinánd Milán	BME	<i>Hibrid polipropilén kompozitok: merevség, ütésállóság, deformációs folyamatok</i>
11:10	11:30	Szervetlen kémia		
		Fekete Csilla	BME	<i>Dibizmutátok, mint építőegységek: kvantumkémiai számítások</i>
		Anyagtudomány		
		Márton Péter	BME	<i>Kémiaailag módosított kitozánbevonatok fejlesztése korrózióvédelmi alkalmazásokra</i>

Polimerkémia- és technológia

Zsinka Viktória PE *Hidrogén/szintézisgáz előállítás csomagolóipari többkomponensű polimer hulladékok katalitikus pirolízis-reformálásával*

11:30 11:50 **Szervetlen kémia**

Váradi Márk PE *Vízoldható terbium(III)-porfirin komplexek fotofizikai és fotokémiai vizsgálata*

Anyagtudomány

Debreczeni Diána SZTE *Ezüst-foszfát alkalmazása bioaktív üveg mátrixban és azok fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságainak vizsgálata*

Polimerkémia- és technológia

Horváth Csilla BME *Természetes szálak értéknövelt felhasználása polimer kompozitokban: szerkezet és tulajdonságok*

11:50-13:30 **Ebédszünet**

14:00-15:00 **Online szponzori standok (Live Showcase)**

15:30 16:15 **Roska Tamás előadás**

Balog Ádám SzTE Kémia Doktori Iskola

16:30 18:00 **Ünnepélyes díjkiosztó és zárás**



Tartalmi kivonatok



Analitikai kémia I.



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnöki
MSc, 3. félév
zsubornemissza@gmail.com

Tápközegek minőségi és mennyiségi elemzése Raman kémiai térképezéssel

Kulcsszavak: kémiai térképezés; Raman spektroszkópia; kemometria; táptalaj minősítés; emlőssejt-tenyésztés

A biológiai eredetű gyógyszerkészítmények utáni kereslet az elmúlt évtizedekben jelentősen megnövekedett, ezáltal elengedhetetlen ezen terápiás fehérjék költséghatékony és biztonságos előállítása, melyhez szükséges a Helyes Gyógyszergyártási Gyakorlat (GMP, Good Manufacturing Practice) és a Folyamatkövető és -analizáló Technológia (PAT, Process Analytical Technology) elvei alapján a gyártási folyamat és a kiindulási anyagok kritikus paramétereinek analízise és szabályozása. Monoklonális antitesteket termelő emlőssejteket kémiaiilag definiált tápközegekben tenyésztnek, melyek összetétele a gyártótól függ és nem mindig ismert. Az upstream műveletek nagy variabilitásának egyik leggyakoribb forrása az ismeretlen – ezáltal nehezen szabályozható – médiaösszetétel, ami akár 50–100 komponenst [1] is jelenthet.

Kutatásom során adalimumab termelő CHO (Kínai hörcsög petefészek – Chinese hamster ovary) sejtek tenyésztésére alkalmazott tápközegek minőségi és mennyiségi elemzését valósítottam meg. Célom az volt, hogy Raman kémiai térképezés és kemometriai módszerek alkalmazásával minél több ismeretlen komponenst azonosítsak a médiumban, valamint különböző adatelemzési módszerek alkalmazhatóságát vizsgáljam a komplex mintákon. A tápközegekről Raman kémiai térképeket készítettem, melyeket többváltozós adatelemzési módszerekkel vizsgáltam, melyek közt szerepelt a többváltozós görbefulbontás – váltakozó legkisebb négyzetek módszere, mellyel a meglévő referenciákon kívül további önálló spektrumokat nyertem ki a térképekből, majd a SAM-OP spektrális szögtérképező algoritmussal ellenőriztem a jelenlétüket a térképeken. Végül a széles körben használt klasszikus legkisebb négyzetek módszerével határoztam meg a komponensek százalékos koncentrációját a térképeken.

Eredményeim arra mutatnak, hogy ezen adatelemzési módszerek alkalmazásával olyan nagy számú komponenst tartalmazó összetett keverékek is vizsgálhatók, amire eddig nem volt példa, mind az ismert komponensek mennyiségi elemzése, mind az ismeretlenek felderítése céljából.

[1] Ackermann T, Tardito S. Cell Culture Medium Formulation and Its Implications in CancerMetabolism. Trends in Cancer. 2019;5(6):329-332. doi:10.1016/j.trecan.2019.05.004

*Témavezetők:
Dr. Farkas Attila
tudományos munkatárs, BME VBK
Dr. Hirsch Edit
tudományos segédmunkatárs, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
vegyésszmérnök
BSc, 6. félév
horvath.livia@post.com

Valós idejű spektroszkópai mérések és kemometriai módszerek alkalmazása gyógyszerkioldódás predikciójára

Kulcsszavak: kioldódás predikció; PLS; mesterséges neurális háló; Raman spektroszkópia; NIR-spektroszkópia

A világon évente több százmilliárd gyógyszertablettát gyártanak, melyek minőségének biztosítására a gyógyszergyártó cégek többsége statisztikai eszközöket alkalmaz. Ennek értelmében egy legyártott sarzsból kis számú mintát vesznek, amelyeket különböző roncsolásos analitikai módszerekkel vizsgálnak, majd ez alapján vonnak le következtetéseket az egész sarzsról. A gyártott tabletták minőségbiztosításának szempontjából nagy szükség lenne egy olyan megbízható, gyors és minden tablettát roncsolásmentesen átvizsgáló módszerre, amellyel lehetőség nyílna arra, hogy a minőségellenőrző rendszerek beépíthetők legyenek a folyamatos gyártásba, ezzel felgyorsítva az egész gyártási folyamatot. Visszacsatolásos szabályzóköörök segítségével pedig arra is lehetőség nyílik, hogy be lehessen avatkozni a folyamatba, ezzel csökkentve a hibás termékek kockázatát. Erre ad lehetőséget a Raman és NIR-spektroszkópia, különböző kemometriai módszerekkel kapcsolva. Ezek segítségével lehetőség nyílik egy adott tablettá hatóanyagleadásának becslésére a felvett spektrumok alapján. Kutatásomban ezt a módszert használtam fel háromkomponensű, nyújtott hatóanyagleadású tabletták teljes kioldódásgörbéinek becslésére. Munkám során a céloom már előzőleg felállított, az adott kísérletben bizonyítottan jól működő modellek robusztusságának ellenőrzése, kibővítése és összehasonlítása volt, hogy a változó paraméterek szélesebb tartományában biztosítsanak megbízható eredményt. Az általam használt többféle kemometriai módszer közül (PLS-regresszió, illesztett válaszfelület, mesterséges neurális háló és kombinációik) sikerült megállapítani, melyik alkalmas a legjobban a feladatra, és melyiket lenne érdemes beépíteni egy gyártósorba. Ilyen alapos összehasonlító tanulmányt még nem végeztek a kioldódáspredikció témakörében. Az eredményeim és tapasztalataim segíthetik majd valódi gyógyszeripari problémáknál a mérési és modellezési módszerek közötti választást.

*Témavezető:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Kémia
BSc, 6. félév
kmetyek13@gmail.com

Kinurénsav és legújabb származékainak mennyiségi meghatározása in vitro vér–agy gát modellen végzett permeabilitási vizsgálati mintákból; módszerfejlesztés és alkalmazás

Kulcsszavak: kinureninek; kinurenin származékok; vér–agy gát; UHPLC-MS/MS; MRM

A gyógyszerkutatások egyik kiemelt területe az idegrendszer működését befolyásoló kinureninek terápiás alkalmazása, mivel számos központi idegrendszeri betegség hátterében a kinurenin-útvonal termékeinek egyensúlyában bekövetkező változás áll. A betegségek terápiás kezelését hátráltatja, hogy a kinureninek nehezen jutnak át a vér–agy gáton. Ezért napjainkban olyan szintetikus kinurenin származékokat fejlesztenek ki, amelyek kedvezőbb vér–agy gát anyagtranszporttal rendelkeznek az endogén változatukkal szemben.

A munkám céljai között szerepelt a kinurénsavnak és két új származékának, az SZR104-nek és az SZR72-nek mennyiségi meghatározására alkalmas célzott analitikai módszer kidolgozása, alkalmazása és az eredmények statisztikai kiértékeléssel történő alátámasztása.

A minták a Szegedi Biológiai Kutatóközpontban folytatott in vitro vér–agy gát modellen történő permeabilitási kísérletekből származtak. Első lépésben optimalizáltam az analitikai méréshez szükséges folyadékkromatográfiás és tandem tömegspektrometriás paramétereket. Összehasonlítotam négy különböző mintaelőkészítést a visszanyerés, mátrixhatás és teljes folyamathatékonyság szempontjából. Majd meghatároztam a vizsgált vegyületek mennyiségi meghatározásához szükséges linearitási tartományokat, kimutatási és meghatározási határokat.

A permeabilitási kísérleti minták új analitikai módszerrel kapott eredményeinek feldolgozását követően megállapítottam, hogy az új származékok nagyobb határfokkal jutottak át az in vitro vér–agy gáton a kinurénsavval szemben.

*Témavezetők:
Dr. Berkecz Róbert
egyetemi adjunktus, SZTE GYTK
Körmöczi Tímea
tudományos segédmunkatárs, SZTE GYTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
alengkakoshman@gmail.com

The investigation of the effect of the column and carrier gas parameters on linear retention index

Hungarian Keywords: LRI; gázkromatográfia; vivőgáz; oszlop

Gas chromatography, especially hyphenated with mass spectrometry is currently one of the most widespread techniques for qualitative analysis. With the development of gas chromatography need for the standardization of the data arose and it resulted in the development of retention indices. The linear retention index system, created by van den Dool and Kratz, is based upon a comparison of the analyte elution time and that of n-alkanes.

Various databases and compilations have been published, however, the indices for the same compounds range within 10–50, and sometimes even more units. Misidentification and different experimental conditions lead to huge confusion. The study of gas chromatographic parameters as for instance carrier gas, heating program, column dimensions could help to understand the variation; however, the number of papers on the topic is rather limited and the experiments presented are often out dated or non-reproducible.

In the current paper, I tried to understand the effect of column dimensions and stationary phases well as carrier gas nature using both efficiency and speed optimized flow rate values. The 41 compounds used in the experiments are commonly present in plastics. The samples were prepared by dilution of neat reference materials in isooctane. The 50 mg/l n-alkanes' (C7–C40) solution was used as an external retention standard. GC equipped with a flame ionization detector was used with various capillary columns, mostly of ZB-5MS type. Three parallel measurements were performed over a 4-month time and the averaged data were evaluated using a specially developed ranking system. Based on the experimental results, it could be stated that there is a minor effect of carrier gas type as only slight deviations in LRI were found. Upon the increase of column length, the linear retention indices increased, however, the compounds having n-alkane like structure were the least affected. The thinner stationary film caused a decrease in LRIs, which was minor for molecules with n-alkane moiety again. The addition of phenyl-arylene on the apolar PDMS stationary phase resulted in the drastic elevation of LRI values.

*Témavezetők:
Kirchkeszner Csaba
PhD hallgató, okleveles vegyészmérnök, ELTE TTK
Eke Zsuzsanna
egyetemi adjunktus, laboratóriumvezető, ELTE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Környezettan
BSc, 3. félév
kovacs.vanda.viktoria@gmail.com

Jód adagolás hatása fóliasátorban nevelt paradicsomnövények elemfelvételére

Kulcsszavak: jód; elemfelvétel; paradicsom; növény

Tudományos diákköri munkámat az Ökológiai Kutatóközpont Duna-kutató Intézetében végeztem el egy NVKP 16-1-2016-0044 pályázat keretein belül.

Dolgozatom szakirodalmi áttekintésében átfogó képet adtam a jód környezetbeli és élettani vonatkozásairól, valamint bemutattam a különböző növények jódfelvételének alakulását a különböző típusú jódgezselések hatására.

Munkám során fóliasátorban nevelt paradicsomnövények (*Solanum lycopersicum*) különböző részeinek (gyökér, hajtás és termés) jódfelvételét vizsgáltam kálium-jodiddal (0,1 és 0,5 mg/L) adagolt öntözővíz alkalmazásával. A növényi részek szétválogatása után meghatároztam a minták száraz tömegét, majd homogenizálás után a jód és a tápelem koncentrációk (Mg, Fe, P, Mn, Cu, Zn, B) alakulását mikrohullámmal elősegített savas feltárást követően induktív csatolású plazma tömegspektrométerrel határoztam meg.

Kísérleteim során megállapítottam, hogy a legnagyobb jód koncentráció alkalmazásával a gyökér és hajtás tömege 22- és 26%-kal nagyobbak, míg a termésé 18%-kal bizonyult kisebbnek a kontroll mintához képest. Az eredmények alapján elmondható, hogy 0,5 mg/L jód koncentrációjú öntözővíz alkalmazásával minden növényi rész jód koncentrációja szignifikánsan növekedett továbbá, hogy a legnagyobb koncentráció értékek a gyökérben, legkisebbek pedig a termésben tapasztalhatók. Annak ellenére, hogy a kontroll mintákhoz viszonyítva a legkisebb mértékű jód akkumuláció a termésben fordult elő, 0,5 mg/L öntözővízbeli jód koncentráció alkalmazásával 67 dkg paradicsom termés elfogyasztása fedezné egy átlagos felnőtt ember napi jódbevitelét (200 µg). Méréseim során rámutattam arra, hogy a jódadagolás következtében a legtöbb vizsgált tápelem koncentrációja a termésben jelentősen csökkent, így megállapítható, hogy az öntözővíz jóddal történő adagolása csökkenti a növény esszenciális tápelem tartalmát, amely ronthatja a növény tápértékét.

*Témavezetők:
Dr. Dobosy Péter
tudományos munkatárs, Ökológiai Kutatóközpont – Duna-kutató Intézet
Vetési Viktória
PhD hallgató, ELTE TTK*



Univerzita Karlova
Analitikai Kémia
MA, 2. félév
katalin.molnar95@gmail.com

Alacsony molekulatömegű heparin meghatározása affinitás kapilláris elektroforézis alkalmazásával

Kulcsszavak: kapilláris elektroforézis; alacsony molekulatömegű heparin; nadroparin-kalcium; tetraarginin; affinitás interakció

Munkám a Fraxiparine meghatározásával foglalkozott, amely a klinikai gyakorlatban használt véralvadásgátló. A Fraxiparinem melynek aktív hatóanyaga a nadroparin kalciummal alkotott sója, az alacsony molekulatömegű heparinok osztályába tartozik.

A kísérletek során a Fraxiparine meghatározása közvetett módon, tetraarginin felhasználásával történt, amely egy pozitív töltésű peptid. Az arginin a protamin fő alkotóeleme, melyet a heparin túlada-golás kezelésére alkalmaznak. Mivel a tetraargininnak, a protaminnal ellentétben, jól meghatározott szerkezete van, használata a meghatározás szempontjából alkalmasabb volt. A tetraarginin képes a Fraxiparine negatív töltésű csoportjaival kötést alkotni, így létrehozva egy stabil Fraxiparine-tetraarginin komplexet. A meghatározás alapját a Fraxiparine-tetraarginine komplexben nem jelenlevő, szabad tetraarginin detektálása képezi. Ez a tetraarginin csúcsterületének csökkenésével jár, amely egyenesen arányos a Fraxiparine koncentrációjával.

Az alapbeállításból kiindulva a mintákat ún. zónákban adagoltam a kapillárisba. A tetraarginin és a Fraxiparine adagolásának ideje az optimalizálás tárgyát képezte. Először a Fraxiparine-t, majd rögtön utána a tetraarginint adagoltam a kapillárisba. Ezután meghatározott ideig feszültséget kapcsoltam a kapillárisra, ami lehetővé tette a zónák egymással szemben történő vándorlását, így biztosítva a komplex létrejöttét. A feszültség alkalmazása után a zónákat nyomás alkalmazásával a detektor felé mobilizáltam. A zónák injektálása hidrodinamikus módon történt. Megállapítottam, hogy a Fraxiparine-zóna adagolási idejének növelésével növelhető a vizsgálat érzékenysége. Továbbá a teljes analízisidőt optimalizáltam. Megvizsgáltam a kapilláris detektálási végénél történő („short end”) mintaadagolás lehetőségét, de ez nem szolgált kedvező eredményekkel. Az elemzés lerövidítésére szolgáló másik lehetőség a kapilláris teljes hosszának lerövidítése. A kapilláris teljes hosszát 40,0 cm-re rövidítettem le. Az optimalizált módszer képes volt a Fraxiparine meghatározására 0 IU anti-Xa ml⁻¹-től 4,75 IU anti-Xa ml⁻¹-ig terjedő koncentráció-tartományban. A módszer visszanyerését a Fraxiparine Forte készítmény segítségével vizsgáltam.

Az alapbeállítás optimalizálása után a Fraxiparine vérplazmában levő meghatározásának lehetőségét vizsgáltam. Különböző kicsapószerkeket próbáltam ki, amelyek közül a legalkalmasabbnak az acetonitril bizonyult.

*Témavezető:
RNDr. Tomáš Křížek, PhD.*

adjunktus, Károly Egyetem, Természettudományi Kar, Analitikai Kémia Tanszék



Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
bettinaurmos96@gmail.com

Pseudomonas törzsből izolált lipid-A szerkezetének és hőmérsékletfüggésének felderítése kapcsolt tömegspektrometriás módszerekkel

Kulcsszavak: bakteriális glikolipid; folyadékkromatográfia; kapilláris elektroforézis; szerkezetfejtés; tandem tömegspektrometria

Munkám során a *Pseudomonas aeruginosa* (PA) baktériumtörzsszel foglalkoztam, ugyanis kórházi körülmények között nagy problémát jelentenek az általa okozott fertőzések. Amint a baktérium bekerül a szervezetbe, beindulnak a megfelelő védekező mechanizmusok a kórokozóval szemben. A baktérium elpusztulása során felszabadul az úgynevezett endotoxin, amely – bár kis mennyiségben erősíteni képes az immunrendszert – nagy mennyiségben, vagy legyengült immunrendszerű betegek esetében, PA jelenlétében helyi fertőzést, végeredményben szepszist okozhat. A PA egy rendkívül rezisztens baktérium, így a terápia is sok esetben kihívást jelent. Ahhoz, hogy megértsük a baktérium működését a szervezetben, ismernünk kell az endotoxin bioaktivitásáért felelős részének, az úgynevezett lipid-A egységnek a pontos szerkezetét, a szerkezet-hatás összefüggéseket. A jelenleg fellelhető szakirodalmakban a PA baktériumtörzsből izolált lipid-A régió szerkezetét eddig legfőképp előzetes elválasztás nélkül, direkt tömegspektrometriával, valamint NMR-rel vizsgálták. Tudományos diákköri munkám egyik célja az volt, hogy mind a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiával, mind a kapilláris elektroforézissel kapcsolt tandem tömegspektrometriás módszerrel megvizsgáljam a PA baktériumban lévő lipid-A molekulák detektálhatóságát és a szerkezeti információk kinyerését. Ismereteink alapján a PA baktérium széles hőmérsékleti tartományban képes szaporodni és túlélni, úgymint kórházi eszközökön 25 °C-on, emberi testben 37 °C-on vagy akár madarakban 42 °C-on. Ebből következően a dolgozatom másik célja a három különböző tenyésztési hőmérséklet hatására a lipid-A szerkezetében bekövetkező esetleges változások felderítése volt. Vizsgálataim során először direkt injektálással felmértem a minták heterogenitását, a kapott tömegspektrumok komplex mintázata alapján arra jutottam, hogy szükség lesz a komponensek elválasztására is. Első körben folyadékkromatográfiával kapcsolt tandem tömegspektrometriát alkalmaztam a baktérium lipid-A régiójának szerkezetfejtéséhez. A tandem tömegspektrumok alapján kiderült, hogy a foszforilációs izomerek elválasztása csak részlegesen lehetséges az alkalmazott kromatográfiás módszerrel. Ezért más módon kellett elválasztanom egymástól az izomereket. Erre alkalmasnak bizonyult a kapilláris elektroforézissel kapcsolt tandem tömegspektrometria, ugyanis ezen mérések során a foszforilációs izomerek elválasztása hatékony volt.

*Témavezetők:
Dr. Dörnyei Ágnes
egyetemi adjunktus, PTE TTK
Dr. Kílár Anikó
tudományos munkatárs, PTE ÁOK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 4. félév
v.j.debi@gmail.com

Egy ciszteintartalmú peptid szintézise és trisz(2-karboxietil)-foszfin jelenlétében képződő bomlástermékeinek vizsgálata UHPLCMS technikával

Kulcsszavak: TCEP; diszulfidhíd; hasítás; peptid, cisztein

Kutatómunkám során egy ciszteint tartalmazó modellpeptid bomlási reakcióját vizsgáltam LC-MS(/MS) technikával. A munka kiindulópontja az a publikáció, amely egy peptid esetén a trisz(2-karboxietil)-foszfin (TCEP) redukálószer hatására bekövetkező peptidkötés-hasadásra mutat rá semleges pufferekben [1]. Liu és munkatársainak eredményei alapján olyan nem várt mellékreakciók következhetnek be az elterjedten használt redukálószer jelenlétében, melyek során a cisztein kiszakad a molekulából. A reakció tanulmányozása kulcsfontosságú, mert a TCEP az egyik leggyakrabban alkalmazott redukálószer tömegspektrometriás mérések, proteomikai elemzések során. A reagenst a fehérjékben előforduló diszulfidhidak redukálására használják a mintaelőkészítés során.

Modellpeptidként az Ig K láncának egy módosított szakaszát használtam, mely egy ciszteint tartalmazott. A modellpeptidet szilárd fázisú peptidszintézissel, Fmoc stratégia szerint állítottam elő, szemipreparatív HPLC-vel tisztítottam és LC-MS technikával jellemeztem. A lehetséges mellékreakciók tanulmányozására stabilitásvizsgálatokat végeztem, amelyek során az előállított peptidet 37° C-on inkubáltam TCEP reagens jelenlétében, ammónium-bikarbonát és TRIS pufferekben. A reakcióelegyekből 0 h, 1 h, 3 h, 6 h, 24 h, 48 h és 72 h elteltével mintát vettem, amelyeket UHPLC-MS módszerrel elemeztem egy nagy felbontású és nagy tömegpontosságú orbitrap típusú tömegspektrométerrel.

Az ammónium-bikarbonát és TRIS pufferben TCEP reagens mellett inkubált peptidből vett minták LC-MS kromatogramjait összehasonlítva megállapítottam, hogy ammónium-bikarbonát pufferben a TCEP reagens hatására a peptid jelentősen degradálódott, míg a TRIS pufferben a kromatogram nem változott jelentősen az inkubálási idő előrehaladásával. Ammónium-bikarbonát puffer esetében a detektált melléktermékek ionjai a kromatogramon jól beazonosítható, intenzív komponensek voltak már 24 h után is. A detektált bomlástermékek egy részét pontos molekulatömeg-meghatározással és elemi összetétel becsléssel azonosítottam. Méréseim során érdekes módon megfigyelhető volt a vizsgált peptid gyors vízvesztése is. A vízvesztés pozícióját LC-MS/MS szekvenálással vizsgáltam a peptidben. Eredményeim felhívják a figyelmet arra, hogy a TCEP reagens alkalmazása esetén a ciszteintartalmú peptidek és fehérjék jelentős bomlást szenvedhetnek, amennyiben a peptid- vagy fehérjemintát hosszabb ideig inkubáljuk egy semleges pufferben.

[1] P. Liu: J. Am. Soc. Mass Spectr., 21, 837–844 (2010)

*Témavezető:
Dr. Schlosser Gitta
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Gyógyszervegyészmérnök
MSc, 5. félév
varga.petra.regina0601@gmail.com

Elektrofil funkciós csoportok és tiol-modellvegyületek reakciója

Kulcsszavak: ciesztein reaktivitás; kovalens fragmens; tiol modell; reaktivitás; GSH

A kovalens kötést kialakítani képes molekulákat a gyógyszerkutatók korábban elkerülendőnek tartották, mivel ezek a vegyületek súlyos mellékhatásokhoz vezethetnek. Napjainkban azonban számos terápiás területen alkalmazott kovalensen kötődő gyógyszerhatóanyag került forgalomba előnyös hatása miatt. A nukleofil célponthoz kötődő elektrofil kötőelemek helyes megválasztásával a toxicitás kockázata csökkenthető. A nem-specifikus kötődés által kiváltott mellékhatások kockázata és a célpont nukleofil reaktivitásának változatossága miatt szükséges a kötőelemek reaktivitását vizsgálni. A kovalens inhibitorok leggyakrabban ciszteinhez kötődnek, így szükséges a kötőelemek tiol-reaktivitásának meghatározása. A vizsgálatok során a célozni kívánt biomolekulák helyett kis-molekulás tiolvegyületek használhatók.

Kutatásom során egy egyedi elektrofil fragmenskönyvtár segítségével tanulmányoztam néhány tiolmodell felhasználhatóságát. Az elektrofil kötőelemek minden esetben 3,5-bisz(trifluorometil)fenil alapvázhhoz kapcsolódtak, elősegítve a kötőelemek reaktivitási tulajdonságainak alapváztól független vizsgálatát. Az alkalmazott elektrofil- és tiolvegyületek kombinációiban HPLC-alapú kinetikai méréseket végeztem, a kapott eredményeket összehasonlítottam. Eredményeim szerint a különböző tiolmodellekkel végzett kísérletek eltérő reaktivitást mutatnak, és az L-glutationnal végzett kinetikai mérések bizonyultak a reaktivitás vizsgálatára legalkalmasabbnak. Vizsgáltam az elektrofil- és tiolvegyületek stabilitását, és az elektrofil kötőelemek aminosav-szelektivitását is. Tanulmányoztam a fotoaffinitás-jelölés módszerét is kovalens fehérje módosítás esetén, melynek során fényvel való besugárzás hatására a fotoreaktív molekulából egy karbén típusú intermedier képződik, ami gyorsan reagál a közelében lévő fehérjecélpontokkal. A módszer alkalmazására elektronikus tulajdonságaikban eltérő funkciócsoporttal rendelkező 3,5-bisz(trifluorometil)fenil alapvázú szulfonil-hidrazonok szintézisét is elvégeztem, vizsgáltam L-glutationnal szembeni reaktivitásukat HPLC készüléken a körülmények (puffer, pH, besugárzás ideje, besugárzás hullámhossza) szisztematikus változtatásával.

Megállapítottam, hogy befolyásolni lehet egy adott fragmens reaktivitását és vizes stabilitását, és az alkalmazott puffer és besugárzás ideje mellett a besugárzó fény hullámhossza is befolyásolhatja a próbavegyületek reaktivitását. Megállapítottam, a szulfonilhidrazonok mint új kötőelemek, alkalmasak fotoaffinitás-jelölésre.

Témavezetők:

Dr. Ábrányi-Balogh Péter

tudományos munkatárs, Természettudományi Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet,

Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

Dr. Keglevich György

egyetemi tanár, BME VBK





Analitikai kémia II.



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésszmérnök
MSc, 4. félév
janosberi@gmail.com

Szén-dioxid nyomás alatti keverékrendszerek olvadáspontmérése: módszerfejlesztés

Kulcsszavak: olvadáspont mérés; szuperkritikus szén-dioxid; szilárd injektálás; látóüveges cella

Kutatócsoportunk királis rendszerek elválasztásával foglalkozik szuperkritikus szén-dioxid alapú közeget alkalmazva, melyben több anyag esetén továbbtisztítási limitációt figyeltünk meg. Ezen tisztítási gátak összetétele több esetben korrelált az anyagok atmoszferikus fázisdiagramjának eutektikus összetételével. Azonban, ezen nyomás alatti oldószer közegben az olvadási fázisdiagramok felvételére új módszer kidolgozása szükséges. Munkám célja, hogy scCO_2 -segédoldószer képezte fluid rendszerben vizsgáljam a királisan aktív keverékek olvadáspontját. Mivel az olvadáspont (op) nyomásfüggése ismert így az adott közegben szükséges a fázisdiagram elkészítése az összehasonlíthatóhoz. A fluid fázis jelenléte esetén két fő hatás befolyásolja az op-t, a fluid fázis kristályrácsba történő beoldódása csökkenti, míg a mechanikai nyomás az olvadáspontot növelő folyamat.

Munkám során, feldolgoztam az irodalomban elérhető nyomás alatti op mérési technikákat és a lehetséges kialakításokat leteszteltem. A mérések során a következőket figyeltem meg: a segédoldószer–szilárd rendszer nyomás alá helyezés előtti kontaktja az olvadáspontmérést befolyásoló folyamat. Ennek kiküszöbölésére az új kidolgozott módszer a következő: homogén fluid fázis kialakítása a szilárd minta jelenléte nélkül, emellett a szilárd anyag injektálása a már kialakított fluid fázisba. Az új módszer segítségével a egy új technikai olvadáspont mérést rövid időn belül végre lehet hajtani, jellemzően 3 óra alatt.

Vizsgált modellanyagok: 3-klórmandulasav (KMS) (enantiomer keverékei) és racém benzil-ammónium-mandelát só (BAM), felhasznált segédoldószer: acetonitril, metanol. Ezen anyagok korábbi elválasztási kutatások alapját képezték. Rendelkezésre áll atmoszferikus és szén-dioxid alatti fázisdiagramjuk így összehasonlítható az új eredményekkel is. A KMS esetén elkészítettem a királisan aktív rendszer fázisdiagramját scCO_2 -acetonitril közegben 16 MPa-on. A maximális op csökkenés az atmoszferikushoz viszonyítva 36,7 K (eutektikus összetétel környezete), a BAM esetén scCO_2 -metanol közegben 8–12–16–20 MPa nyomásokon vizsgáltam a racém sav sóját. A maximális op csökkenés 18 K 16 MPa-on, míg 20 MPa-on ennek értéke már csak 9,5 K. Az anyagok, az irodalomhoz hasonlóan, op csökkenést mutatnak fluid fázis jelenléte mellett, azonban a mechanikai nyomás okozta op. növekedés jelenségét is megfigyeltem.

*Témavezetők:
Dr. Székely Edit
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Kőrösi Márton
egyetemi adjunktus, BME VBK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
bfancsii@gmail.com

Adatértékelési és minta-előkészítési módszerek fejlesztése fehérjék poszt-transzlációs módosításainak vizsgálatára

Kulcsszavak: tömegspektrometria; proteomika; peptid; foszforiláció; szilárd fázisú extrakció

A fehérjék feladataik ellátását és szükség esetén a gyors funkcióváltást poszt-transzlációs módosítások (PTM-ek) révén képesek megvalósítani. Míg a fehérjék tömegspektrometrián alapuló vizsgálata ma már rutin feladatnak számít, a PTM-ek elemzése még számos fejlesztést igényel. TDK munkám során a PTM-ek vizsgálati folyamatának két részével foglalkoztam.

Elsőként célul tűztem ki a foszforiláció esetén foszfopeptidek dúsítására szolgáló minta-előkészítési módszerek fejlesztését, optimalizálását és átfogó összehasonlítását kis mennyiségű fehérjekeverékek foszfoproteomikai analízisének hatékonyabbá tétele érdekében. A módszerfejlesztés során optimalizáltam a mintafelviteli- és az elúciós oldószerrendszer összetételét több állófázis (pipettahegy alapú konvencionális TiO_2 - és kombinált TiO_2 - C_{18} szilárd fázisú extrakció (SPE), ill. a TiO_2 funkcionális monolit kolonnás dúsítási módszerek) alkalmazása esetén. Két saját fejlesztésű módszerrel értem el kiemelkedő hatékonyságot: mindössze 250 ng HeLa sejtlizátumot dúsítva a esetén az 50 mM citromsav tartalmú felvételi puffert alkalmazó „pipettahegy SPE” módszerrel 215 db foszfopeptidet, míg a 20% ecetsavas felvételi puffert alkalmazó monolit kolonnás módszerrel 224 db foszfopeptidet azonosítottam.

Munkám második részében a proteomikai keresésbe integrált módosítások számának, ill. az egyedi PTM-ek előfordulási valószínűségének (gyakoriságának) hatását vizsgáltam a megbízhatóan azonosított peptidek és fehérjék számára. Több ezer keresés eredményét analizálva megállapítottam, hogy a módosítások gyakoriságuknak megfelelően lineárisan növelik meg a beazonosítható peptidek számát 2%-os gyakoriság határ felett.

A kidolgozott módszerek teljes proteomikai munkafolyamatba történő integrálása és szöveti biopsziákon való alkalmazhatóságának tesztelése jelenleg is zajlik.

Publikációk: Tóth, G, et. al, Separations 2020, 7, 74.

Bugyi, F, et. al, ACS Omega (bírálat alatt)

Témavezetők:

Dr. Drahos László

*tudományos főmunkatárs, MS Proteomika Kutatócsoport, Szerves Kémiai Intézet,
Természettudományi Kutatóközpont, Eötvös Loránd Kutatási Hálózat*

Tóth Gábor

*tudományos segédmunkatárs, MS Proteomika Kutatócsoport, Szerves Kémiai Intézet,
Természettudományi Kutatóközpont, Eötvös Loránd Kutatási Hálózat*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 2. félév
hercbence@gmail.com

Kálium-ferrát analitikai vizsgálata Mössbauer-spektroszkópiával és röntgendiffraktometriával

Kulcsszavak: K_2FeO_4 ; Mössbauer; röntgendiffrakció; Fe(VI); Fe(III)

Napjainkban egyre nagyobb szükség van az ipari víztisztításra vonatkozó környezetbarát technológiák alkalmazására. Ilyenek az oxidációs elven alapuló technológiák, így a Fe(VI)-ot tartalmazó K_2FeO_4 -ot alkalmazó ferrát-technológia. Mivel a ferrátok igen erős oxidálószeresek, ezért nagyon reaktívak, levegővel vagy vízzel érintkezve bomlanak. Ezért alapvető jelentőségű, hogy a víztisztításnál felhasználandó, esetenként részlegesen elbomlott termékben a K_2FeO_4 mennyiséget meg lehessen határozni. Ehhez a ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópia egy kiváló módszer a K_2FeO_4 tartalom minőségi analizisére, mivel elsődlegesen a Fe(VI)-ra és Fe(III)-ra jellemző izoméreltolódások alapján a K_2FeO_4 mennyisége a bomlástermékektől egyértelműen megkülönböztethető.

A munka során elsődlegesen arra kerestünk választ, hogy az ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópia segítségével megvalósuló, szennyvíztisztítási ipari célból elektrokémiai úton előállított K_2FeO_4 minták előállítását követő azonnali minősítésénél – meghatározott összetételű standardokra alapozott kalibrációs görbék hiányában is – lehetséges-e korrekciós faktorokat meghatározni, amelyekkel a K_2FeO_4 tartalom a mért területarányokból az eddigieknél pontosabban meghatározható?

Ennek céljából egy kiválasztott, részben elbomlott K_2FeO_4 minták 80–250 K tartományban történő, hőmérsékletfüggő Mössbauer-spektrumának felvételét és kiértékelését és néhány kiválasztott minta röntgendiffraktometriai mérését és kiértékelését végeztük el. A hőmérsékletfüggő relatív spektrumterületek Debye-modell alapján történő görbeillesztése révén, egyrészt megbecsültük a K_2FeO_4 Debye-hőmérsékletét, másrészt korrekciós faktorokat és Mössbauer–Lamb faktorokat határoztunk meg, amelyekkel a K_2FeO_4 mennyisége a mért területarányokból az eddigieknél pontosabban lehetne meghatározható.

Témavezetők:
Dr. Kuzmann Ernő
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Homonnay Zoltán
egyetemi tanár, ELTE TTK



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Kémia
BSc, 5. félév
kajnerocsi@gmail.com

Mikrofluidikai eszközök fejlesztése nanorészecskék egyrészecskés ICP–MS (spICP–MS) módszerrel történő on-line karakterizálása céljára

Kulcsszavak: egyrészecske ICP-MS; mikrofluidikai chip; on-line mintaelőkészítés; áramlástan szimuláció; nanorészecske karakterizálás

Az induktív csatolású plazma tömegspektrometria (ICP–MS) az utóbbi évtizedekben egy sokoldalú, nagy teljesítményű és népszerű mérés technikává vált, amelyet számos természettudományos területen elterjedten alkalmaznak ultranyomelemanalitikai célra és stabil izotópok meghatározására. A mikrofluidikai chip-ek kistérfogatú folyadék minták, szuszpenziók kezelésére már régóta bevált eszközei a korszerű analitikai kémiának, melyen belül elsősorban elválasztástechnikai és mintaelőkészítési szerepet töltenek be. A legnépszerűbb mikrofluidikai eszközök poli-dimetilsziloxán (PDMS) és üveg/kvarc anyagú mikroszkóp tárgylemez kombinációjaként készülnek, mivel ezek az eszközök olcsóak és könnyen előállíthatók. Noha elvben számos területen potenciálisan előnyös lenne használatuk az atomspektroszkópiában, és ezen belül is az ICP–MS spektrometriában, a mikrofluidikai chip-ek használata itt eddig még nem terjedt el. Az elmúlt néhány évben azonban elkezdtek megjelenni a szakirodalomban olyan közlemények, amelyek mikrofluidikai eszközöket (főként mikroextraktorokat) alkalmaznak ICP–MS mérési feladatokhoz. Azt, hogy ez egy új kutatási terület, az is mutatja, hogy a területen az első összefoglaló közlemény csak 2019-ben jelent meg, és ez mindössze 20 cikk tartalmát tekinti át [1].

Kutatócsoportunk célul tűzte ki mikrofluidikai eszközök fejlesztését ICP–MS minták on-line mintaelőkészítése céljából. Közelebbről elsősorban olyan eszközök fejlesztése a célunk, amellyel kis térfogatú (μL) folyadék mintákban előforduló nanorészecskék, illetve sejtek detektálása és karakterizálása lehetséges. A munka során többféle mintázatú, professzionális 3D nyomtatóval készített formával öntött PDMS/üveg mikrofluidikai chipeket készítettünk, amelyek működését számítógépes szimulációval előzetesen optimaltunk. Az elkészült chipekkel az eddigi munkánk során nanodiszperziók hígítási, részecske számlálási és különböző karakterizálási feladatait sikerült megvalósítanunk.

[1] He, M., Chen, B., Wang H., Hu, B., Appl. Spectrosc. Rev. 54(3), 250-263 (2019)

*Témavezetők:
Dr. Galbács Gábor
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Dr. Kéri Albert
tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK*



Dunaújvárosi Egyetem
Anyagmérnök
BSc, 7. félév
koskaimartin@gmail.com

A vas és acéliparban alkalmazott alap és nyersanyagok valamint a félkész és kész termékek átfogó minta előkészítése mikrohullámú roncsolással és vizsgálata icp-es készülékkel

Kulcsszavak: ICP–OES; ferrotitán; mikrohullámú roncsoló

A vas és acélipari alapanyagok és termékek, mint például ötvöztelen, alacsonyan és magasan ötvözött acélok, ferroötvöző anyagok, ferrumhordozók illetve magas szilikát tartalmú kőanyagghalmazok analízise a Dunafer Labor Nonprofit Kft. Környezetvédelmi és Kémiai Anyagvizsgáló Főosztályának akkreditált tevékenységi körébe tartozik.

A jelenleg érvényben lévő szabványos mintaelőkészítési módszerek esetén több jelentős probléma is felmerült, mint például a hosszú minta előkészítési idő vagy a nagy mértékű vegyszer felhasználás.

Jellemzően a ferroötvöző anyagok vizsgálatánál kellett azzal a problémával szembesülnünk, hogy a fő ötvöző elemek meghatározására áll rendelkezésünkre nemzeti szervezet által elfogadott nemzetközi szabvány, de nyomelemekre nem áll rendelkezésre szabványos módszer.

Hasonlóképpen magasan ötvözött acélok vizsgálata esetén is több probléma felmerült. Habár a gyors kémiai elemzésre is alkalmazható az szikragerjesztésű optikai emissziós spektrométer ugyan rendelkezésünkre áll, sok esetben nem végezhető el a meghatározás. Ennek oka lehet a mintadarab nem megfelelő geometriája vagy egyes elemek detektora nem került beépítésre a készülék üzembe helyezésekor.

Ezeket felül a jelenleg akkreditált mintaelőkészítési módszereket mikrohullámú feltáró berendezésben végezzük, valamint vizsgálatok elvégzéséhez induktív csatolású plazma optikai emissziós spektrométert (ICP-OES) használunk. Így ezen készülékek segítségével megvalósítható egységes/átfogó mintaelőkészítési és vizsgálati módszer kifejlesztésének igénye merült fel, nem utolsósorban költség- és vegyszerigény szempontokat is figyelembe véve. Dolgozatom elkészítése során ezen módszer fejlesztés menetébe kapcsolódtam be.

Célul tűztem ki a mikrohullámmal segített feltáró berendezés módszerének szakirodalom által ajánlott feltárási módszer optimalizálását a vas és acéliparhoz tartozó alapanyagok és termékek legszéleskörében.

Emellett célom volt még Agilent 5110 VDV típusú ICP-OES készülékkel végzett mérési módszerfejlesztés és optimalizálását kivitelezését.

Dolgozatomban ennek a mintaelőkészítési és vizsgálati módszerfejlesztés optimalizálásnak menetét ismertetem, beleértve a mikrohullámú feltárás során felmerülő problémákat, illetve az ICP-OES elemzés paraméter optimalizálási folyamatát. Ismertetem a megfelelőnek ítélt módszer teljesítményjellemzőit tanúsított anyagminták mérési eredményein vezetve végig. Valamint összevetést adok a jelenleg alkalmazott vizsgálati módszerek eredményeivel.

Témavezetők:

Dr. Kovács Imre

főiskolai docens, DUE

Koskai-Téger Ramóna

anyagvizsgáló mérnök, DUNAFERR LABOR Nonprofit Kft.

Vizsgáló- és Kalibráló Laboratóriumok Üzletága



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnöki
 BSc, 7. félév
 korinna.kovacs11@gmail.com

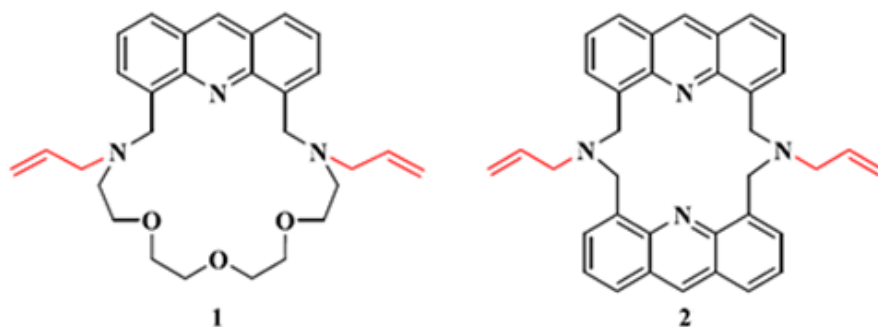
Kvarcüveg hordozón kovalensen rögzített makrociklus alapú direkt optód polimermembrán fejlesztése és alkalmazása Zn-ionok spektrofotometriás analízisében

Kulcsszavak: koronaéter; fluoroionofor; fotokatalízis; szenzormembrán-réteg; optikai szenzor

Kutatómunkám során közvetlenül polimerizálható makrociklus fluoroionoforok előállítását kívántam megvalósítani. OTDK-munkám célja a korábban kutatócsoportunkban előállított triaza-20-korona-6-éter (1) származék szintézislépéseinek reprodukálása és optimalizálása, illetve egy új, eddig a szakirodalomban nem közölt bisz(akridino)tetraaza-szenzormolekula előállítása volt. Megvalósítottam UV/látható- és fluoreszcencia spektroszkópai módszerek segítségével az előállított allilamino-triaza-koronaéter (1) és bisz(akridino)tetraaza-makrociklus (2) fotofizikai tulajdonságainak és fémion-szelektivitásának oldatfázisú vizsgálatait, valamint komplexstabilitási állandóinak és kvantumtényezőinek meghatározását. Ezt követően tanulmányoztam a koronaéterek protonaszociációs hajlamát, illetve ennek spektrális tulajdonságokra gyakorolt hatását és szerepét a komplex- és jelképzésben.

Végül a bisz(akridino)tetraaza-koronaéter szenzormolekula allilcsoportjainak közvetlen fotokatalitikus kopolimerizációjának segítségével egy széleskörűen alkalmazható előzetesen felületmódosított kvarcüveg hordozóhoz kovalensen rögzített direkt optód típusú szenzormembránt fejlesztettem, továbbá megvalósítottam alkalmazhatósági korlátainak, illetve kompetitív körülmények jelenlétében mutatott működési sajátosságainak vizsgálatát.

Az így létrehozott immobilizált direkt optód típusú szenzormembrán-réteg hagyományos kvarc-küvetébe helyezve lehetőséget biztosít bármely típusú fluoreszcens spektrofotométer szelektív Zn²⁺ szenzorral történő közvetlen átalakítására.



*Témavezetők:
 Dr. Huszthy Péter
 egyetemi tanár, BME VBK
 Golcs Ádám
 doktoráns, BME VBK
 Dr. Tóth Tünde
 egyetemi docens, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésszmérnöki mesterképzési szak
MSc, 4. félév
reka.szabo223@gmail.com

Prediktív in vitro kioldódás vizsgálati módszer fejlesztése szilárd gyógyszerkészítmények vizsgálatára

Kulcsszavak: kioldódás vizsgálat; bioreleváns vizsgálat; ibuprofen; emésztőrendszer szimulátor

A gyógyszerkutatás-fejlesztésben növekvő igény van olyan in vitro vizsgálatokra, melyek minél jobban közelítik, egyes esetekben pótolják az in vivo vizsgálatokat, így ezek számának csökkentésével a preklinikai, klinikai fázisok esetén időt és költséget takaríthatnak meg. Ilyen in vitro vizsgálatok közé tartozik a gyógyszerkészítmények kioldódás vizsgálata is, mely megfelelő körülmények között kellően modellezheti a készítmény szervezetbeli hasznosulását. Erre a standard gyógyszerkönyvi kioldódás vizsgálatok nem minden esetben alkalmasak, így szükség van azoknál biorelevánsabb, az emberi szervezetet jobban modellező módszerek fejlesztésére.

Kutatómunkám tárgyát képezte az in vitro-in vivo korreláció javulását eredményező kialakítással rendelkező emésztőrendszer szimulátor (GIS: gastrointestinal simulator) vizsgálati módszer fejlesztése és tanulmányozása. A hatóanyag biohasznosulásának jobb előrejelzésének érdekében célom volt a bélcsatorna körülményeinek minél részletesebb modellezése, hangsúlyt fektetve a kioldódás és felszívódás szempontjából három relevánsabb szakaszra (gyomor, patkóbél és éhbél). Törekedtem arra, hogy a kioldódási módszer minél jobban szimulálja azt a biológiai rendszert, melyben a készítmény változatos pH-jú, ionerősségű és összetételű közegeken halad át, míg eléri kioldódásának és felszívódásának helyét. Kutatási munkám alapjául az irodalomban megjelent eredmények szolgáltak [1]. Irodalomkutatás segítségével meghatároztam az emésztőrendszer egyes részeire étkezés előtti állapotban jellemző pH értékeket és tartózkodási időket, majd ezen paraméterek alapján optimalám a kioldódás vizsgálat körülményeit.

Az in vitro-in vivo korreláció növelésének eredményességét ibuprofen tartalmú szilárd gyógyszerkészítmények vizsgálatával tanulmányoztam, melyhez irodalmi farmakokinetikai mérések álltak rendelkezésemre [2]. Célom volt, hogy a vizsgált készítmények in vivo viselkedését minél jobban közelítsem az in vitro (GIS) vizsgálatokkal, illetve hogy kimutassam ugyanazon különbségeket a készítmények között, melyek a szervezetbeli viselkedés esetén is tapasztalhatók.

[1] Takeuchi, S.; Tsume, Y.; Amidon, G. E.; Amidon, G. L., J. Pharm. Sci. 2014, 103, 3416-3422.

[2] Legg, T. J.; Laurent, A. L.; Leyva, R.; Kellstein, D., Drugs R D 2014, 14, 283-290.

*Témavezető:
Dr. Tóth Blanka
egyetemi adjunktus, BME VBK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
szeles.aliz.1997@gmail.com

A lineáris retenció index retenciót befolyásoló tényezőktől való függésének vizsgálata a gázkromatográfiában

Kulcsszavak: gázkromatográfia; GC; lineáris retenció index; LRI; műanyag

A műanyagokat napjainkban sokszor használjuk ételleink tárolására és csomagolására. Pedig az élelmiszerekkel rendeletetesszerűen érintkező műanyagokból számos vegyület oldódhat ki, ezek lehetnek adalékanyagok és azok bomlástermékei is.

Ezen anyagok kvalitatív meghatározására különböző kromatográfias módszerek terjedtek el. A műanyagokból modelloldatokkal kioldjuk a bennük lévő vegyületeket, az így készített extraktumokat folyadékkromatográfias és gázkromatográfias módszerekkel elemezzük.

A kromatogramok elemzése során a minőségi meghatározáshoz szükséges legfontosabb adat a célkomponens retenció ideje (t_R). A t_R -ből számítható retenció indexek hozzájárulhatnak az ismeretlen komponensek azonosításához. A retenció index használata azért kedvezőbb az egyéb relatív retenció időt használó módszerektől, mert nem szükséges megvásárolnunk a mérendő anyagunk referencia oldatát. A legelterjedtebb retenció indexek általában n-alkán sort alkalmaznak viszonyítási alapként, mely sokkal könnyebben beszerezhető.

TDK dolgozatomban a lineáris retenció index (LRI) t_R -t befolyásoló tényezőktől való függését vizsgáltam a gázkromatográfiában. Méréseim során célul tűztem ki a gázkromatográf típusának, a felfűtési sebességnek, a kolonna átmérőjének és a lineáris áramlási sebességnek módosításának hatására bekövetkezett változás vizsgálatát a LRI-n.

Munkám során tizenöt műanyag adalékanyagot oldottam izooktánban és az összes komponens tartalmazó törzsoldatot készítettem belőlük. A mérések során külső standardként nC7–nC40-es alkán sor hexános oldatát használtam. Az analitikai méréseket FID-del felszerelt Agilent 6890/7890 típusú gázkromatográfival végeztem.

A mérési eredmények alapján a komponensenként mért LRI-k a különböző készülékek esetében hét esetben jelentősen ± 5 LRI egységnél jobban, három esetben ± 10 LRI egységen túl változtak. A vivőgáz lineáris áramlási sebességének növelése nem hatott jelentős mértékben a LRI-re. A kromatográfias oszlop átmérőjének változtatása az anyagok felénél okozott jelentős változást. A felfűtési sebesség változtatása során 10 °C/perc felfűtési sebesség különbség esetén szinte az összes, míg 5 °C/perc különbség esetén néhány anyag esetében okozott jelentős eltérést.

További kutatómunkám során szeretném folytatni a LRI vizsgálatát más paraméterek módosításával. A kromatográfias oszlop tulajdonságai közül szeretném módosítani az állófázis típusát, a filmvastagságát és a hosszúságát. A vivőgáz esetében H_2 helyett szeretnék He-t vagy N_2 -t alkalmazni.

Témavezetők:

*Dr. Eke Zsuzsanna
egyetemi adjunktus, ELTE TTK
Kirchkeszner Csaba
PhD hallgató, ELTE TTK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnöki mesterszak
MSc, 1. félév
z.petra97@gmail.com

In-line alkalmazható spektroszkópiai módszereket befolyásoló tényezők vizsgálata szálas minták folyamatos feldolgozásánál

Kulcsszavak: elektrosztatikus szálképzés; in-line spektroszkópiai módszerek; többváltozós adatelemzés; folyamatfelügyelő technológia (PAT); rezgési spektroszkópiai módszerek

A gyógyszeriparban jelenleg domináló szakaszos módszerek mellett egyre nagyobb jelentőséget kapnak a folyamatos gyártási technológiák. Bár alkalmazásuk rengeteg előnnyel jár, a gyógyszeriparban még igen kevés készítményt gyártanak ily módon. Működtetésükhöz elengedhetetlen a valós idejű, in-line vagy online nyomon követés és a megfelelő, fejlett folyamatfelügyelő és -elemző rendszerek alkalmazása. Ezeknek a módszereknek a fejlesztése kihívást jelent mind a hagyományos, mind az újabb gyógyszergyártási eljárások folyamatossá tétele során. A gyógyszerkészítmények fejlesztésénél például különösen nagy szerepet tölt be a rossz vízoldhatóságú hatóanyagok kioldódásának javítása, melyre az egyik legelterjedtebb stratégia az amorf szilárd diszperziós rendszerek előállítása. Az ilyen típusú termékeknél különösen felértékelődik az alkalmazott analitikai módszerek szerepe, hiszen kioldódásukat számos tényező befolyásolhatja. Az amorf szilárd diszperzióknál tehát a meghatározó paraméterek vizsgálata szakaszos eljárásoknál is rendkívül fontos, folyamatos rendszereknél pedig ezek feltárása és a folyamatos nyomon követése még nagyobb szerepet kap.

Munkám célja egy folyamatos rendszer valós idejű, online nyomon követésének megvalósítása volt, melyhez közeli infravörös és Raman spektroszkópiát használtam. Mindkét technológia igen ígéretes lehet a célra, azonban az ipari alkalmazhatóságukhoz elengedhetetlen a módszerek mélyebb megismerése, részletes vizsgálata. Ehhez fel kellett tárnom azokat a tényezőket, melyek befolyásolhatják a módszerek hatékony működését, így összehasonlíthattam őket és értékelhettem, hogy melyik mennyire megfelelő a vizsgált rendszerrel. Fontos megjegyezni, hogy a folyamatos sor esetében elektrosztatikus szálképzéssel előállított hatóanyagból és polimerből álló szálas termék és a megfelelő tablettázási segédanyagok folyamatos homogenizálásából, illetve az azt követő tablettázásból állt, melyre a szakirodalomban jelenleg még nincs példa. Az általam vizsgált rendszer ötvözi az amorf szilárd diszperziók és a folyamatos technológiák, illetve a hozzájuk kapcsolódó analitikai módszerek előnyeit, így a gyógyszeripar számára is nagy jelentősége lehet.

*Témavezetők:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK
Szabó Edina
doktoráns, BME VBK*





Anyagtudomány



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésmérnök
MSc, 4. félév
bulatko.anna03@gmail.com

Intermolekuláris kölcsönhatások szabályozott hatóanyag-leadású rendszerekben

Kulcsszavak: rezponzív hidrogélek; PNIPA gél; host-guest kölcsönhatások; szabályozott hatóanyag-leadás

A szabályozott gyógyszerhatóanyag-szállító rendszerek kutatása és felhasználása napjaink egyik legdinamikusabban fejlődő területe. Ezek a komplex rendszerek egy hordozó mátrixból és egy aktív hatóanyagból állnak. A poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPA) hőmérséklet-érzékeny (termorezponzív) hidrogélt reverzibilis alakváltozási képessége, abszorpciós kapacitása potenciálisan alkalmasá teszi többek között az elválasztástechnika, a szenzorika és a mikrofluidika területén való felhasználásra. Előnyös tulajdonságai miatt ígéretes mátrixanyaga lehet gyógyászati hatóanyag-leadó rendszereknek. Orvosbiológiai alkalmazhatóságát segíti elő biokompatibilitása, valamint, hogy fázisátalakulási hőmérséklete tiszta vízben az emberi test hőmérsékletének közelében, 34 °C-on van.

A gélmátrix és a hatóanyag-molekulák között fellépő másodrendű kölcsönhatások meghatározó tényezők hatóanyag-leadó rendszerek fejlesztésében, hiszen mind jellegük, mind erősségük alapvető hatással van a rendszer felépítésére, tulajdonságaira.

Az indolszármazékok széles spektrumú biológiai aktivitással rendelkeznek, ezáltal gyógyszerkutatások jelentős alapkövei lehetnek, fájdalomcsillapító, gyulladáscsökkentő és antidepresszáns hatásuknak köszönhetően. Munkám során a PNIPA hidrogél kölcsönhatásait vizsgáltam különböző próbamolekulákkal, indollal, 5-aminoindollal, valamint 5-hidroxiindollal.

A gélt a hatóanyagok vizes oldatában duzzasztva vizsgálom annak mechanikai és duzzadási tulajdonságainak változását. Pásztázó mikrok calorimetriás módszerrel követem a hatóanyag jelenlétének hatását a gél fázisátmenetére, amely egyik jellemzője a gél és a hatóanyag-molekulák között kialakuló kölcsönhatásoknak. A kialakuló molekuláris kölcsönhatásokat mágneses magrezonancia spektroszkópiával lokalizálom.

*Témavezető:
Dr. László Krisztina
egyetemi tanár, BME VBK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Környezetmérnök
BSc, 5. félév
d.diana9507@gmail.com

Ezüst-foszfát alkalmazása bioaktív üveg mátrixban és azok fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: ezüst-foszfát; ezüst-pirofoszfát; bioaktív üveg; in vitro bioaktivitás

Kutatásaimat az elmúlt években az ezüst-foszfát fotokatalitikus tulajdonságainak vizsgálataival kezdtem meg a kutatócsoportnál, ahol kollégák bioaktív üveg tanulmányozásával is foglalkoznak. Ismerve az ezüst antibakteriális tulajdonságát felmerült az ötlet, miszerint ez ezüst-foszfát felruházhatja az eredetileg ilyen tulajdonsággal nem rendelkező bioaktív üveget, így elhatároztuk, hogy ezüst-foszfát bioaktív üveg kompozitokat állítunk elő.

Az ezüst-foszfát előállításához az irodalmat hívtuk segítségül, amelyből kiválasztottuk a csapadékkepző reakcióval történő szintézist. Prekursoroknak ezüst-nitrátot és 4 különböző foszfátforrást (H_3PO_4 , NaH_2PO_4 , Na_2HPO_4 és $Na_3PO_4 \cdot 12 H_2O$) választottunk. Minden mintát kétféle koncentrációban (0,06 M és 0,03 M) állítottam elő. Ezután megvizsgáltuk a minták szerkezeti, optikai és morfológiai tulajdonságait, mely vizsgálatok közül én végeztem a röntgendiffrakciós szerkezeti vizsgálatot, valamint a DRS és az IR vizsgálatok egy részét. A SEM felvételek elkészítésénél jelen voltam, de a vizsgálatot egy szakképzett kolléga végezte.

Az előállítás után kiválasztottunk egyet az elkészült minták közül az alapján, hogy melyik rendelkezik a biológiai rendszerekben leginkább preferált tulajdonságokkal. Ezután következhetett az bioaktív üveg kompozitok előállítása, amelyeket témavezetőm tanácsa alapján szol-gél módszerrel állítottam elő úgy, hogy az ezüst-foszfátot többféle mennyiségben tartalmazza a rendszer (0,1; 0,2; 0,4 mol%). Emellett készült egy olyan minta is, ami nem tartalmaz ezüst-foszfátot annak érdekében, hogy elvégzendő vizsgálatok kiértékelése során összehasonlítható eredményeket kapjunk. A kompozit mintákon elvégeztük a szükséges szerkezeti, optikai és morfológiai vizsgálatokat. Terveink közt szerepelt a mintákon in vitro biokompatibilitás és antibakteriális hatás vizsgálatot is végezni, amelyek megvalósításához néhány biológus kolléga segítségét kértük.

Az elvégzett vizsgálatok megerősítették azt a feltételezésünket, hogy az ezüst-foszfát jelenléte a bioaktív üvegben kiemelkedő antibakteriális tulajdonsággal látja el azt, így jövőbeli terveink közt szerepel, hogy az elkészült mintákat biopolimerben elhelyezve vizsgáljuk viselkedését az élő szervezetben is.

*Témavezetők:
Dr. Magyar Klára
tudományos munkatárs, SZTE TTIK
Tóth Zsejke-Réka
doktorjelölt, SZTE TTIK*



Babeş-Bolyai Tudományegyetem
vegyéssz mérnök
MSc, 4. félév
farkasnoemi@yahoo.com

Szén nanoszerkezetek hatása a hidroxipatit adszorpció és deszorpció tulajdonságaira

Kulcsszavak:

Nano-hidroxipatit (Hap) és a Hap- alapú nanokompozitok kerültek előállításra, különböző morfológiájú szénadalékok (fullerén (Ful), funkcionizált szén nanocső (fMWCNT), funkcionizált grafén-oxid (GO)) és zselatin (Gel) segítségével. Dolgozatom fő kérdése, hogy a fent említett adalékanyagok milyen hatással vannak a Hap adszorpció és deszorpció tulajdonságaira, melyeket egyrészt ibuprofennel (szintetikus gyulladásgátló), másrészt antocianinnal (természetes gyulladáscsökkentő, antioxidáns) vizsgáltam. A szintetizált kompozitokat por-röntgendiffrakció (PXR), lézerdiffrakció (PSDA), transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM) és Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia (FT-IR) segítségével vizsgáltuk. A különböző hatóanyagok megkötődését a hordozókon, illetve a felszabadulási mechanizmust ultrabolya-látható (UV-VIS) spektroszkópiás módszerrel vizsgáltuk.

Az eredmények azt mutatták, hogy a hatóanyag természete sokkal inkább befolyásolja a hordozó adszorpció kapacitását, mint az adalékanyag jelenléte. A szimulált testnedvben (SBF) végzett deszorpció kísérletek egyértelműen bebizonyítják a fMWCNT és a GO pozitív hatását, mindkét hatóanyag esetén. A Gel pozitív hatása mindkét tulajdonság vizsgálatakor kiemelkedő, hiszen, egyrészt növelte az adszorpció kapacitást, másrészt szabályozta a kioldódást. Az antocianin keverék felszabadulási mechanizmusa kiszámíthatatlan, míg az ibuprofen minden esetben szabályos kioldódást mutat. A felszabadulási mechanizmus magyarázata különböző kioldódási modellek segítségével történt, az ibuprofennel végzett in vitro vizsgálatok eredményei a legjobban az I. rendű kinetikai modellhez, a Korsmeyer-Peppas-modellhez illetve a Higuchi modellhez illeszkednek.

*Témavezető:
Dr. Barabás Réka
egyetemi docens, RO BBTE*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnök
MSc, 2. félév
marton5peter@gmail.com

Kémiaailag módosított kitozánbevonatok fejlesztése korrózióvédelmi alkalmazásokra

Kulcsszavak: kitozán; korrózióvédelem; peremszögmérés

A korrózióvédelem és a különféle egyszerűen felvihető, korróziós védőhatást biztosító bevonatok előállítása napjainkban intenzíven kutatott terület. A megfelelő védőhatás elérése mellett azonban törekszünk arra is, hogy az alkalmazott anyag környezetbarát és (ideiglenes bevonat esetén) könnyen eltávolítható legyen. A kitozánt számos előnyös tulajdonsága teszi jól alkalmazhatóvá ezen a területen: biológiailag lebomló polimer, rendkívül jól impregnálható különféle korróziós inhibitorokkal és kémiai módosítása viszonylag egyszerű és gyorsan megoldható.

Munkám során ilyen módosított kitozánbevonatok korrózióvédelmi és nedvesedési tulajdonságait vizsgáltam üveg, illetve cink hordozón. A cinklemezre mártásos bevonatképzéssel felvitt réteget indigókárminnal impregnáltam, illetve acileztem, majd az így elkészült minták korróziós tulajdonságait elektrokémiai módszerekkel tanulmányoztam (impedancia-spektroszkópia, polarizációs vizsgálatok). Kísérleteztem hasonló technikával kialakított, szililvegyületekkel hidrofobizált bevonatokkal is mind üveg, mind cink hordozón. A bevonatok nedvesíthetőségét ülőcsepp módszerrel tanulmányoztam meghatározva a peremszögek sztatikus értékeit és tanulmányozva azok időbeli változását is.

*Témavezetők:
Dr. Hórvölgyi Zoltán
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Szabó Gabriella Stefánia
oktató, RO BBTE
Dr. Albert Emőke
egyetemi adjunktus, BME VBK*



Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar
Vegyész
MSc, 4. félév
vandus.papp@gmail.com

Ca(II)-alginát aerogél hidratációs folyamatai

Kulcsszavak: NMR; nedvesedési mechanizmus; szerkezetvizsgálat; pórusos anyag; hidrofil

Munkám során egy Ca(II)-alginát alapú aerogél hidratációjának mechanizmusát és a hidratáció által kiváltott szerkezeti változásokat vizsgáltam, speciális NMR technikák alkalmazásával. Az aerogél eredeti pórusszerkezetét folyékony közegben (ciklohexán) NMR krioporozimetriás méréssel karakterizáltuk, és a korábbi nitrogén gázporozimetriás és kisszögű neutronsórásos eredményekkel összhangban megállapítottuk, hogy a mezopórusos mintában ~25 nm sugarú pórusok találhatóak. Hidratáció hatására a pórusszerkezet radikális változáson megy keresztül, ~0,7 g/g víztartalomnál a pórusos rendszer megszűnik és egy hidrogélszerű mátrixszá alakul. Az egyes víztartalmak esetén sikeresen meghatároztuk a rendszerben jelenlévő víz doméneket és arányukat a relaxometriás mérések során, melyek mozgékonyaságáról a diffúziometriás mérések adtak információt. Munkám során homogén és inhomogén mágneses térben is vizsgáltam a rendszer hidratációja során fellépő dinamikus folyamatokat. Az inhomogén térben, egyszerű szekvenciák alkalmazásával történő vizsgálatok jó egyezést adtak a bonyolultabb nagyterű diffúziós mérések eredményeivel. Az alkalmazott NMR módszerek és az ezt kiegészítő további szerkezetvizsgáló módszerek segítségével sikerült a nedvesedési folyamatok, eddig még nem látott, molekuláris szintű leírása.

*Témavezetők:
Dr. Kalmár József
egyetemi docens, DE TTK
Dr. Kéri Mónika
egyetemi adjunktus, DE TTK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Vegyész MSc
MSc, 3. félév
szabogabor97@gmail.com

Platina nanorészecskék hatása 2D WSe₂ nanolapok fotoelektrokémiai aktivitására

Kulcsszavak: félvezető; TMDC; HER; mikroszkópia; ALD

A kétdimenziós (2D) átmenetifém-dikalkogenidek, köztük a p-típusú félvezető WSe₂ is, előnyös optoelektronikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezek alkalmas jelöltékké teszik őket fotoelektrokémiai alkalmazásokban, melyek közé tartozhat például a napfény által segített CO₂-redukció vagy hidrogén előállítás (HER).

A p-WSe₂ tulajdonságai alapján kiváló lenne például a HER-ben való felhasználásban, azonban a folyadékfázisú exfoliálással előállított 2D nanolapok nem mutatják azt a fotoelektrokémiai aktivitást, amit a sima felületű egykristályok. Ennek oka az élek nagy relatív gyakorisága a nanolapok esetében, ugyanis ezek rekombinációs centrumokként viselkednek, így a fotoelektrokémiai aktivitást jelentősen csökkentik [1]. Ezek a negatív hatások azonban csökkenthetők, a hibahelyek passziválásával vagy a katalitikus centrumok aktiválásával. A passziválás történhet például Al₂O₃ leválasztásával, azonban ez a HER-ben nem növelte az aktivitást [2]. A platina (Pt) nanorészecskék képesek voltak növelni a HER aktivitást [1].

Kutatómunkám során a Pt nanorészecskék hatását vizsgáltam, azonban a szakirodalommal ellentétben nem folyadék fázisú exfoliálással (LPE), hanem mechanikus exfoliálással (ME) állítottam elő a p-WSe₂ nanolapokat, melyekre Pt nanorészecskéket választottam le, atomi rétegleválasztással (ALD). A különböző vastagságú WSe₂ nanolapok fotoelektrokémiai aktivitását vizsgáltam a kutatócsoportunk által fejlesztett fotoelektrokémiai mikroszkópiás elrendezéssel. Az egyes nanolapok ugyanazon pontjain tudtam vizsgálni a Pt leválasztása előtt és után. Az eredmények azt mutatják, hogy az ALD-vel leválasztott Pt nanorészecskék főként az éleken válnak le, és nagyságrendekkel növelik a kvantumhatásfok értékét. A növekmény értéke abszolút értékben a vastagabb rétegek esetén a legnagyobb (elérve a 90%-os kvantumhatásfokot), míg a relatív növekmény a nanolapok vastagságától független.

[1] Velazquez, J. M.; John, J.; Esposito, D. V.; Pieterick, A. et al., Energy Environ. Sci., 9 (1), 164–175. (2016)

[2] Yu, X.; Sivula, K., Chem. Mater., 29 (16), 6863–6875. (2017)

Témavezetők:

*Dr. Tóth Péter Sándor
tudományos munkatárs, SZTE TTIK*

*Dr. Janáky Csaba
egyetemi docens, SZTE TTIK*



Miskolci Egyetem
Műszaki Anyagtudományi Kar
Anyagmérnök
BSc, 3. félév
tamasbencebenedek@gmail.com

Ioncserező gyanták fém-ion megkötési tulajdonságainak összehasonlító vizsgálata

Kulcsszavak: ioncsere; vegyipar; víztisztítás; kationcsere

Tamás Bence Benedek vagyok, másodéves duális anyagmérnök hallgató. 4 cégnél vettem részt sikeres meghallgatáson, ezek közül a BorsodChem Zrt.-vel kötöttem duális szerződést. Vegyipar iránti érdeklődésem egyértelművé tette a szakirány és partnercég választásom. A tudományos munka elvégzésére és a TDK-n való részvételre a BorsodChem területén szerzett tapasztalataim motiváltak. Témavezetőim Mihalkó Andrea fejlesztőmérnök és Farkas László egyetemi adjunktus. Vizsgálataim célja víztisztításhoz használatos ioncserező gyanták összehasonlító vizsgálata. A mintáim 4 féle gyanta, 3 cégtől. A kísérletek során a gyantákat azok elméleti kapacitásánál nagyobb ion-tartalmú oldatban telítettem. Ehhez rázópadokra helyeztem az oldat és gyanta keverékét. Az időszakosan vett minták analitikai módszerekkel, ICP vizsgálattal lettek elemezve. A kísérleteket a BorsodChem területén, a Technológiai Támogatás laborjaiban végeztem. A mérési eredmények kielemezését az analitikai és a központi labor segítségével végeztem. Terveim szerint az elkövetkezendő tanévekben további tudományos munkát szeretnék végezni a BorsodChem szerves technológiájával kapcsolatban.

*Témavezetők:
Mihalkó Andrea
kutatás-fejlesztési koordinátor, BorsodChem Zrt.
Farkas László
technológiai támogatás menedzser, BorsodChem Zrt.*





Biokémia



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Molekuláris bionika mérnöki
BSc, 10. félév
gyuszi65556@gmail.com

Cinkujj fehérje fémion-kötésének vizsgálata FluoZin-3 fluoreszcens festékkel

Kulcsszavak: cinkujj fehérje; FluoZin-3 fluoreszcens festék; fluoreszcencia spektroszkópia; cirkuláris dikroizmus spektroszkópia; ezüst(I) ion

A cinkujj fehérjék létfontosságúak az emberi szervezet számára, hiszen több folyamatban vesznek részt, például a transzkripció szabályozásában – DNS átírása RNS-sé –, fehérje lebontásban, jelátvitelben, de moduláris felépítésüknek köszönhetően akár génszerkesztés céljából is felhasználhatók, mesterséges metallonukleázok alapjaként. DNS-kötő funkciójukat csak Zn(II)-komplex formájában képesek betölteni. Ezért fontos tudni, hogy a szervezetbe bekerülő szennyező fémionok kicserélhetik-e a Zn(II)-t.

Ennek megfelelően TDK dolgozatomban mesterségesen előállított cinkujj fehérjék kölcsönhatását vizsgáltam cink(II) és egyéb nem létfontosságú/toxikus fémionokkal, köztük ezüst(I), kadmium(II) és higany(II) ionokkal. Célom volt egy olyan fluorimetriás tesztrendszer kialakítása, amely segítségével automatizáltan vizsgálhatók ezek az egyensúlyi kölcsönhatások akár μM és ezalatti koncentráció tartományban. A rendszer alapjául a FluoZin-3 fluoreszcens festékanyagot választottuk, mely cinkionokkal komplexet képezve fluoreszkál, és a korábbiakban már meghatározták oldatkémiai sajátosságait. Így vizsgálhatjuk azt is, hogy az egyéb fémionok hogyan képesek kiszorítani a cinkujj fehérjében kötött cinkionokat.

Ahhoz hogy kis koncentrációk mellett is reprodukálható, pontos eredményeket kaphassak, elsőként megvizsgáltam a környezeti – igen magas – cinkszennyezés hatását, illetve a csökkentésének lehetőségeit. Ezután Zn(II)-FluoZin-3 referencia titrálások végrehajtásával optimalizáltam az automatizált titrálás paramétereit egy új CLARIOstarPlus lemezolvasó készülékben.

Megállapítottam, hogy a vizsgálati körülmények között a FluoZin-3 nem képes versengeni a cinkujj fehérjével a Zn^{2+} -ionokért, így a fehérje-Zn(II) komplex stabilitását cirkuláris dikroizmus spektroszkópiával követett reverz titrálásokkal határoztam meg EDTA, EGTA valamint EDTA-Mg komplex segítségével.

Végezetül megvizsgáltuk különböző fémionok (Ag(I), Cd(II), Hg(II)) kölcsönhatását a cinkujj fehérjével az optimalizált fluorimetriás tesztrendszerünkben. Sikerült megállapítani, hogy az Ag^+ -ion ekvimoláris mennyiségben kiszorítja a Zn^{2+} -iont, míg a másik két fémion a FluoZin-3 festékkel is kölcsönhatásba lép, így ezen összetettebb rendszerek esetében további vizsgálatok szükségesek.

Témavezetők:

Dr. Gyurcsik Béla

egyetemi docens, SZTE TTIK

Hajdu Bálint

PhD hallgató, SZTE TTIK



Babeş-Bolyai Tudományegyetem
Biokémiai mérnök
BA, 8. félév
krisztinabrs@yahoo.com

Rekombináns, nem-kanonikus aminosavat tartalmazó fenilalanin-ammónia-liáz (PAL) előállítása

Kulcsszavak: fenilalanin ammónia-liáz; immobilizálás; p-azido-fenilalanin; pontmutáció; expresszió

A fenilalanin ammónia-liáz (PAL) enzimek az ammónia β -eliminációját katalizálják L-fenilalaninról transz-fahéjsavat képezve. Az aromás aminosav-ammónia-liázokat (különösen a PAL-t) hatékonyan alkalmazzák az aminosavak sztereoselektív szintézisétől kezdve a bioszenzorokig, valamint tanulmányozzák a fenilketonúria kezelésében is. Jelenleg az enzim alacsonyfokú termikus illetve proteáz-hasítás elleni stabilitása, valamint a szilárd hordozóra való rögzítés (immobilizálás) során észlelt nagyfokú aktivitás vesztese jelenti a fő akadályt a PAL alapú biotechnológiák további elterjedésében.

Kutatásunk során nem természetes aminosavat hely-specifikusan tartalmazó Petroselinum crispumból származó rekombináns PAL (PcPAL) előállítását terveztük, mely a továbbiakban az enzim helyspecifikus immobilizálását biztosítja. Mivel ezen rögzítési folyamat két egyedi és kölcsönösen reaktív csoport jelenlétét igényli, így az enzim szerkezetében génmutáció révén egy aminosavat p-azido-fenilalaninra (pAzPhe) cserélünk ki, mely a „click” reakció révén kapcsolódhat a hordozó felületén lévő terminális alkin kötéshez. Kiválasztva az enzim felületén, valamint a katalitikus központtól távol eső fenilalaninokat, végrehajtottuk ezeknek „Stop” kodonná való mutációit. Majd rekombináns pAzPhe-aminoacil-transzferRNS-szintetáz enzimet kódoló plazmidot használva kifejlesztettük a működőképes expressziós rendszert két különböző gazdasejt esetében is. Ezen sejt-rendszereket használva megvalósítottuk a módosított PAL enzim termelését.

*Témavezető:
Bencze László-Csaba
egyetemi adjunktus, RO BBTE*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnök
MSc, 2. félév
holub.eszter@gmail.com

Genom szintű uracil beépülési mintázatok vizsgálatára alkalmas szenzorfehérje továbbfejlesztése és alkalmazásának finomítása

Kulcsszavak: DNS-hiba; uracil-DNS szenzor; dotblot; DNS-immunprecipitáció; klónozás

A DNS-ben az egyik leggyakrabban előforduló hibás bázis az uracil, mely a citozin spontán vagy enzimatis dezaminációjával, de akár timint helyettesítő beépítéssel is létrejöhet. A citozin dezaminációja pontmutációhoz vezet, amennyiben nem történik meg a javítása a következő replikációig, míg a timint helyettesítő uracil nem okoz ilyen problémát [1–2]. Ennek ellenére, ha a sejtbeli dUTP/dTTP arány ami normális esetben extrém alacsony megemelkedik, az uracil beépülése és/vagy az erre épülő folyamatok is végzetesek lehetnek a sejt számára. Sok kemoterápiás szer éppen ezt használja ki és a de novotimidilát bioszintézis útvonalait támadva ún. timinmentes sejtthálát indukál [3].

A DNS-beli uracil eltávolításáért az uracil-DNS-glikozilázok (UDG-k) felelnek. Az emberben legalább négyféle UDG található, ezek közül a legaktívabb az uracil-DNS-N-glikoziláz (UNG). Ez az U:A és az U:G párban lévő uracilt egyaránt képes felismerni, valamint többféle uracil-származékot is javít [4–5].

Az uracilos DNS-nek (U-DNS) ugyanakkor fontos biológiai szerepe is lehet [6–10], mely megértéséhez és megfelelő leírásához egy hatékony U-DNS detektálási technika szükséges. A Vértessy-laborban erre a célra fejlesztettek ki több UNG alapú szenzorfehérjét [11–12]. A FLAG-címkés szenzorral többféle alkalmazásban is reprodukálható és koherens eredményeket kaptunk az uracil beépülést okozó drogkezelt sejtek esetén [12]. Ezzel szemben alacsony uraciltartalmú mintáknál a dotblot mérések bizonytalanok. Ezt javítandó kutatómunkám során egy enzimatisan biotinilált U-DNS szenzorfehérjét hoztam létre, melyet DNS-immunprecipitációs kísérletben (IP) és dotblot mérésekben hasonlítottam a FLAG-címkés szenzorhoz. Az IP eredményei alapján a biotinilált szenzorfehérje is képes nagy hatékonysággal kapcsolódni az U-DNS-hez. Dotblot-ban az új szenzorfehérjével kisebb az aspecifikus háttér, a mérés robosztusabb, aminek a háttérben a detektáló szenzorkomplex kisebb mérete állhat. Az érzékenységet viszont nem sikerült javítani, aminek valószínűleg az U-DNS és a szenzorok alapját képező, inaktív UNG közti kölcsönhatás erőssége szab határt.

- [1] Krokan, H. E. PMID: 12483510; [2] Visnes, T. PMID: 19008197; [3] Blackledge, G. PMID: 95798534; [4] Kavli, B. PMID: 12161446; [5] Slupphaug, G. PMID: 7819187; [6] Yan, N. PMID: 21576478; [7] Kiljunen, S. PMID: 16339954; [8] Muha, V. PMID: 22685418; [9] Xu, Z. PMID: 22728528; [10] Liu, M. & Schatz, D. G. PMID: 19303358; [11] Róna, G. PMID: 26429970; [12] Pálincás, H. L. PMID: 32956035

*Témavezetők:
Dr. Békési Angéla
tudományos munkatárs, BME VBK
Pálincás Hajnalka Laura*

tudományos segédmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet



Babeş-Bolyai Tudományegyetem
Vegyésszmérnöki
BA, 8. félév
horvath_ilka@yahoo.com

A fenilalanin-ammónia-liáz termostabilitásának növelése iteratív telítési mutagenézissel

Kulcsszavak: PAL; B-FIT; ISM mutagenézis; lízis, transzformálás

A fenilalanin ammónia liázok természetes reakciója az L-fenilalanin transz-fahéjsavvá való átalakulása ammónia elimináció során valamint a reverzibilis ammónia addíciós reakció. Ezen enzimek iránti érdeklődés egyre nő, úgy az iparban, mint az orvostudomány terén, széles szubsztráttartományuknak köszönhetően. Felhasználásukat azonban korlátozza alacsony hő- valamint proteáz enzimek hasítása elleni stabilitásuk.

Kutatásunk során a petrezselyemből (*Petroselinum crispum*) származó fenilalanin ammónia liáz (PcPAL) stabilitásának növelését vizsgáltuk. Az enzim kristályszerkezetén azonosítottuk a felszínen levő legflexibilisebb aminosavakat, majd azokat az iteratív telítési mutagenézis módszerével az összes többi természetes aminosavra lecseréltük. A kapott mutáns könyvtár termostabilitását egy általunk fejlesztett, nagy hatékonyságú, egész sejtes enzimaktivitásmérés módszerrel hajtottuk végre.

*Témavezetők:
Dr. Bencze László Csaba
egyetemi adjunktus, RO BBTE
Dr. Nagy Csaba Levente
egyetemi adjunktus, RO BBTE*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnöki
BSc, 7. félév
loczihanna@gmail.com

A mikobakteriális dUTPáz enzim szerepének vizsgálata

Kulcsszavak: dUTPáz; DNS hibajavítás; qPCR; Mycobacterium smegmatis

A mikobaktériumok számára esszenciális a dUTPáz enzim, azonban nem a dUTP-t hidrolizáló funkciójának kiesése miatt okoz életképtelenséget a hiánya. Az enzim tartalmaz egy esszenciális, mikobaktérium-specifikus hurok régiót, melynek pontos funkciója nem ismert.

Előkísérletek alapján tett feltételezésem szerint a dUTPáznak szerepe van a DNS kettősszáltörések javításában, ezért kutatásom során két dUTPáz mutáns *Mycobacterium smegmatis* törzset – csak inaktív dUTPáz-t termelő (dut(-)), valamint a vad típusú dUTPáz mellett genomjában a mikobaktérium-specifikus hurok régiót nem tartalmazó dUTPázt is tartalmazó (Δ loop) törzseket – hasonlítottam össze a vad típussal a DNS javítási útvonalak aktiválódásának vizsgálatában. Az expressziós profilok feltérképezésére qPCR technológiát használtam. Kettősszáltörések előidézésére ciprofloxacinos kezelést alkalmaztam, és a sejtek morfológiáját is megvizsgáltam mikroszkóp segítségével.

Témavezetők:

*Dr. Vértessy G. Beáta
egyetemi tanár, BME VBK*

Dr. Tóth Judit

tudományos főmunkatárs, ELKH Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnöki BSc
BSc, 5. félév
posszonja@gmail.com

Organokatalízisben alkalmazott cinkona alkaloidok citotoxicitásának tesztelése parentális és multidrog rezisztens malignus sejtvonal páron

Kulcsszavak: citotoxicitás, multidrog rezisztencia, P-glikoprotein, organokatalizátor, cinkona

A daganatos megbetegedések kemoterápiás kezelésének sikerét az egyik leggyakoribb rezisztencia mechanizmus, a multidrog rezisztencia (MDR) gyakran megghiúsítja. A multidrog rezisztencia jellemzően a gyógyszer-efflux pumpa fehérjék sejtmembránban való fokozott expressziójához kapcsolható. A szállítások közül központi szerepet tölt be a P-glikoprotein (ABCB1, MDR1, Pgp), ugyanis elsősorban ez a pumpa hozható összefüggésbe a kemoterápia során fellépő gyógyszer-rezisztenciával. Energiafüggő működési mechanizmusán keresztül számos hidrofób vegyület, köztük daganatellenes ágensek extracelluláris térbe való eltávolításáért felelős, ezáltal sarkalatos gátat szab a kemoterápia hatékonyságának. A jelenség mechanizmusa és annak klinikai megoldása aktívan kutatott terület, amelyre számos megoldási javaslat született. Az MDR leküzdése in vitro a pumpa blokkolásán, megkerülésén, vagy a malignus sejt pumpán keresztül történő támadásán keresztül is megvalósítható.

A kutatómunkám során elvégzett vizsgálatok elsődleges tárgyát az organokatalízisben is előszeretettel használt cinkona alkaloid-származékok képezték, amelyek bioaktivitását egy parentális és multidrog rezisztens méh szarkóma sejtvonalat magában foglaló in vitro ko-kultúra modellen jellemeztem. Tudományos munkám célja a tesztelt vegyületek citotoxicitásának és a tumorsejtekre gyakorolt antiproliferatív jelleg szelektivitásának karakterizálása volt, és annak megállapítása, hogy organokatalizátorok esetében melyik támadási stratégia az, amit potenciálisan ki lehetne aknázni az MDR leküzdésére. A kívánt cél megvalósításához egy fluoreszcens fehérje alapú citotoxicitási esszét használtam, amelyet az adott kémiai funkció (Pgp-inhibíció, Pgp-megkerülés, MDR-szelektivitás) vizsgálatának megfelelően alakítottam. Eredményeim hozzájárulhatnak az organokatalizátorok egy újabb alkalmazási trendjének megteremtéséhez, egyúttal mélyebb információt biztosítva a gyógyszeriparnak az egyes katalitikus reakciókhoz alkalmazandó vegyületcsaládok bioaktivitásáról, toxicitásáról, és ezáltal támaszt nyújtva a megfelelő katalitikus reagens kiválasztásához. Másrésztől kutatómunkám markánsabb jelentősége a rákkutatásban és terápiában nyilvánulhat meg, újabb tumorellenes vegyületek kifejlesztésével, jellemzésével és alkalmazhatósági potenciáljának feltérképezésével hagyományos efflux pumpa-inhibítorként, pumpa megkerülő szerként, vagy a radikálisan új szemléletű kollaterális szenzitivitás kiaknázásán alapuló MDR-szelektív vegyületként.

*Témavezetők:
Dr. Kupai József
egyetemi docens, BME VBK
Tóth Szilárd
tudományos munkatárs, Természettudományi Kutatóközpont, Enzimológiai Intézet*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
biomérnök
BSc, 6. félév
smildiko55@gmail.com

Onkogén mutációt hordozó KRAS fehérjék csökkent GTPáz funkciójának helyreállítására tervezett GAP fehérje mutánsok vizsgálata

Kulcsszavak: KRAS; onkogén; mutáció; enzimaktivitás; tumorterápia

A humán daganatos megbetegedések esetében a RAS fehérje mutációja fordul elő leggyakrabban. A RAS fehérjének három izoformája ismert: KRAS, HRAS és NRAS. Az izoformák közül a KRAS mutációja kifejezetten gyakori hasnyálmirigy- (86%) és vastagbélrák tumorokban (41%) valamint a tüdőadenokarcinómás esetekben (32%). A KRAS molekuláris kapcsolóként működik sejten belüli jelátviteli útvonalakban: GTP kötött állapotban képes a jelátvitelre, GDP kötött állapotban pedig inaktív. A fehérje rendelkezik saját GTPáz aktivitással, ez azonban meglehetősen alacsony. A GTPáz aktiváló proteinek (GAP-ok) meggyorsítják a KRAS GTP hidrolízisét, ezáltal elősegítik a jelátvitel inaktivációját. Az onkogén KRAS mutánsok esetében viszont gyengébb a GAP-KRAS kölcsönhatás, emiatt fokozott a jelátvitel, ami kontrollálatlan sejtosztódáshoz, és tumorigenezishez vezet.

Munkám célja az volt, hogy olyan GAP-mutánsokat állítsak elő, melyek gyorsítják egyes onkogén KRAS mutánsok (G12C, G12D) inaktivációját, amely által esetleg kiküszöbölhetővé válhatna a hibás működés. A kutatást Dr. Rosta Edina által vezetett kutatócsoporttal együttműködésben végezzük. Kollaborációs partnereink QM/MM számítások alapján olyan mutációkat azonosítottak a GAP fehérjén belül, amelyek feltehetőleg befolyásolják a GAP KRAS-hoz való kötődését.

Munkám során irányított mutagenézissel előállítottam a GAP mutánsok expressziójára alkalmas plazmidokat. Ezután bakteriális expressziós rendszerben termeltem a mutáns GAP fehérjéket, majd izoláltam azokat. Ezt követően többféle módszerrel is megvizsgáltam, hogy az onkogén KRAS mutánsok aktivitására hogyan hatnak a GAP mutánsok. Ezen módszerek segítségével azonosítottam néhány olyan mutánst, melyek a vad típusúnál nagyobb mértékben növelik a mutációt tartalmazó KRAS fehérjék GTPáz aktivitását.

Az így kapott eredményeim hozzájárulhatnak a KRAS mutáns daganatok új kezelési módszereinek fejlesztéséhez. Illetve a fehérjeszerkezetekre és az aktivitásban bekövetkező változásokra irányuló vizsgálatok hozzásegítenek minket a daganatok kialakulásában szerepet játszó fehérjék működési mechanizmusának mélyebb megértéséhez.

*Témavezetők:
Dr. Nyíri Kinga
egyetemi adjunktus, BME VBK
Dr. Vértessy G. Beáta
egyetemi tanár, BME VBK
Koppány Gergely
tudományos segédmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont*



GnRH fehérje-hatóanyag biokonjugátumok szintézise és tumorelles hatásvizsgálata

Kulcsszavak: peptidkémia; onkológia; peptidszintézis; tumor-össejtek

A kemoterápia az onkológia egyik legszélesebb körében alkalmazott tumorelles kezelése, mely számos mellékhatással járhat. Az eljárás során alkalmazott citosztatikumok nem minden esetben rendelkeznek olyan mértékű szelektivitással, hogy az egészséges sejteket elkerülje az alkalmazott anyagok sejtoxikus hatása. A problémára megoldást jelenthet a célzott tumorterápia, mely a daganat specifikus egységeit veszi célba.

Középiskolai kutatómunkám során fehérje-hormonokon alapuló, receptor-vezérelt, irányított tumorterápiával foglalkoztam. Kutatócsoportunk célja olyan fehérje-hatóanyag biokonjugátumok előállítása, melyek az adott fehérjének megfelelő kötőhelyhez szállítják a későbbi sejtekbe jutó hatóanyagot. Munkám során gonadotropin felszabadító hormon analógokat (GnRH) szintetizáltam szilárdfázisú peptidszintézis segítségével. Ennek tumorterápiás jelentősége, hogy a daganatsejtek membránjukra nagyobb számban expresszálnak GnRH receptorokat. Az egészséges sejtek csak kevésbé, vagy egyáltalán nem rendelkeznek ilyen kötőhelyekkel felületükön (sejttípustól függően). Ez a tulajdonság lehetővé teszi számunkra a sejtek megkülönböztetését. Ha a GnRH-hoz oxim kötéssel antraciklineket kötünk, a peptid rész a tumorsejt membránján elhelyezkedő kötőhelyéhez kapcsolódik. A hatóanyag ezután receptor-vezérelt endocitózissal kerül a sejtbe, ahol citotoxikus hatását így megnövelt szelektivitással fejtheti ki.

A GnRH-analógok szintézise mellett jelenleg, egyetemi hallgatóként két fágkönyvtárból kiválasztott, 12 aminosavból álló (TNSFHGIAGYQS, FNLPLPSRPLL), CD44v szelektív peptid szintézisével is foglalkozom, hasonló terápiás célokra, viszont ebben az esetben a tumor kiújulásáért részben felelős daganat-össejteket célozva. Előadásom során ezen két vonalon végzett saját, preparatív munkámat, valamint a példavegyületekről készült biológiai összesítéseket tervezem bemutatni.

*Témavezetők:
Dr. Koncz Gábor
mentor, középiskolai tanár, Kisvárdai Bessenyei György Gimnázium és Kollégium
Dr. Mező Gábor
tudományos tanácsadó, ELTE TTK*



Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem
Csíkszeredai Kar
Fenntartható biotechnológiák
MSc, 1. félév
szep.evelin@yahoo.com

SARS-CoV-2 stabilitás vizsgálat RT-PCR módszerrel orr- és garat nyálkahártya mintából

Kulcsszavak: SARS-CoV-2; RT-PCR; stabilitás; kimutatás; fertőzőképesség

Az eltelt évek, évtizedek során a biológiai, kémiai és molekuláris biológiai eredmények, valamint a laboratóriumi műszerek fejlődésének köszönhetően egyre több és újabb diagnosztikai módszer vált lehetővé. Ezen módszerek egyik kiemelkedő tagja a valós idejű PCR (RT-PCR), amely lehetőséget biztosít különböző betegségek, génmutációk tanulmányozására, valamint fertőzések kimutatására és nyomon követésére. 2019 decemberében Wuhan városában kialakult a jelenleg is tartó SARS-CoV-2 világ járvány epicentruma. A gyorsan terjedő és súlyos légúti megbetegedést okozó vírus központi szerepet játszik jelenleg is a tudósok és orvosok körében. Megismerése, tanulmányozása elsődleges fontosságúvá vált mindenki számára.

Kutatásunk témája a SARS-CoV-2 vírus stabilitásának vizsgálata: virális RNS izolálása, ill. valós idejű kvantitatív PCR alkalmazása. A kutatás során virális RNS koncentrációt és kópiaszámot határoztunk meg. A jelen kutatás kiemelkedő fontossággal bír a jelenleg érvényben lévő világjárvány megfékezése során, hiszen a kapott eredmények hozzájárulnak annak meghatározásához, hogy a mintavételezést követően mennyi ideig mutatható ki teljes bizonyossággal a vírus jelenléte. Vizsgálataink során az izolátum virális RNS koncentrációja a napok elteltével nem mutat szignifikáns különbséget, a meghatározott kópiaszám eredményei igazolják, hogy a mintavételt követő 7. napon is kimutatható a vírus jelenléte. A kutatás további lépését képezte annak felderítése, hogy a már megfertőzött páciens esetében megkülönböztethető-e, ill. hogyan határozható meg (szelektálható) a nem fertőző betegek kiválasztása.

*Témavezető:
Dr. Albert Beáta
egyetemi professzor
drd. Salamon Pál
egyetemi tanársegéd, RO EMTE CSK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnök
MSc, 4. félév
uorsi95@gmail.com

Máj uptake transzporterek szteroid alapú inhibitorainak vizsgálata

Kulcsszavak: OATP; szteroid; inhibitor; szubsztrát; fluoreszcens esszé

Az OATP-k (Organikus anion transzporter polipeptidek) membránfehérjék, amelyek az emberi szervezet számos szövetében expresszálódnak (vér–agy gát, béllumen, máj, izomszövet). Az OATP-k amfipatikus szerves molekulák sejtbeli felvételét végzik, valamint hozzájárulnak az epesók, bilirubin és szteroid illetve tiroid hormonok homeosztázisához. A májban kifejeződő OATP1B1, 1B3 és 2B1 multispecifikus hepatikus transzporterek számos gyógyszer molekulát is felismernek, jelentős szereplői például a sztatinok és antivirális szerek farmakokinetikájának. Az OATP1B1, 1B3 és 2B1 fehérjékkel való kölcsönhatás vizsgálata a gyógyszerfejlesztés korai fázisának elengedhetetlen eleme. Munkám során egy olyan fluoreszcens festék transzportját jellemeztem, amely alkalmas a hepatikus OATP fehérjék gyógyszer kölcsönhatásának olcsó és érzékeny vizsgálatára. Az új festék-szubsztrát alkalmazásával vizsgáltam az OATP1B1, 1B3 és 2B1 fehérjék szteroid kölcsönhatását. Olyan ösztrom származékokat jellemeztem, amelyek kutatócsoportunk korábbi felfedezése alapján hatékony gátlószerei az OATP2B1-nek.

Munkám célja a különböző ösztrom-alapú vegyületek szelektivitásának vizsgálata volt, amely során specifikus OATP2B1 inhibitorokat azonosítottam és általános, az OATP1B1 és 1B3 fehérjéket is hatékonyan (mikromólos IC50) gátló 13-epiösztrom derivátumokat találtam. A felfedezett szelektív inhibitorok jó eszközök lehetnek a máj OATP fehérjéinek vizsgálatában. Eredményeim hozzájárulhatnak továbbá célzott OATP gátlók fejlesztéséhez és segíthetnek az OATP-k szubsztrát-inhibitor felismerésének feltérképezésében.

*Témavezető:
Dr. Laczka Csilla
tudományos főmunkatárs,*

Eötvös Loránd Kutatási Hálózat Természettudományi Kutatóközpont Enzimológiai Intézet



Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem
Csíkszeredai Kar
Génebépsz
BSc, 6. félév
vancsaklarika@gmail.com

Sejthalált moduláló rekombináns SMAC fehérje bioszintézise

Kulcsszavak: rekombináns fehérje; bioszintézis; SMAC

Napjainkban világszinten igen komoly gondot jelentenek a rosszindulatú daganatos megbetegedések. Az Eurostat adatai szerint Európa szinten az elhalálozások oka átlagosan 24%-ban valamilyen rákos megbetegedés. Jelenleg a listavezető Magyarország, ahol a rákos megbetegedések az elhalálozások több mint 30%-át okozza (Eurostat, 2016). Bár többféle módszert alkalmaznak a rák kezelésére, egyelőre nem létezik olyan kezelési módszer, amely 100%-ban garantálná a betegségből való felépülést.

Az orvostudomány a biotechnológiában rejlő lehetőségeket hívta segítségül, hogy megoldja ezt a problémát: a tudomány igyekszik felderíteni a betegség kialakulásának biológia, kémiai és biokémiai hátterét, megismerni a kialakulásban résztvevő folyamatokat. A rosszindulatú daganatos megbetegedések kialakulásában és fejlődésében közreműködő folyamatok megismerésében, feltérképezésben nyújt segítséget az általunk termelt és vizsgált fehérje, az apoptózis második mitokondriális kaspáz aktivátor fehérje, azaz a SMAC. A SMAC fehérje fontos szerepet tölt be az apoptózis (programozott sejthalál) folyamatában.

Jelen kutatás során a rekombináns humán SMAC fehérje nagy volumenű bioszintézisét valósítottuk meg bakteriális expressziós rendszerben. Fúziós partnerként ubiquitin-t alkalmaztunk, így a tisztítási műveletek végén Ubiquitin karboxil-terminális hidroláz (YUH1) enzimmel történő emésztéssel izoláltuk a rekombináns SMAC fehérjét. A bioszintézis során keletkező rekombináns fehérje (SMAC-UBI) szeparálása érdekében dekahisztidin címkét alkalmaztunk. Az előállított rekombináns SMAC fehérje további onkológiai kutatások tárgyát képezi.

*Témavezető:
drd. Salámon Pál
tanársegéd, RO EMTE CSK*





Biotechnológia és élelmiszer-kémia



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnök
MSc, 2. félév
angyalviolazs@gmail.com

Modell rendszer létrehozása a bakteriofág dUTPáz aktivitás horizontális géntranszferre gyakorolt hatásának vizsgálatára *Staphylococcus aureus*-ban

Kulcsszavak: Staphylococcus aureus; horizontális géntranszfer; dUTPáz; antibiotikum rezisztencia; bakteriofág

A *Staphylococcus aureus* törzsek genomjának közelítőleg 20%-át beékelődött mobilis genetikai elemek teszik ki, melyek sűrűn cserélődnek. Ezek az elemek gyakran hordoznak patogenitási faktorokat és antibiotikum rezisztenciáért felelős géneket, így hozzájárulnak a baktérium fertőzőképességéhez, illetve a virulencia és az antibiotikum rezisztencia terjedéséhez. Szintén gyakran előfordul, hogy olyan géneket tartalmaznak, amelyek befolyásolják az uracil DNS hibajavítást. Ilyen például a bakteriofágok dUTPáz géneje. A dUTPáz feladata, hogy megfelelő arányban tartsa a dUTP/dTTP arányt, ezzel akadályozva, hogy uracil kerüljön a DNS-be és mutagén elváltozások jelenjenek meg. Ezt a gént korábban esszenciálisnak tartották, maga a *S. aureus* saját genomja (a mobilis genetikai elemektől mentes rész) viszont nem kódolja. Felmerül tehát a kérdés, hogy a baktérium hogyan él túl dUTPáz nélkül, illetve az is, hogy ha a baktériumnak nincs szüksége erre a génre, akkor a genomba integrálódó lizogénikus fágok miért hordozzák.

A témám legfőbb célkitűzése, hogy létre hozzak egy olyan modell rendszert, mely alkalmas arra, hogy a *S. aureus* bakteriofág dUTPáz enzimaktivitásának bakteriofágok szaporodásában betöltött szerepét vizsgálni lehessen. Ez a legegyszerűbben úgy vizsgálható, ha egy adott bakteriofág dUTPázát gátoljuk a fág szaporodása közben. Ahhoz, hogy vizsgálni tudjuk, hogy a dUTPáz hogyan befolyásolja a fágok terjedését, szükség volt egy olyan lizogén törzsrre, amely csak egy féle bakteriofágot tartalmaz (a legtöbb törzs 2-3 profágot tartalmaz), még hozzá, egy olyat amelynek aktivitása gátolható a rendelkezésünkre álló Stl nevű, fehérje természetű inhibitorral.

Erre a célra a $\phi 11$ lizogént választottuk, mely dUTPáz enzime biztosan olyan trimer dUTPáz, amelyre hat az általunk ismert szekvenciájú Stl fehérje gátlása. Ennek érdekében egy több bakteriofágot is tartalmazó törzsben aktiváltuk a fágokat, majd azzal fogékony törzseket fertőztünk és kizárólagosan $\phi 11$ profágot tartalmazó lizogén törzset izolálni. Ehhez egy erre alkalmas screenelési módszert is kifejlesztettünk. A létrehozott lizogéneket új generációs szekvenálással is vizsgáltuk. Ezután az Stl fehérjét egy *S. aureus*-*E. coli* ingázó expressziós vektorba klónoztuk, aminek a segítségével az inhibitor fehérjét kifejezhetjük a vizsgálni kívánt törzsben.

A létrehozott és tesztelt modell rendszerrel a jövőben vizsgálni tudjuk, hogy a dUTPáz enzim aktivitása hogyan befolyásolja a fágok terjedését és a horizontális géntranszferet.

Témavezető:
Dr. Szabó Judit Eszter
tudományos segédmunkatárs, BME VBK



KOMENDA ZSÓFIA

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Villamosmérnöki és Informatikai Kar
egészségügyi mérnök
MSc, 4. félév
zsofkom@gmail.com

TÓTH ANIKÓ RÉKA

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar
biomérnök
BSc, 7. félév
rtoth98@gmail.com

Egy búzán túlmutató probléma: rozs és árpa prolaminok szerepe a gluténanalitikában

Kulcsszavak: cöliákia; gluténanalitika; rozs; árpa; referencia anyag

A népesség 1%-át érintő cöliákia egyetlen kezelési módja az élethosszig tartó gluténmentes diéta. Ahhoz, hogy a betegségben szenvedők biztonságosan tudjanak táplálkozni, szükség van a glutén pontos mérésére. Sokféle módszer létezik, jelenleg az R5 antitest alapú ELISA-t javasolja a szabályozás a glutén meghatározásra. Azonban a különböző gabonafélékből származó glutén pontos mérése kihívást jelent az ELISA módszerrel, többek között az antitestek eltérő affinitása és a különböző kalibrációs standardek miatt. Olyan ELISA készlet, ami búza prolaminot használ a kalibrációhoz, nem tudja pontosan meghatározni a rozsból és árpából származó glutént az antitest eltérő affinitása miatt. Ez a probléma megkerülhető lenne, ha az ELISA-t olyan gabona specifikus gluténnal kalibrálnánk, mint amilyen a mérendő glutén forrása. A referencia anyag fejlesztés szempontjából elengedhetetlen a fehérjék pontos jellemzése, amely rozs és árpa esetén jelenleg nem áll rendelkezésre. A dolgozat célja a rozs és árpa prolamin frakciók genetikai-környezeti változékonyságának vizsgálata és ennek hatása a glutén immunanalitikai meghatározására.

*Témavezetők:
Dr. Kormosné Bugyi Zsuzsanna
egyetemi adjunktus, BME VBK
Dr. Tömösközi Sándor
egyetemi docens, BME VBK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Biomérnöki alapképzés
BSc, 3. félév
laura.kovacs10@gmail.com

Anódpotenciál-vezérelt exoelektrogén mikroba-szelekció bioelektrokémiai rendszerekben

Kulcsszavak: áramtermelés; bioelektrokémiai rendszer; biofilm; elektródpotenciál; Geobacter

A bioelektrokémiai rendszerek egyik típusa a mikrobiális üzemanyagcella, melyben biológiai oxidáció révén elektromos áram állítható elő, és ez az energia ki is nyerhető. Az exoelektrogén mikrobákkal történő energiatermelés napjaink igen kedvelt kutatási témája, mivel alkalmazási területei igen szerteágazók lehetnek. Alkalmazzák őket többek között szennyvízkezelésben, energiatermelésben, szenzorikában, bioelektro-szintézisben.

A különböző kutatások során fontos szempontok a különböző elektród típusok közül az adott célnak leginkább megfelelők kiválasztása, az optimális cella kialakítása, a leghatékonyabb töltésátadás érdekében, és – talán a legfontosabb – a megfelelő mikroba kiválasztása, valamint a számára legkedvezőbb környezet kialakítása.

Ebben a dolgozatban azt vizsgáltam, hogy egy adott inokulumban található mikrobák közül a különböző, már jelenlevő fajok, eltérő anódpotenciál mellett hogyan alkalmazkodtak, és milyen összetételű konzorcium alakulhat ki az elektród felületén, tehát, hogy lehet-e ilyen módon kontrollálni egy létrejövő biofilm összetételét és szelektálni domináns fajokat.

Ezt a vizsgálatot két különböző anódpotenciál-értéken végeztem el, és az anódról nyert minták kielemezését követően egy átfogó képet kaptam arról, milyen összetételű lett a végső mikrobakonzorcium. A vizsgálat sikeresnek bizonyult *Geobacter anodireducens* exoelektrogén törzs irányított szelekciójára.

*Témavezető:
Dr. Nemestóthy Béla Nándor
egyetemi docens, PE MK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
biomérnök
BSc, 7. félév
luciamagasmarti@gmail.com

Reaktorfejlesztés exoelektrogén biofilm kialakítására és hidrogén bioelektrokémiai előállítására

Kulcsszavak: bioelektrokémia; reaktorfejlesztés; hidrogéntermelés

A bioelektrokémiai rendszerek olyan speciális bioreaktorok, amelyek a biológiai és elektrokémiai folyamatok társításával, hulladék anyagokból elektromos áram, bioüzemanyag vagy egyéb hasznos termék előállítására alkalmasak. Ezen rendszerek alkalmazása ígéretesnek bizonyul a hulladékgazdálkodás és a CO₂-kibocsátás csökkentés területén is.

A hatékony működéshez nélkülözhetetlen az elektród felületén biofilm kialakítása, mivel ezek biokatalizátorként funkcionálnak. Ennek hatékony megvalósítása érdekében standardizálható eljárások szükségesek. A reaktorok kialakítása szempontjából napjainkban kutatócsoportonként jelentősen eltérő, egyedi megoldások léteznek, amik azért nem előnyösek, mert mind geometriailag, mind gazdaságosság terén különbözőek, valamint nem utolsó sorban az eredmények összehasonlítása is problémás.

A bioelektrokémiai rendszerek alkalmazásuk terén is rendkívül diverzek lehetnek. Felhasználhatóak H₂ termelésére, mikrobiális üzemanyagcellaként, szintéziscellaként stb. Ehhez a többfunkciós celladizájn kialakítás a könnyebb működtetés szempontjából indokolt.

Kutatásom első felében egy biofilm növesztésére alkalmas, könnyen standardizálható, minden laboratóriumban elérhető alkatrészekből álló rendszert alakítottam ki. Munkám második felében az elkészített biofilmeket H₂ termelésre használtam fel. Ehhez 3D nyomtatott reaktortípus került kialakításra.

A felnövesztett biofilmek felhasználásával sikeresen előállítható volt H₂ gáz. Noha technikai kihívások továbbra is fennállnak, időszerű és praktikus lépés az összehasonlítható felépítésű reaktorok használata a bioelektrokémiai folyamatokhoz.

*Témavezető:
Dr. Nemestóthy Béla Nándor
egyetemi docens, PE MK*



MUCSI EDINA

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

biomérnök

BSc, 7. félév

edina.mucsi9@gmail.com

SZEGŐ ZSUZSANNA

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

biomérnök

BSc, 7. félév

zs.szego@gmail.com

Fajtaszelekciós módszertan kidolgozása gluténmentes diétába illeszthető zabfajták azonosításához

Kulcsszavak: zab; cöliákia; glutén; ELISA; HPLC

A cöliákia egy krónikus szisztémás autoimmun betegség, ami a populáció körülbelül 1%-át érinti, és amit az egyes gabonafélékben (búza, rozs, árpa) megtalálható glutén fehérjék váltanak ki. Egyelőre nem ismerünk a betegségekre más gyógymódot, mint az élethosszig tartó gluténmentes diétát. A diéta betartása azonban nem egyszerű feladat: az elsődleges kihívás a megfelelő, biztonságosan fogyasztható élelmiszerek beszerzése. A vásárlók a termék gluténmentességéről kizárólag annak címkézése alapján tájékozódhatnak. Az Európai Bizottság 828/2014/EU végrehajtási rendelete alapján egy élelmiszer akkor tekinthető gluténmentesnek, ha legfeljebb 20 mg/kg glutént tartalmaz.

Amennyiben a betegek hozzáférnek gluténmentes élelmiszerekhez, akkor is adódik a probléma, hogy táplálkozásuk bizonyos tápanyagokban hiányos, például rostban, vasban és B-vitaminban. Ezt orvosolhatná a különböző zabfajták bevezetése a diétába, azonban a zab cöliákiában, illetve gluténmentes diétában betöltött szerepe a mai napig vitatott kérdés. Több kutatás foglalkozott már a témával, felváltva bizonyítva a zabok ártalmatlanságát és lehetséges toxikusságát is.

Az évek során világossá vált, hogy a zabokkal kapcsolatban tapasztalt legtöbb problémát az alapanyag gluténnal való szennyeződése okozza. Ez bekövetkezhet a termék előállítása során bármikor, a természetből az aratáson és a feldolgozás át egészen a tárolásig. Ezért a 828/2014/EU rendelet külön foglalkozik a zabot tartalmazó élelmiszerekkel: gluténmentesnek nyilvánításuk feltétele, hogy előállításuk során 'tisztá' körülmények között dolgozzák fel őket, és gluténtartalmuk ne haladja meg a 20 mg/kg mennyiséget. Emellett viszont néhány zabfajtában azonosítottak saját toxikus epitópopokat is. A „tisztá” zabtermékek előállításának feltétele tehát, hogy a termesztésbe bevont fajták se egyéb gabonából származó kontaminációt, se saját toxikus fehérjéket ne tartalmazzanak.

Kutatásunk célja egy komplex analitikai módszertan kidolgozásával azon zabfajták kiválasztásának elősegítése, melyek javíthatják a cöliákiában szenvedők életminőségét. Ennek érdekében immunológiai módszerek alkalmazásán alapuló többlépcsős módszertant dolgoztunk ki a zabfajták szennyeződésmentességének igazolására, valamint esetleges saját toxikus epitópopok jelenlétének vizsgálatára. Megkezdtük továbbá egy elválasztástechnikai módszertan létrehozását, melynek segítségével felfedezhetők a fehérje-összetétel és az immunológiai eredmények közötti kapcsolatok.

Témavezetők:

*Dr. Kormosné Bugyi Zsuzsanna
egyetemi adjunktus, BME VBK*

*Dr. Tömösközi Sándor
docens, BME VBK*

Dr. Gell Gyöngyvér

tudományos főmunkatárs, MTA ATK Mezőgazdasági Intézet



Pécsi Tudományegyetem
Egészségtudományi Kar
Orvosdiagnosztikai Laboratóriumi Analitika
BSc, 10. félév
redzsi0823@gmail.com

Gyógy-és fűszernövények antioxidáns hatásának és flavonoid tartalmának spektrofotometriás vizsgálata

Kulcsszavak:

Célok: A gyógynövények és fűszernövények használata mindennapos. Az ilyen növények pozitív hatással vannak az emberi szervezetre, hatásuk abban rejlik, hogy antioxidáns hatással rendelkeznek. Vizsgálataink célja fűszer-és gyógynövények antioxidáns hatásának vizsgálata, valamint flavonoid-tartalom meghatározása volt.

Módszerek: Összesen 11 db kereskedelemben könnyen elérhető, a mindennapokban gyakran használt gyógy- és fűszernövényt vizsgáltunk. Antioxidáns hatás meghatározására irányuló vizsgálataink a hidrogén-peroxid semlegesítő képesség, vasredukáló képességen alapuló antioxidáns vizsgálat és DPPH* semlegesítésén alapuló vizsgálat voltak. Flavonoid-tartalom meghatározás céljából a következő módszereket alkalmaztuk: Folin-reaktivitás vizsgálat, flavanol tartalom meghatározása DMACA reagenssel, teljes flavonoid tartalom meghatározást két különböző módszerrel, alumínium-kloridos, valamint DNPH reagenssel. Minden módszer a méréseket spektrofotométerrel végeztük.

Eredmények: A flavonoid-tartalom meghatározásnál a négy módszerből három módszernél a fahéj volt a legmagasabb koncentrációban jelen, két esetben szignifikánsan ($p < 0,05$) magasabb koncentrációt mutatott a többi mintához képest. A négy módszer közül kettőnél a petrezselyem szignifikánsan a legkisebb koncentrációjú volt. Mind a három antioxidáns vizsgálatnál a bazsalikomnak volt a legnagyobb koncentrációja, a fokhagymának pedig kettő esetben a legkisebb. Az egyes módszerek között korrelációanalízissel sikerült összefüggéseket kimutatnunk.

Következtetések: A mérési módszerek alkalmasak a flavonoid tartalom, valamint az antioxidáns hatás jellemzésére gyógy- és fűszernövény minták esetében. A választott minták közül a fahéjnak van a legmagasabb flavonoid-tartalma, és a bazsalikomnak van a legmagasabb antioxidáns hatása, ezért fogyasztásuk kiemelten javasolt az egészség megőrzése érdekében.

Témavezetők:

*Dr. Stromájer-Rácz Tímea
adjunktus, mb. képzési igazgató, PTE ETK
Csöndör Éva
tanársegéd, PTE ETK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Biomérnöki
BSc, 7. félév
oroszag98@gmail.com

Potenciális antivirális oltóanyag fejlesztése vírus burokkfehérje és flagellin fuzionálásával

Kulcsszavak: flagellin; fúziós fehérje; DIII domén; oltóanyag adjuváns; rekombinációs DNS technika

A flagellin olyan bakteriális fehérje, mely képes az immunrendszer aktiválására azáltal, hogy erősen konzerválódott D1 doménje kölcsönhatásba lép a veleszületett immunrendszer receptoráival. A flavivírus egyszálú RNS vírus, melynek E burokkfehérjéjét felépítő egyik doménje, a DIII domén szerepet játszik a vírus gazdasejthez való tapadásában. A két fehérje összekapcsolásával olyan rekombináns fehérje hozható létre, mely képes aktiválni mind a veleszületett, mind a szerzett immunrendszert. Célom olyan fúziós fehérje konstrukció létrehozása melyet, ha sikerül termeltetni és oldható formába hozni, akkor a későbbiekben flavivírusok elleni oltóanyag prototípusa lehet.

A két fehérje összeépítése során a flagellin N0-D1 doménjét és a flavivírus E burokkfehérje DIII doménjét génszintézeti eszközökkel fuzionáltam. Első lépésként megterveztem a DIII domén flagellin N0D1-be építésének módját. A fúziós fehérjét kódoló plazmidok létrehozása után a fehérje termelését Salmonella és E. coli SHuffle sejtekben vizsgáltam.

Salmonellában termeltetve vizsgáltam a N0D1-flaviDIII fehérje tápközegbe való kijutásának mértékét. Az aggregáció csökkentése és a könnyebb tisztíthatóság érdekében megnéztem, hogy etanol, illetve NaCl tápoldatba adagolásával fokozható-e a fehérje szekréciója.

A hisztidin toldalékkal ellátott fúziós fehérjét a diszulfidhidak megfelelő kialakítását támogató E. coli SHuffle sejtekben is termeltettem. A feltárt sejtek felülúszójából nikkel affinitás töltetet tartalmazó pipettahegyekkel jelentős mennyiségű oldható fehérjét gyűjtöttem, amiből arra lehet következtetni, hogy ezzel a módszerrel az oltóanyag modell fúziós fehérje tesztelési célokra előállítható.

Témavezetők:

*Dr. Jankovics Hajnalka
tudományos munkatárs, PE MK
Kovács Noémi
tanszéki mérnök, PE MK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
BiomérnökMSc
MSc, 1. félév
solymosfanni@gmail.com

Hőkezelés hatása a zab technológiai tulajdonságainak és lipid romlási folyamatainak alakulására

Kulcsszavak: zab; hőkezelés; kromatográfia; reológia, minőségstabilitás

Az egészségtudatos táplálkozás, a lisztérzékenység, vagy egyéb, a sikefehérjékhez köthető rendellenesség miatt növekszik az alternatív gabonákból készült termékek iránti igény is. A zab kedvező tápanyagösszetétellel, jellegzetes rosttartalommal, magas lipidtartalommal, elfogadható technológiai tulajdonságokkal rendelkezik. Ugyanakkor jól ismert, hogy a lipid összetétele miatt az alapanyagban és a termékekben is enzimés és/vagy oxidatív bomlás játszódhat le, ami a tárolás során gyors romlást eredményezhet. Emellett a hőkezelés a makromolekulák, elsősorban a fehérjék és részben a keményítőmolekulák módosulásához, így technológiai viselkedésük megváltozásához vezethet, melyről kevés információ áll rendelkezésre a szakirodalomban.

Kutatásunk egy új, kisüzemi hántoló és hőkezelő berendezés fejlesztéséhez és beüzemeléséhez kapcsolódik. Célunk az ipari technológia vizsgálata volt, ami műszaki okok miatt megghiúsult. Ezért laboratóriumi kísérletet építettünk fel a zab szemtermés romlási folyamatainak tanulmányozására. A hántolt szemterméseket eltérő idejű és hőmérsékletű hőkezelési eljárásnak vetettük alá. A reológiai tulajdonságokat Mixolab készülékkel, a fehérje és keményítő molekulák összetételének változását méretkizárásos folyadékromatográfiás módszerrel vizsgáltam. Emellett tárolási kísérletet indítottam az őrlmények minőségstabilitásának vizsgálatára érdekében. A savszám és peroxidszám változásával követtem hidrolitikus bomlás és az oxidatív állapot változásának folyamatát.

Eredményeimből látható, hogy a reológiai jellemzők közül a fehérjékhez köthető dagasztási tulajdonságok változása volt jelentősebb, de a keményítőtől függő viszkozus tulajdonságok is módosultak. Ezek az eltérések részben magyarázhatók a molekulaméret eloszlás jellegzetes változásával is. A hőkezelés hatására értelemszerűen a savszám és a peroxidszám értékei is eltérőek a különböző mértékű kezelésen átesett mintákban. A tárolási kísérlet során azt tapasztaltuk, hogy a kontroll mintában mindkét jellemző folyamatosan nőtt, míg a kezeltéknél jelentősen kisebb változás volt megfigyelhető. A tárolási kísérleteket folytatjuk, illetve új zabfajtákat és hőkezelési beállításokat is tesztelünk a közeljövőben. A laborkísérletek eredményei segíthetik az üzemi tesztek technológiai paramétereinek kiválasztását, egyszerűsíthetik annak lebonyolítását, illetve közelebb juthatunk a hőkezelés és a tárolás során bekövetkező változások megértéséhez is.

Témavezetők:

Jaksics Edina

PhD hallgató, BME VBK

Dr. Tömösközi Sándor

egyetemi docens, BME VBK

Németh Renáta

tudományos segédmunkatárs, BME VBK



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésmérnöki mesterképzési szak
MSc, 3. félév
tothgergodaniel@gmail.com

Poli(vinil-alkohol) alapú prekursorok optimalizálása enzimeszpadázásra alkalmas nanoszálak előállítására

Kulcsszavak: nanoszál; poli(vinil-alkohol); enzim; csapdázás; biodízel

Kutatómunkánk során célul tűztük ki egy átfogó tanulmány készítését, melyben részletesen bemutatjuk a kereskedelemben kapható különböző molekulatömegű és hidrolizáltsági fokú szilárd poli(vinil-alkohol)okból előállítható eltérő koncentrációjú vizes prekursor oldatok elektrosztatikus szálképezhetőségének korlátait, valamint az előállított szálak nanostruktúrák enzimrögzítő képességét. Célunk volt továbbá megvizsgálni az így immobilizált modell enzim (*Burkholderia cepacia* lipáz) katalitikus aktivitásának és a szálképzés körülményeinek kapcsolatát. Végezetül célunk volt, a rögzített lipáz enzim segítségével sütőolaj biokatalizált metanolízisével jó minőségű bioüzemanyagot előállítani.

Előállítottuk a célkitűzésben megfogalmazott tulajdonságokkal rendelkező egységes, homogén nanoszálak szerkezetű mátrixokat. Megállapítottuk a szálképzés prekursor oldatának előállításához felhasznált PVA molekulatömegének, hidrolizáltsági fokának, valamint a prekursor oldat koncentrációjának hatását a szálmorfológiára, valamint az oldatok reológiai tulajdonságaira. Feltérképeztük széles tartományban a PVA szálképezhetőségét, és megállapítottuk annak technológiai korlátait. Immobilizáltuk a választott modell lipáz enzimet a kialakított nanoszálakba beágyazásos módszerrel. Vizsgáltuk prekursor enzimtartalmának hatását a szálszerkezetre és az oldat viszkozitására. A kinetikus reszolválási kísérletek eredményeiből kimutattuk, hogy a PVA hidrolizáltsági foka, molekulatömege és koncentrációja jelentősen befolyásolja a nanoszálba ágyazott lipáz biokatalitikus aktivitását. A szálképzés körülményeinek gondos megválasztásával sikerrel állítottunk elő olyan biokatalizátor-készítményt, mely a módosíthatatlan modell lipáz fajlagos aktivitásának több, mint tízszeresével rendelkezett.

A biodízel előállítására irányuló kísérletekben láttuk, hogy a kialakított polimer mátrix hatékonyan képes megvédeni a bele csapdázott enzimet a környezetével szemben, így a lipáz metanolos közegben is képes volt jelentős aktivitás kifejtésére. Láthattuk továbbá, hogy a kialakított PVA mátrix hőstabilitása alacsony. Ezt nagy valószínűséggel javítaná, ha keresztkapcsoló reagens (pl. glutáraldehid) segítségével kovalens keresztköteket alakítanánk ki a PVA molekulák között. Ez az eljárás csökkenthetné továbbá a PVA vízoldhatóságát, így lehetővé tenné, hogy a katalizátor-készítményt vizes közegű reakció katalíziséhez is felhasználjuk.

Témavezetők:

*Dr. Balogh-Weiser Diána
adjunktus, BME VBK*

*Dr. Hornyánszky Gábor
egyetemi docens, BME VBK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
biomérnöki
BSc, 7. félév
otii98@gmail.com

Flavivírus burokfehérje kötő doménjének rekombináns előállítására célmolekulaként irányított evolúcióhoz

Kulcsszavak: flavivírus; burokfehérje; rekombináns DNS technika; riboszóma display; vírus diagnosztika

A flavivírusok a Flaviviridae családból származó egyszálú RNS vírusok, melyek olyan súlyos betegségek okozói, mint a Nyugat-nílusi láz, a Dengue láz, a Sárgaláz vagy az Omszk vérzéses láz. A flavivírusok hordozói az ízeltlábúak, főként a szúnyogok és a kullancsok. A mediterrán országokban, valamint főként Afrikában és Brazíliában okoznak járványokat. A betegség a legtöbb esetben enyhe lefolyású, de kezelés nélkül sok esetben halált okoz. A flavivírusok mindegyike rendelkezik az „E” burokfehérjével, melynek DIII-doménje, ismeri fel és köt a fertőzni kívánt sejt felszínéhez. A felgyógyult egyedek szervezetében megjelenő flavivírus antitestek a vírus kimutatására ugyan használhatók, izolálásuk viszont körülményes és mennyiségük sem elégséges.

A vírusfertőzés korai diagnosztizálására lehet kiváló alternatíva fehérje könyvtárból riboszóma display segítségével szelektált, egy a DIII doménhez erősen kötő molekula. A szelekcióhoz a DIII-domént, tiszta, oldható és rögzíthető formában kell előállítani. A Ni(II)-ionokat tartalmazó hordozóra rögzítés a DIII valamelyik terminálisára fuzionált hisztidin aminosavak segítségével valószínűsíthető.

TDK munkámban a flavivírus burokfehérje DIII-doménjét kódoló DNS molekula tervezését, génszintézisi módszerekkel történő módosítását, a fehérje expressziójának és termeltetésének optimalizálását mutatom be. Annak érdekében, hogy a riboszóma display során a fehérje jól hozzáférhető legyen, kétféle konstrukciót hoztam létre: a flavivírus burokfehérje DIII-doménjét kódoló DNS-t olyan plazmidokba építhetőre terveztem, melyek a szintetizálendő fehérje N- illetve C-terminális végére polihisztidint fuzionálnak. Ez a peptid az affinitáskromatográfiás tisztítást és a felületre rögzítést is lehetővé teszi. A fehérjét kódoló vektort génszintézisi módszerekkel hoztam létre és bejuttattam a diszulfid hidak megfelelő kialakítását elősegítő E. coli törzsbe. Ezután kidolgoztam a fehérje expressziójának és termeltetésének optimális protokollját. A fehérje hőstabilitását cirkuláris dikroizmus mérésével vizsgáltam. Az általam előállított egyik variáns célmolekulaként való felhasználása során bekapcsolódtam a riboszóma display-jel és szelekciós lépésekkel kombinált irányított evolúciós kísérletekbe is.

*Témavezető:
Dr. Jankovics Hajnalka
tudományos munkatárs, PE MK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
biomérnöki
MSc, 3. félév
mail.dora.varga@gmail.com

In vitro toxikológiai májmodellek: HepG2 és HepaRG sejtvonalak alkalmazhatósága

Kulcsszavak: toxikológia; in vitro modellezés; acetaminofen; máj; HepaRG

A gyógyszer-indukált májkárosodás gyakori oka a késői stádiumú klinikai vizsgálatok bukásának, a gyógyszer piacról történő kivonásának és az akut májelégtelenségnek. A klinikai gyógyszer által kiváltott májkárosodás előrejelzése komoly kihívás, kiemelt jelentőséggel bír a fejlesztés minél korábbi szakaszában, mind gazdasági, mind egészségügyi szempontból. A toxicitási vizsgálatok általános megközelítése összetett in vivo vizsgálatokat foglal magában, a kísérleti állatok farmakológiában és toxikológiában történő felhasználása a múlt évszázadra nyúlik vissza. Ezek a kísérletek azonban egyrészt időigényesek, költségesek és felmerülnek az állatok jólétével kapcsolatos kérdések, másrészt gyakran gyenge a megfeleltethetőség az állati és az emberi szervi toxicitások között. Napjainkban egyre növekvő igény van a kísérleti állatok alkalmazásának kiváltására. A preklinikai hepatotoxicitás vizsgálatánál gyakran alkalmaznak in vitro, sejtes alapú modelleket. A fajok közti toxicitási válasz eltérése miatt az humán eredetű sejtvonalak alkalmazása célszerű. Az in vitro modellekben használt máj- és májsejt-szerű sejtek lehetnek például primer májsejtek vagy hepatóma sejtvonalak, de ezek életképessége korlátozott, vagy génexpressziója és funkciója a májsejtektől jelentősen eltér, így alkalmazhatóságuk korlátozott. Számos lehetőség közül a háromdimenziós (3D) modellek és az őssejtből származó modellek is jelentős érdeklődésre számot tartó területekké váltak. Megfelelő toxikológiai modellrendszerek kialakítása nem könnyű feladat, de jelentősen segíti a toxikológiai vizsgálatok eredményességét.

A munkánk célja különböző sejtes toxicitási modellek összehasonlítása és toxikológiai alkalmazhatóságának vizsgálata. A kísérletek során acetaminofen indukálta sejthalál folyamatokat vizsgálunk különböző 2D és 3D sejtenyésztési rendszerekben fenntartott HepaRG (humán máj progenitor sejtvonala) és HepG2 (humán hepatokarcinóma) sejtvonalakon. Az acetaminofen indukálta májsejt pusztulás napjaink leginkább elfogadott modellje a májkárosodás tanulmányozására.

*Témavezető:
Dr. Szarka András
egyetemi tanár, BME VBK*





Elméleti kémia



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 2. félév
barcza.bonis@gmail.com

Multipólus közelítés vizsgálata intermolekuláris kölcsönhatás leírására

Kulcsszavak: multipólus sorfejtés; intermolekuláris kölcsönhatás; QM/MM

Dolgozatomban molekulák között fellépő kölcsönhatásokat vizsgáltam, különböző közelítő modellek segítségével, két példán keresztül: a pirrol–pirrol, illetve uracil–citozin molekulakomplexek sandwich stacked konformációiban. A használt referencia mindkét esetben a teljes rendszerre végzett CCSD(T) szintű kvantumkémiai számítás volt, counterpoise korrekcióval.

A kutatócsoport által használni kívánt, DNS molekulák leírására szolgáló közelítés során az egyik monomert ponttöltésekkel ábrázoljuk, majd ezek terében végzünk kvantumkémiai számítást a másik molekulára (QM/MM modell). Az így kapott potenciálisenergia-görbékét összehasonlítottam a tér multipólus sorfejtéséből származó momentumok, a ponttöltések közti kölcsönhatások adta eredménnyel.

A ponttöltéseket populációanalízisekből (Mulliken, IAO), illetve irodalmi erőterekből (CGenFF, GAFF, Drude, OPLS-AA) vettem. A multipólus sorfejtés hibájának szemléltetésére egy egyszerű modellrendszert is felállítottam. Végezetül diszperziós erők leírására használt, atomi erőterekből származó Lennard-Jones potenciál hatásával is számoltam.

Az egyszerű QM/MM számítással taszítást, míg a dipólus momentumaik, és a referencia értékek vonzást mutatnak a pirrol-pirroldimer esetén. Ezt az ellentmondást vizsgáltam dolgozatom során.

A multipólus sorfejtés kvadrupólusokig való figyelembevételével visszakaptam a QM/MM eredményeket, azonban egy egyszerű modellrendszeren végzett számítások alapján előbbi kis molekulaszeparáció esetén divergál. A Lennard–Jones korrekció feloldotta az elektrosztatika, és a referenciaszámítások közti különbséget. Széles távolságtartományban folytatott vizsgálatok megmutatták, hogy kis szeparációnál a pirrol-pirroldimernél diszperziós, míg a citozin–uracil esetén az elektrosztatikai kölcsönhatások dominálnak. Előbbi esetben az egyszerű QM/MM modell nem alkalmas a komplex vizsgálatára.

*Témavezetők:
Dr. Szalay Péter
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Tajti Attila
tudományos munkatárs, ELTE TTK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
vegyész
MSc, 4. félév
gbalazs96@gmail.com

A OH + CH₄ és C₂H₆ reakciók tanulmányozása a standard kvantumkémiaán túl

Kulcsszavak: PES; MP2; CCSD(T)-F12b; átmeneti állapot; minimum

Dolgozatomban a OH + CH₄ és C₂H₆ reakciók potenciális energia felületeit (PES) vizsgáltam kvantumkémiai módszerek segítségével. Az egyes reakciók esetén megkerestem a PES-ek fontosabb stacionárius pontjait, az átmeneti állapotokhoz tartozó nyeregpontokat, valamint a termékekhez tartozó minimumokat. A szerkezetek optimalítása és a harmonikus frekvenciaszámítás három különböző kvantumkémiai szinten történt. Ezt követően „single point” energiaszámolásokat végeztem a legpontosabb geometriákon. Továbbá különféle korrekciós számolásokat is figyelembe vettem: ún. törzs, δT , $\delta(Q)$, skaláris relativisztikus, illetve spin-pálya korrekciókat. A OH + CH₄ reakció esetén két reakcióutat vizsgáltam: hidrogén absztrakciót és hidrogén-szubsztitúciót, a OH + C₂H₆ esetén pedig hármat: hidrogén-absztrakciót, hidrogén-szubsztitúciót és metil-szubsztitúciót. A szubsztitúciós reakcióknál kétféle mechanizmust különböztettem meg: Walden-inverziós és előlről támadásos reakciócsatornákat.

Eredményeim alapján a OH + CH₄ reakciónál a hidrogén-absztrakció jóval alacsonyabb energián játszódik le, mint a hidrogén-szubsztitúció. Míg a hidrogén-absztrakció exoterm, addig a hidrogén-szubsztitúció már endoterm jelleget mutat. A OH + C₂H₆ reakciót tekintve szintén a hidrogén-absztrakciós reakcióút rendelkezik a legalacsonyabb energiával, melyet a metil-szubsztitúció követ, és legmagasabb energiával a hidrogén-szubsztitúció játszódik le. Az első két reakció exoterm, míg a hidrogén-szubsztitúció már endoterm. A továbbiakban az egyes stacionárius pontokhoz tartozó szerkezetek paramétereit is alaposan elemeztem, majd a Hammond-posztulátum érvényességét is megvizsgáltam.

*Témavezető:
Dr. Czako Gábor
egyetemi docens, SZTE TTIK*



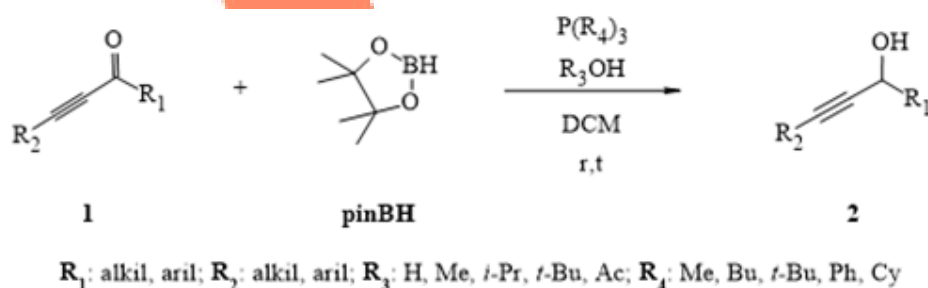
α,β -telítetlenséget tartalmazó inon-vegyületek 1,2-redukciójának vizsgálata

Kulcsszavak: DFT-számítás; mechanizmus vizsgálat; inon-vegyületek; 1,2-redukció

A modern szintetikus kémia nagy hangsúlyt fektet szelektív reakciók kidolgozására, miközben alternatív, átmenetifémet nem tartalmazó katalizátorok is előtérbe kerülnek. Alkalmazásukkal számos esetben helyettesíthetőek lehetnek az átmenetifémek, így megvalósíthatóak környezetbarátabb, enyhébb körülmények között végbemenő reakciók.

Kutatómunkám során inon-vegyületen (1. ábra 1) végzett 1,2-redukciót vizsgáltam számítási kémiai módszerekkel, melyhez hasonló, telítetlenséget tartalmazó vegyületeket a szakirodalomban elsődlegesen szintén komplex átmenetifémekkel katalizáltak alkohollá (1. ábra 2), ipari szempontból kedvezőtlen körülmények között. Két friss tanulmány szerint azonban szobahőmérsékleten megvalósítható a reakció szelektíven, trialkil-foszfán katalizátorral és az enyhe redukáló ágensként funkcionáló pinacol-boránnal (1. ábra pinBH). Céloom a reakció mechanizmusának feltérképezése volt DFT számítások segítségével, melyhez a 4-fenilbut-3-in-2-ont választottuk kiindulási modellvegyületnek, a katalízishez trimetil-foszfánt, illetve metanolt prótikus additívként, melynek szerepe a melléktermékek keletkezésének visszaszorításban jelentős.

Először a kísérleti eredményeket tartalmazó tanulmány alapján feltételezett mechanizmust kísérletem meg alátámasztani, melyet kiegészítettem általam javasolt reakcióutakkal is, továbbá kiterjesztettem a számításokat a prótikus additív szerepének vizsgálatára és fontosabb melléktermékek keletkezésére is.



1. ábra: Inon-származékok redukciója pinacolboránnal, foszfán-katalizátor jelenlétében

Témavezetők:
 Dr. Kelemen Zsolt
 egyetemi adjunktus, BME VBK
 Buzsáki Dániel
 tudományos segédmunkatárs, BME VBK



Eötvös Loránd Tudományegyetem
 Természettudományi Kar
 vegyész
 MSc, 1. félév
 2322132i@student.gla.ac.uk

Integrals for lower bounds to the exact energy

Hungarian Keywords: alsó korlát; ultrapontos számítások; expliciten korrelált bázisfüggvények

The analytical solutions to quantum few-body systems are rarely found meaning that, for atoms and molecules, stationary states are found by numerical computations. If high precision is required then the computations can be expensive and, in contrast to experiment, it can be difficult to attach rigorous error bounds to results. The exact energy of quantum states can be estimated using the variational method, which provides an upper bound to the exact energy. Achieving lower bounds of comparable quality to upper bounds would then provide an energy range within which the exact energy eigenvalue would reside. The formal theory of lower bounds is well established, but the numerical application to systems occurs less frequently compared to that of upper bounds.

In this report I explore two methods for calculating lower bounds to the exact energy, the Weinstein criterion and Temple's bound, both of which rely on the variance of the upper bound energy, σ_E^2 . In order to calculate σ_E^2 , the matrix elements of the Hamiltonian squared, H^2 , are required which take the form of multi-dimensional integrals. My research focuses on the collection, consideration, and derivation of the matrix elements of H^2 for an explicitly correlated Gaussian (ECG) basis set. Most of these integrals have known solutions, though there are some for which analytical solution have not been found in literature.

I determine solutions for two-electron systems for the matrix element $\langle \phi_k | 1/(r_{ij}^2) | \phi_l \rangle$ using floating Explicitly Correlated Gaussian (FECG) basis sets, and for n-electron systems for the matrix element $\langle \phi_k | 1/(r_{ij} r_{pa}) | \phi_l \rangle$ using ECG basis functions. A one-dimensional integral expression for the matrix element $\langle \phi_k | 1/(r_{ij} r_{pa}) | \phi_l \rangle$ using FECG basis functions is also found. I have since implemented these integral expressions in the integral library of the QUANTEN computer program, and first tests are in progress.

*Témavezetők:
 Dr. Mátyus Edit
 adjunktus, ELTE TTK
 Dr. Jeszenszki Péter
 tudományos munkatárs, ELTE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
jelenfidavid96@gmail.com

Az 1,4-diaminobenzol vezetőképességének vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel

Kulcsszavak: kvantumkémia; molekuláris vezetőképesség; Coupled Cluster; molekuláris elektronika; 1,4-diaminobenzol

A molekuláris vezetőképesség vizsgálata fontos szerepet játszik a molekuláris elektronikai egymolekulás csomópontok tervezésében, valamint jelentősége lehet biológiai rendszerekben zajló jelátviteli folyamatok során is. A kísérleti eredmények magyarázatára szolgáló elméleti modell fő alkotóeleme a molekula elektronállapotai és magmozgásai közötti csatolódások leírása. Az irodalomban elterjedt megközelítés a molekuláris vezetőképességet a sűrűségfüggvény elmélet szintjén számítja, a vezetés mechanizmusát pedig a molekulapálya kép keretein belül tárgyalja.

Céлом a molekuláris vezetőképesség pontosabb megértéséhez szükséges kvantumkémiai metodológia kidolgozása volt, a korábban sokat vizsgált 1,4-diaminobenzol példáján. A vezetés mechanizmusának feltárásához a molekulapályák helyett az elektronbefogott állapotokat választottam, melyek olyan elektronállapotok, amelyekben a környezetből a rendszerre egy további elektron fogódik be. Ezen állapotok leírásához bevezettem a kontinuum pálya stratégiát, melyben azok formálisan a kontinuum pályáról történő gerjesztéseként számíthatók a kvantumkémia bármely elméleti szintjén, amely képes gerjesztések leírására. A számításokhoz a Coupled Cluster modell CC2 és CCSD módszereit alkalmaztam.

A molekula mellé az elektródok reprezentálása céljából két aranyatomot helyezve, a rendszer azon belső mozgásait kerestem, amelyek a molekulára és az elektródra lokalizált elektronbefogott állapotokat degenerálttá tehetik, így az elektron energiagát-mentesen juthat át a molekulán. Ezen mozgás megtalálásához háromféle szerkezetváltozást vizsgáltam. A molekulára lokalizált állapot minimális energiájú szerkezetébe mutató irány mentén a vizsgált állapotok energiakülönbsége kevesebb, mint felére csökken, de nem szűnik meg. A megfelelően választott normálrezgés mentén, ez az energiakülönbsége bár kisebb mértékben csökken, az optimálással kapott elmozdulás és a molekula normálrezgései közötti kapcsolat egyértelműen megállapítható. Az elektródra és a molekulára lokalizált állapotok ún. különbség-gradiensének optimálásával sikerült az egyensúlyi szerkezethez legközelebbi degenerált pozíció megtalálása is. A kapott belső mozgások összehasonlításával elmondható, hogy a megfelelő normálrezgések lineáris kombinációjával valószínűleg elérhető a molekula vezetési állapota. Sikerült bizonyítanom, hogy a molekula normálrezgései és a vezetésben részt vevő elektronbefogott állapotok energetikai változásai között egyértelmű kapcsolat áll fenn.

*Témavezető:
Dr. Tajti Attila
tudományos munkatárs, ELTE TTK*



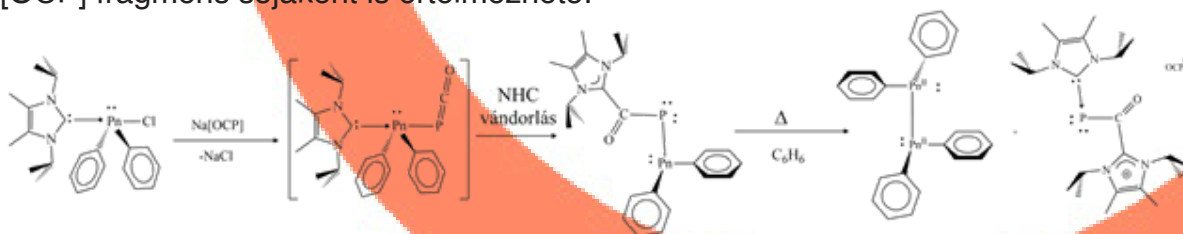
Bizmut- és antimonhelyettesített foszfaketének szerkezete és reaktivitása

Kulcsszavak: foszfaketén; pniktogén; karbén; NHC-átrendeződés; reakciómechanizmus

A fémorganikus és koordinációs kémia területén az elmúlt pár évtizedben élénk érdeklődés övezi a pniktogén csoport legnehezebb elemét, a bizmutot. Ezen elem vegyületeinek szintézise azonban kihívást jelent, egyrészt a hidrolízis, másrészt a Bi^{3+} ionok könnyű redukciója következtében. Az utóbbi időben több Bi-tartalmú karbén komplexet sikerült előállítani és a karbénligandum jelentős stabilizáló hatással bír. A foszfaketének (R-P=C=O) régóta ismert vegyületek, ám az előállításuk csak az utóbbi időben vált egyszerűvé, ugyanis a 2-foszfaet inolát anion $[\text{OCP}]^-$, mint prekursor alkalmas lehet foszfaketének előállítására. Robert J. Gilliard kutatócsoportjával együttműködésben bizmut- és antimontartalmú foszfaketén komplexeket, illetve az ezekhez vezető reakciók mechanizmusát vizsgáltam.

Munkám célja difenilpniktogén-kloridok ($\text{Pn}=\text{Sb, Bi}$) és egy N-heterociklusos karbén, NHC, reakciója során keletkező kloro-komplexek, majd ezen vegyületek $\text{Na}[\text{OCP}]$ -tal történő metatézisével kialakuló difenilpniktogén–foszfaketén komplexek jellemzése. (1. ábra) Továbbá céлом ezen foszfaketén komplexeken végbemenő átrendeződési folyamat termodinamikai értelmezése, illetve a keletkező foszfaketén-adduktok termikus redukciójának számításos kémiai vizsgálata, különösen a mechanizmust és a keletkező $[(\text{NHC})_2\text{OCP}][\text{OCP}]$ ionpárt illetően.

Összefoglalva elmondható, hogy sikerült az előállított karbén-stabilizált difenil-pniktogén foszfaketének szerkezetét értelmezni, valamint feltérképezni a valószínűsíthető reakciómechanizmust. A termikus redukció vizsgálata során a korábban leírt 13. és 14. csoportbeli elemektől eltérően, eddig az irodalomban példa nélküli $[(\text{NHC})_2\text{OCP}][\text{OCP}]$ és Pn_2Ph_4 termékek képződtek. Ezen ionpár érdekessége, hogy tulajdonképpen egy $[\text{OCP}]^-$ anion és két karbén által stabilizált, formálisan kationos $[\text{OCP}]$ fragmens sójaként is értelmezhető.



1. ábra A vizsgált reakciók

Témavezető:
 Dr. Benkő Zoltán
 egyetemi docens, BME VBK



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnök
 BSc, 7. félév
 mate.kovacs.3@gmail.com

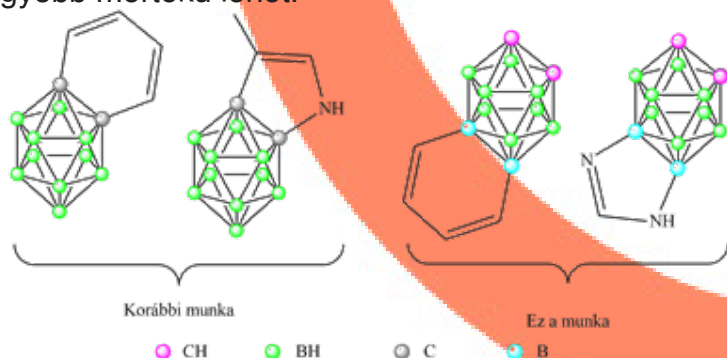
Kölcsönhatás 2D (π) és 3D (σ) aromás rendszerek között a karborán vegyületeiben

Kulcsszavak: elméleti kémia; karborán; aromás; konjugáció; NICS

Az elmúlt években számos publikáció jelent meg a 2D és a 3D aromás rendszerek közötti kölcsönhatásokról karboránt tartalmazó rendszerek esetében. A publikált molekulákban, a 2D gyűrűk a karborán szénatomjain keresztül kapcsolódnak a klaszterhez. Felmerült a kérdés, hogy hogyan valósul meg a konjugáció egy π - és egy döntően σ -aromás rendszer között, ha a gyűrű a bóratomokon keresztül kapcsolódik.

A munkám során célul tűztem ki, hogy megvizsgáljam, miként befolyásolja a karboránhoz kapcsolódó kondenzált gyűrűs rendszer aromásságát a kötődő atomok kapcsolódó kondenzált gyűrűs rendszerek minősége. Az irodalomból már említett szénatomokon át kapcsolódó gyűrűs rendszerek mellett vizsgáltam azt is, amikor a gyűrű az o-karboránok széntől távol eső bóratomjain át kapcsolódik. Ahhoz, hogy megállapítsam, hogyan befolyásolják a karborán lehetséges izomerei az aromásságot vizsgálataimat kiterjesztettem a megfelelő meta- és para-karborán származékokra is. Összesen 16 gyűrű aromásságát vizsgáltam a fenti izomerek esetében geometriai, energetikai és mágneses kritériumok alapján.

Habár az említettek közül a geometriai vizsgálatok nem zárultak eredménnyel, a vizsgálathoz felhasznált izodezmikus reakciók reakcióenergiái és a mágneses tulajdonságok leírására használt NICS értékek megfelelő jellemzői voltak a rendszerek kialakult aromásságának. Azt találtam, hogy a bóron keresztül kapcsolódó gyűrűk aromássága összemérhető a (már vizsgált) szén atomokon keresztül kapcsolódókéval, sőt elméleti számítások alapján az orto-karborán esetében ez még nagyobb mértékű lehet.



Témavezető:
 Dr. Kelemen Zsolt
 egyetemi adjunktus, BME VBK



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
lgergo45@gmail.com

Penténsavahalogénezéses gyűrűzárásának vizsgálata számítógépes kémiai módszerekkel

Kulcsszavak: penténsav; halociklizáció; mechanizmus; számításhoz kémia; halogénkötés

Ishihara és munkatársai foszfin-katalizátorokkal állítottak elő penténsav-származékokból jodolaktonekat [1]. A katalizátorok királis változatait alkalmazva nagy enantioszelektivitást értek el. Jelenleg folyó kutatásainkban ezen reakciók mechanizmusát igyekszünk felderíteni számítógépes kémiai módszerekkel. Tudományos diákköri dolgozatomban egy olyan előtanulmány eredményeit mutatom be, melyek modellreakciókra vonatkoznak.

A reakciót először egyszerűbb jódforrással (bisz(piridin)-jodónium) és szubsztráttal (pent-4-énsav) modelleztük, hogy felderítsük a karbonsavak gyűrűzárásának lehetséges módjait. Négy lehetséges mechanizmust vizsgáltunk, melyek közül a legkedvezőbb a karbonil oxigéneken keresztüli gyűrűzárás, melyet a hidroxilcsoport és a piridin közti hidrogénhid nagy mértékben elősegít. A reakció sebességmeghatározó lépése ebben az esetben nem a gyűrűzárás, hanem a bisz(piridin)-jodónium disszociációja, mely az apoláris toluol oldószerben nagyon kedvezőtlen. Megvizsgáltuk a cisz addíció lehetőségét is, mely során a jodónium és az oxigén a kettős kötés azonos oldalára addíciónálódik, azonban ehhez magasabb gát tartozott, mint a közismert, transz gyűrűzáráshoz.

Ezután számításokat végeztünk az N-jódszukcinimid (NIS) és az 5-benzilpent-4-énsav reakciójára is, melyet a kísérletek szerint trifenil-foszfin katalizál. Megállapítottuk, hogy nem lehetséges olyan mechanizmus, melyben az NIS a katalizátornak átadja a jodóniumot, mert a keletkező ionpár apoláris közegben nem képes disszociálni. Megmutattuk, hogy a szubsztrát nem kaphatja közvetlenül az NIS-től a jódot, mert ehhez a reakcióúthoz báziskatalízis esetén is magas gát tartozik. Feltételezésünk szerint lehetséges egy olyan reakcióút, ahol az NIS katalizátorral képzett komplexéről a szukcinimid nem disszociál, hanem más szögben koordinálva hozzáférhetővé teszi a jódot. Ebből a komplexből eddig csak kedvezőtlen, cisz addíciót sikerült modelleznünk. A továbbiakban a transz addíciós reakcióutat kívánjuk megvizsgálni abban a reményben, hogy a kísérleti tapasztalatokkal összhangban levő gátat kapunk. Ha ez sikerül, áttérhetünk a legizgalmasabb célkitűzésre, az enantioszelektivitást meghatározó tényezők feltárására.

[1] Nakatsuji, H., Sawamura, Y., Sakakura, A., Ishihara, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 6974–6977 (2014)

*Témavezető:
Dr. Pápai Imre
kutatócsoport-vezető
Természettudományi Kutatóközpont*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnöki
 BSc, 7. félév
 lorinczbalazs98@gmail.com

Foszfortartalmú ambidens nukleofilek reaktivitásának kvantumkémiai vizsgálata

Kulcsszavak: foszforkémia; kvantumkémia; ambidens; nukleofil

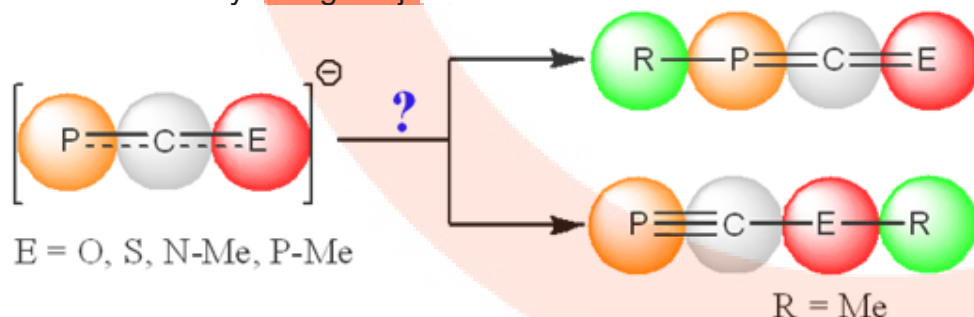
Napjainkra a foszforkémia jelentős kutatási területté nőtte ki magát, mely mind a kísérleti, mind az elméleti kémikusok számára kihívásokat jelent. Ennek oka, hogy a foszfor változatos kötésviszonyokat képes kialakítani, valamint különféle módokon képes beépülni szerves kémiai rendszerekbe. Gyakran a P centrumot nukleofil támadással alakítják át, melyhez például foszfor trihalogenideket alkalmaznak elektrofilként. Újabban viszont kezd elterjedni foszfor nukleofilek alkalmazása, például a 2-foszfet inolát anion, OCP^- , napjainkban számos kutatásban megjelent, mint nukleofil.

Dolgozatom témáját négy foszfortartalmú ambidens nukleofil adja, melyek a kettős nukleofil centrum következtében akár molekuláris kapcsolóként működhetnek: a reakció körülményeit megfelelőre választva hol egyik, hol másik ambidens centrum „hozható működésbe” és ezeken keresztül változatos szerkezetű termékek állíthatók elő.

Célom, hogy feltérképezsem az $[\text{OCP}]^-$, a $[\text{SCP}]^-$, az $[\text{Me-NCP}]^-$, valamint a $[\text{Me-PCP}]^-$ metilezési reakciójának termodinamikáját és kinetikáját, melyhez a számítási kémia eszköztárát alkalmazom. Vizsgálom továbbá a lehetséges két izomer termodinamikai stabilitását míg a kinetikai becsléseket a Marcus-elmélet segítségével végzem.

A geometriák tanulmányozásán felül NBO-, valamint Bader-analízist használok, mellyel a terminálisan szubsztituált rendszerek, azaz az R-P=C=E és izomerje, a $\text{P}\equiv\text{C-E-R}$, illetve a szubsztituálatlan anionok elektron-, és kötésszerkezetét, valamint töltéseloszlását tanulmányozom.

A dolgozatban megmutatom, hogy nem csak az $[\text{OCP}]^-$, de a másik három rendszer is hasonló ambidens karakterrel rendelkezik. Továbbá a Marcus-elmélet a HSAB-elmélettel összhangban ugyanazt az eredményt szolgáltatja a kinetikai leírásban.



Témavezető:
 Dr. Benkő Zoltán
 egyetemi docens, BME VBK



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnöki
BSc, 5. félév
szalaymate98@gmail.com

Szén-dioxid redukciójának mechanizmusa Cu₄ klaszteren

Kulcsszavak: szén-dioxid; redukció; rézklaszter;

A közelmúltban a fémklaszterek a nanotudomány egyik legérdekesebb és legígéretesebb anyagai-vá váltak, mert fizikai és kémiai tulajdonságaik jelentősen eltérnek az azonos atomokból álló tömbi anyagokétól. Az atomok kis száma miatt a fémklaszterek diszkrét energiaszintekkel rendelkeznek, így tulajdonságaik erősen méretfüggők, hiszen már egyetlen atom hozzáadása is jelentősen befolyásolja az elektronszerkezetüket. A méret- és összetétel-függő kémiai tulajdonságaik miatt igen ígéretesek a katalitikus alkalmazásaik, többek között hatékony szén-dioxid redukció megvalósításához is hozzájárulhatnak [1–3]. Egy közelmúltban megjelent publikáció szerint a rézklaszterek jól katalizálják a szén-dioxid termikus hidrogénezését [4], azonban az azóta folyó intenzív kutatások ellenére a reakció részletes mechanizmusa nem ismert.

Munkám célja a CO₂ gázfázisú Cu₄ klaszter által termikusan katalizált hidrogénezés reakciómechanizmusának felderítése és bővebb megértése, sűrűség funkcionál elméleten alapuló számításokkal. Az eredményeim azt mutatják, hogy a CO₂ és a H₂ is gát nélkül kötődik a klaszterhez, azonban a reakcióút kedvezőbb, ha a H₂ disszociatív adszorpciója történik az első lépésben, és csak utána kötődik a CO₂ a klaszterhez. Következő lépésként az egyik disszociált hidrogénatom vándorlása révén a rézklaszter előszeretettel katalizálja egy igen stabil formiát-réz komplex kialakulását. Iparilag felhasználható vegyületté, hangyasavvá, egy 232 kJ/mol-os gáton át lehetséges az átalakítás. A továbbiakban egyéb ötleteket vetettem fel a gát csökkentésére (pl.: rézklaszter telítése hidrogénnel), és valamennyi szerkezet esetében a klaszter-szubsztituens közti nemkovalens kölcsönhatásokat, illetve a komplexek pályáit vizsgáltam a stabilitások és a mélyebb reakciómechanizmus megértése céljából.

Összefoglalva megállapítható, hogy a Cu₄ klaszter katalizálja a CO₂ redukcióját iparilag jelentős terméké, hangyasavvá. További célom a gát csökkentésének, a rézklaszter katalitikus aktivitás méretfüggésének, illetve különböző dópoló atomok hatásának felderítése.

[1] P. Serp, K. Philippot; *Nanomaterials in Catalysis*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2013.

[2] Z. Luo, A. W. Castleman, Jr., S. N. Khanna, *Chem. Rev.* 2016, 116, 14456-14492

[3] P. Braunstein, L. A. Oro, P. R. Raithby – *Metal Clusters in Chemistry*. volume 1-Wiley-VCH (2000)

[4] C. Liu, B. Yang, E. Tyo, S. Seifert, J. DeBartolo, B. von Issendorf, P. Zapol, S. Vajda, L. A. Curtiss *JACS*. 2015, 137, 27, 8676–8679

Témavezetők:

Barabás Júlia

tudományos segédmunkatárs, BME VBK

Dr. Hóltzl Tibor

*fejlesztőmérnök, címzetes egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*





Fizikai kémia I.



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
vegyésmérnöki alapszak
BSc, 6. félév
dora.bucsai@gmail.com

Kén-hidrogén–alkán elegyek adszorpciós elválasztásának molekuláris szimulációs vizsgálata csak szilíciumot tartalmazó zeolitokon

Kulcsszavak: zeolit; adszorpció; kén-hidrogén; molekuláris szimuláció

Számos ipari folyamatban a gázelegyek kén-hidrogén-tartalmának eltávolítása gazdasági és környezetvédelmi szempontból is kulcsfontosságú. A kén-hidrogén elválasztására jelenleg az abszorpción alapuló módszerek a legelterjedtebbek, azonban az utóbbi időben előtérbe kerültek adszorpción alapuló technikák is, amelyekkel környezetet jobban kímélő és energiahatékonyabb eljárások valósulhatnak meg. Az újabb és újabb anyagok megjelenésével a lehetséges adszorbensek száma folyamatosan növekszik. Nagy stabilitásuk és hidrofób jellegük miatt a tiszta szilíciumos zeolitok ígéretesnek tűnnek erre a célra.

Az adszorpciós folyamatok kísérleti úton való tanulmányozása mellett széles körben alkalmaznak molekuláris szimulációs vizsgálatokat is. Ezekkel a különböző adszorpciós tulajdonságok akár extrém körülmények között is meghatározhatók, a szükséges drága kísérleti berendezések nélkül. A kén-hidrogén zeolitokon történő, gázfázisból kiinduló adszorpciójának vizsgálatára nagykanonikus Monte Carlo szimulációkat alkalmaztam. A szimulációkban olyan atomi potenciálmódelleket használtam, amelyekkel a szakirodalomban található kísérleti eredmények megfelelően jól reprodukálhatók.

A munkám célja a kén-hidrogén könnyű alkánokkal alkotott gázelegeiből lejátszódó adszorpciójának vizsgálata DDR, CHA, ACO és CAS (tiszta szilíciumos) zeolitokon. Ezeket a zeolitokat a szakirodalom is potenciálisan jó adszorbensnek tekinti erre a célra. Megkíséréltem e zeolitok között a kén-hidrogénre vonatkozó szelektivitásuk és adszorpciós kapacitásuk alapján sorrendet felállítani, és adszorpciós sajátágaik eltéréseinek okait megtalálni. Az alaposabb elemzés érdekében a számításokat több hőmérsékleten, nyomáson és gázelegy-összetételnél végeztem, és összehasonlításként érintőlegesen vizsgáltam néhány, az itt részletesen tanulmányozott zeolitokhoz nagyon hasonló szerkezetű hipotetikus rácsot is. Megállapítottam, hogy az adott gázelegyek esetén a zeolitszerkezetben jelentkező kismértékű eltérések sokszor jelentős szelektivitásbeli változást eredményeznek.

*Témavezető:
Dr. Kristóf Tamás
egyetemi docens, PE MK*



Babeş-Bolyai Tudományegyetem
Kémia
BA, 6. félév
gy_kresz5@yahoo.com

Kitozán térhálósításának vizsgálata elektrokémiai módszerrel cink hordozón

Kulcsszavak: korrózióvédelem; vékonyréteg; dip-coating technika; kitozán; elektrokémiai módszerek

A kitozán alapú biopolimerből ideiglenes korróziót gátló hatással rendelkező bevonatok készíthetők. Ezek hiányossága a vízáteresztő képességük és vízben való duzzadásuk jelentős mértéke. A duzzadásuk mértékét csökkentendő, tripolifoszfáttal (TPP) és glutáraldehiddel (GDA) (ionos és kovalens térhálósító szerekkel) való impregnálással módosítottuk a kitozán szerkezetét.

A bevonatok mártásos technikával készültek kitozán-oldatból, cink és üveg hordozón. Vastagságuk és stabilitásuk meghatározása az optikai tulajdonságainak vizsgálatával történt üveglapokon. UV-VIS spektroszkópia alkalmazásával natív kitozán esetében meghatározott értékek: a törésmutató 1,5370 és a rétegvastagság 334,12 nm, míg GDA-del keresztkapcsolva ezek az értékek 1,5410 illetve 322,33 nm. Páasztázó szögű reflektometriai mérésekkel kapott törésmutató értékek a natív kitozán és GDA-del térhálósított minták esetében az előző módszerrel kapott értékekkel jó egyezést mutatnak, de a rétegvastagságok némileg eltérnek. Az utóbbi módszerrel kapott értékek tripolifoszfáttal (1 és 3%-os oldat) térhálósított minták esetében: a törésmutatók 1,5439 illetve 1,5416, míg a rétegvastagságok 337,03 illetve 353,43 voltak.

A fém hordozóra felvitt bevonat nedvesíthetőségét peremszög mérésével tanulmányoztuk, ülőcsepp módszerrel. Megfigyelhető mindegyik rendszernél a peremszögesedés, ami a különböző mértékben történő duzzadás következménye. A GDA-del térhálósított rendszer kevésbé hidrofób és megnő a permeabilitása is. A TPP-tal térhálósított minták kevésbé duzzadtak meg, mint a natív kitozános minta, javítva a korrózióvédő hatást.

A cink hordozóra felvitt rétegek korrózióval szembeni ellenállását elektrokémiai módszerekkel vizsgáltuk: potenciodynamikus polarizáció és elektrokémiai impedancia spektroszkópiával (EIS). Azt tapasztaltuk, hogy a térhálósító szerek hatására módosulnak a bevonatok optikai és elektrokémiai tulajdonságai egyaránt. A polarizáció eredményeként nyert görbéket összehasonlítva azt látjuk, hogy a natív kitozán alig 1,6 %-os inhibíciós effektussal rendelkezik, az ionos térhálósító szer 80-90%-os hatást mutat, annak függvényében, hogy milyen töménységben adagoltuk a rétegbe. A kovalens térhálósító mindössze 10%-os inhibíciós hatással rendelkezik, ez indigókármin-impregnálással javul. A vizsgált impedancia spektrumok is alátámasztják a tapasztaltakat: a TPP-tal kialakított rendszer korrózióval szembeni ellenállása megnő, míg a GDA-del nem kaptunk kiemelkedő javulást a korrózióvédelemben.

*Témavezető:
Dr. Szabó Gabriella
egyetemi adjunktus, RO BBTE*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
vegyésszmérnök
BSc, 2. félév
rekahorvathr@gmail.com

Metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyedési tulajdonságainak vizsgálata számítógépes szimulációs módszerekkel

Kulcsszavak: szuperkritikus szén-dioxid; Monte Carlo szimuláció; termodinamikus integrálás; elegyedés

A metanol és a szuperkritikus szén-dioxid elegyítése során extenzív állapotjelzők – térfogat, belső energia, szabadenergia, entrópia – megváltozását Monte Carlo számítógépes szimulációk és termodinamikus integrálás segítségével határoztuk meg két szén-dioxid és négy metanol potenciálmodellből alkotott nyolc modell kombináció esetén tizenkét különböző összetétel mellett 313 K-en. A kapott eredményeket kísérleti eredményekkel hasonlítottuk össze, ahol erre lehetőség nyílt.

A vizsgálataink megmutatták, hogy körülbelül 95 mol% szén-dioxid tartalomnál a rendszer folyadék fázisból szuperkritikus állapotba kerül minden modell kombináció használata mellett. A szuperkritikus állapotú rendszerekben az elegyedési szabadenergia minden esetben pozitívnak adódott, így ebben a koncentráció tartományban azt találtuk, hogy a két komponens egymással nem elegyedik. Eredmények alapján az is kijelenthető, hogy mind a nem elegyedés a szuperkritikus tartományban, mind pedig az elegyedés a szén-dioxidban szegényebb, folyadék állapotú rendszerekben elsősorban energetikai okokra vezethető vissza, hiszen az elegyedési entrópia értéke minden esetben közel nulla, és ráadásul a szuperkritikus tartományban ennek kvalitatív viselkedése is jelentősen függ a választott modellektől.

Emellett azt is megmutattuk, hogy a metanol expanziós koefficiense nem függ jelentősen a potenciálmodell megválasztásától, és minden esetben jó egyezést mutat a kísérleti adatokkal. Azonban mind az elegyedési térfogat, mind pedig az elegyedési belső energia erősen függ a tiszta szén-dioxid moláris térfogatától, és ebben a tekintetben a TraPPE szén-dioxid modell [1] sokkal jobb egyezést mutat a kísérleti értékekkel, mint a Zhang és Duan által fejlesztett modell [2].

[1] J. J. Potoff és J. I. Siepmann, AIChE J. 2001, 47, 1676

[2] Z. Zhang and Z. Duan, J. Chem. Phys. 2005, 122, 214507

*Témavezető:
Dr. Jedlovszky Pál
egyetemi tanár, EKE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
barbi1226@gmail.com

1:1 hidrogén-kötéses [H, C, N] és [H, C, N, O] komplexek mátrixizolációs IR-spektroszkópiás vizsgálata

Kulcsszavak: asztrokémia; fotokémia; pszeudohalogének; kvantumkémiai számítások; reakciómechanizmus

A 2018-as év végéig a csillagközi térben több, mint 200 vegyületet sikerült detektálni, a kimutatott specieszek között megtalálhatóak [H, C, N] és [H, C, N, O] izomerek is. [1] A csillagközi térben ezen részecskéket eddig gázfázisban, monomerként sikerült kimutatni, de elképzelhető, hogy porszemcsék felületén, exobolygók légkörében és felszínén komplexeket alkotnak, melyek kimutatása a korábban használt IR űrteleszkópoknál nagyobb érzékenységgel igényel. Napjainkban fejlesztés alatt áll a James Webb Űrteleszkóp (JWST), ami a korábban használt űrteleszkópoknál érzékenyebb IR spektroszkópiai berendezésekkel lesz ellátva, ezért képes lehet komplexek kimutatására is. A komplexált molekuláris rendszerek laboratóriumi vizsgálata segítheti a JWST által nyújtott adatok elemzését, az esetlegesen detektált komplexek azonosítását.

Kutatásom során a kiindulási anyagokat (1,2,5-oxadiazol, illetve 1,3,4-oxadiazol) mátrixizolációs technika segítségével alacsony nyomáson és hőmérsékleten argonmátrixban csapdáztam. A mátrixizolációs technika előnye, hogy a vizsgált részecskék a mátrix üregeiben szeparáltan helyezkednek el, köztük nem alakulnak ki kölcsönhatások, azonban, ha a megfagyott mátrix üregeiben egy csapdázott molekulából két vagy több részecske keletkezik, akkor köztük nagy valószínűséggel létrejönnek kölcsönhatások, így a prekursorok fotolitikus bontásával nagy hatékonysággal alakíthatók ki komplexek. A nemesgázok nem nyelnek el fényt az infravörös tartományban, ezért az argonmátrixban kifagyasztott részecskék IR spektroszkópia segítségével jól vizsgálhatók.

A mátrix leválasztását követően lézerefény segítségével fotolizáltam a prekursorokat, majd a kialakult termékeket hidrogénkisülési lámpa segítségével más hullámhosszon is fotolizáltam. A fotolízisek időtartama alatt IR spektroszkópiai módszerrel követtem a mátrixban végbement változásokat. A kísérleti eredményeket összefoglalva elmondható, hogy a lézerefénnyel való fotolízis hatására a mátrixban az 1,2,5 oxadiazol esetén HCN...HNCO, HCNO...HCN, HCN...HCNO és HCN...HOCN komplexek, az 1,3,4-oxadiazol esetén HCN...HNCO és HCN...HOCN komplexek alakultak ki. A hidrogénkisülési lámpával végzett fotolízis során a kialakult HCN-molekulák egy részét sikerült izomerizálni, a mátrixban az 1,2,5-oxadiazol esetén HNCO...HNC és HCNO...HNC komplexek, az 1,3,4-oxadiazol esetén HNCO...HNC és HNC...HOCN komplexek voltak detektálhatók.

[1] McGuire, B. A., The Astrophysical Journal Supplement Series, 239, 1-48 (2018)

*Témavezetők:
Dr. Tarczay György
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Csonka István Pál*

tudományos munkatárs, MTA-ELTE Lendület Laboratóriumi Asztrokémia Kutatócsoport



Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar
Vegyésszmérnök
BSc, 5. félév
99lakatosgergo@gmail.com

Koordinációs kémiával a biztonságosabb betegdiagnosztikáért – Az OPCPA ligandum szintézise és fizikai kémiai jellemzése

Kulcsszavak: MRI; mangán; ligandum; stabilitás; makrociklus

A gadolínium-alapú MRI-kontrasztanyagok új távlatokat nyitottak a neminvazív betegdiagnosztikában, azonban az ezredfordulót követően ezekkel kapcsolatban számos biztonsági aggály látott napvilágot. Ezen problémák (pl. az Nefrogén Szisztémás Fibrózis megjelenése, a Gd(III)-ion felhalmozódása a betegek szöveteiben stb.) lendületet adtak az alternatív paramágneses fémionokat, pl. Mn(II)-ionot tartalmazó ágensek kifejlesztésének.

A munkánk során a célunk egy olyan merevgerincű makrociklusos kelátképző szintézise és jellemzése volt, amely korábban Mn(II)-alapú kontrasztanyagjelöltek esetében sikeresen alkalmazott molekulák szerkezeti elemeit egyesíti. A munkánk első lépéseként sikeresen előállítottunk a merevített 12-tagú, a makrociklusban éteres oxigén és nitrogén donoratomokat, ill. koordinálódó oldalláncként pikolinátcsoportot tartalmazó OPCPA kelátképzőt és annak Mn(II)-komplexét.

A [Mn(OPCPA)]⁺ nagy termodinamikai stabilitással rendelkezik (log KMnL= 14,23; pMn= 8,55), amely a komplexképző bázicitásása alapján várható volt. A ¹H-relaxometriás és ¹⁷O NMR mérések eredményei alapján megállapítottuk, hogy a központi fémion belső szférájában található egy koordinált vízmolekula. A kelát kinetikai inertségét több módszerrel is jellemeztük (pl. Zn(II), és Cu(II)-ionokkal lejátszódó cserereakciók, ill. humán szérumban végzett „stabilitási” vizsgálatokkal). Meglepő módon a [Mn(OPCPA)]⁺-komplex tisztán kémiai rendszerekben mért felezési idői lényegesen kisebbek, mint azt az anyavegyületek esetében tapasztalták. Azonban vérszérumban nem tapasztaltuk a komplex számottevő disszociációját a vizsgálat több mint 1600 perces időtartama során. A [Mn(OPCPA)]⁺-komplex és a HSA között erős, a speciális HSA-kötő ágensek esetében mérhető nagyságrendű kölcsönhatást fedeztünk fel, ami segítséget szolgáltat a későbbiekben egyszerűen előállítható MRI-angiográfias ágensek megtervezéséhez.

*Témavezetők:
Dr. Tircsó Gyula
egyetemi docens, DE TTK
Csupász Tibor
PhD hallgató, DE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
schneiker.anita@gmail.com

A fenalenil-gyök vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával

Kulcsszavak: fenalén, fenalenilgyök, hidrogénezés/dehidrogénezés, csillagközi hidrogén, mátrixizoláció

A világegyetemet alkotó molekulák közül a H_2 a legegyszerűbb és leggyakoribb, így csillagközi térben való képződése nagy érdeklődésre adhat számot. A megfigyelések azt sugallják, hogy a fotodisszociációs régiókban (PDRs) nagy mennyiségben jelenlévő PAH-ok (poliaromás szénhidrogének) katalizálhatják a H_2 keletkezését [1]. A fenalén is a PAH-ok családjának tagja, hidrogénezési/dehidrogénezési ciklusának felderítése segíthet kideríteni, hogy milyen szerepe van a csillagközi H_2 képződésében. Célom az 1H-fenalén és a fenalenilgyök előállítása, valamint az ezek közötti hidrogénezési/dehidrogénezési ciklusok elméleti és kísérleti vizsgálata volt. A kísérleti megfigyelésekhez mátrixizolációs IR spektroszkópiát alkalmaztam.

Számításokat végeztem a fenalén egyes izomereire és a fenalenilgyökre. Számítottam az említett ciklus gátjait is. Az 1H-fenalén H atommal való ütközésének hatására végbemenő H atom eliminációs reakció következtében fenalenilgyök és H_2 keletkezik. B3LYP/cc-pVTZ számításaim szerint ezen reakció gátja $0,3 \text{ kJ mol}^{-1}$. Ez a kis gát a H atom számára alacsony hőmérsékleten is átjárható alagúteffektussal. A fenalenilgyök reakciója H atommal, ami fenalént eredményez, pedig gát nélkül játszódik le.

1H-fenalénből 220 és 250 nm-es fotólízis hatására keletkezett fenalenilgyök mind Ar, mind Xe mátrixban. Az 1H-fenalén kísérleti és számított IR spektruma alapján skálafaktorokat határoztam meg. Ezekkel skáláztam a fenalenilgyök számított harmonikus rezgési hullámszámértékeit is, így jó egyezést kaptam a kísérleti hullámszámértékekkel. A fotólízis után fluoreszcencia spektrumot is vettem fel, amit összehasonlítottam a Cofino és munkatársai által a gyökről felvett fluoreszcencia spektrummal [2]. Kijelenthető, hogy sikerült előállítani a fenalenilgyököt.

Megvizsgáltam azt is, hogy mi történik a fenalenilgyökkel, ha a mátrixot melegítjük. Melegítés hatására, amint megindul a H atomok diffúziója, a fenalenilgyök egy része visszaalakul 1H-fenalénné. Az IR spektrumok alaposabb elemzése azt is sugallja, hogy ezzel párhuzamosan a H atomok az 1H-fenalént is dehidrogénezik.

További tervem az 1H-fenalén és a fenalenilgyök közötti hidrogénezési/dehidrogénezési ciklus vizsgálata para- H_2 mátrixban, ahol a H atomok diffúziója rendkívül gyors, így egyértelműbb eredményekre számíthatunk. Nem kizárt, hogy hidrogénezett fenaléneket is meg tudunk figyelni.

[1] A. L. Skov, et al., Faraday Discussions, 268, 223-234. (2014)

[2] W.P. Cofino, et al., MolecularPhysics, 51 (3), 537-550 (1984)

Témavezetők:
Dr. Tarczay György
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Csonka István Pál
tudományos munkatárs, ELTE TTK



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
sereslaci8@gmail.com

Vegyes összetételű micellák képződésének vizsgálata kalorimetriás módszerrel

Kulcsszavak: felületaktív anyag; micellaképződés; kalorimetria; van'tHoff analízis; nemlineáris paraméterbecslés

A felületaktív anyagok kétezer éve részét képezik mindennapjainknak és az ipari forradalom óta modern társadalmunk egyre nagyobb mennyiségben felhasznált vegyületcsaládját alkotják. Egyedi molekulaszervezetük miatt, általánosan ismert mosóhatásuk mellett széles körben kerülnek felhasználásra, szolublilizáló-, stabilizáló- és emulgeálószerként, mégis az előállított mennyiség több mint fele a háztartásokba kerül mosó- és tisztítószer formájában. A környezetünk megóvását célzó nemzetközi szabályozás ellenére a vízi élővilágba való kikerülésük továbbra is kockázatot jelent, így a gyártott és felhasznált mennyiség csökkentése napjaink egyik fontos technológiai kihívása. Az alkalmazásközeli technológiák fejlesztéséhez azonban a felületaktív anyagok (tenzidek) oldat- és határfelületi viselkedését meghatározó fizikai-kémiai törvényszerűségek átfogó ismerete szükséges. Ezen ismeretanyag jelentős része mára elfogadott és kísérleti eredmények tömegével bizonyított törvényszerűségek formájában áll rendelkezésre, de a szerteágazó felhasználás és a szerves vegyületekre jellemző szerkezeti változatosság miatt a mai napig is nagy intenzitással folynak a tenzidek sajátosságainak megismerését célzó kutatások. Az eltérő szerkezetű felületaktív molekulák asszociátumaként leírt kevert micellák képződése évtizedek óta vizsgált jelenség, ám kialakulásukat és összetételüket meghatározó szabályszerűség a mai napig sem tisztázott. Amíg az egyedi molekulák alkotta tenzidmicellák kialakulásának kalorimetriás vizsgálatáról már számos kutató beszámolt és hasonlóan népszerű a technika az oldószerkeletben vagy kotenzid jelenlétében végbemenő micellaképződés tanulmányozása, jelentősen kevesebb tanulmány foglalkozik a vegyes összetételű tenzidoldatokban végbemenő micellaképződés kalorimetriás úton történő megismerésével.

A dolgozatomban bemutatásra kerülő kísérleti munka során céltom volt az eltérő szerkezetű tenzidekből felépülő micellák képződésének, kalorimetriás úton történő tanulmányozása. A micellaképződés kvantitatív jellemzéséhez a kritikus micellaképződési koncentrációk (cmc) és az ehhez rendelhető entalpiaváltozás értékének meghatározása szükséges, így ennek érdekében az entalpiagramok kiértékelését lehetővé tévő táblázatkezelő alapú eljárást dolgoztam ki. Ezek után a cmc összetétel- és hőmérsékletfüggésének ismeretében az asszociációs kolloid szerkezetét valamint a micellákat alkotó molekulák közti kölcsönhatás jellegét tudtam számszerűen jellemzeni.

*Témavezető:
Dr. Csapó Edit
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnöki alapképzési szak,
BSc, 7. félév
s.eszti99@gmail.com

Új lehetőségek szemészetileg releváns in vitro permeabilitás modell kidolgozására

Kulcsszavak: In vitro permeabilitás; szemészet; PAMPA; üvegtest; hialuronsav-agar rendszer

Az emberi szem, mint egyik elsődleges érzékszervünk funkciója a különböző mechanikai sérülések, megbetegedések hatására jelentősen megváltozhat, így annak kezelése rendkívül fontos látásunk fenntartása érdekében. Szemünk összetett felépítése, mely egyúttal védelmi rendszerként is funkcionál, egyedi kihívást jelent a gyógyszerhatóanyagok célba juttatására vonatkozóan.

A szem hátsó szegmensének nagy részét a géles állagú üvegtest tölti ki, melyet a 0,1%-ban jelenlévő hialuronsav (HA) és kollagén komplexe adja. A látásromlás és a vakság vezető okai a hátsó szegmenshez kapcsolódó betegségek, beleértve az időskori makula-degenerációt és a diabéteszes makula ödémát. Az üvegtest terápiás kezelésére több lehetséges módszer létezik, melyekhez elengedhetetlen a hatóanyagok pontos felszívódási útvonalainak ismerete (topikális, szisztémás bejuttatás), beleértve az akadályozó tényezőket, melyek nagyban lecsökkentik a gyógyszermolekulák biohasznosulását.

Munkánk során egy nagy áteresztőképességű, robusztus technikát alkalmazunk a hatóanyagok permeabilitásának vizsgálatára: ez a PAMPA, (Parallel Artificial Membrane Permeability Assay) egy in vitro, nem sejtes, 96-lyukú mikroplate „szendvics”, mely a különböző biológiai membránokon keresztüli passzív diffúzió modellezésére alkalmas. Kutatócsoportunk 2019-ben kidolgozott corneal-PAMPA modelljével igazolta, hogy a PAMPA alkalmas lehet a topikálisan bejutatott hatóanyagok felszívódásának vizsgálatára a szaruhártyán keresztül. A hátsó szegmens modellezésére a mai napig csak igen kevés módszer létezik, melyek mind élő szövetet, illetve sejteket alkalmaznak, így nem teljesítik a gyógyszerkutatás korai fázisában szükséges modellek áteresztőképességre és robusztusságra vonatkozó kritériumait. Jelen munka célja annak vizsgálata, hogy a corneal-PAMPA modell – amennyiben fogadó oldal összetételét az üvegtestnek megfelelően módosítjuk – alkalmas-e a szem hátsó szegmensének modellezésére.

Ahhoz, hogy a modell alkalmazható legyen az üvegtest permeabilitási viszonyainak vizsgálatára, a PAMPA rendszer több paraméterének változtatása vált szükségessé: analitikai háttér leváltása plate alapú UV-spektrofotometriás detektálásra, s a hatóanyagok magasabb koncentrációban történő alkalmazása, melyek a HA jelenléte miatt váltak szükségessé. Modellfejlesztésünkben új utat jelentett HA–agarhidrogél rendszer, mely alkalmas üvegtest modellnek ígérkezett.

Témavezetők:

Vincze Anna

PhD hallgató, BME VBK

Dr. Balogh György Tibor

hab. docens, BME VBK



Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar
Vegyész
MSc, 4. félév
janchemist@freemail.hu

Különböző talajtípusok foszfátmegkötésének vizsgálata heterogén izotópcserével

Kulcsszavak: foszfátmegkötés; talajkémia; heterogén izotópcseré; kinetikai egyenlet

A talajon megkötődött foszfátionok kicserélődési reakcióját vizsgáltam heterogén izotópcserével savanyú homok, meszes homok és réti talaj példáján. Vizsgálataim során a kutatócsoportunkban korábban végzett mérések eredményeit dolgoztam fel és értelmeztem, de a savanyú homoktalaj esetében saját kísérleteket is végeztem. A heterogén izotópcseré kísérletek kiértékelése során a talaj relatív radioaktivitását ábrázoltam az idő függvényében, és illesztettem az egy és a két kötőhelyes kinetikai modell egyenletével. Az egy kötőhelyes modell egyféle, a két kötőhelyes pedig kétféle gyengén kötött foszfátiont feltételez, amelyek képesek a talajoldatban található foszfátionokkal kicserélődni. Azt tapasztaltam, hogy a savanyú homoktalaj az egy, míg a meszes homoktalaj és a réti talaj a két kötőhelyes modellel írható le. A két kötőhelyes viselkedést vélhetően a nagy humusztartalom okozza, ugyanis korábban a szintén humuszban gazdag rendzina talaj is két kötőhelyes viselkedést mutatott. Kivétel a meszes homok, amely szintén két kötőhelyes kinetikájú. Ennek oka valószínűleg a foszfátionok kalcium-karbonáton való szorpciója, de ezt kísérleti úton kellene igazolni a kalcium-karbonát szelektív eltávolításával. A savanyú homok esetében az egyes kötőhelyeken megkötődött foszfor mennyiségét ábrázoltam az oldatbeli foszforkoncentráció függvényében, a kapott pontok pedig jól illeszkedtek a Langmuir izotermára, ugyanakkor az eredmény nem pontos, mivel csak a kezdeti, gyorsan emelkedő szakaszból vannak pontok. Ugyanezt elvégeztem a réti talaj mindkét kötőhelyére, itt is jó illeszkedést tapasztaltam. A Langmuir-izotermákból kapott szorpciós egyensúlyi állandókat irodalmi értékekkel összevetve valószínűsíthető, hogy a savanyú homoktalaj esetében agyagásvány okozza a szorpciót. Réti talaj esetében ettől lényegesen nagyobb állandókat kaptam, így itt valószínűleg valamilyen hidratált fém-oxidon történik a szorpció, de ennek eldöntése további vizsgálatokat igényel. A savanyú homoktalajra heterogén izotópcseré kísérleteket végeztem, amelynek során a talajmintát desztillált vízzel és különböző koncentrációjú KH_2PO_4 oldatokkal keverttem. Amikor a talajoldat hozzáadott foszfort is tartalmazott, a pontok nem illeszkedtek jól az egy kötőhelyes modellre, és nagy volt a szórásuk. Ennek oka az lehet, hogy a steady-state kicserélődési reakció mellett gyors irreverzibilis szorpciós folyamatok is bekövetkeztek. Ennek eldöntésére tervezem matematikai modellek felállítását.

Témavezetők:

Dr. M. Nagy Noémi

egyetemi tanár, DE TTK

Dr. Buzetzky Dóra

tanársegéd, DE TTK

Dr. Kónya József

nyugalmazott egyetemi tanár, DE TTK



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
zsubritsabel.98@gmail.com

Elektrokémiai mérőrendszer összeállítása ferrátionok képződésének vizsgálatához

Kulcsszavak: ferrát; ciklikus voltammetria; elektrokémiai impedancia spektroszkópia; ohmikus korrekció

Az alkálifém-ferrátok a jelenleg ismert leghatékonyabb, mégis környezetbarát oxidáló- és egyben fertőtlenítőszer, melyek hatóanyaga 6-os oxidációs számú vasat tartalmaz. Ezek a vegyületek képesek többféle szennyezőanyag koncentrációjának egyidejű csökkentésére, ivóvíz és szennyvíz kezelésére egyaránt alkalmazhatók.

A ferrátok alkalmazásának korlátot szab azok bomlékonysága és a ferrátok előállítási költsége. Az elektrokémiai módon előállított ferrátsók jellemzően vizes oldatban vannak, és csak erősen lúgos közegben tarthatók el, ezért a vízkezelés céljából történő felhasználás esetén a kezelt vizet semleges kémhatásúra kell savanyítani.

A szakirodalomban számos olyan cikk található, amely ferrátok különböző körülmények között történő elektrokémiai előállításával foglalkozik, azonban ezek jellemzően csak gyakorlati szempontból közelítik meg a kérdést és a bruttó reakció sebességének meghatározására fókuszálnak. Az elektród folyamat részleteire vonatkozóan igen kevés információ lelhető fel.

Kutatómunkám elsődleges célja egy olyan, termosztálható elektrokémiai cellát tartalmazó mérőrendszer összeállítása volt, amely alkalmas a ferrátionok előállítása során lejátszódó elektród folyamatok kinetikájának tanulmányozására. Egy ilyen rendszer összeállítása nem egyszerű feladat, hiszen azon kívül, hogy az elektrolizáló cella alkatrészeinek az extrém lúgos kémhatású elektrolit oldattal hosszú időn keresztül kell érintkezniük károsodás nélkül, a kísérletek során keletkező ferrátionok oxidáló hatásának is ellen kell állniuk.

A megvalósított mérőrendszerrel végzett tesztek eredményei azt mutatják, hogy az megfelel a kitűzött céloknak és eleget tesz a vele szemben támasztott követelmények legnagyobb részének. Nem csak a ferrátionok elektrokémiai előállítására használható, hanem a ferrátionok képződéséért felelős folyamatok – akár hosszabb ideig tartó – vizsgálatát is lehetővé teszi.

A kísérleti eredmények alapján úgy tűnik, hogy a ciklikus voltammetria és az elektrokémiai impedancia spektroszkópia is alkalmas módszer e rendkívül komplex rendszer tanulmányozására. Az új mérőrendszer használatával reményeink szerint lehetőség nyílik olyan kísérletek elvégzésére, melyek segítségével jobban megérthetjük a ferrátionok képződéséhez vezető, bonyolult kinetikájú elektrokémiai folyamat mechanizmusát, és meghatározhatjuk a legfontosabb reakciókinetikai paramétereiket.

Az eredményeket várhatóan fel lehet majd használni az ipari méretű gyártási folyamatok optimalizálására is.

*Témavezető:
Dr. Láng Győző
egyetemi tanár, ELTE TTK*





Fizikai kémia II.



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnöki
BSc, 6. félév
a.dora.a08@gmail.com

3-klórmandulasav olvadási hőmérsékletének vizsgálata szuperkritikus szén-dioxid és szerves oldószerek nagynyomású elegyében

Kulcsszavak: olvadáspont-csökkenés; szuperkritikus; királis; olvadási fázisdiagram; Hansen-paraméter

A nagynyomású fluidumok által indukált olvadáspont-csökkenést számos helyen alkalmazzák. Polimerek esetén például az alacsonyabb olvadáspont (üvegesedési hőmérséklet) a megmunkálhatóság szempontjából előnyös, de az úgy nevezett „particles from gas-saturated solutions” mikronizálási eljárás (PGSS) is ezen alapszik.

Munkám során olvadási hőmérséklet méréseket végeztem nagynyomású látóüveges cellában, a kutatócsoportunkban fejlesztett mérési módszer segítségével, szerves oldószer és szén-dioxid (CO_2) nyomás alá helyezett elegyében. A csoport korábbi munkájához kapcsolódóan a 3-klórmandulasavat választottam modellvegyületnek. Először ciklohexán és izopropil-acetát szerves oldószerek elegyét használtam segédoldószerként, a méréseket állandó nyomáson (16 MPa) és móltört mellett ($x_{\text{CO}_2}=0,966$) végeztem. Elkészítettem a sav királis olvadási fázisdiagramját, mely nem különbözött a csoportban korábban, tiszta szuperkritikus szén-dioxidban végzett mérésektől, azonban jelentősen eltért a szintén korábbi, acetonitril segédoldószer jelenlétében végzett mérésektől. Az eredményekből arra következtettem, hogy a segédoldószer anyagi minősége befolyásolhatja az olvadási hőmérsékletet, ezért állandó nyomáson (16 MPa) és móltört ($x_{\text{CO}_2}=0,983$) mellett vizsgáltam különböző szerves módosítók hatását a racém 3-klórmandulasav olvadási hőmérsékletére, ami valóban jelentősnek bizonyult.

Emellett foglalkoztam a metanol példáján a szerves oldószer móltörtjének hatásával is. Méréseim alapján valóban jelentősen függ az olvadási hőmérséklet a felhasznált segédoldószer mennyiségétől. A segédoldószer közel 2%-os koncentrációja az olvadási hőmérsékletet a tiszta szén-dioxidban mért 107 °C-ról 82 °C-ra csökkentette, ami jelentős változás. Ebben a szűk tartományban ($x_{\text{MeOH}} = 0$ és $x_{\text{MeOH}} = 0,02$ között) az olvadási hőmérséklet közel lineárisan függ a segédoldószer móltörtjétől.

Végül az azonos nyomáson végzett méréseim alapján megpróbáltam az oldószerek és a szén-dioxid alkotta nagy nyomású, magas hőmérsékletű elegyekben mért olvadási hőmérsékletek, valamint a segédoldószerekre jellemző Hansen oldhatósági paraméterek között összefüggést találni.

*Témavezetők:
Dr. Kőrösi Márton
egyetemi adjunktus, BME VBK
Mihalovits Máté
PhD hallgató, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésszmérnöki
BSc, 7. félév
arvaicsaba98@gmail.com

Furfurol homogén ruthénium katalizált hidrogénezésének reakciókinetikai vizsgálata

Kulcsszavak: furfurol; hidrogénezés; ruthenium; homogén katalízis; reakciókinetika

Az egyre szigorodó szén-dioxid kibocsátási előírások és a rohamosan növekvő vegyipari nyersanyagigények miatt szükségessé vált a fosszilis energiahordozók felhasználásának újragondolása. Emiatt a biomassa és az abból előállítható platform molekulák (furfurol, 5-hidroximetilfurfurol, levulinsav, γ -valerolakton) iránti érdeklődés az elmúlt években jelentősen megnőtt, mivel ezen anyagok alkalmasak bioüzemanyagok és más vegyipari alapanyagok előállítására, ezáltal kiválthatják a fosszilis energiahordozókat és a belőlük nyerhető vegyületeket.

A furfurol (FAL) egy 5 szénatomos platform molekula, amit a lignocellulóban található hemicellulóz savas hidrolízisén keresztül lehet előállítani. Belőle katalitikus hidrogénezéssel furfural-alkohol (FOL) nyerhető, amelynek számos felhasználása lehetséges, mint például polimerek és illatanyagok előállítása, gyógyszeripari köztitermékek szintézise vagy oldószerként való alkalmazása.

Kutatási témám célja a furfurolfurfural-alkohollá történő szelektív hidrogénezésének kinetikai vizsgálata volt, ami által lehetőség nyílik a reakció optimalizálására és egy lehetséges üzem folyamat-szimulátorokban történő részletesebb vizsgálatára. A reakciót a kutatócsoport által kidolgozott nagy hatékonyságú és szelektivitású ruthénium(III)-acetilacetát/1,4-bisz(difenilfoszfino)bután (DPPB) homogénkatalizátor-rendszerrel végeztem, ami lehetővé teszi a reakció segédoldószer-mentes kivitelezését.

Kutatómunkám során részletesen megvizsgáltam a keverőfordulatszám, a nyomás, a hőmérséklet, a katalizátor koncentráció, a ruthénium:ligandum arány, kiindulási termék koncentráció és más egyértékű alkoholok jelenlétének hatását a reakciósebességre. A lehetséges részreakciók igazolására deutérium izotópjelzéses technikát alkalmaztam, amelynek segítségével az átalakításban részvevő specieszek reakciói igazolhatók. Az adatok alapján feltételezhető, hogy a redukció autokatalitikus. Előadásomban bemutatom az egyes reakcióparaméterek hatásának vizsgálatát az átalakításra, a javasolt kinetikai modellt, valamint az izotópjelzés alapján a javasolt részreakciókat.

*Témavezetők:
Dr. Mika László Tamás
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Horváth Attila
egyetemi tanár, PTE TTK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Vegyésszmérnök
BSc, 5. félév
davidbaccillieri@gmail.com

Tranziens módszerekkel kapott korróziósebességek összehasonlító vizsgálata

Kulcsszavak: korrózió; elektrokémia; polarizáció; polarizációs ellenállás; ohmikus ellenállás

A korróziósebesség lehető legpontosabb meghatározása a különböző agresszív rendszerekben a korrózióvédelem egyik központi problémája. Az elmúlt évtizedekben számos elektrokémiai technikát alkalmaztak erre a célra: potenciosztatikus és potenciodynamikus eljárásokat, a polarizációs ellenállás mérését DC és elektrokémiai impedancia-spektroszkópiai (EIS) módszerekkel, valamint az ún. tranziens technikákat, amelyek alkalmazásakor valamely potenciál- vagy áramimpulzusra adott potenciálválaszból határozzuk meg az elektrokémiai paramétereket. A tranziens technikák nagy előnye, hogy az oldat ohmikus ellenállásának a hatása az esetek túlnyomó többségében elhanyagolhatóan kicsiny. A tranziens technikák már több évtizede ismertek [1], azonban korróziós rendszerekben nincsenek megfelelően kihasználva az előnyös mérési tulajdonságaik, továbbá hiányoznak azok a szisztematikus kísérletek, amelyekben összehasonlíthatók a tranziens módszerekkel kapott paraméterek a más, hagyományosan alkalmazott elektrokémiai eljárások eredményeivel.

Kísérleti munkám során két reverzibilis és két korróziós elektrokémiai rendszerben mértem tranziens technikával elektrokémiai paramétereket, melyeket összehasonlítottam más elektrokémiai módszerekkel kapott paraméterekkel.

Az eredmények összevetéséből az látható, hogy a kísérleti paraméterek helyes megválasztása esetén az EIS és a tranziens impulzus módszerrel kapott kinetikai paraméterek, elsősorban az időállandók, jó egyezést mutatnak. További kísérletek szükségesek annak a megállapítására, hogy hogyan javítható a polarizációs ellenállások egyezése. Ez különösen fontos abból a szempontból, hogy a tranziens módszerek a legalkalmasabbak a nagy ellenállású korróziós rendszerek diagnosztikájának a céljaira.

[1] W. H. Reinmuth, C. E. Wilson (1962) An Impulse (Coulostatic) Relaxation Method for the Study of Rapid Electrode-Processes. 34, (9), 1159-1161.

*Témavezető:
Dr. Lukács Zoltán
tanszéki mérnök, PE MK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
balbisimirjam@gmail.com

Az iminoacetonitril izomerek egymásba alakulásának vizsgálata hidrogénezési/dehidrogénezési katalitikus ciklusokon keresztül

Kulcsszavak: asztrokémia; csillagközi tér; hidrogénezési/dehidrogénezési ciklus; hidrogénképződés; mátrixizoláció

A csillagközi térben napjainkig azonosított molekulák száma már több mint 200, de ezeknek az anyagoknak a keletkezésével kapcsolatban még számos megválaszolatlan kérdés van. A csillagközi tér leggyakoribb anyagának, a H_2 -nek a csillagközi térben tapasztalt óriási keletkezési sebességét sem tudják megmagyarázni a modellek, ami arra utal, hogy ehhez eddig nem ismert folyamatoknak is hozzá kell járulnia. Bizonyos anyagok mennyisége között pedig szoros összefüggés figyelhető meg, aminek a magyarázata nem ismert.

A Z-HNCHCN-t 2019 elején sikerült azonosítani csillagközi térben. A mérések szerint a Z- és a korábban kimutatott E-HNCHCN izomerek aránya $6,1 \pm 2,4$. Ez jó egyezést mutat a termodinamikai egyensúllyal a gázfázis kinetikus hőmérsékletén, de a két izomer között a közvetlen izomerizáció nem lehetséges a nagy aktiválási energia miatt; a korábban felvetett elméletek pedig mind 0,9 és 1,5 közti arányt jósoltak. Feltételezésünk szerint a két izomer H-atomokkal történő hidrogénezési/dehidrogénezési reakciókon keresztül alakulhat egymásba. Ezek a katalitikus ciklusok nemcsak a két izomer mennyisége közti összefüggést magyarázhatják, hanem a H_2 keletkezéséhez is hozzájárulhatnak. Kutatásom célja annak bizonyítása volt, hogy csillagközi térben lejátszódhatnak ezek a katalitikus ciklusok.

Munkám során először a feltételezett reakciók kiindulási és végtermékeire, valamint az átmeneti állapotokra végeztem harmonikus frekvenciaszámítást B3LYP/aug-cc-pVTZ szinten. A számítások szerint ezek a folyamatok vagy gát nélkül mennek, vagy olyan kis aktiválási energiát igényelnek, hogy az alacsony hőmérsékleten is könnyen átjárható alagúteffektussal.

A katalitikus ciklusok kísérleti megfigyelése céljából csoportunk egy külföldi laboratóriumban végzett méréseket $p-H_2$ mátrixizolációs technikát alkalmazva. A HNCHCN-t egy korábbi cikkben leírt módon, az N_3CH_2CN UV-fotólízisével állították elő. A kiértékelés során megállapítottam, hogy 4 termék keletkezett. A keletkező termékeket Z- és E-HNCHCN-ként, valamint Z- és E-HNCHNC-ként azonosítottam.

A hidrogénezési reakciók modellezését úgy végezték, hogy in situ H-atomokat állítottak elő a mátrixban. A H-atomok hatására egy új anyag, az NCHCN gyök keletkezett és a két HNCHCN izomer arányának megváltozását tapasztaltuk. Az arány a csillagközi térben megfigyelt arány felé közeledett. Ez azt mutatja, hogy az NCHCN-t és a HNCHCN izomereket összekötő katalitikus ciklusok teremthetik meg a keresett kapcsolatot a két iminoacetonitril izomer között.

*Témavezetők:
Dr. Tarczay György
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Csonka István Pál*

tudományos munkatárs, MTA-ELTE Lendület Laboratóriumi Asztrokémia Kutatócsoport



Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar
Vegyésszmérnök
MSc, 4. félév
rocknot96@gmail.com

A szabad és az aerogélen immobilizált Cu(II)-ciklén komplex katalizátorok hatásmechanizmusának vizsgálata

Kulcsszavak: reakciókinetika; katalízis; aerogél; fenol; redoxireakció

A kutatómunka során célunk volt a szabad és az aerogélen immobilizált Cu(II)-ciklén komplex katalitikus viselkedésének tanulmányozása egy modell redoxireakción keresztül. A vizsgált reakció a fenol H_2O_2 reagenssel történő oxidációja oldatfázisú és aerogélen immobilizált Cu(II)-ciklén komplex katalizátorok jelenlétében. Az adatok értelmezése után egy matematikai modellt állítottunk fel a heterogén rendszerre nézve, figyelembevéve a katalizátor-hordozó szerepét. Vizsgáltuk továbbá a települési szennyvizekbe kerülő és ott feldúsuló antibiotikum, a ciprofloxacín H_2O_2 reagenssel végzett katalitikus oxidációját a funkcionizált aerogél katalizátor jelenlétében.

*Témavezető:
Dr. Forgács Attila
tudományos segédmunkatárs, DE TTK*



Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
jenei.laura.barbara@gmail.com

1,4-Benzokinon-származékok redoxi- és fotokémiai sajátságai

Kulcsszavak: 1,4-benzokinon; fotoreakció; spektrofotometria; reakciókinetika; hidroxikinon-polimerizáció

Kutatásom célja a különféle szubsztituált 1,4-benzokinon-származékok fotokémiai sajátságainak és redoxireakcióinak a vizsgálata. Ezen reakciók kinetikáját vizsgáljuk, elsősorban spektrofotometriás módszerrel. A megismert reakciótulajdonságok (pl. sebességi egyenlet, sav-bázis sajátságok, redoxipotenciálok) segítségével összetett kutatások eredményeképpen feltehetően egy megújuló, környezetbarát energiaforrásra tehetünk szert, mint pl. a redox flow battery.

Spektrofotometria segítségével megadtam egy 1,4-benzokinon- származék, a 2-terc-butil-1,4-benzokinon fotokémiai stabilitását, hidrogén-peroxiddal lejátszódó reakciójának sebességi egyenletét, a fotoreakcióban és a hidrogén-peroxid hatására is keletkező hidroxikinon savi disszociációs állandóját, valamint a lúgos közegben vagy erős oxidációszer hatására bekövetkező irreverzibilis, huminsavvá történő polimerizációjának sebességi egyenletét.

Néhány egyéb származéknál CV méréseket is végeztünk, az alkalmazott ciklikus voltammetria ugyanis összeköttetést jelent a fotoreakció eredményei és az akkumulátor között, mivel mind az elektrokémiai, mind pedig a fotoreakció tulajdonságai nagyban függenek a kinon szubsztituensének kémiai minőségétől.

*Témavezető:
Dr. Ósz Katalin
egyetemi docens, PTE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
vegyész
MSc, 3. félév
kiszoltansandor@gmail.com

Developing a computer controlled potentiostat with dynamic current ranging

Hungarian Keywords: elektrokémia; műszerfejlesztés; voltammetria; mérésautomatizálás

Most modern potentiostats are black-box devices. The instrument is connected to a PC with the manufacturer's custom software, and the manufacturer essentially restricts us on what experiments we can carry out using the instrument: we can conduct a measurement if it is programmed into its software, but in case it is not, we are unable to do anything about it. We do not “see” into the instrument, we do not know exactly how it works, thus maybe even not understand how it should work. It is very hard to develop custom techniques without being able to work on the instrument itself. We realized this problem, and we are trying to improve this situation.

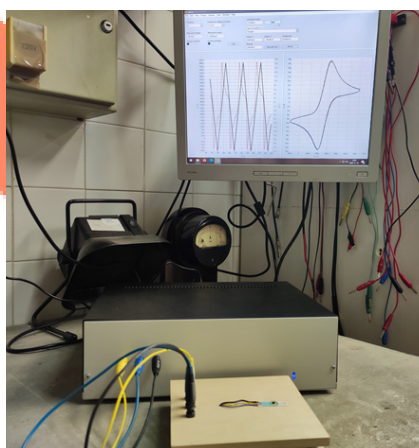
Therefore, we have built a small potentiostat that we know thoroughly. Although it is not as advanced as the commercially available ones for now, it has several advantages: it is modular, we know where and what might be modified or might be worth to modify. If we have an idea on where to improve, we can immediately try it out without voiding a warranty.

We have developed an instrument, both hardware-wise and software-wise, with a functioning dynamic range amplifier. After a successful calibration, we carried out chemical test measurements successfully as well. The linear range settings work remarkably well. We have tried out the dynamic range amplifier as well: we used diodes at first, which did not provide us with impressive results, but replacing them with two Darlington transistors (as negative feedback elements in the amplifier), we have arrived at a well-functioning device. It still has some issues, for example its noise is rather large.

We would like to work on the dynamic range amplifier some more, in several aspects. First, we would like to increase the dynamic range up to several decades. Second, we would like the response time to be at least tunable.

We also plan to try out commercially available logarithmic amplifiers, such as the Texas Instruments LOG112 model. Although the logarithmic amplifiers on the market are not bipolar, we can use two of them along with a current inverter.

Our most ambitious plan is to move from the NI DAQ to a microcontroller programmed by us, in order to further lower costs. For instance, a PIC32 microarchitecture microcontroller is a viable alternative. This will require serious embedded system programming, but this is already in progress and will be finished in the near future.



*Témavezető:
Dr. Vesztegom Soma
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
pacek97@hotmail.com

Kémiai reakció és a közegmozgás kölcsönhatásának modellezése szilárd–folyadék rendszerben

Kulcsszavak: reakció-diffúzió-advekción; modellezés; tér- és időbeli mintázatok; csapadékképződés

Kutatásom során az áramló közegben képződő csapadék tér- és időbeli változását tanulmányoztam. Első lépésként egy olyan modellt állítottunk fel, amelyben a reakcióban létrejövő minden egyes csapadékszemcse méretét és térbeli trajektóriáját számítani tudjuk. A modellt az OpenFOAM programcsomagba implementáltam a differenciális mérlegegyenletek megoldásához használt véges térfogatok módszerének a Lagrange-féle részecskékövetéssel történő ötvözésével. A programot két folyamat modellezésével validáltam: a vesekőképződés tanulmányozására kialakított mikrofluidikai reaktorban a kalcium-oxalát képződését [1], valamint homogén elegyből kiváló csapadékok áramlás révén történő térbeli szeparációját a kobalt(II)-réz(II)-oxalát rendszerben [2] vizsgáltam.

A leülepedett kalcium-oxalát részecskék növekedése nem csak a koncentrációmezőtől, de a környezetében levő szemcsék helyzetétől is függ. Az izolált szemcsék növekedése az idővel $t^{1/3}$ szerint skálázódik, összhangban a kísérleti tapasztalatokkal, míg nagy részecskesűrűségnél a kialakuló kompetíció miatt a növekedés gátolt. A másik rendszerben megállapítottuk, hogy a réz(II)- és kobalt(II)-oxalát részecskék térbeli szeparációjáért a réz(II)-oxalát komplexek nagyobb stabilitási állandói a felelősek, így a kobalt(II)-oxalát komplexek csak a betáplálással egyirányú gravitációs áram feletti folyadék rétegben alakulnak ki. Ennek megfelelően az áramlás messzebbre sodorja azokat, így a kobalt(II)-oxalát csapadék később és távolabb képes leülepedni, a kísérleti tapasztalatoknak megfelelően.

A kidolgozott modellel képesek vagyunk egy kémiai reakció hatására kialakuló heterogén rendszer szimulációjára úgy, hogy figyelembe vesszük a folyadékáramlás és a képződő részecskék közötti kölcsönhatást is.

A munka során megírtam a modell alapjául szolgáló forráskódot, valamint én végeztem a futattásokat, és az eredményül kapott adatokat is én értékeltem ki.

[1] Rakotozandriny, K., Bourg, S., Papp, P., Tóth, Á., Horváth, D., Lucas, I. T., Babonneau, F., Bonhomme C., Abou-Hasan A., Cryst. GrowthDes., 20 (12) 7683-7693 (2020)

[2] Tóth-Szeles, E., Bohner, B., Tóth, Á., Horváth, D., Cryst. GrowthDes., 17 (9), 5000-5005 (2017)

*Témavezető:
Dr. Horváth Dezső
egyetemi tanár, SZTE TTIK*



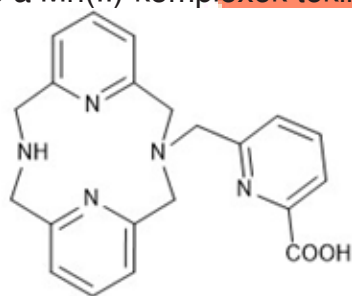
Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar
Vegyésszmérnök
BSc, 5. félév
sajtosgeri@gmail.com

Merevgerincű pikolinát-csoportot tartalmazó Mn²⁺-alapú MRI kontrasztanyag-jelölt előállítás és koordinációs kémiai jellemzése

Kulcsszavak: mágneses rezonanciás képelkötés; kontrasztanyagok; mangán(II)-alapú alternatívák; makrociklusos komplexképzők

Az MR képkötés az orvosi diagnosztikában az egyik legelterjedtebb és legsokoldalúbb képkötő módszerré vált az elmúlt évek során. Azonban a használatban lévő Gd(III)-alapú kontrasztanyagok biztonságosságával kapcsolatban több aggály is felmerült, pl. Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF), gadólinium lerakódások a szervezetben, stb. A Gd(III)-ionnal szemben a Mn(II)-ion komplexei biztonságos alternatívát kínálhatnak az MRI vizsgálatokhoz.

A kutatás tárgyát egy pikolinát-oldalláncot tartalmazó makrociklusos komplexképző (BPPA, lásd az ábrán) és Mn(II)-komplexe képezte. A ligandum megtervezésekor szem előtt tartottuk a csoport korábbi eredményeit, ami a Mn(II)-kelátok stabilitási és disszociációkinetikai paramétereit jelenti. pH-potenciometriás módszerrel meghatároztuk a ligandumunk protonálódási, ill. Ca(II)-, és Mg(II)-komplexeinek képződési állandóit. A merev pikolinátcsoport hatására a ligandum bázicitása kis mértékben nőtt, és ennek következtében nőtt a fémkomplexeinek stabilitása is. A ligandum Mn(II), Zn(II) és Cu(II) fémionokkal olyan stabil komplexet képez, hogy a stabilitási állandó értékét a pH-potenciometriás mérések mellett a Mn(II)-komplex esetében relaxometriás, a Zn(II) és Cu(II)-ionok esetében pedig spektrofotometriás módszerekkel is alátámasztottuk. A Mn(II)-komplex látszólagos stabilitási állandójának tekinthető pMn értéke 10,89, amely meghaladja az irodalomban eddig leírt összes komplex pMn értékét. ¹⁷O-NMR mérésekkel igazoltuk, hogy a [Mn(BPPA)]⁺-komplex tartalmaz egy, a fémionhoz koordináló vízmolekulát, ami relatíve lassan cserél az oldószer vízmolekulákkal (3,2x10⁷ s⁻¹). Ennek ellenére a kelát kifejezetten jó, 3,34 mM⁻¹s⁻¹-os relaxivitással rendelkezik. A ligandum szerkezete merevségének köszönhetően a [Mn(BPPA)]⁺ kitűnő inertséggel is bír. A komplex Cu(II)-ionnal való kicserélődési reakciót jellemző sebességi állandók segítségével a pH=7,4-re extrapolált disszociációra jellemző felezési idő 2669 órának adódott, ami szintén kimagasló a Mn(II)-komplexek tekintetében.



Az általunk jellemzett BPPA ligandum szerkezete



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 2. félév
veresravai.akos@gmail.com

Nitrogén-monoxid átalakulásait szénhidrogének jelenlétében leíró reakciómechanizmusok vizsgálata

Kulcsszavak: újraégetés; reakciómechanizmus; szimulációk; hibafüggvények; érzékenységanalízis

Tudományos diákköri dolgozatom témája az úgynevezett „reburning” eljárás [1], amelynek során nitrogén-oxidokat távolítanak el füstgázból szénhidrogének hozzáadásával. Ez a folyamat napjainkban igen nagy jelentőséggel bír, mert a nitrogén-oxidok káros hatást fejtenek ki a környezetre és az emberi egészségre egyaránt.

A „reburning” egy összetett reakció, amelynek leírásához nagy számú elemi reakció szükséges. Kutatómunkám távlati célja, hogy a jelenleg rendelkezésre álló, nitrogéntartalmú vegyületek átalakulásait leíró mechanizmusok továbbfejlesztésével egy pontosabb, optimalizált reakciómechanizmust alkossak meg. Ehhez eddigi munkám során az égéskémiában ismert hat tudományos publikáció adatait használtam fel, amelyek áramlási reaktorban és jólkevert reaktorban történő mérések voltak. A kísérleti adatokat felhasználva reakciókinetikai szimulációkat végeztem az ELTE Reakciókinetikai Laboratóriuma által fejlesztett Optima++ program [2] segítségével, amelyhez az OpenSmoke++ nevű szimulációs programcsomagot használtam. A szimulációkat a következő négy, a nitrogén-kémiában ismert mechanizmussal végeztem: POLIMI-2019, Glarborg-2018, GRI 3.0-1999 és Shrestha-2019. A szimulációk eredményeit hibafüggvény-értékek számításával hasonlítottam össze a kísérleti adatokkal, így megállapíthattam, hogy melyik mechanizmus képes legjobban reprodukálni azokat. A célfüggvény-értékek összehasonlítása alapján a legjobb mechanizmus a POLIMI-2019, de a Shrestha-2019-cel készült szimulációk is hasonlóan jól reprodukálták a kísérleti adatokat. A Glarborg-2018 alacsony hőmérsékleten adott csak jó eredményt.

Ezt követően lokális érzékenységanalízissel meghatároztam, hogy melyek a legfontosabb reakciók az egyes reakciókörülmények között, a különféle mechanizmusok szerint. A kutatómunka következő lépése az optimalizáció lesz, amelyben az érzékenységanalízis eredményei nagyon nagy jelentőséggel bírnak.

[1] Smoot, L. D., Hill, S. C., Xu, H., ProgEnergyCombustSci, vol. 24, pp. 385–408, (1988).

[2] Varga, T., Busai, Á., Zsély, I. Gy., Optima++ v1.0: A general C++ framework for performing combustion simulations and mechanis moptimization (2018).

*Témavezetők:
Dr. Turányi Tamás
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Zsély István Gyula
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
zsubritsabel.98@gmail.com

Elektrokémiai mérőrendszer összeállítása ferrationok képződésének vizsgálatához

Kulcsszavak: ferrát; ciklikus voltammetria; elektrokémiai impedancia spektroszkópia; ohmikus korrekció

Az alkálifém-ferrátok a jelenleg ismert leghatékonyabb, mégis környezetbarát oxidáló- és egyben fertőtlenítőszer, melyek hatóanyaga 6-os oxidációs számú vasat tartalmaz. Ezek a vegyületek képesek többféle szennyezőanyag koncentrációjának egyidejű csökkentésére, ivóvíz és szennyvíz kezelésére egyaránt alkalmazhatók.

A ferrátok alkalmazásának korlátot szab azok bomlékonysága és a ferrátok előállításának költsége. Az elektrokémiai módon előállított ferrátsók jellemzően vizes oldatban vannak, és csak erősen lúgos közegben tarthatók el, ezért a vízkezelés céljából történő felhasználás esetén a kezelt vizet semleges kémhatásúra kell savanyítani.

A szakirodalomban számos olyan cikk található, amely ferrátok különböző körülmények között történő elektrokémiai előállításával foglalkozik, azonban ezek jellemzően csak gyakorlati szempontból közelítik meg a kérdést és a bruttó reakció sebességének meghatározására fókuszálnak. Az elektród folyamat részleteire vonatkozóan igen kevés információ lelhető fel.

Kutatómunkám elsődleges célja egy olyan, termosztálható elektrokémiai cellát tartalmazó mérőrendszer összeállítása volt, amely alkalmas a ferrationok előállítása során lejátszódó elektród folyamatok kinetikájának tanulmányozására. Egy ilyen rendszer összeállítása nem egyszerű feladat, hiszen azon kívül, hogy az elektrolizáló cella alkatrészeinek az extrém lúgos kémhatású elektrolitoldattal hosszú időn keresztül kell érintkezniük károsodás nélkül, a kísérletek során keletkező ferrationok oxidáló hatásának is ellen kell állniuk.

A megvalósított mérőrendszerrel végzett tesztek eredményei azt mutatják, hogy az megfelel a kitűzött céloknak és eleget tesz a vele szemben támasztott követelmények legnagyobb részének. Nem csak a ferrationok elektrokémiai előállítására használható, hanem a ferrationok képződéséért felelős folyamatok – akár hosszabb ideig tartó – vizsgálatát is lehetővé teszi.

A kísérleti eredmények alapján úgy tűnik, hogy a ciklikus voltammetria és az elektrokémiai impedancia spektroszkópia is alkalmas módszer e rendkívül komplex rendszer tanulmányozására. Az új mérőrendszer használatával reményeink szerint lehetőség nyílik olyan kísérletek elvégzésére, melyek segítségével jobban megérthetjük a ferrationok képződéséhez vezető, bonyolult kinetikájú elektrokémiai folyamat mechanizmusát, és meghatározhatjuk a legfontosabb reakciókinetikai paramétereket.

Az eredményeket várhatóan fel lehet majd használni az ipari méretű gyártási folyamatok optimalizálására is.

*Témavezető:
Dr. Láng Győző
egyetemi tanár, ELTE TTK*





Kémiai technológia



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésszmérnök
BSc, 7. félév
bekearon99@gmail.com

Folyamatos porhomogenizálás digitális ikerpárjának fejlesztése neurális hálókkal és tartózkodási idő eloszlás modellekkel

Kulcsszavak: digitális ikerpár; neurális háló; készítménytechnológia; folyamatkövetés; NIR spektroszkópia

A gyógyszeripar egy hagyományosan szakaszos üzemű gyártásra berendezkedett iparág, az elmúlt években azonban egyre inkább teret nyernek a folyamatos üzemű technológiák ebben a szektorban is [1]. A folyamatos gyógyszergyártás előnyös, mert általa hatékonyabb, biztonságosabb, és átfogóan nyomon követhető gyártási folyamatok, jobb termékhomogenitás, és egy alapjában teljesebb körű minőségbiztosítási rendszer érhető el, amely a PAT (process analytical technologies) folyamatanalitikai technológiákkal ötvözve az Egyesült Államok Gyógyszerengedélyeztetési Hivatalának (FDA) irányelvévé vált [2]. A folyamatos technológiákban a fellépő zavarások leírása, modellezése és kiküszöbölése, valamint a műveletek analitikai követésének megvalósítása, illetve a gyártási rendszerek digitalizációja és magasfokú automatizációja nagy kihívást jelent.

Kutató-fejlesztő munkám során egy folyamatos porhomogenizálási lépés teljeskörű modellezését hajtottam végre mesterséges neurális hálókkal és mechanisztikus tartózkodási idő eloszlás (RTD – residence time distribution) modellekkel alacsony hatóanyag-tartalmú glükóz-koffein rendszeren. A folyamatanalitikát közeli infravörös-spektrofotométer (NIR) biztosította, a homogenizátum koffeintartalmának meghatározására sokváltozós regressziós modelleket állítottam fel. A neurális háló tanításához, illetve a modellek teszteléséhez egy többfunkciós ikercsigás keverőberendezésen folyamatos porhomogenizálási kísérleteket hajtottam végre. A modelleket validáló kísérletek alapján értékeltem és hasonlítottam össze, illetve alacsony hatóanyag-tartalmú porkeverékek előállítására jellemző robusztusságukat vizsgáltam acélból, hogy a porhomogenizálás pontos digitális ikerpárját leírhassem. Ennek segítségével a technológiai folyamatokban használt adagolók karakterisztikája és alkalmazhatósága is jellemezhető.

Kísérleteimet a BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Karának Szerves Kémia és Technológia Tanszékén végeztem. Kutatómunkám szervesen kötődik a Gyógyszer-, Környezeti- és Biztonságtechnológiai Anyagok Kutatócsoport munkájához, azon belül is a folyamatos gyógyszergyártási technológiák megvalósítására és fejlesztésére irányuló kutatási programhoz.

[1] K., Plumb. 2005. Continuous Processing in the Pharmaceutical Industry: Changing the Mind Set, Chem. Eng. Res. Des. 83(6), 730-738.

[2] FDA, U. S. D. of H. and H. S. Guidance for Industry PAT – A Framework for Innovative Pharmaceutical Development, Manufacturing, and Quality Assurance (2004)

*Témavezetők:
Dr. Farkas Attila
tudományos munkatárs, BME VBK
Gyürkés Martin Zoltán
PhD hallgató, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
vegyésszmérnöki
BSc, 7. félév
ficzeremate1998@gmail.com

Alacsony hatóanyag-tartalom valós idejű mérése folyamatos nedves granulálás során gépi látás segítségével

Kulcsszavak: folyamatkövető- és elemző technológia; folyamatos nedves granulálás; színes nyomjelző; gépi látás; képelemzés

A gyógyszeriparban a folyamatos technológiák a korábbi, szakaszos technológiákkal szemben fokozatosan előtérbe kerülnek. Folyamatos gyártás alkalmazása esetén csökken a berendezések helyigénye, jobban kontrollálható és könnyebben méretnövelhető a technológia, valamint a termelés gazdaságosabbá válhat.

A nedves granulálás műveletének folyamatos megvalósítását többféleképpen is megoldották, ezek közül az egyik legígéretesebb módszernek a folyamatos ikercsigás nedves granulálás bizonyul. Ez a technológia különösen előnyös lehet, ha alacsony dózisban jelen lévő hatóanyagot szeretnénk egyenletesen eloszlatni a termékben. Azonban ilyen esetekben a hatóanyag-tartalom valós idejű mérésére a jelenleg elterjedt analitikai eszközök (közeleli infravörös vagy Raman spektroszkópia) már nem alkalmasak, ugyanis 0,5 m/m% alatt ezekkel a hatóanyag-tartalom pontos meghatározása nem megvalósítható.

Munkám célja egy olyan indirekt módszer kifejlesztése volt, mely segítségével már 0,04 m/m% koncentrációnál is mérhető valós időben a hatóanyag-tartalom. Ezt kétféle módon valósítottam meg: a granuláló oldatban a hatóanyag mellett színes nyomjelző feloldásával, valamint a granulátumok szemcseméretének vizsgálatával. Ezek jól megvalósíthatóak gépi látás és képelemzés alkalmazásával.

Először off-line előkísérleteket végeztem. Mozsárban, kézi erővel granuláltam, majd a granulátumokról készült fotók elemzése során megfigyeltem az összefüggést a termék színe és a hozzáadott granuláló folyadék mennyisége között. Ezt követően in-line, hozzáadott riboflavin nyomjelzővel végeztem folyamatos nedves granulálást, és bizonyítottam, hogy fennáll az összefüggés a termék színe és szemcsemérete, valamint az alkalmazott folyadék/szilárd arány között.

Ezt követően carvedilol hatóanyagot oldottam fel a granuláló folyadékban, majd folyamatos nedves granulálás során különböző folyadékarányoknál mintát vettem a rendszerből, és a valós carvedilol tartalom meghatározása céljából HPLC mérést végeztem. Ezen adatok és a fotók $L^*a^*b^*$ színtérben vett b^* értéke vagy a fotókon található szemcsék területe alapján kalibrációt készítettem a carvedilol tartalom meghatározására. Végül a kalibrációt felhasználtam arra, hogy egy folyamatos gyártás során a termék carvedilol tartalmát valós időben mérjem, és a kapott becsléseket HPLC mérés segítségével validáltam.

Témavezető:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnöki szak
BSc, 7. félév
joadam1997@gmail.com

Impinging jet technológia fejlesztése reakcióelegy folyamatos kristályosításához

Kulcsszavak: folyamatos technológiák; kristályosítás; MSMPR; impinging jet; kísérlettervezés

Dolgozatom célja egy folyamatos szintézissel előállított acetilszalicilsav reakcióelegy impinging jet technikával történő folyamatos antizolvens kristályosításának a kidolgozása. Korábbi eredmények alapján a megfelelő termelés eléréséhez többszörös antizolvens-szolvens arányt kell alkalmazni, a különböző (egymáshoz képest többszörös) térfogatáramú folyadéksugarak megfelelő keveredést biztosító ütköztetése nem megoldott impinging jet technológia esetén. Továbbá az acetilszalicilsav kristályosodási kinetikája miatt nem lehet önmagában az impinging jet kristályosítóban elvégezni a folyamatot, hiszen a kristályosítás nem pillanatszerű. Ebből fakadóan munkám során egy saját fejlesztésű impinging jet elemet használtam, amellyel többszörös mennyiségű kicsapószer is jól adagolható. A folyadéksugarak ütköztetése után a kevert elegyet egy túlfolyóval ellátott folyamatosan kevert tartályreaktorba vezettem, ahol a termelés javítása érdekében a kristályok érlelése zajlott. Első lépésként félszakaszos kísérleteket végeztem az utókeverési idő termelésre vonatkoztatott hatásának és az impinging jet elem fizikai alkalmazhatósági határainak a vizsgálatára. Az eredményeket felhasználva kidolgoztam a folyamatos kristályosítások kísérlettervét és kiválasztottam a további kísérleteknél alkalmazott túlfolyós tartályreaktort.

A folyamatos impinging jet kísérletek során a különböző folyamatparaméterek (hőmérséklet, antizolvens-szolvens arány, adagolási sebesség) kristálymorfológiára, tisztaságra és termelésre vonatkoztatott hatását vizsgáltam.

Végül az impinging jet keverőelemet kihagyva, becsepegtetési módszerrel adagolva is végeztem folyamatos kristályokat a folyamatosan kevert tartályreaktorban, annak érdekében, hogy a két technológia által előállított termék tulajdonságait összehasonlítsam és az impinging jet keverőelem hatásait feltérképezzem.

*Témavezetők:
Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Pataki Hajnalka
MTA posztdoktor, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésszmérnök
BSc, 6. félév
kantorpett@gmail.com

Oldószercsere áramlásos körülmények között közel szobahőmérsékleten

Kulcsszavak: áramlásos kémia; töményítés; mikroreaktor ; oldószercsere; szuperkritikus

Az áramlásos kémia térnyerése a 21. század hajnalára tehető, amikor megfogalmazódott az igény egy olyan innovatív környezetbarát technológiára, ami megfelel az új környezetvédelmi előírásoknak, biztonságos és fenntartható fejlődés jellemezi. A folyamatos gyártási technológiák bevezetése kisebb kapacitású üzemet igénylő vegyipari iparágakban, például agrokémiai- és gyógyszeripar, intermedierek, illatanyagok és felületaktív anyagok gyártásában különösen előnyös lehet, de jelentős kihívásokkal néz szembe, a már meglévő és megszokott szakaszos reaktorok használata és elfogadottsága miatt. A folyamatos üzemű működésnek nem csupán a szintézisek esetén van jelentősége, hanem egy gyártósor megvalósítása esetén szintén fontos lehet a tisztítási és egyéb feldolgozási lépések folyamatos mivolta is. Célom egy olyan folyamatos, szobahőmérsékletű töményítési eljárás bemutatása, amely lehetővé teszi a folyamatos szintézis és a kristályosítás között a folyamatos oldószercserét és töményítést.

A flibanszerin gyógyszerhatóanyag szintézise és tisztítása már folyamatos technológiákkal is ismert [1], de ezen lépések végén egy híg oldatot kapnak. Munkám során egy nagynyomású, alacsony hőmérsékletű töményítő készülék továbbfejlesztését végeztem el. A készülékben a szuperkritikus CO₂-t és a töményíteni kívánt oldatot elegyítjük, majd nyomáscsökkenés után pillanatszerűen elpárolog a szén-dioxid és az oldószer egy része, így az eredetinel töményebb szerves oldat marad vissza. A termékáram oldószerösszetételét off-line gázkromatográfiás vizsgálattal határoztam meg.

Az eredeti oldószerkeverékből való töményítést különböző hőmérsékleteken vizsgáltam (25–38 °C), és akár húszszoros töményedési fokot is el tudtam érni állandósult állapotú üzemeltetés mellett. Az anyagmérleget is figyelembe véve 3,5–4-szeres töményítés érhető el megbízhatóan a jelenlegi berendezésben egy lépésben. Ekkor a mérések bizonytalansága kicsi, 2–6%-os relatív hibával. Kétlépéses töményítéssel kombinált oldószercserevel ciklohexán–izopropil-acetát–metanol–víz oldószerkeverék kiindulási 1 mg/ml flibanszerin koncentrációjú szerves fázisából 3 g/h tömegáramú 0,6 tömeg% flibanszerin tartalmú, propanol oldószerű oldatot állítottam elő. A propanolban a flibanszerin oldhatósága kb. 3 tömeg% szobahőmérsékleten, így további töményítéssel még a koncentráció növelhető.

[1] Bana, P, Szigetvári, Á, Kóti, J., Éles, J., Greiner, I., React. Chem. Eng., 2019, 4, 652-657.

*Témavezetők:
Dr. Székely Edit
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Kőrösi Márton
egyetemi adjunktus, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnöki Mesterképzés
MSc, 4. félév
madlajos96@gmail.com

Folyamatos gyógyszeripari poradagolás szabályozásának fejlesztése valós idejű képelemzés alkalmazásával

Kulcsszavak: valós idejű minőségellenőrzés; Quality by Design; folyamatos gyógyszergyártás; folyamatirányítás; visszacsatolós szabályozás

A jelenlegi gyártási folyamatok számos problémát a fejlesztési fázisból örökölnék, amelyek közül azonban sok kiküszöbölhető a Quality by Design (QbD) elvek figyelembe vétele mellett fejlesztett folyamatos technológiák alkalmazásával. Ezáltal csökkenthetők a selejt- illetve az esetleges gyógyszer-visszahívási költségek, hatékonyabbá tehető a gyártás valamint a minőségbiztosítás, valamint lehetőség nyílik az állandó fejlesztésre is. Folyamatfelügyelő (Process Analytical Technology, PAT) eszközök telepítésével biztosítható a valós idejű minőségbiztosítás, valamint a gyártás során keletkezett adatok segítségével tovább növelhető a gyártás hatékonysága.

A folyamatos technológiák egy kritikus műveleti lépése a folyamatos poradagolás, mivel a teljes gyártási folyamat sikeressége függ a komponensek tömegáramának megbízhatóságától. Ennek fontossága alacsony dózissú, nagy erősségű (Highly Potent) hatóanyagok esetében tovább fokozódik, ahol akár néhány gramm/órás adagolási sebességre is szükség lehet, amire a jelenleg piacon kapható gravimetrikus adagolók nem alkalmasak.

Ezért munkám során célul tűztem ki egy új, képelemzésen alapuló módszer megalkotását, amely képes folyamatos technológiával adagolt porok tömegáramának meghatározására, valamint visszacsatolós szabályozás révén adott célértéken tartására.

Ehhez szükség volt a megfelelő minőségű képek elkészítésére alkalmas rendszer összeállítására, valamint a képelemző szoftver megalkotására, amely az elkészített képek valós idejű elemzésén túl képes kommunikálni a számítógéphez csatlakoztatott kamerával, digitális mérleggel, illetve poradagolóval. Ezután összefüggést kerestem a képelemzéssel meghatározott, szemcsék által okozott fényesség és azok tömegárama között.

Eredményeim közé tartozik, hogy a dinamikus képelemzésen alapuló eszköz megalkotása után sikeresen alkalmaztam azt porok tömegáramának (és tömegének) nagy pontosságú becslésére, mind dozírozás, mind folyamatos adagolás esetében. Ezt kihasználva a rendszer karakterisztikájának modellezése után elsőként valósítottam meg a kiadagolt por tömegáramának kamerajel alapú visszacsatolós szabályozását, amely ezáltal potenciális eszközként szolgál egy újfajta minőségbiztosítási eljárás számára.

*Témavezető:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
vegyésmérnök
MSc, 4. félév
mkitti.major@gmail.com

Algaszuszpenzió sűrítésének vizsgálata habflotálással

Kulcsszavak: algatechnológia; flotálás; habflotálás; flokkulálószer; pH; gáz diszperzió

Az algatechnológia egyre elterjedtebb a nemzetközi K+F+I gyakorlatban, mert egyrészt jó eséllyel alkalmazhatóak bizonyos szennyezőanyagok kibocsátásának csökkentéséhez, másrészt megújuló energiaforrásként is szolgálnak. Magas lipidtartalmuk (40–80 % [1]) miatt biodízel előállítására is használják napjainkban, de nem csak a lipidkinyerés a cél, hanem zsírok, telítetlen zsírsavak, olajok, természetes festékek, cukrok, pigmentek, antioxidánsok, nagyértékű bioaktív komponensek előállítása is [1]. A mikroalgáknak nagy a reprodukciós arányuk, valamint igen tág a tűrőképességük (például szélsőséges időjárású viszonyok miatt mezőgazdasági célokra alkalmatlan területeken is termesztethők [1]). Számos kutatás foglalkozik a termesztett szuszpenzió szeparálásával, mert az alap elválasztási műveletek, mint a szűrés, ülepités, derítés igen nehézkesek, költségesek és/vagy nehezítik a további biomaszafeldolgozást [2].

A Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszéken fotobioreaktorokban előállított algaszuszpenziók szeparálhatóságát vizsgáltam gáz szuszpenzióba történő diszpergálás során. Célom a kiindulási algaszuszpenzió minél hatékonyabb besűrítése volt, a szeparációs művelet optimumainak, határértékeinek meghatározásával. Kísérleteim kezdetén optimális szuszpenzió mennyiséget (térfogat, folyadék oszlop magasság) és betáplálási levegőtérfogatáramot határoztam meg. Ezek után, a tanulmányozott szakirodalmak alapján két féle flokkulálószernek ($\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$), valamint pH változtatásnak, valamint e kettő együttes hatását is vizsgáltam. Továbbá a diszpergált gáz eloszlását is tanulmányoztam a flotáló oszlopban. Kísérleteim során a kezelendő szuszpenziók minőségét, állapotát is figyelembe vettem, mint a flotálási műveletet jól érezhetően befolyásoló tényezőt. Abszorbancia és tömeg méréseket, koncentráció meghatározást is vizsgáltam a különböző koncentrációjú flokkulálószerrel és pH változtatás hatásainak vizsgálata során.

[1] G. M. Margarita Stoytcheva, Biodiesel-feedstocks and processing technologies, Rijeka, Horvátország: In Tech, 2011.

[2] A. G. a. A. H. Mariam Alhattab, „Microalgae Harvesting Methods for Industrial Production of Biodiesel: Critical Review and Comparative Analysis,” Journal of Fundamentals of Renewable Energy J and Applications, kötet 5., szám 2., pp. 1–26, 2015.

*Témavezető:
Dr. Hodai Zoltán
egyetemi adjunktus, PE MK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Vegyésszmérnök
MSc, 4. félév
tpiroska94@gmail.com

Anaerob hulladékáramok energetikai hasznosítása bio-elektrokémiai rendszerekben

Kulcsszavak: bio-elektrokémia; szennyvíz

Számos kutatás irányul mind a globális energiaválság leküzdésére, mind a különböző hulladékáramok kezelésének, feldolgozásának korszerűsítésére. A bio-elektrokémiai rendszerek egyre nagyobb teret hódítanak az említett célkitűzések megvalósításában; különböző típusaik alkalmazhatóak például elektromos energia termelésére, hidrogén vagy metán előállítására szennyvíziszap felhasználásával.

Kutatásom során kétfajta anaerob hulladékáram, egy biogáz fermentorból származó, mezofil anaerob iszap és egy szennyvíziszap energetikai hasznosításával foglalkoztam. Kísérleteimet különböző típusú és kialakítású bio-elektrokémiai rendszerekkel – mikrobiális üzemanyagcellával, mikrobiális elektrohidrogenezis cellával és elektrofermentációval – végeztem. Dolgozatomban az említett rendszereknél szerzett tapasztalataimat és az elért eredményeket mutatom be.

*Témavezető:
Dr. Nemestóthy Nándor
egyetemi docens, PE MK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésszmérnöki alapképzési szak
BSc, 7. félév
blankaveszi@gmail.com

Acetil-szalicilsav porok és tiszta hatóanyagot tartalmazó kapszulák kioldódásának jóslása a szemcseméret-eloszlás ismeretében

Kulcsszavak: szemcseméret-eloszlás; PAT; kioldódáspredikció; mesterséges neurális hálózat

A gyógyszergyártásban egyre nagyobb figyelmet kap az alapanyag és a készítmények roncsolásmentes és valós-idejű vizsgálata a folyamatos technológiák bevezetése miatt, bár ez további kihívásokat jelenthet az in vitro kioldódásvizsgálat során, ami egy hagyományosan hosszú és roncsolásos művelet. A szakirodalomban számtalan bizonyítékot találni arra, hogy a hatóanyag szemcsemérete jelentősen befolyásolja a tabletták kioldódását. Azonban, ennek modellezésére leginkább fizikai összefüggéseket alkalmaztak eddig, robusztus, sok adattal dolgozó empirikus modelleket kevésbé. Bár az előbbieket egyszerű összefüggések modellezésére alkalmasak, az utóbbi komplex formulák tanulmányozása során jelentős előnyökkel szolgálhat [1].

Munkám során egy empirikus modellt optimalizáltam, amely acetil-szalicilsav kioldódását célzott prediktálni a szemcseméret-eloszlásból. Ehhez őrléssel és szitálással különböző szemcseméret-tartományú acetil-szalicilsav por frakciókat választottam el, és az így nyert frakciókból különböző összetételű porkeverékeket készítettem. Az egyes frakciók és a keverékek szemcseméret-eloszlását mértem, majd felvettem a porkeverék és tiszta hatóanyagot tartalmazó kapszulák kioldódásgörbéjét. Ezután azt tűzttem ki célul, hogy modellezéshez alkalmazott mesterséges neurális hálózat jellemzőinek a predikcióra vonatkozó hatását vizsgáljam. Emellett összehasonlítottam a becslések eredményét, ha változtattam a bemeneti adatként felhasznált a szemcseméret-eloszlás osztályszámait és típusát (szám- vagy térfogatalapú). Az eredmények jó kiindulópontként szolgálhatnak a szemcseméret-eloszlás komplex készítmények (pl. tabletták) kioldódására gyakorolt hatásának tanulmányozásához.

[1] M. F. Simões et al., „Artificial neural networks applied to quality-by-design: From formulation development to clinical outcome,” Eur. J. Pharm. Biopharm., vol. 152, pp. 282–295, Jul. 2020.

*Témavezető:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyészmérnöki mesterszak
BSc, 6. félév
z.petra97@gmail.com

Elektrosztatikus szálképzéssel előállított hatóanyag tartalmú minták folyamatos homogenizálása

Kulcsszavak: elektrosztatikus szálképzés; amorf szilárd diszperziók; folyamatos gyártás; valós idejű analitika; folyamatos feldolgozás

Az amorf szilárd diszperziók egyre nagyobb teret hódítanak a gyógyszergyártásban, köszönhetően a jó oldódási tulajdonságuknak, mely sok esetben a rossz vízoldhatóságú hatóanyagok biológiai hasznosulását is javítja. A jelenleg piacon lévő, ilyen rendszereket tartalmazó gyógyszerkészítmények jelentős részénél porlasztva szárítással, vagy olvadék extrúzióval alakítják ki az amorf formát. A szakirodalomban azonban folyamatosan jelennek meg új, innovatív eljárások, melyek közül az elektrosztatikus szálképzés egy modern, és igen ígéretes módja az előállításuknak.

Az elektrosztatikus szálképzés egyik előnye, hogy egy folyamatos technológia, így lényegesen hatékonyabb és kevésbé időigényes az amorf jellegű termékek gyártása. Kihívást jelenthet viszont a rossz gördülékenységgel jellemezhető nano és mikro mérettartományba eső szálak teljesen folyamatos üzemmódban történő feldolgozása. A leggyakoribb gyógyszerforma a tabletták, melynek előállításánál a komponensek porfolyási tulajdonságainak különösen nagy hatása van a hatóanyag egységességére a végtermékben, szakaszos és folyamatos gyártások során egyaránt.

Kutatómunkám célja egy összetett, folyamatos rendszer megalkotása volt, mellyel az elektrosztatikus szálképzés közelebb kerülhet az ipari alkalmazáshoz. Először a szálas termékek nagyobb mennyiségű előállításával foglalkoztam, majd törekedtem a méretnövelt rendszer és a további műveletek összekötésére. Az egyes részlépéseket külön vizsgáltam, kiemelt figyelmet fordítva az adagolás karakterisztikájának megismerésére, mely a folyamatos gyártások meghatározó lépésének tekinthető. Munkám során az adagolás sebességét a szálképzés termelési sebességéhez igazítottam, megalapozva egy olyan rendszer működését, mely a valós gyártás során is folyamatosan üzemeltethető lenne. A következő lépésben a szálas termék és a tablettázási porkeverék folyamatos homogenizálást vizsgáltam részletesebben, melyre jelenleg még nincs példa a szakirodalomban. Mivel a folyamatos rendszerek állandó felügyelete elengedhetetlen, a homogenizálási lépés mellé in-line nyomon követésre alkalmas módszert is fejlesztettem. Ehhez közeli infravörös spektroszkópiát használtam, mely lehetőséget adott a szálas terméket tartalmazó porkeverék aktuális koncentrációjának meghatározására. Ez az analitikai eljárás a későbbiekben felhasználható lenne egy visszacsatolásos szabályozás beépítésére, mellyel az adagolók irányítása elérhetővé válna, és ezzel a termékek állandó minősége folyamatosan biztosítható lenne.

Témavezetők:

*Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK
Szabó Edina
doktoráns, BME VBK*





Környezeti kémia és környezettechnológia



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
gyenespeter5@gmail.com

Kationos farmakonok eltávolítása vizes oldatokból polielektrolit/grafén-oxid multirétegekkel módosított nanoszűrő membránokkal

Kulcsszavak: grafén-oxid; layer-by-layer; nanoszűrés; farmakon elválasztás

A dolgozatomban nanoszűrő membránok felületmódosításával foglalkoztam azzal a céllal, hogy alkalmassá tegyem a membránokat a farmakonok hatékony elválasztására. A membránok felületére különböző (1 és 10 közötti) számú polielektrolit/grafén-oxid párosrétegeket vittem fel layer-by-layer módszerrel. A módosított membránokat optikai mikroszkóppal, diffúz reflexiós spektroszkópiával és röntgendiffrakcióval vizsgáltam. Hasonlóan, felületmódosított kvarclemezeket is vizsgáltam röntgendiffrakcióval és UV-látható spektroszkópiával, a rétegszerkezet felépülésének tanulmányozására. A membránok felületi módosításának alapanyagául szolgáló grafén-oxidot transzmissziós elektronmikroszkóppal és dinamikus fényszórásméréssel vizsgáltam. A módosított membránok optikai mikroszkópos képein grafén-oxid multirétegek és egyedi lamellák láthatóak. A röntgendiffrakciós képünk szabályos szerkezetre utal. A módosított membránok teljesítőképességét két modellmolekulával teszteltem: prokainnal és akriflavinnal. A párosrétegszám függvényében a membránok visszatartása telítési görbét követett, illetve a permeátum térfogatárama egy minimum felé konvergált. A membránok visszatartása akár 41%-ról 56%-ra nőtt a prokain és akár 21%-ról 44%-ra nőtt az akriflavin esetében. A permeátum térfogatárama módosítás hatására csak kismértékben csökkent. A prokain esetében a pH függést is vizsgáltam: a pH függvényében a visszatartás minimumgörbét adott, aminek a minimuma pH = 8,5-nél van. Eredményeim így demonstrálják, hogy ultravékony polikation/kolloid részecske filmek hatékonyan alkalmazhatók nanoszűrő membránok szűrési teljesítményének növelésére.

A dolgozatom elkészítése során nanoszűrő membránokat és kvarclemezeket felületmódosítottam polielektrolit/grafén-oxid vékonyrétegekkel. A membránokat diffúz reflexiós spektroszkópiával és röntgendiffrakcióval; a kvarclemezeket UV-látható spektroszkópiával és röntgendiffrakcióval vizsgáltam. A membránokat tesztszűrésnek vettem alá, amely eredményeiből megállapítottam, hogy a felületmódosítás kedvező irányba befolyásolja a membránok tulajdonságait farmakonok eltávolítása szempontjából.

*Témavezető:
Dr. Szabó Tamás
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Kémia
MSc, 3. félév
tamas.hlogyik@gmail.com

Heterogén fotokatalízis alkalmazása imidakloprid és tiakloprid vizes oldatának kezelésére

Kulcsszavak: heterogén fotokatalízis; imidakloprid; tiakloprid; reakció mechanizmus; mátrix hatás

Napjaink egyik legnagyobb kihívása a vízkezelés és ivóvízkezelés szempontjából a biológiailag nehezen lebontható, ugyanakkor negatív biológiai hatással bíró szerves vegyületek maradéktalan eltávolítása. Megoldást jelenthetnek az úgynevezett nagyhatékonyságú oxidációs eljárások, melyek reaktív gyökök generálásán alapulnak. Ezen eljárások közé tartozik a heterogén fotokatalízis is, mely során megfelelő hullámhosszúságú fénnel megvilágított fotokatalizátor felületén lejátszódó redoxi folyamatok indítják az átalakulást.

Dolgozatom témája két, nagy mennyiségben forgalmazott és elterjedten alkalmazott peszticid hatóanyag, az imidakloprid és a tiakloprid heterogén fotokatalitikus átalakulásának vizsgálata. Mindkét vegyület a neonikotinoidok családjába tartozik, az Európai Unió 2018-ban az imidakloprid szabadföldi használatát a méhpopulációra kifejtett negatív hatása miatt betiltotta, valamint a tiakloprid engedélyének megújítása is erősen kérdéses.

Munkám során vizsgáltuk az egyes reakció paraméterek (TiO_2 szuszpenzió töménysége, hatóanyag és oldott oxigén koncentráció) hatását az átalakulási sebességre. A kezdeti átalakulási sebesség mellett mértük a kémiai oxigénigény (KOI), teljes szerves széntartalom (TOC), adszorbeálható klórtartalmú vegyületek (AOX) és nitrátion koncentrációt, valamint követtük egyes köztitermékek képződését és átalakulását. A klórozott köztitermékek képződése és alakulása a neonikotinoidok átalakulásával egyidejűleg történt, az imidakloprid és tiakloprid teljes átalakulása után klórozott szerves vegyületek már nem mutathatók ki a kezelt szuszpenzióban. Nitrátion képződést csak az imidakloprid esetében tapasztaltunk. Mindkét esetben a TOC és KOI változás sebessége jelentősen lassult a kiindulási vegyületek átalakulása után, ami a $\text{HO}\cdot$ -kel nehezen reagáló köztitermékek képződésére utal. *Vibrio fischeri* tesztorganizmust használva imidakloprid átalakulása során az ökotoxicitás nőtt, tiakloprid esetén viszont csökkent.

Vizsgáltuk különböző adalékanyagok és a pH hatását is az átalakulás sebességére. Eredményeink alapján arra következtettünk, hogy a $\text{HO}\cdot$ -kel való reakció mellett a közvetlen töltésátmenet is szerepet játszik az átalakulásban. A gyakorlati megvalósíthatóság szempontjából összehasonlítottuk különböző mátrixok hatását. Míg a tisztított szennyvíz nem befolyásolta számottevően az átalakulási sebességet, a csapvíz nagymértékben csökkentette azt.

*Témavezetők:
Dr. Alapi Tünde
adjunktus, SZTE TTIK
Náfrádi Máté
PhD hallgató, SZTE TTIK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Kémia
MSc, 3. félév
tamas.hlogyik@gmail.com

Higanygőzlámpa és LED fényforrások összehasonlítása ZnO és TiO₂ fotokatalizátorok alkalmazása során

Kulcsszavak: LED; heterogén fotokatalízis; fotokatalizátor; kumarin

A megfelelő tisztaságú víz hatékony és gazdaságos előállítása napjaink egyik kihívása. A kiegészítő víztisztítási módszerek közé tartozó nagyhatékonyságú oxidációs eljárások igen gyakran az UV tartományban sugárzó fényforrások alkalmazását igénylik. Heterogén fotokatalízis esetén elsősorban higanygőz és xenon lámpákat használnak, melyek helyettesítésére az elmúlt évtizedek intenzív fejlesztéseinek köszönhetően a LED fényforrások megfelelő alternatívát nyújtanak.

Munkánk során 365 nm-en sugárzó HighPower LED-ekkel ellátott reaktort építettünk, majd teszteltünk heterogén fotokatalízist alkalmazva ZnO és TiO₂ fotokatalizátorokkal. Eredményeinket összehasonlítottuk a HighPower LED-ekhez képest sokkal kedvezőbb árú, 398 nm-en sugárzó, a kereskedelmi forgalomban „UV LED”-ként kapható fényforrások, valamint a 300-400 nm tartományban sugárzó kisnyomású higanygőzlámpáéval.

A fotonfluxus meghatározása minden esetben vas-oxalát aktinometriával történt. Az általunk épített reaktor esetén a betáplált elektromos teljesítmény függvényében a kibocsátott fotonfluxus jól szabályozhatóan, lineárisan változott. Kumarint használva modellvegyületként mindkét fotokatalizátor esetén vizsgáltuk a fotonfluxus, a kumarin kiindulási koncentrációja és a katalizátor töménységének a hatását a HO• képződési sebességére, majd elektromos energiafelhasználás szempontjából a három fényforrás alkalmazása során kapott eredményeinket összehasonlítottuk.

A gyakorlati felhasználhatóságot szem előtt tartva két mátrix (szegedi csapvíz és tisztított szennyvíz) hatását is vizsgáltuk a kezdeti reakciósebességre.

*Témavezetők:
Dr. Alapi Tünde
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Náfrádi Máté
PhD hallgató, SZTE TTIK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Kémia
MSc, 8. félév
kocsis.gabor03@gmail.com

TiO₂ alapú fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: heterogén fotokatalízis; szén-dioxid redukció; MgO–TiO₂

A heterogén fotokatalízis során használt félvezetők közül a TiO₂ bizonyult az egyik legígéretesebbnek nagy stabilitása, nem toxikussága, alacsony előállítási költsége miatt. A katalizátor gerjesztését követően keletkező elektronok és lyukak rekombinálódhatnak, illetve töltésátviteli folyamatokban reaktív gyökökké (pl. hidroxilgyök és szuperoxid-gyökanion) alakulhatnak át, melyek további oxidációs-redukációs folyamatokat indíthatnak el. A TiO₂ különböző elemekkel, vegyületekkel történő módosításával növelhető a fotokatalitikus reakciók hatékonysága.

Munkám során kétféle eljárással szintetizáltam különböző összetételű MgO–TiO₂ katalizátorokat. A magnézium azért jó választás mert a Mg²⁺ (145 pm) és a Ti⁴⁺ (176 pm) ionsugara meglehetősen közel van egymáshoz, így a magnéziumion könnyen be tud épülni a rácsszerkezetbe. A fém-oxid elektroncsapdaként is működhet a nanorészecskék felületén, így a fotogenerált elektron-lyuk pár rekombinációjának valószínűsége jelentősen csökken, azaz élettartamuk megnő.

Meghatároztam az előállított katalizátorok fázisösszetételét, fajlagos felületüket, valamint gerjesztési küszöbenergiájukat. Fotoaktivitásuk összehasonlításakor kumarint és 1,4-hidrokinont alkalmaztam modellvegyületként. A kumarin hatékony hidroxilgyök-befogó, a képződő 7-hidroxi-kumarin koncentrációjának változását a fluoreszcencia intenzitásának mérésével követtem nyomon. Az 1,4-hidrokinon fotodegradációjának folyamatában a szuperoxid-gyökanion szerepe kulcsfontosságú. A modellvegyület koncentrációjának változását spektrofotometriásan követtük nyomon.

Megállapítottam, hogy a szol-gél eljárással előállított TiO₂ katalizátorok hidroxilgyök generáló képessége kisebb, ugyanakkor szuperoxid-gyökanion generáló képességük nagyobb, mint a hasonló módon készült MgO–TiO₂ katalizátoroké. Azaz a MgO jelenléte elősegíti a szuperoxid-gyökanion képződését, míg a hidroxilgyök képződését gátolja. Az ilyen katalizátorok jól alkalmazhatók redukációs folyamatok katalizálására, pl: szén-dioxid fotoredukációjára.

*Témavezető:
Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet
egyetemi docens, PE MK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Vegyész
MSc, 2. félév
nagypeter211@freemail.hu

Ipari szennyvizek kezelése réteges kettős hidroxidokkal

Kulcsszavak: réteges kettős hidroxidok; ipari bányavíz; in situ vízkezelés; nanostruktúrák

A réteges kettős hidroxidok az elmúlt évtizedekben az egyik legkutatottabb nanostruktúra típus lett. Lehetséges felhasználásuk a gyógyszer tudománytól kezdve, a heterogén katalízisen át a szennyvízkezelésig, igen nagy potenciált rejt magában. Egyszerű szintézisük, könnyen variálható szerkezetük, kolloid tulajdonságaik, valamint, a kompozit nanorészecskék készítésére történő egyszerű alkalmazhatóságuk mind a részletes megismerésüket szorgalmazzák. Jelen tanulmány egy, a laboratóriumi modellrendszerek világából kilépő, valódi lehetséges ipari alkalmazását tárgyalja a fent említett részecsketípusnak. Így egy olcsó és könnyen megvalósítható zöldkémiai víztisztító technológia alapjait írja le, különös hangsúlyt fektetve, az alkalmazott részecskék részletes szerkezetvizsgálatára, az ipari szennyvízmintákban felhasznált, réteges kettőshidroxid diszperziók, kolloidkémiai jellemzőinek ismertetésére.

*Témavezetők:
Dr. Szilágyi István
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Somosi Zoltán
PhD hallgató, SZTE TTIK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Biomérnök
BSc, 5. félév
toroktivadarpeter@gmail.com

Fenol toleráns *Rhodococcus opacus* PD630 fermentációjának vizsgálata és fenol-szenzor vezérelt rátáplálásos rendszer megépítése

Kulcsszavak: lignin rátáplálásos fermentáció; biodízel; triacil-glicerid; optimalizálás

A lignin a legnagyobb raktára a megújuló aromás vegyületeknek. A teljes biomassza 20-35%-át teszi ki, ezzel a második leggyakoribb természetes polimer a cellulóz után. A lignin felhasználása különös kihívást jelent, mivel az evolúció során úgy fejlődött, hogy minél nehezebben legyen lebontható. A lignin teljes felhasználása és felhasználásának korszerűsítése kritikus fontosságú az újabb generációs biofinomítók gazdasági életképessége szempontjából.

A lignin lebontása és felhasználása nehézkes a mikroorganizmusok számára is, ennek fő oka, hogy az aromás gyűrűket kevés mikroba tudja bontani, valamint a lignin bomlástermékek toxikusak (például: fenol, furfuro). A *Rhodococcus opacus* PD630 egy ideális jelölt lehet erre a feladatra, mivel mind a szénhidrát, mind a lignin frakcióját a lignocellulóznak képes értékes termékekké alakítani, valamint ellenálló a toxikus lignin bomlástermékek ellen, mint például a fenol ellen. További előnye a *Rhodococcus opacus* PD630-nak, hogy nagy mennyiségben képes megfelelő körülmények között triacil-gliceridek (TAG) felhalmozására, amely akár a sejt teljes szárazanyag tartalmának ~80%-át is kiteheti. A TAG-ek ezután átalakíthatók lehetnek egy átészterezéssel biodízellé (pl. metil-palmitát), ami egy potenciális üzemanyag lehet a fosszilis tüzelőanyag helyett/mellett.

Kísérleteim során célom volt a *Rhodococcus opacus* PD630 minél magasabb koncentrációjú fenolhoz való adaptációja növekvő koncentrációjú fenolt, mint egyedüli C-forrást tartalmazó fermentációkkal. Az ideális nitrogén koncentrációt is vizsgáltam fenol szénforrás mellett, valamint a nitrogén mennyiség hatását a növekedésre. A korábban már *Pichiapastoris* élesztőnél használt online metanol szenzor és metanol ráptáplálásos rendszer fenolra adaptálása és alkalmazása illetve optimalizálása volt a fő fókusz munkám során *Rhodococcus opacus* fermentációkban. Ennek érdekében vizsgáltam a szenzor működését befolyásoló tényezőket fenol esetén, valamint a szenzor karakterisztikáját és működését optimalizáltam. A szenzor vezérelt rátáplálásos rendszerrel egy a fermentáció alatt állandó vagy szükség szerint szabályozható fenol koncentrációt alkalmazó rendszert kívántam létrehozni.

*Témavezető:
Dr. Németh Áron
egyetemi docens, BME VBK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 7. félév
petervarga919@gmail.com

Új aeroszol részecskék keletkezésének és növekedésének magassági kiterjedése

Kulcsszavak: levegő; aeroszol; nukleáció; léggör; drón

A léggöri új részecske-képződés olyan elsőrendű fázisátalakulás, amely során gázokból fotokémiai oxidációt követően kondenzációra képes gőzök keletkeznek, amelyek a jelenlévő, más anyagokkal új, szilárd vagy folyékony diszpergált fázist – azaz aeroszol rendszert – eredményeznek. Ez a folyamat hozza létre az aeroszol döntő részét a részecskeszám tekintetében a globális léggörben. Az ultrafinom aeroszol részecskék megnövekedve, felhőkondenzációs magvakként befolyásolják az éghajlatot, illetve többlet egészségügyi kockázatot jelentenek.

A nukleáció a Kárpát-medencében térben koherens módon jön létre egy nagyobb horizontális méretű jelenségként. Célunk a folyamat magassági kiterjedésére vonatkozó első ismeretek megszerzése volt. A vertikális eloszlás meghatározása azért is fontos, mert egyes elképzelések szerint a nukleáció, illetve a részecskénövekedés kezdetei szakasza bizonyos körülmények között nagyobb magasságokban játszódik le.

Céljaink eléréséhez egy drónra szerelt, hordozható kondenzációs részecskeszámlálóval (CPC) és meteorológiai szondával végeztünk méréseket. A CPC által mért koncentráció adatokat a BpART Laboratóriumban működő differenciális mozgékonyaságon alapuló részecskeméret szeparátorral (DMPS) hitelesítettük. A drón a felszállást követően lépcsőzetesen emelkedett, 50 méterenként megállt, ahol 3–6 egyedi mérést végeztünk a pontosság növelése érdekében. A mérőrendszerek által mért értékeket 5 s időfelbontásra szinkronizáltuk, majd meghatároztuk az időmeneteket, a magassági profilokat és az összefüggéseket.

Nem-nukleációs napokon a koncentrációk időmenetében nem tapasztaltunk visszatérő és általános tendenciát. A koncentráció általában kis mértékben változott és fluktuált a repülések ideje alatt. Nukleációs napokon azonban a jelenséghez legközelebbi mérések a koncentráció növekvő tendenciáját mutatták, míg ugyanazon a napon végzett későbbi repülések ezt a tendenciát már nem jelezték. Az összes nukleációs napot tekintve, a különböző magasságokon mért koncentrációk medián értéke szintén növekvő tendenciát jelzett, míg a nem-nukleációs és az azonosíthatatlan napokon ez a tulajdonság nem mutatkozott. Mindebből arra következtetünk, hogy a magasságnak szerepe lehet a folyamatában, ezért a vizsgálatokat folytatjuk. A mérések reprezentativitásának növelése érdekében szükséges a mérési napok számát bővíteni, valamint jelentősen növelni kell a jelenlegi kb. 8 perces repülési időt is.

*Témavezető:
Dr. Salma Imre
egyetemi tanár, ELTE TTK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Vegyész
MSc, 4. félév
vvirag6@gmail.com

Vákuum-ultraibolya tartományban sugárzó fényforrások jellemzése, összehasonlítása és alkalmazhatóságának vizsgálata antibiotikum hatóanyagok átalakításában

Kulcsszavak: 172 nm; 185 nm; VUV fotolízis; mátrixhatás; szulfonamid

A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közé tartozó VUV fotolízis a 200 nm-nél kisebb hullámhosszú sugárzáson alapul, mely során a vízből képződő gyökök ($H\cdot$ és $\cdot OH$) képesek a szerves szennyezők hatékony átalakítására. Munkánk során két, VUV tartományban sugárzó fényforrás alkalmazhatóságát vizsgáltuk és hasonlítottuk össze a szulfonamidok csoportjába tartozó négy antibiotikum hatóanyag vizes oldatból való eltávolítása szempontjából. Az egyik fényforrás a nagytisztaságú víz előállítására is használt 254 és 185 nm hullámhosszúságon (UV/VUV185 nm) sugárzó kisnyomású higanygőzlámpa, míg a másik az egyetlen kereskedelmi forgalomban kapható, 172 nm hullámhosszú fényt (VUV172 nm) kibocsátó Xenon-excimer lámpa volt.

Milli-Q víz esetében a H_2O_2 koncentrációk egyensúlyi értékeinek hányada a két fényforrás esetén jól tükrözi a 185 és 172 nm-es fotonok fluxusainak arányát. A kumarin átalakulási és az abból képződő hidroxilált termék képződési sebességeinek arányára ez már nem volt igaz, amit a 172 nm hullámhosszú fényvel besugárzott oldatok inhomogenitásával értelmeztük.

Vizsgáltuk a különböző fényforrások használata során az egyes szulfonamidok átalakulási sebességét, valamint négykomponensű oldataik esetén azok egymásra gyakorolt hatását Milli-Q vízben és három különböző mátrixban, melyek a csapvíz, fordított ozmózissal tisztított ipari szennyvíz, és biológiailag tisztított lakossági szennyvíz voltak. A négykomponensű szulfonamid oldatok UV/VUV185 nm fotolízise során a 254 nm hullámhosszú UV fény is jelentősen hozzájárul azok átalakulásához, míg Xenon-excimer lámpát használva az elsősorban a gyökökkel való reakciókhoz rendelhető.

A szulfonamidok UV/VUV185 nm fotolízise során a csapvíz bizonyos esetekben pozitív hatást, míg a különböző paraméterekkel rendelkező fordított ozmózissal tisztított ipari és biológiailag tisztított lakossági szennyvíz hasonló mértékű negatív hatást fejtett ki. VUV172 nm fotolízis során egyértelműen a biológiailag tisztított szennyvíz csökkentette az átalakulási sebességet. Az egyes szerves mátrixkomponensek hatása (HCO_3^- , Cl^- , NO_3^-) arra utalt, hogy a szerves ionok és a víz közti kompetíció a 185 nm hullámhosszú fotonokért is hozzájárul a hatékonyság csökkenéséhez.

Összehasonlítva a kiindulási vegyületek 90%-os átalakulásához szükséges elektromos energiát, a biológiailag tisztított lakossági szennyvíz mátrixban egyértelműen a kisnyomású higanygőz lámpa használata a gazdaságosabb.

*Témavezetők:
Dr. Alapi Tünde
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Farkas Luca
PhD hallgató, SZTE TTIK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
vegyész
MSc, 3. félév
vmate6@gmail.com

A COVID–19 járványügyi intézkedések hatása Budapest levegőminőségére

Kulcsszavak: levegőminőség; covid–19; légszennyezés; forgalom

A levegő szennyezése az közlekedéssel szorosan összekapcsolható. A COVID–19 világjárvány miatt 2020 első felében számos ország, így Magyarország is hozott korlátozó intézkedéseket a vírus terjedésének lassítására. Ezek az intézkedések érezhetően csökkentették a gépjárműforgalmat, így lehetőségünk nyílt arra, hogy a közlekedésből származó levegőszennyezők mennyiségét becsülni és közvetlenül mérni tudjuk. A vizsgálatba a megszokott levegőszennyezőket: a nitrogén-monoxidot, a nitrogén-dioxidot, az ózont, a szén-monoxidot, a kén-dioxidot és a légköri aeroszol részecskéket vontuk be.

A budapesti gépjárműforgalom körülbelül 50%-ra esett az előző referenciaidőszakhoz képest. A NO, NO₂, CO és a teljes részecskeszám-koncentráció a forgalommal együtt csökkent, a legszigorúbb kijárási korlátozási időszakban, március 28. és május 17. között ez a csökkenés elérte a 68%-ot NO koncentrációja esetén, 46%-ot a NO₂-nál, 27%-ot a CO-nál és 24%-ot a teljes részecskeszám-koncentrációnál.

Kapcsolatot vontunk a légköri koncentrációk és a gépjárműforgalom között, ami szerint 10%-os forgalomcsökkenésnél a NO 6,3%-kal, a NO₂ 5,7%-kal, a CO 0,4%-kal csökkenne. A PM tömegkoncentrációk esetén nem mutattunk ki kapcsolatot, így feltételezhető, hogy ezen részecskék nem a közlekedésből származnak elsősorban. Az O₃ koncentrációja a többi légszennyező anyagtól függő reakciómechanizmusa miatt nőtt.

A munka lényegi része a Budapest Aeroszol Kutató és Oktató Platform kutatócsoportban történt, ahol a feladataim nagy része adatkiértékelés, -előkészítés és ábrázolás volt, valamint bekapcsolódtam a mérőállomás mérési munkálataiba, karbantartásába.

*Témavezető:
Dr. Salma Imre
egyetemi tanár, ELTE TTK*





Polimerkémia- és technológia



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
aitkazina.aiman@gmail.com

Kinetic investigation on the synthesis of thioether containing copolymers

Hungarian Keywords: kopolimer; tioéter; diszulfid; Michael-addíció; párhuzamos polimerizáció

Click chemistry is a concept of highly efficient chemical reactions in which these reactions share some important common features, such as high reaction yields, benign reaction conditions, and easily removable byproducts, stereospecific reaction coordinates, and tolerance to diverse functional groups. Accordingly, taking into account previous studies, advantages of the “click” nature offered by thiols have been exploited and implemented in a broad range of fields, like chemical, biochemical, biological, physical, and engineering applications. The Michael-type addition reaction is one of the „click” chemistry mechanisms, which used for copolymer formation. Thiols and alkenes couple even under physiological conditions with no by-products, and there is no need for free radical initiating chemicals. In my work, I have attempted to investigate the effect of a novel unique process developed very recently, which is based on the simultaneous thiol-ene Michael addition and oxidative thiol coupling reactions.

In the past few years, sulfur-containing polymers have gained increased interest due to their advantageous properties which make them useful for a wide range of applications. I have studied the reaction of 3,6-dioxa-octane-1,8-dithiol (DODT) with poly(ethyleneglycol) diacrylate (PEGDA) in the presence of N,N,N',N'',N'''-pentamethyl-diethylene-triamine (PMDETA) catalyst and hydrogen peroxide as an oxidizing agent. This reaction shows the features of green chemistry due to the use of ambient temperature and pressure. During the reactions, small amounts of samples were withdrawn at different reaction times, and alcohol was added to the opaque solutions in which the obtained polymers were precipitated. Analysis of the resulting polymer samples was carried out by ¹H NMR spectroscopy and gel permeation chromatography (GPC) for the determination of the number of average molecular weight (M_n) and the average amounts of DODT and PEGDA monomeric units in the obtained copolymers.

My results conclusively indicate that the simultaneous thiol-ene Michael addition reaction and oxidative thiol–thiol coupling successfully resulted in P(DODT-co-PEGDA) copolymer formation under green chemistry conditions in a short reaction time. Moreover, it has been proved that the presence of water or alcohol is necessary for the formation of this copolymer.

*Témavezető:
Dr. Iván Béla
egyetemi magántanár, ELTE TTK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnök
 BSc, 7. félév
 dianadaicu21@gmail.com

Organocatalytic depolymerization of poly(ethylene terephthalate)

Hungarian Keywords: organocatalyst; recycling; depolymerization; Brønsted-bases; immobilization

During my research work, I investigated the depolymerization of poly(ethylene terephthalate) (PET), because nowadays, our planet is facing climate change problems caused by pollution, and one of the main goals of humanity is to find the best way to diminish plastic waste and, eventually, recycle it and reuse it. Respectively, my aim was to perform the depolymerization of PET with the best reaction conditions. For my research work, I chose the glycolysis reaction (Figure 1) as a chemical recycling of PET. Multiple depolymerization reactions were conducted using several catalysts and different conditions to optimize the reaction.

The depolymerization reactions were carried out in sealed vials, under inert atmosphere (Ar), at a range of temperatures between 170 to 190 °C. Ethylene glycol was applied as reagent and solvent, and different Brønsted basic or H-bond donor organocatalysts supported on silica gel, such as the commercially available trialkyl amine, guanidine or thiourea functionalized silica gels, and the prepared 1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]dec-5-ene (TBD) functionalized silica gel were used as catalysts. After obtaining the main product bis(hydroxyethyl)terephthalate (BHET) and side products, too, we characterized them by NMR and HPLC-MS techniques, and the stability of the abovementioned supported organocatalysts was determined by TG-DSC technique.

The optimization of the glycolysis reaction was mainly accomplished based on four aspects: the type of supported catalyst, the reaction temperature, the ratios of catalyst: PET, and solvent: PET. Finally, we found a method resulting in almost quantitative production (96%) of BHET, which is a readily appropriate starting material for preparing PET.

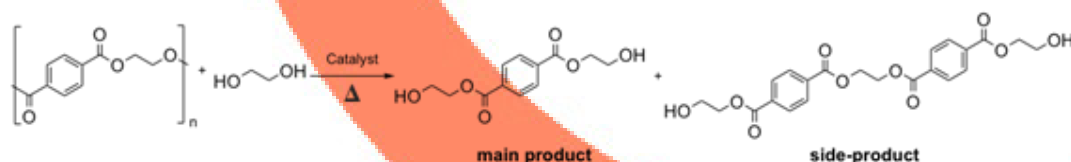


Figure 1: Depolymerization of PET by glycolysis

*Témavezetők:
 Dr. Kupai József
 egyetemi docens, BME VBK
 Fehér Zsuzsanna
 PhD hallgató, BME VBK
 Kisszékelyi Péter
 doktorjelölt, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Műanyag- és száltechnológiai mérnöki
MSc, 4. félév
ferdinandmilan97@gmail.com

Hibrid polipropilén kompozitok: merevség, ütésállóság, deformációs folyamatok

Kulcsszavak: szintetikus szálak; polimer szál; törés; akusztikus emisszió; mikromechanika

Kutatómunkám során a PVA szálak PP/üvegszál, valamint PP/szénszál kompozitok mechanikai tulajdonságaira gyakorolt hatását vizsgáltam, különös tekintettel az ütésállóságra. A szabványos ütésállósági vizsgálatok bizonyították, hogy a PVA szálak alkalmazása az ütésállóság növelésének hatékony módja a kompozitokban. A növekedés mértéke a PVA szál mennyiségétől, valamint a határfelületi kölcsönhatások erősségétől függ, amely befolyásolja a szálak körül lejátszódó mikromechanikai deformációs folyamatok típusát. A műszerezett törési vizsgálatok igazolták, hogy a PVA szálak nemcsak a repedés iniciálásához szükséges erőt növelik, hanem a repedés terjedését is gátolják a kompozitokban. Az akusztikus emissziós mérések és a pásztázó elektronmikroszkópos felvételek bizonyították, hogy a PVA szálak újabb, szálakhoz kapcsolódó mikromechanikai deformációs folyamatokat iniciálnak a kompozitokban. Az ütésállóság növekedése a folyamatok jelentős mértékű energiaelnyelésének eredménye. A növekedés mértéke a kapcsolóanyagot nem tartalmazó kompozitokban nagyobb, hiszen a határfelületek elválását követő plasztikus deformáció, valamint a PVA szálak mátrixból való kihúzódnása energiaelnyelés szempontjából hatékonyabb, mint a MAPP jelenlétében bekövetkező PVA száltördelődés. Az előállított hibrid kompozit alapanyagok kiemelkedő mechanikai tulajdonságaiknak köszönhetően a jövőben akár kereskedelmi forgalomba is kerülhetnek, különösen gépjárműipari szerkezeti anyagként történő hasznosításra.

*Témavezetők:
Dr. Móczó János
tudományos főmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont
Várdai Róbert
tudományos segédmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
vegyésszmérnök
BSc, 7. félév
katadorina98@gmail.com

Flibanszerin folyamatos formulációja közvetlenül áramlásos reakcióelegyből

Kulcsszavak: elektrosztatikus szálképzés; folyamatos technológia; formulálás

A legtöbb nagy iparággal szemben a gyógyszeripar a mai napig szinte teljes mértékben szakaszos technológiákkal állítja elő termékeit, ami lassúvá, rugalmatlanná és költségessé teszi a folyamatokat. Emellett az állandó, jó minőség fenntartása is számottevő kihívást jelent. Ezek a nehézségek azonban várhatóan orvosolhatók lennének folyamatos gyártástechnológiák bevezetésével, ahogy az más iparágak esetében már megfigyelhető volt. A felmerülő kihívások megoldására mára kiterjedt kutatás figyelhető meg ezen a területen, és az első folyamatosan gyártott gyógyszertermékek is megjelentek a piacon.

Jelenleg a kutatások elsősorban a különálló gyártási lépések folyamatos megvalósítására fókuszálnak, míg ezek kapcsolásának vizsgálata lényegesen kevesebb munkában jelenik meg. A gyártás két fő szakaszát, azaz a szintézist és a formulálást közvetlenül integráló megoldásra még csupán egy-két példa található a szakirodalomban.

Az elektrosztatikus szálképzés egy innovatív eljárás amorf szilárd diszperziók előállítására, mely alkalmazható lehet gyógyszerhatóanyagok kíméletes körülmények mellett, folyamatos eljárással történő formulálására. A technológia közvetlenül kapcsolható a szintézishez, valamint képes az adott reakcióelegyre nagyfeszültséget kapcsolva szilárd nanoszálakká alakítani az előállított hatóanyagot megfelelő polimer segédanyag mellett, melyekből őrlést követően akár tabletták is préselhetők.

Munkánk céljából tűztük ki a flibanszerin hatóanyag folyamatos szintézisből érkező reakcióelegynek közvetlen feldolgozását elektrosztatikus szálképzés segítségével. A hatóanyagot három különböző polimer segédanyaggal is formuláltuk, és mindegyik eljárást sikeresen optimalizáltuk. Az előállított szálas termék tulajdonságait számos analitikai módszerrel elemeztük, valamint vizsgáltuk az anyagok feldolgozhatóságát őrlési lépésben, mely a tablettázhatóság előfeltétele. Ezen felül, a gyártási lépések tökéletesebb illeszthetősége érdekében méretnövelt berendezésen is végeztünk kísérleteket.

*Témavezető:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Műanyag- és száltechnológiai mérnöki mesterképzési szak, nappali MSc
MSc, 4. félév
csilla.horvath96@gmail.com

Természetes szálak értéknövelt felhasználása polimer kompozitokban: szerkezet és tulajdonságok

Kulcsszavak: polimer kompozitok; természetes szálerősítés; deformációs folyamatok; fröccsöntés

A polimereket változatos tulajdonságaik miatt igen széleskörben használják az ipari gyakorlatban és a mindennapokban egyaránt. Alkalmazhatóságuk széles skálája tovább bővíthető különböző módosítások segítségével. A folyamatosan növekvő elvárások miatt a heterogén polimer rendszerek nagy népszerűségnek örvendenek. Az utóbbi évtizedekben megnőtt az igény a megújuló nyersanyagforrásból származó természetes alapanyagok alkalmazására, melynek egyik oka, hogy fosszilis anyagforrásaink folyamatosan ürülnek, illetve a környezetvédelmi nyomás is egyre csak növekszik. A cukorpálma szálak használata polimer kompozitokban egy új lehetőséget rejt magában, a szálak megújuló nyersanyagforrásból származnak, ezért alacsony áron lehet őket beszerezni. Többnyire mezőgazdasági melléktermékként keletkezik a cukorgyártás során, viszont értéknövelt felhasználását eddig nem aknázták ki. Ennek egyik módja a szál közvetlen alkalmazása különböző polimer kompozitokban. Ez mind a termelő országok, mint az ipar számára előnyös lenne. A gyártáshoz olyan hatékony feldolgozási technológiák nyújtanak segítséget, mint az extrúzió vagy a fröccsöntés. Munkám során polipropilén (PP)/cukorpálma szál kompozitokat készítettem fröccsöntéssel, ahol két különböző típusú (eltérő folyásindexszel rendelkező) homopolimer PP-t használtam. Kompozitok esetében többek között a határfelületi adhézió az egyik legfontosabb tényező, amely meghatározza a kompozitok tulajdonságait. A kölcsönhatások erőssége a komponensek kémiai jellemzőitől függ, PP és természetes szálak társítása során csak nagyon gyenge másodlagos erők alakulnak ki a mátrix és a szálak között, amely javítása érdekében maleinsav-anhidriddel ojtott polipropilént használtam kapcsolóanyagként. Szakító- és ütésállósági vizsgálatok segítségével jellemeztem a kompozitok mechanikai tulajdonságait, a mikromechanikai deformációs folyamatokat pedig akusztikus emissziós technika segítségével detektáltam. A kompozitok szakadási felületéről pásztázó elektronmikroszkóppal készítettem felvételeket, valamint digitális optikai mikroszkóp segítségével vizsgáltam a feldolgozás utáni szemcseméret eloszlását. A két mátrix kristályos szerkezetét DSC-vel vizsgáltam.

Dolgozatomban rámutatok az eltérő mátrixokkal készített kompozitok közötti különbségekre, vizsgáltam a kapcsolóanyag hatását a mechanikai jellemzőkre és meghatároztam a szálak saját szilárdságát egy exponenciális modell segítségével.

*Témavezetők:
Bartos András
PhD hallgató, BME VBK
Dr. Móczó János
tudományos főmunkatárs,*

*Természettudományi Kutató Központ,
Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimerfizikai Kutatócsoport*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
vegyésmérnöki
MSc, 4. félév
kovacs.tamas.box@gmail.com

Polikarbonát–poliamid blendek összeférhetőségének javítása

Kulcsszavak: kompatibilizálás; blend; extrúzió; adalékolás

Mind a polikarbonát (PC), mind pedig a poliamid (PA) rendkívül jó mechanikai jellemzőkkel és termikus stabilitással rendelkező műanyag típus, ugyanakkor van számos hátrányos tulajdonságuk is, mint például a korlátozott vegyszerállóság, vagy a vízállóság. Ezek az előnytelen tulajdonságok a PC és a PA esetében szimmetrikusak, így a belőlük előállított, különböző összetételű blendek segítségével kiküszöbölhetők.

A PC-PA blendek készítésének legfőbb nehézsége a két polimertípus korlátozott összeférhetősége, amely sok problémát okozhat a feldolgozás során, valamint jelentős mértékben ronthatja a termékek mechanikai jellemzőit. További gyártási nehézséget jelent mind a PC, mind pedig a PA magas víztartalma és nedvességmeggkötő képessége is. Az alapanyagok előkészítési paramétereinek meghatározásához többféle szárítási hőmérsékletet teszteltünk, a termikus degradációt infravörös spektroszkópiával vizsgáltuk.

A PC és PA összeférhetősége javítható az egyik polimer arányának növelésével a blendben, illetve adalékok használatával. A kedvező tulajdonságok fokozásának céljából olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú tanszéki fejlesztésű kompatibilizáló adalékok hatásait vizsgáltuk különböző koncentrációk és alapanyagösszetétel mellett. A próbatesteket extrúziós eljárással készítettük, a kapott szálakból húzó mechanikai jellemzőket, reológiai-, SEM- és FT-IR vizsgálatokat végeztünk. A megfelelő adalékok hozzáadásával sikerült a blendek egyes mechanikai tulajdonságainak javítása az adalékolatlan mintákhoz képest.

*Témavezető:
Dr. Varga Csilla
egyetemi docens, PE MK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Vegyésmérnöki
MSc, 3. félév
zsinkaviki@gmail.com

Hidrogén/szintézisgáz előállítása csomagolóipari többkomponensű polimer hulladékok katalitikus pirolízis-reformálásával

Kulcsszavak: Tetra Pak; pirolízis; katalitikus; szintézisgáz; reformálás

A különböző polimer (pl. műanyag, elasztomer, papír) csomagolóanyagok újrahasznosítása a hulladékgazdálkodás egyik fontos területe. Az egykomponensű csomagolóanyagok újrahasznosítására több módszert is kidolgoztak, illetve vizsgálnak. A többkomponensű rendszerek esetében viszont jelentős kihívást jelent az egymástól nem elválasztható heterogén rendszerek együttes újrahasznosítása. A Tetra Pak csomagolóanyagok olyan többkomponensű rendszerek, melyek – nagy hozzáadott értékű – újrahasznosítása jelenleg még nem megoldott. 2018-ban több mint 180 milliárd darab Tetra Pak csomagolású termék került felhasználásra, melyek számottevő részarányt foglalnak el a városi szilárd hulladékokban. Ezen hulladékok feldolgozásának egyik lehetősége a pirolízis, mely során a termékszerkezet módosítására és az értékesebb termékek mennyiségének növelésére célszerű katalizátort is alkalmazni. Katalizátorként általában zeolit hordozós fénoxidokat, vagy katalitikus hatású ásványi anyagokat alkalmaznak.

A kísérleti munka során Tetra Pak hulladékok magas hőmérsékletű, pirolízis-reformálási reakciói zajlottak. A mérések során Al_2O_3 - SiO_2 hordozóra felvitt átmenetifém katalizátorok kerültek alkalmazásra. Leginkább a keletkezett termékek mennyiségének és összetételének változásának, illetve az alkalmazott katalizátor jellemzők analizálása történt. Elsősorban, a további hasznosítás szempontjából kiemelten fontos, a szintézisgáz (hidrogén és szén-monoxid) mennyiségének és a komponensei arányának változása, illetve annak megfelelő nyomon követése. Emellett a reaktorrendszerben elhelyezett adszorbensek hatása is elemzésre került.

*Témavezető:
Dr. Miskolczi Norbert
egyetemi docens, PE MK*





Szerves kémia I.



Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
aronvilagvege@gmail.com

Szén–szén kötés kialakítása nitroxidok jelenlétében Baylis–Hillman-reakcióval

Kulcsszavak: Baylis–Hillman-reakció; szén–szén kötés; szabad gyök; nitroxid; paramágneses építőkövek

A nitroxid stabilis szabad gyökök unikális vegyületek, alkalmazhatóak többek között spinjelölőként, ferromágneses anyagok alapvegyületeként, vagy polimerizációs inhibitorokként. Mint nem természetes antioxidánsok farmakológiai jelentőségük is számottevő lehet, ezért fontos olyan újabb reakciótípusok kidolgozása, amelyekkel bővíthetjük a paramágneses építőkövek listáját.

Témám új szén–szén kötéssel járó reakció keresése volt, amely alkalmazható nitroxidok jelenlétében. Ehhez a Baylis–Hillman-reakciót választottuk, mely jellemzően aldehidek és aktivált alkének között játszódik le allil-alkoholokat eredményezve. Ezzel a módszerrel az elmúlt évtizedben számos biológiailag aktív molekulát állítottak elő, zöldkémiai alapelveket szem előtt tartva is ígéretes reakcióról van szó. Munkám során gyenge-közepes hozammal állítottunk elő új paramágneses Baylis–Hillman-adduktokat, majd vizsgáltuk ezen vegyületek további funkcionálizálhatóságát is. Alapvegyületekként 5 és 6-tagú paramágneses aldehideket használtunk, melyeket but-3-én-2-on-nal, etil-akriláttal, metil-akriláttal és akrilnitrillel reagáltattunk. Előállítottunk egy cisztein jelölésre is alkalmas paramágneses akrilsav-észtert, melyet benzaldehiddel sikeresen Baylis–Hillman-reakcióba vittünk. Az előállított adduktokat közepes-gyenge kitermeléssel funkcionalizáltuk: halogénezési, acilezési és oxidációs reakciókat végeztünk.

*Témavezető:
Dr. Bognár Balázs
egyetemi adjunktus, PTE GYTK*



Selye János Egyetem
Angol-kémia tanári szak
MA, 1. félév
donat.gelle@gmail.com

Ferrocénekkal a rák ellen?

Kulcsszavak: fémorganikus; rák; gyógyszer; szintézis

A munka ruténiumot tartalmazó ferrocénhez kapcsolt arénvegyületek szintézisét mutatja be. Az első részben a rákról mint betegségcsoportról található egy rövid leírás.

A munka következő része a fémorganikus vegyületek rövid bemutatása, megemlítve az ide tartozó legfontosabb vegyületeket, mint a Zeise só vagy a Grignard reagens. A „Metalloodrugs” kezdetű fejezet a ciszplatin rövid történetével és fontosságának ismertetésével kezdődik, ez ugyanis a legfigyelemreméltóbb fémorganikus molekula a rákos megbetegedések szempontjából. A ciszplatinhoz (mint legjelentősebb gyógyszerhez) hasonló komplexeknek széles skálája létezik, a munka további része a ruténium-tartalmúakra fókuszál. A ruténium több jellemzője is alátámasztja, hogy a molekulái miért lehetnek ígéretesek a biológiai hatás szempontjából. A következő bekezdésekben 3 fontos vegyületcsalád van bemutatva, név szerint a RAPTA-, NAMI-A- és a KP1019 komplexek. További kísérletek is említésre kerülnek, mint például a nitrogén heterociklus csoportokat is tartalmazó ferrocén-ruténium vegyületek vagy a metalodendrimer csoportokat hordozók. Az elméleti rész utolsó fejezete a nem szokványos módszereket, laboratóriumi eljárásokat mutatja be. Ezek közé tartozik az oszlop kromatográfia, a vékony réteg kromatográfia és a Schlenk rendszer. A munka rövid diszkuszióval folytatódik az előállított anyagokról, előállítási eljárásokról, ismerteti a reakcióegyenleteket, meglátásokat. A 3 és 4 számmal jelölt molekulákról röntgen diffrakció segítségével kép is készült, melyek szintén szerepelnek a munkában. Az ezt követő bekezdés a biológus kollégák eredményeit mutatja be, akik kiértékelték a molekulák aktivitását különböző daganatos sejteken. A formazánná redukálódást az élő sejtekben az oxidoreduktáz enzim végzi. Így színváltozás is történik, amely korrelál az élő sejtek számával- ez alapján állapítható meg a molekula hatásossága. Szignifikáns aktivitást a 4 és 6 számmal jelölt molekulák mutattak. A kísérleti rész értelemeszerűen magát a szintézist tárgyalja. Az 1, 2, 3, 4 és 6 számokkal jelölt anyagok szintézisének részletes leírása teszi ki gyakorlatilag az egész kísérleti részt. Amely molekuláknál lehetséges volt, azoknál a szintézis leírása után rövid jellemzés szerepel olvadásponttal, és az NMR spektroszkópia eredményeivel. A munka a konklúzió résszel zárul, egy rövid önértékelést és némi jövőre való kitekintést tartalmaz.

*Témavezető:
doc. RNDr. Róbert Gyepes, PhD.
Mgr JiříPinkas, PhD.
Selye János Egyetem, SK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 3. félév
j.dorina97@gmail.com

Biciklo[1.1.1]pentán vázrészt tartalmazó anyagok előállítása

Kulcsszavak: [1.1.1]propellán; propellán; biciklo[1.1.1]pentánok; biciklo[1.1.1]pentán-1,3-dikarbonsav; 1-etinil-3-(4-etinilfenil)biciklo[1.1.1]pentán

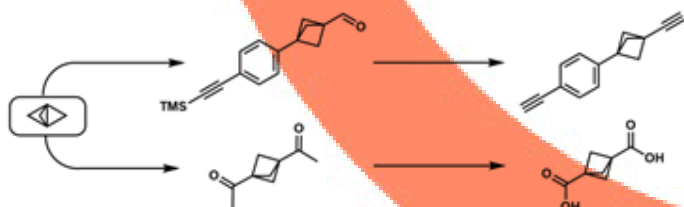
A biciklo[1.1.1]pentán származékok a para-szubsztituált benzolgyűrűt, vagy alkinilcsoportot tartalmazó vegyületek bioizosztereiként viselkednek [1]. Ilyen bioizoszterek előállításával fejleszteni lehet egyes gyógyszerjelölt molekulák fizikai-kémiai tulajdonságát, farmakológiai hatását.

A molekuláris elektronika fejlődésével megjelent több szerves töltés átadásából létrejövő só, biciklo[2.2.2]oktán híddal, melyekkel már számos kísérlet folyt. Biciklo[1.1.1]pentán hidat tartalmazó egyenirányító molekula vizsgálata azonban még várat magára [2].

Munkám egyik célja olyan biciklo[1.1.1] származék előállítása, mely karboxilcsoportokkal rendelkezik, és így peptidekhez, vagy más farmakofórokhoz köthető.

Kísérleti munkám során sikeresen állítottam elő [1.1.1]propellánból 1,3-diacetilbiciklo[1.1.1]pentánt, majd ebből biciklo[1.1.1]pentán-1,3-dikarbonsavathaloform-reakció során. Az 1,3-diacetilbiciklo[1.1.1]pentán előállítása során olyan módszert fejlesztettem ki, mely alkalmazásával az irodalmi példánál egyszerűbben beszerezhető eszközök segítségével is előállítható a célmolekula [3].

A biciklopentán vázrész elektronikus tulajdonságainak vizsgálatához szükségünk volt az 1-etinil-3-(4-etinilfenil)biciklo[1.1.1]pentánra, melynek szintézisét ki kellett dolgozni. A dihalobenzolból előállított védett acetilén származékhoz Grignard reakció során hozzákapcsoltam biciklo[1.1.1]pentán egységet, majd egy üst eljárással aldehiddé alakítottam Bouveault reakció során. Végül homologizációval egy lépésben tudtam a formilcsoportot acetilénné alakítani, és a TMS-csoportot eltávolítani. Az előállított 1-etinil-3-(4-etinilfenil)biciklo[1.1.1]pentánról a szakirodalom nem ír, így az egyenirányító molekulaként való felhasználása új területe lehet a molekuláris elektronikának.



[1] Makarov, I.S., Brocklehurst, C. E., Karaghiosoff, K., Koch, G., Knochel, P., *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 12774-12777 (2017)

[2] Roth, S., Blumentritt, S., Burghard, M., Cammi, E., Carroll, D., Curran, S., Düsberg, G., Liu, K., Muster, J., Philipp, G., Rabenau, T., *Synth. Met.* 94, 105-110 (1998)

[3] Levin, M. D., Kaszynski, P., Michl, J., *Acid. Org. Synth.* 77, 249-250 (2000)

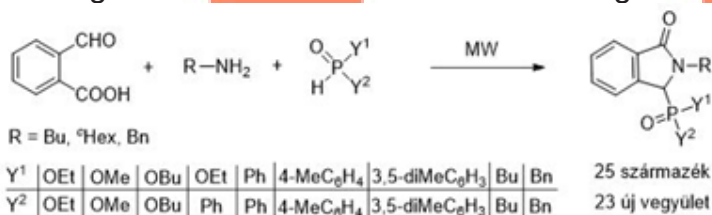


Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnöki
 BSc, 7. félév
 betti.ravai08@gmail.com

Izoindolinon-foszfónatok és izoindolinon-foszfín-oxidok szintézisének tanulmányozása

Kulcsszavak: *N*-heterociklus; foszforkémia; gyűrűzárás; foszfinligand; mikrohullám

A nitrogén tartalmú heterociklusok fontos képviselői az izoindolin-származékok, melyek sokrétű biológiai aktivitással rendelkezhetnek. Kutatómunkám során célul tűztük ki (3-oxo-2,3-dihidro-1*H*-izoindol-1-il)foszfónatok és -foszfín-oxidok előállítását a 2 formilbenzoesav, primer aminok és különféle foszfor-reagensek (dialkil-foszfitek, etil-fenil-*H*-foszfinát vagy szekunder foszfin-oxidok) Kabachnik-Fields-reakcióját követő intramolekuláris gyűrűzárásával. A környezetbarát szemléletmódnak megfelelően, a kondenzációkat mikrohullámú (MW) besugárzás hatására, katalizátor és lehetőség szerint oldószer nélkül kívántuk megvalósítani.



Első lépésben a 2-formilbenzoesav, butilamin és dietil-foszfít modellreakciót tanulmányoztuk. A reakció paramétereinek (a reagensek mólaránya, a hőmérséklet, illetve a reakcióidő) változtatásával kerestük az optimális körülményeket. Az optimalizálást követően a kondenzációt további aminokra és >P(O)H reagensekre terjesztettük ki. A reakciókat gázkromatográfiás (GC) mérésekkel, illetve ³¹P NMR spektroszkópiával követtük. A termékeket oszlopkromatográfia segítségével tisztítottuk, szerkezetüket ³¹P, ¹H és ¹³C NMR spektroszkópiával, illetve nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálatokkal igazoltuk. Munkám során összesen 25 származékot szintetizáltunk, melyek közül 23 új vegyület.

Tanulmányoztuk továbbá egy izoindolinon-foszfín-oxid deoxigénezését, majd a kapott foszfit platina-komplex szintézisében foszfor-ligandumként hasznosítottuk.

Témavezetők:
 Dr. BálintErika
 egyetemi adjunktus, BME VBK
 Tóth Nóra
 doktoráns, BME VBK
 Tajti Ádám
 tudományos segédmunkatárs, BME VBK



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnöki
 BSc, 7. félév
 richterdora98@gmail.com

Diszubsztituált aminosavakhoz vezető intermedierek organokatalitikus szintézise és optimalizálása

Kulcsszavak: organokatalízis; cinkona alkaloidok; koronaéterek; fázistranszfer katalízis; aminosavak

Munkám során célul tűztem ki újfajta királis fázistranszfer organokatalizátorok előállítását. A fázistranszfer képességet koronaéter részlet beépítésével biztosítottam, a királis indukciót kiváltó szerkezeti egységként pedig cinkona származékokat, illetve glükózt alkalmaztam (1. ábra). A katalizátorok aktivitását benzilezett malonát származék aszimmetrikus alkilezésében kívántam vizsgálni, ugyanis az így előállított termék kulcsintermediereként szolgál enantiomertiszta α,α -diszubsztituált aminosavak előállításához, amely vegyületcsalád egyes képviselői antibakteriális tulajdonságokkal bírnak.

Össze kívántam hasonlítani különböző a cinkona egységek, valamint a glükóz hatását az enantio-szelektivitásra, így kinin (Q5, Q6), hidrokinin (HQ5), cinkonin (C5, C6) és glükóz (GC-SQ) részleteket építettem a molekulákba. Továbbá annak érdekében, hogy a reakciót az alkalmazott bázis szempontjából is vizsgálni lehessen, ötös és hatos tagszámú koronaéterekkel kapcsoltam az előbbi vegyületeket, ezzel lehetővé téve nátrium és kálium alapú bázisok használatát is.

Az elvégzendő próbareakciót optimalizálni kívántam az oldószer, a bázis, valamint a reakcióhőmérséklet szempontjából. Az így kapott leghatékonyabb körülmények között kívántam vizsgálni további alkilezőszereket is, mint a C-alkilezési reakció szubsztrátjait.



1. ábra: Az új, négyzetamid típusú fázistranszfer organokatalizátorok

Témavezetők:
 Dr. Kupai József
 egyetemi docens, BME VBK
 Fehér Zsuzsanna
 PhD hallgató, BME VBK
 Dr. Huszthy Péter
 emeritus professzor, BME VBK



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 7. félév
szbbence@gmail.com

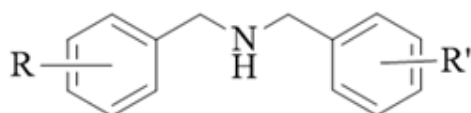
Norbelladin analógok szintézise

Kulcsszavak: norbelladin; alkaloidok; potenciális gyógyszermolekulák

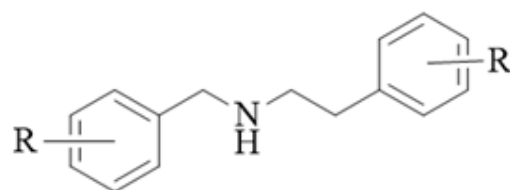
Az alkaloidok egy rég óta ismert vegyületcsalád, amelynek több mint 12 000 jelenleg ismert tagja van. Biológiai hatásai igen sokrétűek ezeknek a vegyületeknek, melyeket az emberiség már évezredek óta használ mérgek, stimulánsok, gyógyszerek és főzetek készítésére, de napjainkban is egy sokat kutatott vegyületcsalád. Azonban a nagy diverzitása miatt találni még kiaknázatlan területeket, mint például az amarillisz alkaloidok családjának kutatása. Az amarillisz alkaloidok közé tartozó norbelladin egy régóta ismert kulcsfontosságú intermedier ezen vegyületek bioszintézisében, melyről származékaival ellentétben csak kevés kutatás történt, azonban az elérhető információk alapján a gyulladáscsökkentő hatása megelőzheti az aszpirinét is.

A munkám célja az volt, hogy előállítsak norbelladin analógokat ez által új potenciális gyógyszermolekulákat létrehozva, és mindezt úgy, hogy kereskedelmi forgalomban elérhető, olcsó benzaldehid származékokat, lehetőleg egyszerű reagenseket és méretnövelhető reakciókat alkalmazzak. Ezek a körülmények lehetővé teszik, hogy a munkám akár gyógyszeripari előállítások alapjául szolgálhasson. A jelenlegi dolgozatomban ezen vegyületek előállítását taglalja, de célom a későbbiekben, hogy az előállított molekulákat biológiai hatásukra megvizsgáljam, és az ígéretes gyógyszerészeti potenciált mutatók szintézisútját optimalizáljam. Három szintézisutat terveztem az előállításukra retroszintetikus analízissel, melyek közül kettőt sikeresen végrehajtottam. A célmolekuláim két csoportra oszthatók, norbelladin analógokra és rövidített analógokra. A munkám során sikeresen előállítottam 7 új potenciális gyógyszermolekulát, amelyek közül 5 a rövidített és 2 pedig a norbelladin analógok közé tartozik. Ezen felül a későbbiekben az előállított molekulák lehetőséget nyújtanak, hogy egy gyűrűzárási reakcióval előállítsak bonyolultabb alkaloidokat, amelyek napjainkban is használt gyógyszerek (papaverin, galantamin).

$R, R': OH, OCH_3, F$



Rövidített analógok



Norbelladin analógok



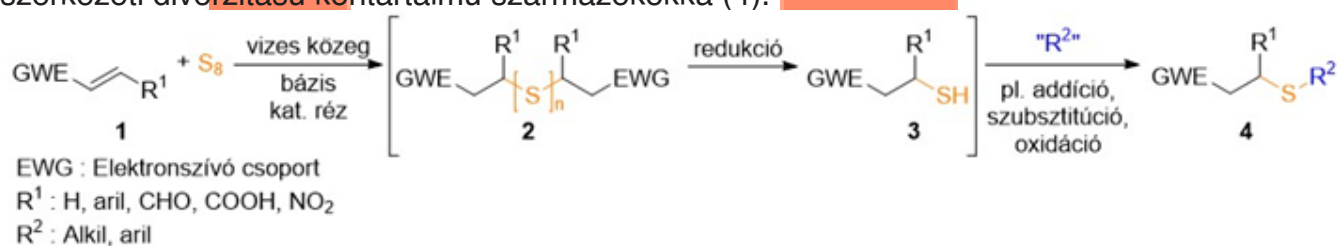
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 vegyészmérnök
 BSc, 7. félév
 szaboreni287@gmail.com

Tiolok és származékaik előállítása elemi kénrel elektronhiányos kettős kötést tartalmazó vegyületekből

Kulcsszavak: multikomponensű reakciók; egy-üst reakciók; tiolok; polisulfánok; elemi kén

A multikomponensű reakciók fontos részét képezik a modern szerves szintetikus kémia eszköztárának. Segítségükkel környezetbarát, atomhatékony és biztonságos módon, akár egy preparatív lépésben állíthatók elő komplex szerkezetek. Hatékonyságukat a reagensek megfelelő kiválasztásával fokozhatjuk. A természetben nagy mennyiségben előforduló, nem toxikus és könnyen kezelhető elemi kén alkalmazása segít kiváltani veszélyes, mérgező reagenseket, illetve tovább fokozni a reakciók atomhatékonyságát [1–5].

Munkánk során kidolgoztam egy új eljárást tiolok (3) és származékaik (4) előállítására elektronhiányos kettős kötést tartalmazó vegyületekből (1) kiindulva, elemi kén alkalmazásával, vizes közegben (1. ábra). Az eljárás első lépésében egy új, réz-katalizált pseudo multikomponensű reakcióban polisulfánokat (2) állítottam elő, amelyeket egy-üst reakcióban tiollá (3) redukáltam. A tiolok további egy-üst eljárásban szubsztitúciós, addíciós és oxidációs reakciókban alakíthatók át széles szerkezeti diverzitású kéntartalmú származékokká (4).



1. ábra: A kidolgozott eljárás általános sémája tiolok és származékaik előállítására

- [1] Nguyen, T. B.; Ermolenko, L.; Al-Mourabit, A. *Org. Lett.* 2012, 14, 4274–4277.
 [2] Nguyen, T. B. *Adv. Synth. Catal.* 2017, 359, 1066–1130.
 [3] Dömling, A.; Wang, W.; Wang, K. *Chem. Rev.* 2012, 112, 3083–3135
 [4] Nguyen, T. B. *Adv. Synth. Catal.* 2020, 362, 3448–3484.
 [5] Liu, S.; Deng, G.-J.; Huang, H. *Synlett*, 2020, 31, A–Q.

Témavezetők:

Dr. Ábrányi-Balogh Péter

tudományos munkatárs, tiszteletbeli oktató, Természettudományi Kutatóközpont

Németh András

PhD hallgató, Természettudományi Kutatóközpont

Dr. Kupai József

egyetemi adjunktus, BME VBK



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
kémia
BSc, 5. félév
szalajpeti24@gmail.com

Magas fluortartalmú építőelem szintézise HFO-1234ze ipari hűtőgázból és fotokémiai felhasználása

Kulcsszavak: fluor; fluoralkil-jodid; fotokémia; keresztkapcsolás

A fluornek számos olyan tulajdonsága van, ami előnyös hatással lehet egy molekulára. Például nagy elektronegativitása, kis mérete, esetleg a szénnel való kötésének erőssége nagyban megváltoztathat egy vegyületet. Ezen tulajdonságok miatt a megelőző években nagy szerepet tölt be a gyógyszerkémia terén a fluor. Tudja növelni a hatékonyságot, a metabolikus stabilitást ezért sokat kutatott terület a fluor molekulába juttatása. A kutatás célja egy nagy fluortartalmú és nagy mennyiségben rendelkezésre álló hidro-fluorolefinből történő perfluoralkil-jodid kiindulási anyag készítése, amit fotokémiai reakció során aktiválva fenil-acetilénbe nagy fluortartalmú csoportként lehet juttatni.

Célom ennek, az eddigi irodalomban nem ismert vegyületnek az előállításnak a teljeskörű optimalizálása és alternatívákat keresni erre a reakcióra specifikusan, a már ismert fotokémiai drága és mérgező fotokatalizátorokkal való aktiválást kiváltva. A kutatás ezentúl kitér az előállított vegyület tovább alakíthatóságára is, kutatva ebből a vegyületből előállítható változatos szerkezeteket.

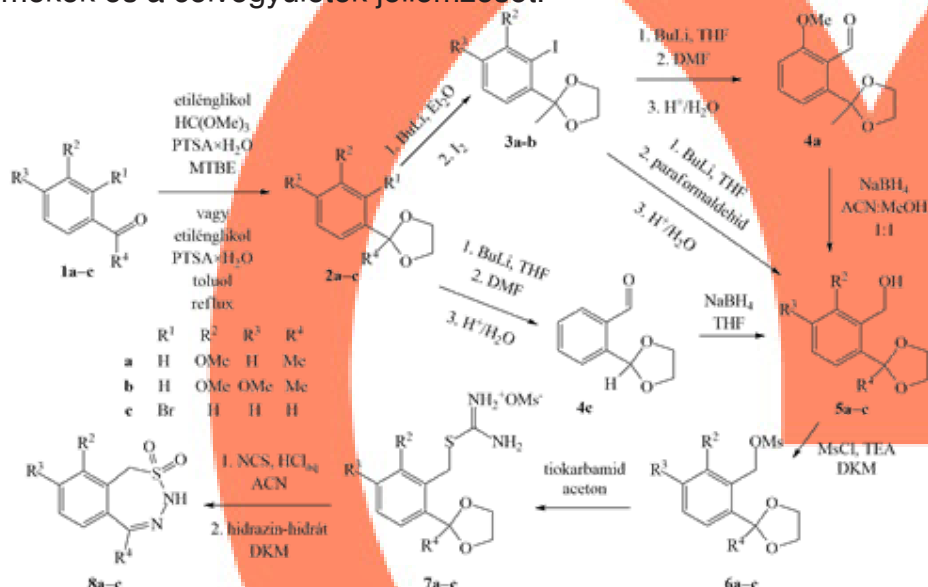
*Témavezetők:
Dr. Novák Zoltán
egyetemi docens, ELTE TTK
Varga Bálint
PhD hallgató, ELTE TTK*



1,3-dihidro-2H-2λ6,3,4-benzotiadiazepin-2,2-dion származékok előállítása

Kulcsszavak: fémorganikus; lítiálás; gyűrűzárás

Az Egis Gyógyszergyár Zrt-ben évekig kutatták a szorongásgátló hatású, potenciálisan pszichiátriai betegségek kezelésre alkalmas benzotiadiazepinek előállítási lehetőségeit, valamint vizsgálták farmakológiai tulajdonságaikat [1]. TDK munkám során célul tűztem ki a kereskedelemből könnyen beszerezhető vegyületekből (1a–c) kiinduló benzotiadiazepin szintézisutak kidolgozását, a köztitermékek és a célvegyületek jellemzését.



Az egyes modellek esetében különféle reakcióutakon jutottam el az 5a–c benzil-alkohol származékig. Az alkoholokból mezilátokat (6a–c), majd izotirónium sókat (7a–c) képeztem. Az utolsó lépésben oxidatív klórozási, N-szulfonilezési, valamint gyűrűzárási részlépések során juthatunk a benzotiadiazepinekhez (8a–c).

Munkám során kutatócsoportunk legújabb eredményeire [2] támaszkodva új szintézismódszert dolgoztam ki a szubsztituenst nem tartalmazó, illetve a metoxicsoportokkal szubsztituált, potenciálisan biológailag aktív benzotiadiazepinek előállítására.

[1] EGIS Pharm. Ltd.; Patent 2012, US2012/0252784 A1.

[2] B. Nyulasi, A. Németh, M. Porcs-Makkay, J. Kupai, et al. Tetrahedron, 2017, 73, 298–306.

Témavezetők:

Nyulasi Bálint

laborvezető, Egis Gyógyszergyár Zrt.

Dr. Hornyánszky Gábor

egyetemi docens, BME VBK





Szerves kémia II.



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Gyógyszervegyész-mérnök
 MSc, 2. félév
 noemicsorba2@gmail.com

Potenciális KRAS-G12C kovalens inhibitorok szintézise

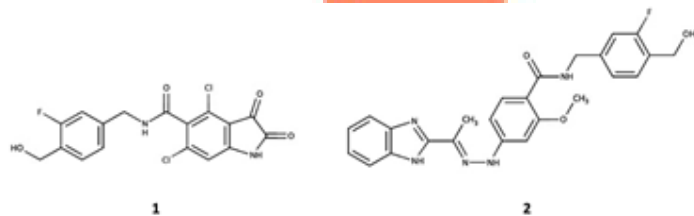
Kulcsszavak: KRAS, KRAS-G12C; onkogén mutáció; kovalens inhibitor; kismolekulák szintézise

A növekedési faktorok jelátviteli folyamataiban játszanak meghatározó szerepet a Ras fehérjék, melyek a kis GTPázok családjába tartoznak. Intracelluláris molekuláris kapcsolóként működnek, és elengedhetetlenek az alapvető sejt szintű folyamatok, mint a sejtproliferáció, differenciálódás szabályozásában.

Ha ez a szabályozás felborul – amit a jelátviteli folyamatban résztvevő fehérje szerkezetének megváltozása okoz – az a sejtek kontrollálhatatlan szaporodásához vezethet, ez pedig daganatképződést eredményezhet. Amikor a Ras gének mutálódnak, az általuk kódolt fehérjék hiperaktívvá válnak és tumorgenezist (rákos sejtek kialakulását), valamint a rákos sejtek növekedését idézik elő. Az emberben található három Rasizoforma közül a KRas mutációja fordul elő a leggyakrabban, főként a vastagbélben, a tüdőben és a hasnyálmirigyben okozva rákos elváltozásokat. A KRas^{G12C}-ről a közelmúltban állapították meg, hogy potenciálisan kezelhető lehet allél-specifikus direkt kovalens inhibícióval, a mutálódott KRas 12-es helyzetű ciszteinjét célozva, nukleofil jellege miatt.

Kutatócsoportunkban kovalens fragmens vegyülettárak szintézisével is foglalkoznak. Ezen kovalens fragmens könyvtár szűrések eredményeként két ígéretes találat adódott a mutáns KRas^{G12C} lehetséges direkt inhibitoraiként. In silico számítási módszerrel ezt a két fragmens molekulát tovább optimalták, és két molekulát azonosítottak (1. ábra), amely szintetikus megvalósítható és a KRas^{G12C} új lehetséges kovalens gátlószere lehet.

Kutatómunkám során feladatom ezen két molekula szintézisének megtervezése és előállítása volt, in vitro és in vivo biológiai vizsgálatokhoz. A szintézisutak kidolgozása után sikeresen előállítottam a két molekulát a biológiai tesztekhez szükséges minőségben és mennyiségben. A kapott eredmények alapján az egyik molekula (1. ábra/2) jól szerepelt a biológiai teszteken, így érdemes a további módosításával foglalkozni és optimalizálni új számításokkal egy olyan szerkezetet, amelynek még jobb az affinitása és a szelektivitása a mutáns KRas^{G12C}-hez, mint a kiindulási fragmens vegyülete. Ha sikerülne egy olyan molekulát előállítani, ami jó gyógyszer-szerű tulajdonságokkal, megfelelő szelektivitással és affinitással rendelkezik, az ígéretes kiindulási pont lehetne KRas^{G12C} mutáció okozta rákos elváltozások kezelésére.



1. ábra Az előállított molekulák szerkezeti képlete

Témavezető:
 Dr. Bölcskei Hedvig
 címzetes egyetemi docens, BME VBK



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
englert.fanny@gmail.com

Fenolszármazékok szelektív fluoralkilezési reakcióinak vizsgálata új hipervalens jodóniumsó segítségével

Kulcsszavak: jodóniumsó; szelektív; fluoralkilezés; fenolszármazékok

Napjainkban a tudományos kutatások és az ipar is egyre nagyobb figyelmet fordít a fluororganikus vegyületek előállítására. Mivel a fluor jelenléte a molekulában előnyösen befolyásolja annak fizikai kémiai paramétereit (biológiai felezési idő, bioabszorpció, lipofilitás), ezért ezek a vegyületek széleskörben alkalmazhatóak a gyógyszerkémiaiban, az agrokémiaiban és az anyagtudományban egyaránt.

Tudományos diákköri kutatómunkám során célom volt egy olyan új eljárás kidolgozása, mellyel fenolszármazékokba építhetünk be új fluoralkil csoportot. A csoport bevitelére egy, a kutatócsoport által nemrégiben kifejlesztett fluoralkil-aril-jodóniumsót használtam, melyet már sikeresen alkalmaztak anilinszármazékok és nitrogén tartalmú heteroaromás vegyületek funkcionálására enyhe körülmények között (szobahőmérsékleten, átmenetifém, vagy nehézfém használata nélkül), kiváló termelések mellett. A jodóniumsó kiindulási anyaga a széleskörben elterjedt, olcsón beszerezhető HFO-1234yf klímagáz.

Munkám során sikeresen reprodukáltam a kutatócsoportunk által kifejlesztett új hipervalens, fluoralkil-aril-jodóniumsó szintézisét, majd ezt alkalmaztam a fenolszármazékok funkcionálására. A kezdeti kísérletek elvégzésekor több termék képződését is tapasztaltam, így az optimálási reakciók során fontossá vált az egyes termékekre történő szelektivitás növelése a minél jobb konverzió és termelés elérése mellett. Az optimált körülmények mellett végül sikeresen izoláltam a megfelelő aril-fluoralkiléter, vinil-étre és benzofurán származékokat.

*Témavezetők:
Dr. Novák Zoltán
egyetemi docens, ELTE TTK
Csenki János Tivadar
PhD hallgató, ELTE TTK*



Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar
kémia
BSc, 5. félév
erdelyi.adam99@gmail.com

Biológiai jelentőségű aminok alkalmazása nukleofil reagensként palládiumkatalizált aminokarbonilezési reakciókban

Kulcsszavak: karbonsavamid; szén-monoxid; homogén katalízis; karbonilezés; átmenetifém

Eredmények összefoglalása

Sikeresen hajtottam végre palládium-katalizált aminokarbonilezési reakciókat biológiai jelentőségű aminok (nortropin, 6-aminopenicillánsav), illetve jód-alkén és jód-(hetero)aromás modellvegyületek, biológiai fontosságú alapvázlat hordozó alkenil-jodidok alkalmazásával. Optimális körülményeket találtam új, karbonsavamid funkcióscsoportot hordozó vegyületek, mint N-acil-nortropin- és penicillinszármazékok szelektív szintézisére.

Absztrakt

Kutatómunkám célja volt vizsgálni azt, hogy a palládium-katalizált aminokarbonilezési reakció alkalmas-e összetett szerkezetű, biológiai funkciót hordozó alapvázlat rendelkező aminok (nortropin, 6-aminopenicillánsav benzil-észtere) funkcionalizására jód-alkén és jód-(hetero)aromás szubsztrátumok alkalmazása mellett. A kísérletek során tanulmányoztam a katalitikus ciklus során keletkező palládium(II)-acil intermedier 'acilező' képességét, illetve a reakciókörülmények (nyomás, ligandum) hatását a reakció szelektivitására. A $\text{Pd}(\text{OAc})_2/2 \text{PPh}_3$ katalizátorrendszer alkalmazásával változatos szerkezetű N-alkenoil-nortropin származékokat, $\text{Pd}(\text{OAc})_2/\text{Xantphos}$ rendszer alkalmazásával pedig N-(hetero)arenoil-nortropin származékokat állítottam elő kemoszelektíven. Utóbbi katalizátorrendszert alkalmazva újszerű penicillinszármazékok szintézisének optimalizálását és kivitelezését hajtottam végre jód-(hetero)aromás vegyületek jelenlétében. Az előállított termékek karbonsavamid funkciós csoportot hordozó vegyületek, melyek széleskörben megtalálhatóak mind a gyógyszer-molekulák, mind a természetes biológiai aktivitással rendelkező vegyületek között. A reakció nagy jelentőséggel bír, mivel a karbonsavamidok előállításának hagyományos szintetikus módszerei kis atomhatékonysággal rendelkeznek.

*Témavezető:
Dr. Takács Attila
tudományos munkatárs, PTE TTK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 gyógyszervegyész-mérnök
 MSc, 4. félév
 zsuzsi516@gmail.com

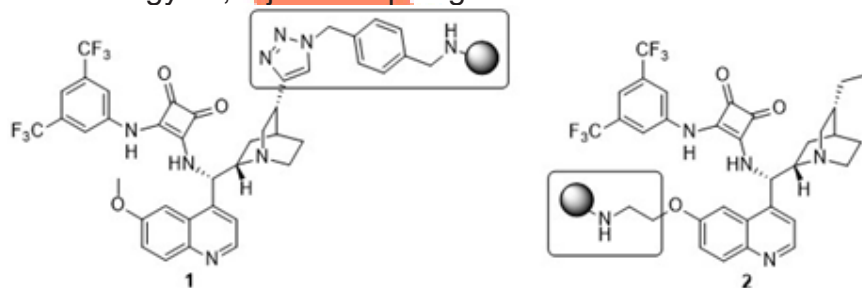
Cinkona-négyzetamid organokatalizátorok poli(glicidil-metakrilát) szemcsékhez való rögzítése és alkalmazása

Kulcsszavak: organokatalízis; cinkona alkaloidok; poli(glicidil-metakrilát); hordozóhoz rögzített katalizátor; Michael-addíció

Munkám során célul tűztem ki a korábban már több reakciótípusban hatékonynak bizonyuló cinkona-négyzetamid enantioszelektív organokatalizátor szűk méreteloszlású poli(glicidil-metakrilát) (PGMA) szemcsékhez történő rögzítését. A PGMA – melyhez a szakirodalom szerint korábban még nem rögzítettek organokatalizátorokat – reaktív epoxid funkciós csoportjai révén könnyen módosítható, így alkalmas a katalizátorhordozó szerepének a betöltésére. Az előállítása gyökös diszperziós polimerizációval történt, később pedig térhálósítással növeltem a szemcsék oldószer-állóságát.

A hordozóhoz való rögzítés előtt a rögzítetlen cinkona-négyzetamid katalizátor teljesítményét enantioszelektív Michael-addícióban vizsgáltam hat különböző oldószerben, hogy kiválasszam a reakció kivitelezéséhez legalkalmasabb oldószereket. Ezután úgy módosítottam az organokatalizátort, hogy a polimer hordozóhoz rögzíthető legyen, ezzel lehetővé téve a gazdaságos alkalmazásához elengedhetetlen visszaforgatását. E katalizátormódosítást kétféleképpen is elvégeztem, így két különböző rögzített katalizátorhoz jutottam (1 és 2, 1. ábra).

A szilárd hordozóhoz rögzített organokatalizátorok aktivitását a pentán-2,4-dion és a β -nitrosztírol enantioszelektív Michael-addíciója során vizsgáltam különböző oldószerekben, majd összehasonlítottam az eredményeket. A hordozóhoz rögzített katalizátorokat – a megfelelő méretű szemcséknek és a szűk méreteloszlásnak köszönhetően – egyszerű fizikai elválasztással lehet visszanyerni a reakcióelegyből, a jövőben pedig áramlásos reaktorban is tervezem alkalmazni őket.



1. ábra: A PGMA hordozóhoz rögzített organokatalizátorok

*Témavezetők:
 Dr. Kupai József
 egyetemi docens, BME VBK
 Dr. Huszthy Péter
 emeritus professzor, BME VBK
 Nagy Sándor
 doktorjelölt, BME VBK*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Kémia
BSc, 3. félév
guoth.marika@gmail.com

Tioéter-aminofoszfín ligandumok alkalmazása allil-éterek palládium-katalizált enantioszelektív szintézisében

Kulcsszavak: tioéter-aminofoszfín; palládium-katalízis; enantioszelektív szintézis; allil-éter

Királis éterek szén-oxigén kötésének sztereoszelektív kialakítása rendkívüli jelentőséggel bír a szintetikus szerves kémiában, hiszen számos biológiailag aktív vegyület, például gyógyszer- vagy növényvédőszer-hatóanyag, tartalmaz aszimmetrikus szénatomhoz kapcsolódó alkoxicsoportot. A rendelkezésre álló szintetikus módszerek közül kiemelhetjük az átmenetifém-katalizált aszimmetrikus szintézist, amely során a királis információt a kis mennyiségben jelenlévő, királis ligandumot tartalmazó fémkomplex a szubsztrátum nagy mennyiségének képes átadni. A módszer sikerességét igazolja, hogy az utóbbi évtizedben számos királis palládium-katalizátorral kiváló enantioszelektivitást értek el éterek aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúcióval történő szintézise során. E katalitikus reakciókban azonban – a hasonló, Pd-katalizált C–C vagy C–N kötés kialakulásával járó reakciókhoz képest – nagy mennyiségű (4-5 mol%) katalizátor alkalmazására van szükség a számottevő átalakulás eléréséhez.

Munkám során új, alkán-diil-vázzal rendelkező, királis tioéter-aminofoszfín (S-NP) típusú ligandumokat állítottam elő és vizsgáltam azok katalitikus tulajdonságait 1,3-difenilallil-1-acetát különböző alkoholokkal végzett Pd-katalizált allil-helyzetű szubsztitúciós reakciójában. Célom volt a ligandum szerkezet hatásának vizsgálata a katalizátor aktivitására és enantioszelektivitására. Tanulmányoztam emellett az oldószer és a nukleofilként alkalmazott alkoholok hatását is a reakció hozamára és szelektivitására. Megállapítottam, hogy az új S-NP-ligandumok elektronikus tulajdonságainak finomhangolásával egyedülállóan magas aktivitás és jó enantioszelektivitás érhető el. Az alkalmazott Pd-katalizátor mennyiségét ugyanakkor sikerült 0,2 mol%-ra csökkenteni a szubsztrátum teljes átalakulása mellett.

*Témavezetők:
Dr. Farkas Gergely
egyetemi docens, PE MK
Major Máté Miklós
PhD hallgató, PE MK*



Photochromic switching of a $[4n]$ π electron system

Hungarian Keywords: aromaticitás; fotokémia; molekuláris kapcsolók;

Hückel's $[4n+2]$ π electron rule for aromaticity is reversed in the first excited state of cyclic conjugated annulenes [1]. Molecules with $[4n]$ π electrons will be Baird-aromatic, while molecules with $[4n+2]$ π electrons will be Baird-antiaromatic in their first excited states. Biphenylene, a tricyclic hydrocarbon with $[4n]$ π electrons can be described by both Hückel-antiaromatic and Hückel-aromatic resonance structures. Its ground state is dominated by Hückel-aromatic character, however, its excited state can also be described by both Baird-aromatic and Baird-antiaromatic resonance structures. This can allow biphenylene to act as a "chameleon", adopting aromatic electron distribution in both its ground and excited states [2]. We designed and synthesized a dithienylethene type photochemical switch (1) encompassing biphenylene as a $[4n]$ π electron bridge in order to investigate this chameleonic behaviour.

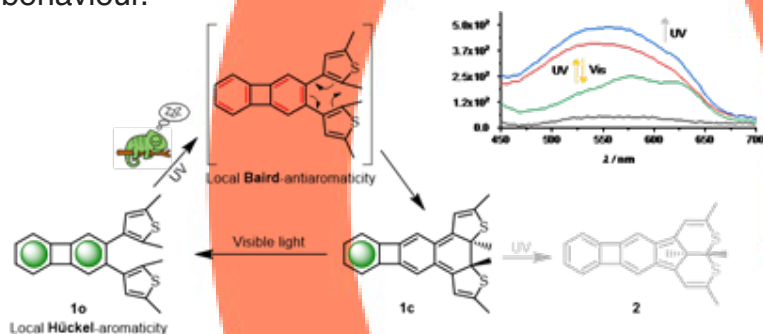


Figure 1: Reversible photochromic behaviour of the designed dithienylbiphenylene 1.

UV-Vis and ^1H NMR spectroscopic measurements have shown that compound 1 is photochromic, reversible conversion between an open form (1o) and a closed form (1c) can be achieved by UV and visible light irradiation (Figure 1). Unfortunately, the closed form produces a non-desired side product (2) upon UV irradiation. Modulation of ground state (anti)aromaticity was achieved since the closed form is partially non-aromatic. It is possible that the alleviation of local Baird-antiaromaticity by the photocyclization is the driving force for the reaction and the non-chameleonic behaviour might be explained by the rapid nature of the photocyclization. Compound 1 is the first photochromic dithienylethene with a $[4n]$ π electron bridge.

[1] Ottosson, H. *Nat. Chem.* 2012, 4, 969–971.

[2] Ayub, R.; Bakouri, O. El; Jorner, K.; Solà, M.; Ottosson, H. *J. Org. Chem.* 2017, 82, 6327–6340.



Babeş-Bolyai Tudományegyetem
Vegyésszmérnöki
BA, 8. félév
kissetus99@yahoo.com

Trifluoretil-szubsztituált terminális alkinek szintézise és szerkezeti vizsgálata

Kulcsszavak: Sonogashira; N-tozilhidrazon; réz-katalizált; terminális acetilén; szerkezetvizsgálat

Dolgozatom fő témája olyan aromás és heteroaromás terminális acetilének előállítása és szerkezeti vizsgálata volt, amelyeket a következőkben rézjodid-katalizált N-tozilhidrazon reagenst alkalmazva trifluoro-etilezési reakcióban használtam fel. A terminális acetilénszintézis kiinduló anyagai halogénezett aromás és heteroaromás vegyületek voltak, alkinilezőszerként tetrametilszilil-acetilént, valamint 2-metil-butinolt használtam. Az alkinilezést Pd-katalizált Sonogashira-keresztkecsolással valósítottuk meg, amelyet a trimetil-szilil-származékok esetében egy deszililelező lépés követett. A laboratóriumi munkám az előállított vegyületek trifluoro-acetaldehid-N-tozilhidrazonnal való reakciók optimális reakciókörülményeinek, valamint a trifluoro-etilező reagens reaktivitásának vizsgálatára terjedt ki. A reakciók végbemenetelének vizsgálata vékonyréteg-kromatográfiával és gáz-kromatográfiával kapcsolt tömegspektrometriás eljárással történt. A kapott köztitermékeknek és a trifluoretilezési reakciók termékeinek szerkezetfelderítése ^1H , ^{13}C és ^{19}F -NMR-el valósult meg.

*Témavezetők:
Dr. Novák Zoltán
egyetemi docens, ELTE TTK
Adamik Réka
doktorandusz, ELTE TTK*



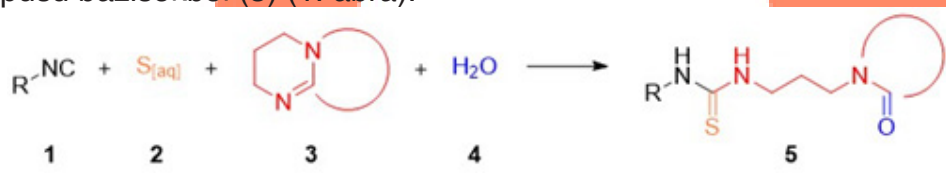
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 vegyészmérnök
 BSc, 5. félév
 szaboreni287@gmail.com

Elemi kén alkalmazása multikomponensű reakciókban

Kulcsszavak: multikomponensű reakció; elemi kén; izonitril; tiokarbamid; áramlósos kémia

A multikomponensű reakciók fontos részét képezik a modern szerves szintetikus kémia eszköztárának. Segítségükkel komplex szerkezetek állíthatók elő akár egy preparatív lépésben, illetve alkalmasak lehetnek környezetbarát, atomhatékony és biztonságos alternatívát nyújtani, mint a korábban kidolgozott szintetikus eljárások. A természetben nagy mennyiségben előforduló, nem toxikus és könnyen kezelhető elemi kén szerves szintézisekben való felhasználása pedig segít kiváltani veszélyes, mérgező reagenseket, illetve fokozni a reakciók atomhatékonyágát [1,2].

Munkánk során elemi kénből szerves bázisok segítségével egy polyszulfid anionokat tartalmazó homogén vizes oldatot állítottunk elő. Ezt az oldatot reagensként alkalmaztuk egy új multikomponensű reakcióban laktám-gyűrűt tartalmazó tiokarbamidok (5) előállítására izonitrilekből (1) és amidin típusú bázisokból (3) (1. ábra).



1. ábra

Az oldatfázisban aktivált kén előnye, hogy azzal a reakció víz–acetonitril elegyben homogén körülmények között is megvalósítható, így az eljárást sikeresen átültettük áramlósos kémiai reaktorba is. A kidolgozott módszert változatos szerkezetű izonitrilekre és amidin típusú bázisokra is kiterjesztettük, ezzel megmutatva az eljárás széleskörű alkalmazhatóságát.

[1] Nguyen, T. B.; Ermolenko, L.; Al-Mourabit, A. *Org. Lett.* 2012, 14, 4274–4277.

[2] Nguyen, T. B. *Adv. Synth. Catal.* 2017, 359, 1066–1130.

Témavezetők:

Dr. Ábrányi-Balogh Péter

tudományos munkatárs, tiszteletbeli oktató, Természettudományi Kutatóközpont

Németh András

PhD hallgató, Természettudományi Kutatóközpont

Dr. Kupai József

egyetemi adjunktus, BME VBK



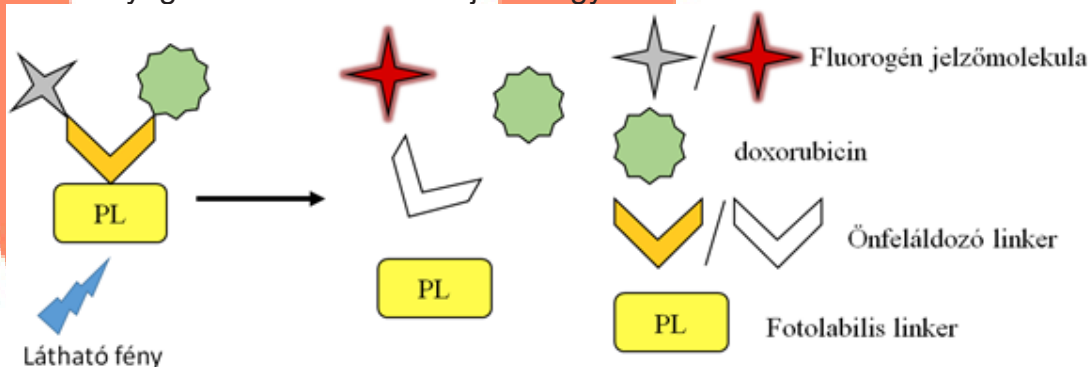
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 vegyészmérnök
 BSc, 6. félév
 werkmannandris@gmail.com

Látható fényel indukált célzott hatóanyagleadásra és valós idejű optikai nyomonkövetésre képes konjugátumok előállítása

Kulcsszavak: linker; önfeláldozó; Heck, fotoaktiválás; kumarin

A fény napjainkban már nem pusztán egy egyszerű lehetőség a megfigyelésre, hanem a biológia és az orvostudományok precíziós eszközévé vált. A fény által kontrollált jelenségek elengedhetetlen elemei a fényérzékeny anyagok, melyek képesek a fényt kémiai folyamatokká alakítani. Ilyen vegyületek közé tartoznak a fotolabilis molekulák, melyek fény hatására egy adott kémiai kötés hasítására képesek, így felhasználhatók különféle anyagok, például gyógyszer-hatóanyagok célbajuttatására vagy leadására. A fényel kiváltott hatóanyagleadás esetében a hatékony terápia elengedhetetlen része a valós idejű visszajelzés a felszabadított hatóanyag mennyiségéről és annak eloszlásáról, különösen a rákterápia területén.

Kutatásom alapvető célja egy olyan molekula előállítása, mely képes a látható fény által kiváltott hatóanyagleadásra és ennek valós idejű nyomonkövetésére fluoreszcencia segítségével. Ennek megvalósításához előállítottam egy fotolabilis kumarin származékot, melyet egy kemoterápiás szerrel (doxorubicin) és fluorogén vegyülettel kapcsoltam össze egy önfeláldozó linkeren keresztül. A látható fény hatására a fotolabilis csoport elbomlik, melyet az összekapcsoló elem gyors bomlása kísér, felszabadítva a hatóanyagot és a fluoreszcens jelzővegyületet.



*Témavezetők:
 Dr. Bitter István
 professor emeritus, BME VBK
 Dr. Kele Péter
 tudományos főmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont
 Bojtár Márton
 tudományos segédmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont*





Szerves kémia III.



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
molekuláris bionika mérnöki
BSc, 7. félév
henrietta.agoston@gmail.com

Új generációs, biomolekulák jelölésére alkalmas fluoreszcens festékek előállítása

Kulcsszavak: fluorofór; karbopironin; Suzuki–Miyaura; mikrohullámú besugárzás; fluoreszcens jelölés

A modern orvosbiológiai kutatásokban kiemelkedően fontos szerepet játszik a biomolekulák fluoreszcens jelölése. A radioaktív nyomjelzéssel szemben, a fluoreszcens jelölés, a zöld kémia alapelveit figyelembe véve, környezetbarát alternatívaként bővíti a képalkotási módszerek eszköztárát. A szuperrezolúciós, fluoreszcens optikai mikroszkópai technikák megjelenése és robbanásszerű fejlődése miatt egyre nagyobb az igény új generációs, fluoreszcens festékmolekulák szintézisére. A festékek tulajdonságaival szemben azonban szigorú elvárásokat támasztanak. Ilyenek a magas kvantumhatásfok, a fiziológiai körülmények közötti stabilitás, valamint a kiváló vízoldhatóság. Fontos szempont továbbá, hogy a biológiai minta komponenseinek autofluoreszcenciája kiküszöbölhető legyen. Manapság a vörös tartományban abszorbeáló és emittáló fluoreszcens festékek kerültek az érdeklődés középpontjába. Jelen kutatás témája olyan vörös fluoreszcens festékek előállítása, amelyek biomolekulák jelölésére alkalmasak. A festékek előállítását két építőelem összekapcsolásával hajtottuk végre. Az egyik alegységen, Suzuki-kapcsolással kialakítottunk egy izopropenilcsoportot, amely később, a Friedel–Crafts reakcióban alkilező szerként szerepelt. Ahhoz, hogy az alegységek ciklokondenzációval összekapcsolhatók legyenek, a másik építőelemen egy primer alkoholos hidroxilcsoportot képeztünk. Egyik partnerre kémiaiilag és metabolitukusan stabil kapcsolóelemként szolgáló funkciós csoportot is építettünk.

*Témavezető:
Dr. Mernyák Erzsébet
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*



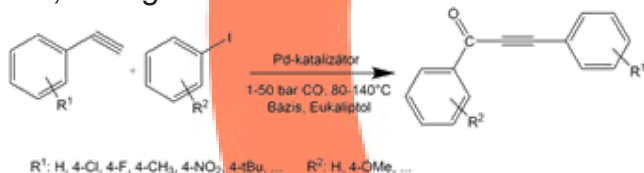
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnöki alapképzés
 BSc, 6. félév
 bathabalint@gmail.com

Eukaliptol: új, biológiai eredetű oldószer palládium-katalizált karbonilatív keresztkapcsolási reakciókhoz

Kulcsszavak: biomassza; zöld oldószer; katalízis; Sonogashira; karbonilatív

Az átmenetifém-katalizált ipar számára is releváns reakciókat általában konvencionális szerves oldószerekben (pl. THF, DMF, toluol) hajtják végre. Ezeknek reakcióközegeknek általában magas a gőznyomása és legtöbbször mérgezőek, csak hogy néhány hátrányukat említsük. Éppen ezért a helyettesítésük más, nem mérgező vagy akár biológiai eredetű oldószerekkel egy zöldebb és tisztább kémiai folyamatot eredményezhet [1].

A karbonilatív Sonogashira reakció segítségével könnyedén gyárthatunk alfa-béta-telítetlen ketonokat [2], amelyek például biomolekulák építőköveiként használhatók tipikusan a gyógyszeriparban, ahol a visszamaradt oldószermaradványok súlyos egészségügyi következményeket okozhatnak. Kutatásom során bebizonyítottam, hogy a természetes eredetű eukaliptol (1,8-cineol) használható biztonságosabb oldószerként jódbenzol és fenil-acetilén molekulák karbonilatív keresztkapcsolásához, a megfelelő alfa-béta-telítetlen ketonokat eredményezve termékként.



Az előadásomban prezentálni fogom a hőmérsékletfüggő gőznyomás viszkozitás és sűrűség meghatározását: az eukaliptol kulcsfontosságú tulajdonságait az oldószerként való felhasználásához. Továbbá demonstrálni fogom az oldószerként való felhasználhatóságát, melyhez bemutatom a reakciókörülmények optimalizálását (nyomás, katalizátor, bázisok stb.) és a szubsztituensek hatását is.

[1] (a) Pongrácz, P.; Kollár, L.; Mika, L. T. *Green Chem.* 2016, 18, 842. (b) Pongrácz, P.; Bartal, B.; Kollár, L.; Mika, L. T. *J. Organomet. Chem.* 2017, 847, 140. (c) Marosvölgyi-Haskó, D.; Lengyel, B.; Tukacs, J. M.; Kollár, L.; Mika, L. T. *Chem Plus Chem* 2016, 81, 1224.

[2] (a) Fukuyama, T.; Yamaura, R.; Ryu, I. *Can. J. Chem.* 2005, 83, 711. (b) Neumann, K. T.; Laursen, S. R.; Lindhardt, A. T.; Bang-Andersen, B.; Skrydstrup, T. *Org. Lett.* 2014, 16, 2216.

Témavezetők:
 Tukacs József Márk
 egyetemi tanársegéd, BME VBK
 Dr. Mika László Tamás
 egyetemi docens, BME VBK



Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
fanni.bede@gmail.com

Szteránvázás N-pikolil-amidok előállítása homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakcióban

Kulcsszavak: homogén katalízis; aminokarbonilezés; szteroid; jód-alkén; pikolil-amin

A karbonilezési reakciók között az aril- és alkenil-halogenidek (különösen a jodidok és bromidok) palládium-katalizált aminokarbonilezési reakciói fontos szerepet játszanak a karbonsavamidok szintézisében, továbbá szintetikus építőelemek farmakológiai fontosságú vegyületek előállításához és biológiai jelentőségű vázak funkcionálására is alkalmasak. A szteránvázás karbonsavamidok több csoportja farmakológiai aktivitással rendelkezik; egyik vegyület-család vegyületei potenciális 5 α -reduktáz inhibitorok.

Ezeknek a szteroidoknak a homogén katalitikus sztereoszelektív szintézisét vonzóvá teszi a fokozott szelektivitás, a katalizátorok finoman hangolható tulajdonságai és a szintetizálás során alkalmazott standard technikák.

Munkám során ötféle szteránvázás jód-alként állítottam elő több lépéses reakciókban, majd ezek aminokarbonilezési reakcióit vizsgáltam különböző N-pikolil-aminok, mint nukleofilek jelenlétében. Mindegyik szteroid alapvázat palládium-katalizált aminokarbonilezési reakcióval átalakítottam a megfelelő amiddá közepes vagy jó hozammal. A palládium-katalizátort in situ állítottam elő a reakciók közben. Az előállított N-pikolil-amidokat izoláltam és teljeskörűen jellemeztem.

*Témavezetők:
Dr. Kollár László
egyetemi tanár, PTE TTK
Mikle Gábor
tudományos segédmunkatárs, PTE TTK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész MSc (angol nyelven)
MSc, 3. félév
csomos.cs.attila@gmail.com

Design, synthesis and analysis of novel fluorescent probes for two-photon zinc imaging

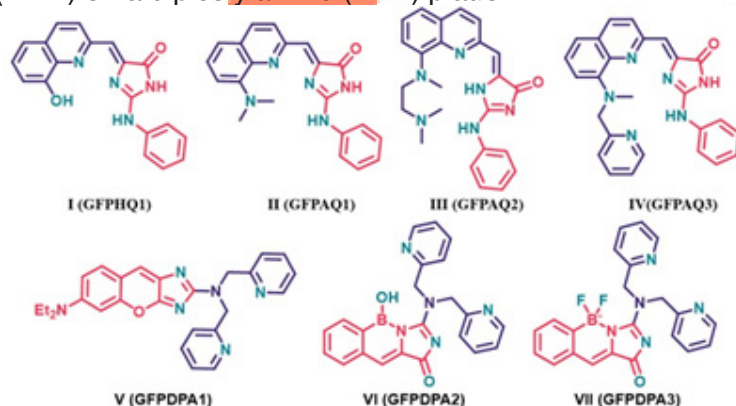
Hungarian Keywords: mikroszkópia; szenzor; képképzés; komplexkémia; zöld fluoreszcens protein

Metal ions are undoubtedly the essential components of any living organism. This work discusses issues related to the second most abundant trace metal in the human body, Zn^{2+} . This ion is involved in several vital processes in the human body, such as signaling, building up metalloproteins, controlling inflammation, and modulating other processes. Moreover, Zn^{2+} was also shown to be a crucial marker of different diseases, such as Alzheimer's or even COVID-19. This makes monitoring its presence highly important.

The most straightforward method for monitoring the presence of metal ions in tissues are fluorescent, two-photon microscopy techniques. These techniques, however, require fluorescent sensor compounds. These compounds are initially non-fluorescent molecules, that can bind to Zn^{2+} and become fluorescent in this process.

The aim of this study was to rationally design novel fluorescent probes for Zn^{2+} for fluorescent and two-photon microscopy.

Based on literature research, seven probes were designed, all involving derivatives of the chromophore of green fluorescent protein (GFP). Four probes (I–IV) were designed on a quinoline platform, while three (V–VII) on a dipicolylamine (DPA) platform.



A binding model was proposed based on quantum chemical computations and compounds I–VI were synthesized successfully. Analytical characterization of their photophysical properties and selectivity was performed and the dissociation constants of their complexes with Zn^{2+} were determined. As a result, four probes (II, III, IV and VI) exhibit all the desired properties for application in microscopy. The dissociation constants of the compounds cover a wide, biologically relevant concentration range making measurements between 1–500 μM feasible. Finally, two-photon measurements were carried out and three probes (II, III and IV) were shown to be effective under two-photon excitation. These results open the possibility to extend the available repertoire of fluorescent sensors for Zn^{2+} with a new family of molecules based on a completely novel, tunable scaffold.

[1] Jancsó, A.; Kovács, E.; Cseri, L.; Rózsa, B. J.; Galbács, G.; Csizmadia, I. G.; Mucsi, Z. *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 218, 161–170. (2019)

[2] Lim, N. C.; Freake, H. C.; Brückner, C. *Chem. – A Eur. J.* 11 (1), 38-49 (2005)

Témavezetők:

Dr. Mucsi Zoltán

vezető kutató, Femtonics Kutató és Fejlesztő Kft.

Dr. Kovács Ervin

tudományos munkatárs, Femtonics Kutató és Fejlesztő Kft.



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Gyógyszervegyész-mérnök
 MSc, 4. félév
 dagyula15@gmail.com

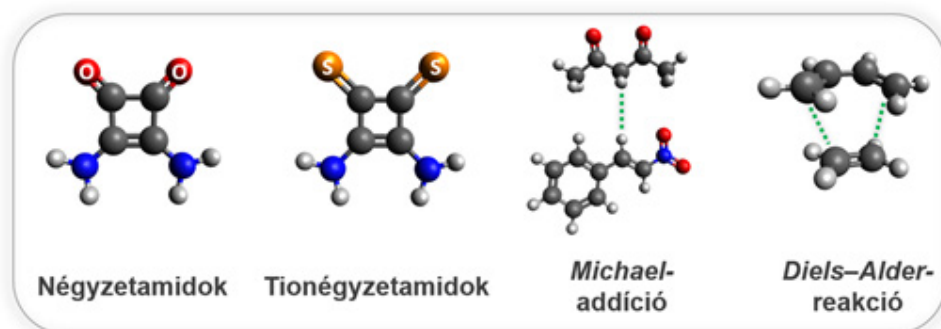
Cinkona és prolin alapú organokatalizátorok szintézise és alkalmazása sztereoszelektív reakciókban

Kulcsszavak: aszimmetrikus szintézisek; organokatalizátor; prolin; cinkona alkaloid; (tio)négyzetamid

A modern vegyiparban kiemelten fontos szerepe van a katalitikus folyamatoknak. Katalizátorok segítségével gyakran alacsonyabb hőmérsékleten, nyomáson kaphatjuk meg a kívánt terméket, kevesebb melléktermék képződése mellett. A katalitikus folyamatok során további előny lehet, ha a katalizátorunk királis, mivel ezen katalizátorok alkalmazásával elérhető, hogy egy nem sztereospecifikus reakcióban is a termékünk megfelelő antipódja keletkezzen.

Kutatómunkám során én is ehhez a törekvéshez csatlakozva több királis organokatalizátort állítottam elő, amelyek katalitikus aktivitását aszimmetrikus reakciókban vizsgáltam. Munkám során sikeresen állítottam elő cinkona alkaloid, valamint prolin alapú négyzetamid, illetve tionégyzetamid organokatalizátorokat. A tionégyzetamidokat a megfelelő négyzetamidokból foszfor-pentaszulfid piridin komplexével történő tionálás segítségével alakítottam ki. Ha a négyzetamidok karbonilcsoportjait tiokarbonil egységekre cseréljük, akkor a katalizátorok savas karaktere, valamint a szerves oldószerekben történő oldhatósága növekedik, amely által ezen vegyületek új reakciókban alkalmazhatók.

Mivel az előállított katalizátorok királis egységeket is tartalmaznak, ezért alkalmazhatóak lehetnek sztereoszelektív reakciókban. Munkám során az előállított katalizátorok aktivitását enantioszelektív szén–szén kötés kialakítására alkalmas Michael-addícióban, valamint a prolin típusú organokatalizátorokat enaminn katalizált Diels–Alder-reakcióban vizsgáltam, amely reakciókban kiváló enantiomer felesleget ($\leq 98\%$) értem el.



Témavezetők:
 Dr. Kupai József
 egyetemi docens, BME VBK
 Dr. Nagy Sándor
 posztdoktor, BME VBK
 Dr. Huszthy Péter
 professor emeritus, BME VBK



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Gyógyszervegyész-mérnöki
 MSc, 3. félév
 domahidy.farkas@gmail.com

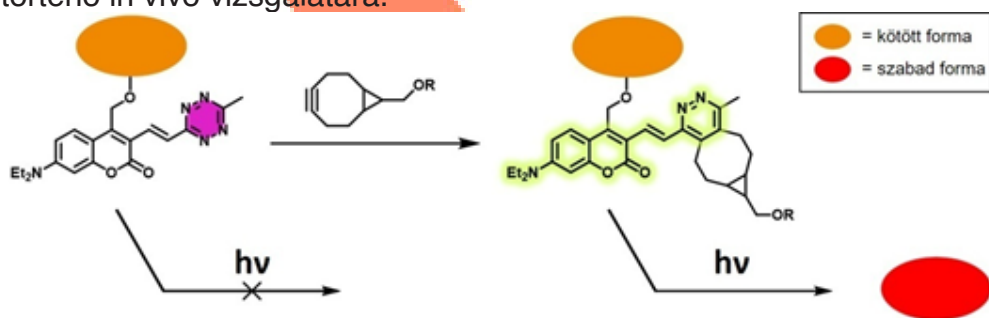
Feltételesen fotoaktiválható vegyületek szintézise és vizsgálata

Kulcsszavak: fotokémia; tetrazin; fotolabilis védőcsoport; bioortogonális kémia

Az élő szervezetek fénnel történő manipulálása lehetővé teszi a biológiai rendszerekbe történő noninvazív, térben és időben jól szabályozható beavatkozást. Ennek egyik eszköze a fotolabilis védőcsoportok (photocage-ek) alkalmazása, amelyek besugárzás hatására képesek egy kötés hasításával felszabadítani a hozzájuk kötött hatóanyag szabad, aktív formáját.

A tetrazin csoport fluoreszcencia-kioltó tulajdonságát sikerrel alkalmazták számos olyan turn-on fluorogén jelzővegyületben, amelyek a tetrazin funkció bioortogonális click reakcióval (iEDDA) történő megszüntetése révén válnak fluoreszcenssé. Ezek mintájára feltételezhető volt, hogy egy fotolabilis védőcsoportot tetrazinnal konjugálva olyan vegyülethez juthatunk, amely önmagában fotostabil, azonban egy bioortogonális reakcióval fotolabilissé tehető. A koncepció magában hordozza annak a lehetőségét, hogy a click reakcióban részt vevő másik reaktánst megfelelő célzó vegyülethez (pl. biomolekulához vagy akár antitesthez) kötve a védőcsoportot szelektíven lehessen eltávolítani egyes sejtekben vagy organelumokban besugárzás segítségével, felszabadítva a hozzá kötött gyógyszer-hatóanyagot vagy egyéb kismolekulát. A módszer reményeink szerint a fotoaktivált kemoterápiában (PACT) találhat alkalmazásra.

Kutatómunkám során előállítottam a dietilaminokumarin (DEAC) fotolabilis védőcsoport tetrazinnal konjugált származékát, majd ehhez különböző (észter-, karbonát-, és karbamát-) csoportokon keresztül UV-aktív modellvegyületeket kötöttem. A célvegyületek látható (kék) fénnel végzett fotolízisét HPLC mérésekkel nyomon követve igazoltam az előállított vegyületek feltételes fotolabilitását, illetve vizsgáltam a távozó csoport és az oldószer hatását a reakció kinetikájára. Szintetizáltam és hasonlóan jellemeztem továbbá egy olyan vegyületet, amelyben a kumarin photocage-hez egy fluorogén jelzővegyület kapcsolódik, így alkalmas a feltételes fotolízis fluoreszcens mikroszkópiával történő in vivo vizsgálatára.



Témavezető:
 Dr. Bojtár Márton
 tudományos munkatárs, Természettudományi Kutatóközpont

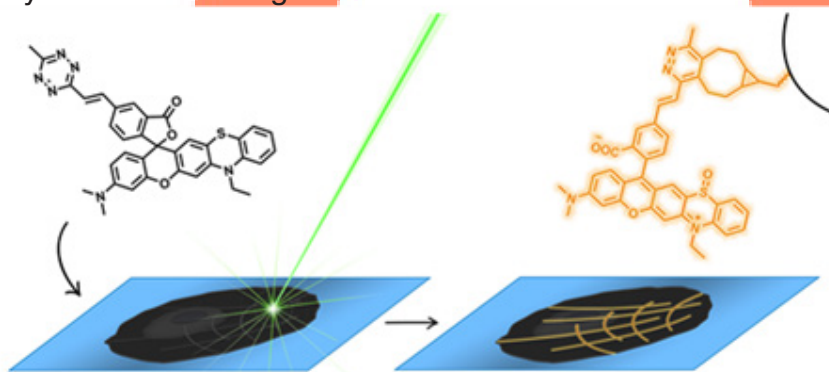


Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 1. félév
kerndora13@gmail.com

Mikroszkóp lézer által indukált fotooxidatíván aktiválható jelzővegyületek szintézise

Kulcsszavak: fluoreszcens; festék; sejtjelölés; szinglet oxigén; bioortogonális

Korunk egyre növekvő információmennyisége megköveteli a rendszerek komplexebb, mélyrehatóbb megismerését, így az emberi testben lejátszódó folyamatok kémiája és biológiája is feltérképezhetővé válik. A sejten belüli molekulák jelölésének – így a sejt szintű folyamatok részletes nyomon követésének – számos módja közül a fluoreszcens tulajdonságú jelzővegyületek használata az egyik legnépszerűbb lehetőséggé lépett elő az elmúlt évtizedben. A fluoreszcens jelzővegyületek, ezen belül is a fluorogén, azaz ki- és bekapcsolható fluoreszcenciájú vegyületek, nagyban hozzájárultak a nyomjelzés egyszerűbb megvalósításához, ugyanis a szelektív jelölés lehetővé tétele mellett előállításuk nem igényel sok munkát. A fluorogenicitás szabályzásának számos módja ismert; ezek közül az utóbbi években nagy figyelmet kaptak azok a vegyületek, melyek fluoreszcens intenzitása fény hatására nő meg.



Munkám során a rodamin alapvázat fentiazin vázzal terjesztettem ki, és a kapott fluorogén molekulákat további funkcionálizálással átalakítottam úgy, hogy azok biológiai közegben történő alkalmazáshoz megfelelő tulajdonságokat ötvözzenek. A biológiai kísérletek során nagy intenzitásnövekedést okozó jelenséget figyeltem meg, melynek okaként fotooxidációs folyamatokat feltételeztünk. Ennek bizonyításához előállítottam a rodafentiazinok oxidált formáit is, ezek segítségével pedig a feltételezett mechanizmust oldatkísérletekkel sikerült alátámasztani.

Témavezetők:

Dr. Kele Péter

tudományos főmunkatárs, Természettudományi Kutatóközpont

Dr. Kormos Attila

tudományos munkatárs, Természettudományi Kutatóközpont



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Kémia
BSc, 5. félév
nagyb@zng.elte.hu

Új fotokatalizátorok szintézise és alkalmazása látható fénnel kiváltott szerves kémiai átalakításokban

Kulcsszavak: szerves kémia; szintetikus kémia; fotokémia; katalízis

A látható fény energiáját hasznosító fotokatalizátorok közül a szerves alapú fotoredox katalizátorok két fő csoportja az átmenetifém-komplexek és a fotoredox tulajdonsággal rendelkező szerves festékmolekulák. A dolgozatban bemutatott munkám során ezen két területen végeztem új ligandumok és katalizátorok szintézisét, illetve reaktivitásuknak vizsgálatát.

A réz centrumú komplexek alternatívát nyújthatnak a magasabb árú átmenetifém-komplexekkel szemben. Kutatócsoportunkban korábban részletesen vizsgáltuk réz(I)-fenantrolin komplexeiket, melyek kiváló aktivitást mutattak. Ezt alapul véve egy olyan projektben vettem részt, mely során különböző diimin ligandumok szintézisét és az ezekből képzett réz(I)-diimin komplexcsalád létrehozását valósítottuk meg. A potenciális fotokatalizátorokat CBr₄ sztirolra történő látható fénnel aktivált gyökös addíciós reakciójában vizsgáltuk katalitikus aktivitásuk kiderítésének céljából. A reakciókörülmények optimalizálása után a legtöbb komplex kiváló konverziót eredményezett. Ezután különböző gyökös addíciós reakciókban vizsgáltuk új katalizátorainkat.

Szerves festékek területén karbazoltartalmú katalizátorok előállításával foglalkoztam. A 4CzIPN [2,4,5,6-tetrakis(karbazol-9-il)izoftalonitril] egy jól bevált karbazoltartalmú szerves fotokatalizátor. Ennek a molekulának állítottuk elő származékait a karbazolvázon végzett változtatásokkal. Először monofoszfanált karbazolokat szintetizáltam, majd ligandumként fotokatalizált Heck-reakcióban vizsgáltam őket sikerrel. Ezután előállítottunk 13 különböző 4CzIPN származékot, kereskedelemben kapható, illetve általunk előállított szubsztituált karbazolokból. Ezeket a festékeket nikkel-komplext alkalmazó látható fénnel kiváltott reakciókban vizsgáltuk, ahol jó konverziókat értünk el. A 4CzIPN nitrilcsoportjának ariletinilcsoportra történő cseréjére is kidolgoztunk egy szintézisutat, amely azonban az utolsó lépésben sikertelennek bizonyult.

Karbazolt alkalmazva új, ftálimid központú szerves festékmolekulák szintézisét is megvalósítottuk. Munkám során 7 különböző difluorftálimidet állítottam elő, melyekből 2 új dikarbazolilftálimid festék szintézise járt sikerrel. N-butilftálimidek esetében mono-, illetve tetrafluor származékokat is előállítottam, melyekből monojódozott karbazolokkal hoztam létre festékeket. A kutatócsoportban előállított monokarbazolil ftálimideket szintén nikkel-komplext alkalmazó fotokatalitikus reakcióban vizsgáltuk, ahol jó eredményeket kaptunk.

*Témavezető:
Dr. Novák Zoltán
egyetemi docens, ELTE TTK*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 Vegyészmérnök BSc
 BSc, 7. félév
 pp.attilaolah@gmail.com

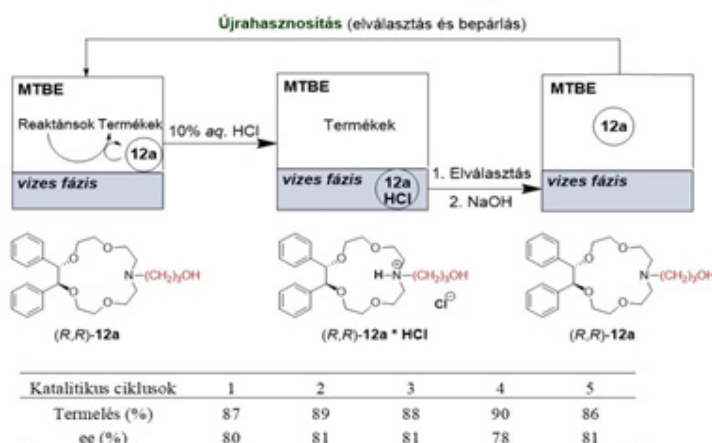
Hidrobenzoin-alapú, újrahasználható királis fázistranszfer katalizátorok szintézise és alkalmazása

Kulcsszavak: katalízis; visszaforgatás; koronaéter; kiralitás; zöld kémia

Napjainkban egyre nagyobb jelentőséget nyer a zöld kémia és a környezet megóvása. A zöldkémiai törekvések célja, hogy a kémiai reakciók és folyamatok tervezését meghatározott szabályrendszer segítségével végezzük, ezáltal visszaszorítva a környezet szennyezését és a veszélyes anyagok használatát a vegyiparban.

A fázistranszfer katalízis több szempontból is eleget tesz a zöld kémia elvárásainak, mivel általában lehetőséget biztosít, hogy enyhébb körülmények között, környezetbarátabb oldószerek és reagensek felhasználásával valósítsunk meg reakciókat. Az aszimmetrikus fázistranszfer katalízis iránt jelentősen megnőtt a tudományos érdeklődés az elmúlt harminc évben. Számos különböző királis katalizátort szintetizáltak és teszteltek az elmúlt időszakban különböző reakciókban, több esetben kiváló enantioszelektivitással. A legtöbb királis fázistranszfer katalizátor szintézise bonyolult és költséges, regenerálásuk általában nem megoldott, vagy körülményes (pl.: kromatográfiás tisztítást igényel). Napjainkban több próbálkozás is történt újra felhasználható királis fázistranszfer katalizátorok előállítására, leginkább polimerhez rögzített cinkonaalkaloid-alapú ammóniumsók esetén. A dolgozatban bemutatott kutatás célja egyszerűen és jó termeléssel visszanyerhető királis fázistranszfer katalizátorok szintézise könnyen hozzáférhető és olcsó kiindulási anyagokból.

Katalizátor visszaforgatása



Témavezetők:
 Dr. Rapi Zsolt
 egyetemi adjunktus, BME VBK
 Dr. Bakó Péter
 egyetemi magántanár, BME VBK



Újvidéki Egyetem
Kémia
MA, 1. félév
srkny.krisztina@gmail.com

Új, szteránvázis heterociklusok előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: koleszterin; N-heterociklus; tetrazol; NMR spektroszkópia

A szerves kémia kutatói már évtizedek óta nagy figyelmet szentelnek a heterociklusokkal módosított szteroid vegyületek szintézisére, ugyanis ezen vegyületek egy része bizonyítottan rákellenes hatást mutat, tehát nagy alkalmazhatóságnak örvendenek a gyógyszerészet és az orvoslás terén.

A TDK-dolgozat fő témája a koleszterin kémiai átalakulása, amely potenciális biológiai aktivitással rendelkező szteroid heterociklusokhoz, azaz többlépéses reakcióúton A-, illetve B-gyűrűhöz kondenzált származékokhoz vezet. A szintézisek kiindulási anyaga a koleszterin volt, amely a már ismert eljárások szerint A-szeko-vegyületté alakult. Ezen kulcsfontosságú köztiterméket a továbbiakban Schmidt- és Mitsunobu-reakciónak, valamint nátrium-aziddal történő nukleofil szubsztitúciós reakciónak alávetve szteránvázis tetrazol- és azido-vegyületek képződtek.

Az újonnan előállított származékok szerkezetét – áttisztítás után – infravörös, valamint ^1H - és ^{13}C -NMR spektroszkópiai módszerekkel elemeztük.

*Témavezetők:
Dr. Csanádi János
egyetemi tanár, RS UE
ŠkorićDušan
tanársegéd, RS UE*



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Kémia
BSc, 5. félév
szelebogi@gmail.com

Szteroidok aza-Michael addíciós reakciója reverzibilis ionfolyadékok jelenlétében

Kulcsszavak: aza-Michael addíció; szteroid; reverzibilis ionfolyadék; guanidin; szén-dioxid

Az ionfolyadékok nagyméretű anionokból és kationokból felépülő, alacsony olvadáspontú vegyületek. Sajátos fizikai és kémia tulajdonságaik miatt alkalmazhatóak oldószerként, illetve katalizátorként egyaránt. Újrafelhasználhatóságuk révén lehetőséget nyújtanak új környezetbarát szintézismódszerek kidolgozására. [1-2] Az ionfolyadékok egyik csoportjába tartoznak az úgynevezett változtatható polaritású oldószeres, vagy más néven reverzibilis ionfolyadékok. Ezen ionfolyadékok komponensei külső behatásra (pl.: CO_2) kerülnek ionos állapotba. A folyamat reverzibilis, tehát a külső hatás megszüntetésével a rendszer visszaáll az eredeti, molekuláris állapotába.

A reverzibilis ionfolyadékok alkalmazhatóságát 3β -hidroxipregna-5,16-dién-20-on (16-DHP) és N-heterociklusok között lejátszódó aza-Michael addíciós reakciókban vizsgáltam. Katalizátorként guanidin bázisokat alkalmaztam. A reverzibilis rendszer kialakítása érdekében egy semleges ionfolyadékot, [BMIM][BF_4]-et is hozzáadtam a reakcióelegyhez. A reakcióidő lejártával és CO_2 gáz hozzáadásával egy biner ionfolyadék rendszert alakítottam ki. A szelektíven képződő termék extrahálását követően az ionfolyadék vákuumban, melegítéssel újra molekuláris állapotba hozható, így a katalizátor és a reagens feleslege újra felhasználható. Munkám során meghatároztam a reverzibilis ionfolyadékok oda-vissza alakításának, valamint a termékek extrahálásának körülményeit. Újrafelhasználhatóságukat több körön keresztül vizsgáltam. A termékek és az ionfolyadékok szerkezetét $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ és tömegspektroszkópiával vizsgáltam. A reakció előrehaladását, a termékek extrahálhatóságát vékonyréteg- illetve gázkromatográfiás módszerekkel követtem nyomon. A nyers termékeket oszlopkromatográfiával tisztítottam.

[1] R. L. Vekariya J. Mol. Liq. 2017, 227, 44–60

[2] P. G. Jessop, D. A. Jessop, D. Fu, L. Phan Green Chem., 2012, 14, 1245–125

*Témavezetők:
Dr. Skodáné Dr. Földes Rita
egyetemi tanár, PE MK
Maksó Lilla
PhD hallgató, PE MK*





Szervetlen kémia



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Vegyésmérnöki
BSc, 2. félév
bala.barhacs.marcell@gmail.com

Grafén felületének módosítása réz klaszterekkel

Kulcsszavak: grafén; rézklaszter; szén-dioxid redukció; kvantumkémia; katalizátor

A grafén a grafit egy rétegének leválasztásával származtatható, egyetlen szénatom vastagságú, ún. kétdimenziós anyag, amely felfedezése óta a tudományos kutatások egyik központi szereplője. Kiemelkedő mechanikai és elektromos tulajdonságokkal rendelkezik: rendkívül flexibilis, félfémek jellegű, külső tér hatására pedig elektromos tulajdonságai megváltoznak, így a mikroelektronikában is hasznosnak bizonyulhat. Kémiaileg meglehetősen inert, emiatt katalizátorok vagy szenzorok hordozóanyaga lehet.

A fém klaszterek olyan, megszámlálható atomból álló rendszerek, melyek fizikai és kémiai tulajdonságai az atomi és a makroszkopikus tulajdonságoktól jelentősen eltérnek. A méret-, összetétel- és kémiai környezettől függő tulajdonságaik miatt az átmenetifém-klaszterek manapság szintén a kutatások középpontjában állnak. Nem régiben elvégzett kísérletek azt mutatták, hogy a Cu₄ kiváló szén-dioxid redukciós katalitikus aktivitással rendelkezik. A grafénre leválasztott és viszonylag nagyméretű elektródokkal rögzített klaszterek szenzorok aktív anyagai lehetnek.

Ugyanakkor a grafén kémiai inertsege miatt a nemesfém klaszterek viszonylag gyengén kötődnek a felülethez. Így munkám célja annak feltérképezése volt, hogy miképp lehet immobilizálni a Cu₄-klasztert a grafén felületén: megvizsgáltam a felületen fellépő vakancia, és a különböző dópoló atomok hatását is. Ehhez főként sűrűségfunkcionál-elméleten alapuló számítási módszereket használtam. Eredményeim alapján arra következtettem, hogy a bór a legkedvezőbb szennyező atom a klaszter immobilizálására: a három bóratom által koordinált klaszter meglepő módon tetraédres szerkezetű. A kis koordinációjú fématom miatt igen ígéretesek a katalitikus vagy szenzorként való alkalmazásai.

A további munkám során számításokkal vizsgáltam, hogy a leválasztott, három bóratom által koordinált 4 atomos klaszter miképp katalizálja a CO₂ elektrokémiai redukcióját. Azt tapasztaltam, hogy a C₁ szénhidrogének, ezek közül is elsősorban a metán keletkezése kedvezményezett. Az ígéretes eredmények nyomán elkezdtem vizsgálni a klaszter méret növelésének hatását is. Ezen számításaim jelenleg is folynak. A számítási munkával párhuzamosan a preparatív munkát is megkezdtük: a nitrogént, mint lehetséges szennyező atomot sem szabad elvetnünk olcsósága miatt, emellett a C és N-tartalmú kétdimenziós anyagokról, a grafitos szén nitridekről sokkal több gyakorlati információ áll rendelkezésre, ezért a preparatív munkánk során ezzel kezdtünk foglalkozni.

*Témavezető:
Dr. Höltzl Tibor
tudományos munkatárs, BME VBK*



Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Vegyész
MSc, 3. félév
beres.kende@gmail.com

Oxidálóanion-tartalmú vas(III)-karbamidkomplex sók szintézise, szerkezete és tulajdonsága

Kulcsszavak: szerkezetvizsgálat; egykristály; spektroszkópia; oxidok;

Jelen munkám során három különböző oxidáló aniont – nitrát (NO_3^-), permanganát (MnO_4^-), és dikromát ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$) – tartalmazó hexakarbamido-vas(III) vegyületet állítottam elő. Az előállított komplexek érdekessége, hogy karbamid ligandumjai redukáló, míg anionjaik oxidáló természetűek. Ez egy olyan reaktív rendszert eredményez, ahol a ligandum és az anion megfelelő körülmények között kölcsönhatásba léphet egymással. Az előállított komplex sókat por- és egykristály-röntgendiffrakció, Mössbauer-, infravörös (analitikai- és távoli tartományú), Raman-spektroszkópiái, pásztázó elektronmikroszkópiái, valamint termikus analízis módszerekkel vizsgáltam. Egykristály-röntgendiffrakció segítségével meghatároztam a komplexek szerkezetét. Ez alapján mindhárom komplex oxigénen keresztül koordinált oktaédesen elhelyezkedő karbamid ligandumokat tartalmaz, továbbá mindhárom komplex esetében kiterjedt, erős N–H...O–X (X = N, Mn vagy Cr) típusú hidrogénhid-kötéseket azonosíthatók. A nitrát-vegyület esetében hematit képződik, míg a hexakarbamido-vas(III)-permanganát és -dikromát termikus bomlása során vegyes vas-mangán és vas-króm oxidok keletkeznek relatíve alacsony hőmérsékleten (< 200 °C). A vegyes oxidok kialakulásában a szilárdfázisú, kvázi-intramolekuláris redox reakciók játszanak szerepet, amelyek az oxidáló anionok és a redukáló karbamid ligandumok között játszódnak le. További hőkezelés hatására az amorf vegyes fémoxidok – levegőn és inert atmoszférában – a hőmérséklettől függően különböző kristályos vegyes fém-oxid fázisokká alakulnak. A reakciótermékek összetételét por-röntgendiffrakciós, Mössbauer- és infravörös spektroszkópiás módszerekkel, míg morfológiájukat pásztázó elektronmikroszkópiás módszerrel vizsgáltam. A vizsgálatok során a hexakarbamido-vas(III)-permanganátból már alacsony hőmérsékleten (350 °C) mikrokristályos vas-mangán vegyes oxidok kialakulását tapasztaltam (jakobzit és bixbyit), míg levegőn 800 °C-on bixbyit, inert atmoszférában wüstitit keletkezik. A hexakarbamido-vas(III)-dikromát esetében nanokristályos vas-króm-oxid (eszkolait) a végtermék 800 °C-on levegőn történő hőkezelés során, míg inert atmoszférában 800 °C hőmérsékleten kromit és eszkolait keletkezik. Az előzetes vizsgálatok alapján a keletkezett vas-mangán és vas-króm vegyes oxidok katalitikusan aktívnak bizonyultak szén-dioxid konverzió esetében, melynek végtermékeként különböző szerves oxigenátok (pl. metanol, etanol, ecetsav) keletkeztek.

*Témavezetők:
Dr. Homonnay Zoltán
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Kótai László
tudományos főmunkatárs, ELKH, Természettudományi Kutatóközpont,
Anyag- és Környezetkémia Intézet*



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
 Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
 vegyészmérnöki
 BSc, 5. félév
 csilluszfekete@gmail.com

Dibizmutátok mint építőegységek: kvantumkémiai számítások

Kulcsszavak: foszfin; bizmut; ezüst; mechanizmus; számításos kémia

A szerves–szervetlen hibrid anyagok tudatos tervezése és szintézise egyre több figyelmet kap napjainkban. Nemcsak tudományos szempontból érdekes és változatos a szerkezetük, hanem egyedi kémiai és fizikai tulajdonságokkal is rendelkeznek, melyeket a gyakorlatban alkalmazni tudunk. Az új anyagok fejlesztése terén az egyik legnagyobb potenciál a bizmut-vegyületekben rejlik. A hagyományos bizmut-vegyületek mellett az utóbbi évtizedekben elkezdtek felfedezni a polikationokat és polianionokat is, melyek előnyös tulajdonságait felhasználhatjuk a katalízisben, perovszkit elemek anyagaként, optoelektronikában vagy ferroelektronikában is [1].

Munkám során diszkrét dibizmutát-ionok keletkezését és szerkezetét vizsgáltam kvantumkémiai módszerekkel, melynek alapját Dominikus Heift csoportjában végzett kísérletek adták. A BiX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) és PS_3 ligandum adduktjának, azaz a PS_3BiX_3 komplexnek, sósavval történő reakciójában a $[\text{HPS}_3\text{BiX}_4]_2$ dimer keletkezik, melyben két $[\text{HPS}_3]^+$ foszfónium egység kapcsolódik a központi $[\text{Bi}_2\text{X}_8]^{2-}$ egységhez datív $\text{S} \rightarrow \text{Bi}$ kötéssel [2]. A reakció egyik érdekessége, hogy a PS_3 foszfor centruma irreverzibilisen protonálódik a HCl által, amely szemben áll a foszfinok viselkedésével; általánosságban a hidrogén-halogenid általi protonálódásuk egyensúlyhoz vezet. A termodinamikai hajtóerő megértéséhez sűrűségfüggő elméleten alapuló számításokat használtam, melyek rávilágítottak a dimerizáció kulcsszerepére a reakcióban. Továbbá a dimerek kötésszerkezetét, optikai tulajdonságait és az izomerek stabilitását is vizsgáltam.

A PS_3BiCl_3 komplexet ezüst-trifláttal is reagáltatták acetonnitril oldószerben, mely reakcióban a $\{[\text{AgPS}_3\text{BiCl}_3(\text{OTf})_2](\text{CH}_3\text{CN})_2\}_\infty$ összetételű koordinációs polimer keletkezett. A koordinációs polimerben dianionos és dikationos ismétlődő egységek (triflát-hidas $[\text{Bi}_2\text{Cl}_6(\text{OTf})_2]^{2-}$ dibizmutátok és makrociklusos $[\text{Ag}(\text{PS}_3)_2]^{2+}$) végtelen láncolata található. Munkám során a két építőegység közötti kötésesterőséget, illetve a makrociklusos vegyület kötési viszonyait vizsgáltam (NBO, AIM analízis).

[1] Lehner, A. J.; Fabini, D. H.; Evans, H. A.; Hébert, C. A.; Smock, S. R.; Hu, J.; Wang, H.; Zwanziger, J. W.; Chabiny, M. L.; Seshadri, R.; Chem. Mater. 2015, 27 (20), 7137–7148.

[2] Fekete, C.; Barrett, J.; Benkő, Z.; Heift, D.; Inorg. Chem. 2020, 59 (18) 13270–13280.

*Témavezető:
 Dr. Benkő Zoltán
 egyetemi docens, BME VBK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Kémia
BSc, 7. félév
kis.mate.levente@gmail.com

A Monenzin A – egy természetes antibiotikum fémkomplexei

Kulcsszavak: monenzin A; ionofór antibiotikum; fémkomplex; moláris abszorbancia; CD spektroszkópia

A monenzin A egy poliéter ionofór vegyület amely pozitív ionokat komplexálhat. A molekula hidrogénkötés révén kvázi gyűrűs szerkezetet alkot, melynek üregében kötődnek meg az egyértékű fémionok. A monenzin A molekula felszíne az alkil láncok miatt lipofil, az üreg pedig az oxigénatomok miatt hidrofil karakterű. Ezért kationokat tud szállítani a sejtmembrán egyik oldaláról a másikra. Ez az iontranszport felboríthatja a baktériumsejtek ionháztartását, sejthalált idézve elő.

Az antibiotikus hatás jobb megértése érdekében tanulmányozták a monenzin A ligandum és az egyszerűen pozitív töltésű fémionok kölcsönhatását. A képződő 1:1 arányú komplexekben a monenzin monoanionos formában volt jelen az adott kation mellett. Kutatócsoportunk korábbi munkája során igazolta, hogy kétszeresen pozitív töltésű fémionokkal a monenzin A ligandumfelesleg jelenlétében $[M(\text{Mon})_2]$ összegképletű komplexeket képez, míg fémionfelesleg mellett pozitív töltésű, $[M(\text{Mon})]^+$ összegképletű komplex alakul ki.

Kutatásaink során célunk volt, hogy a korábban már igazolt komplexekkel részletes oldatkémiai vizsgálatokat folytassunk metanolos közegben. Ehhez elsőként számos Co(II) és Ni(II) só moláris abszorbanciáját vizsgáltuk meg metanolos közegben. Ezen értékek igen korlátozott mértékben állnak rendelkezésre az irodalomban, viszont elengedhetetlenek a további kísérletek megbízható kiértékeléséhez. Megmértük a fémsó-oldatok pontos koncentrációit ICP–MS módszerrel, majd ezeket felhasználva validáltuk számos fémsóoldat moláris abszorbanciáját, valamint a mérések linearitási tartományait is megbecsültük. Ezt követően cirkuláris dikroizmus spektroszkópia segítségével tanulmányoztam a monenzin A kölcsönhatását kobalt(II) ionokkal.

*Témavezetők:
Dr. Gyurcsik Béla
egyetemi docens, SZTE TTIK
Hajdu Bálint
PhD hallgató, SZTE TTIK*



Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar
Molekuláris bionika mérnök
BSc, 7. félév
fanni512@gmail.com

Egy (N,N) donoratomokat tartalmazó Schiff-bázis és félszendvics fémorganikus komplexeinek oldatkémiai vizsgálata és kölcsönhatásuk bioligandumokkal

Kulcsszavak: p-cimol; N-(2-piridinil-metilén)-anilin; 1,10-fenantrolin; humán szérum albumin; transzferrin

A fémorganikus vegyületek ígéretes kutatási területnek számítanak a potenciális gyógyászati és szintetikus vegyipari alkalmazásuk miatt. A Rh(III) és Ru(II) félszendvics komplexeinek katalitikus aktivitását már több ízben bizonyították. Ru(III)-tartalmú komplexeket már klinikai fázisban vizsgáltak rákellenes szerként való felhasználásra, emellett már félszendvics Ru(II)-komplexek is biztató eredményeket mutattak. Fontos még megemlíteni a Schiff-bázis 2-piridinilmetilén-anilineket, melyek félszendvics Ru komplexei jelentős szelektivitást mutattak rákos sejtekre in vitro.

Kutatócsoportunkban már kiterjedt kutatás folyt bioaktív fémkomplexek oldategyensúlyi vizsgálatára, valamint ezek kölcsönhatására endogén vegyületekkel. Szakdolgozati munkámsorán a Ru(η^6 -p-cimol) (RuCym) és a Rh(η^5 -C₅Me₅) (RhCp^{*}) egy modell ligandummal az N-(2-piridinil-metilén)-anilinnel (PMA) képzett komplexeinek megismerését és oldatbeli viselkedésének vizsgálatát végeztük UV-látható spektrofotometriás, pH-potenciometriás, ultraszűrési és ¹H-NMR spektroszkópiás vizsgálati módszerekkel. Fehérjével való kölcsönhatás vizsgálatára humán szérum albumint (HSA) és transzferrint (Trf) használtunk. Vizsgáltuk a Schiff-bázis PMA ligandumnak E és Z izomerjeit és meghatároztuk a molekulát jellemző proton disszociációs makroállandót. Követtük a RhCp^{*}-PMA és RuCym-PMA komplexek kialakulását és ellenőriztük stabilitásukat fiziológiás, savas és lúgos pH-n. A komplexek pH = 2 és 8 között stabilisnak mondhatók, ezért vizsgálhatók a fehérjével való kölcsönhatásaik. Összehasonlításnak az (N,N) donor 1,10-fenantrolin komplexeit használtuk. A komplexek aminosav és nukleozid modellvegyületekhez való affinitását spektrofotometriásan figyeltük meg. A vizsgált fémorganikus komplexek nem citotoxikusak (IC₅₀ > 100 μM), viszont modellként a kapott eredményeink bizonyították, hogy vérfehérjével kölcsönhatnak az ilyen típusú komplexek, ami miatt érdemesek lehetnek további vizsgálatokra.

*Témavezetők:
Dr. Enyedy Éva Anna
egyetemi docens, SZTE TTIK
Mészáros János Péter
PhD hallgató, SZTE TTIK*



Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar
Vegyészmérnök
BSc, 5. félév
antonia.antonia8@gmail.com

Az $[\text{Mn}(\text{OPC2AM}^{\text{sarc}})]$ oldategyensúlyi vizsgálata: egyensúly, kinetika és relaxáció

Kulcsszavak: egyensúly; kinetika; relaxáció; mangán; MRI

Munkám során előállítottam az $\text{OPC2AM}^{\text{sarc}}$ ligandumot és részletesen vizsgáltam komplexképző sajátságait. Tanulmányoztam a ligandum számos esszenciális fémmel kialakuló komplexét, különösképp a $\text{Mn}(\text{II})$ -ionnal kialakuló komplex egyensúlyi, relaxációs és kinetikai sajátságait.

Az egyensúlyi vizsgálatok eredményei azt mutatják, hogy a $\text{OPC2AM}^{\text{sarc}}$ ligandum bázicitás értéke kisebb, mint az OPC2A anyaligandumé és messze elmarad a PC2A ligandumétól, amiből következik, hogy a kialakuló komplexekek stabilitási állandói is kisebb értéket mutatnak. A $[\text{Mn}(\text{OPC2AM}^{\text{sarc}})]$ -komplex stabilitása is kisebb, mint az OPC2A vagy a PC2A ligandumok $\text{Mn}(\text{II})$ -komplexeié, amit a fiziológiai körülményekre számított pMn értékek is jól mutatnak ($\text{pMn}_{[\text{Mn}(\text{OPC2AM}^{\text{sarc}})]} = 7,61$, $\text{pMn}_{[\text{Mn}(\text{OPC2A})]} = 8,69$, $\text{pMn}_{[\text{Mn}(\text{PC2A})]} = 8,64$). Mivel az $\text{OPC2AM}^{\text{sarc}}$ ligandum donoratombjainak száma (8) meghaladja a másik két ligandum donoratombjainak számát (6), így a $\text{Zn}(\text{II})$ - és $\text{Cu}(\text{II})$ -ionok komplexei esetében két protonálódási állandót is kaptunk. A $\text{Cu}(\text{II})$ -komplex stabilitási állandóját spektrofotometriás mérések segítségével tudtuk számolni, hiszen a komplex képződése teljes $\text{pH} = 2$ -es értékre.

A kinetikai vizsgálat eredményéből azt kaptuk, hogy a $[\text{Mn}(\text{OPC2AM}^{\text{sarc}})]$ -komplex disszociációjának felezési ideje $\text{pH} = 7,4$ -en több mint 400 óra, ami a kontrasztanyagok szervezetből történő kiürülési idejét figyelembe véve ($t_{1/2} = 1,6$ óra) kiválóan megfelel az *in vivo* alkalmazáshoz. Azt is megállapítottuk, hogy a komplex gyorsabban disszociál, mint a $[\text{Mn}(\text{OPC2A})]$ -komplex ($t_{1/2} = 1625$ óra), ugyanakkor inertsége nagyobb a $[\text{Mn}(\text{PC2A})]$ -komplexénél ($t_{1/2} = 30$ óra). Az inertség csökkenése a komplex $[\text{Mn}(\text{OPC2A})]$ -hoz viszonyított nagyobb protonálódási állandóiban keresendő, amelyek megkönnyítik a protontranszfert az oldalláncokról a gyűrű N-atomjaira, előidézve a komplex disszociációját.

Megmértük a $\text{Mn}(\text{II})$ -komplex relaxivitás értékeit is 20 és 60 MHz téren 25 és 37 °C egyaránt és azt találtuk, hogy azok több mint egy egységgel nagyobbak az OPC2A és PC2A komplexek megfelelő értékeinél.

Összességében megállapítható, hogy a $[\text{Mn}(\text{OPC2AM}^{\text{sarc}})]$ -komplex termodinamikai, kinetikai és relaxációs szempontból is teljesíti az MRI kontrasztanyagokkal szemben támasztott követelményeket.

Témavezetők:

Csupász Tibor

PhD hallgató, DE TTK

Dr. Kálmán Ferenc

egyetemi docens, DE TTK



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Vegyész MSc
MSc, 1. félév
markmosby97@gmail.com

Vízoldható terbium(III)-porfirin komplexek fotofizikai és fotokémiai vizsgálata

Kulcsszavak: vízoldható; lantanoida; porfirin; fotokémia; terbium

A porfirinek a természetben is előforduló makrociklusok, síkalkatú, aromás molekulák, amelyek kiváló fémion-komplexáló tulajdonságokkal és erős fényelnyeléssel rendelkeznek. Amennyiben a koordinálódó fémion mérete megfelelő és képes síknégyzetes orientációra, úgy síkon belüli komplex képződik, ha viszont a fémion a molekula koordinációs üregébe nem fér be, vagy nem képes a megfelelő térszerkezet kialakítására, akkor síkon kívüli komplex áll elő (out-of-plane, OOP; sitting-atop, SAT). A szokatlan szerkezet kialakulásához nagyságrendekkel nagyobb reakciósebességi együtt-hatók tartoznak, mint a síkszerkezetű komplexekéhez. Ezek a komplexek síkon belüli (in-plane; IP) megfelelőikhez képest eltérő fotofizikai, fotokémiai tulajdonságokkal, kisebb termodinamikai stabilitással rendelkeznek, így alkalmazhatóak fényenergia tárolására is ciklikus reakciókban a komplex reverzibilizálható redoxi bomlásán keresztül. A lantanoida fémionok kiváló komplexképző tulajdonságaik miatt oktakoordinációval ún. szendvics-komplexeket képezhetnek a porfirinmolekulákkal, amelyek egyedi elektronikus, illetve sztérikus tulajdonságokkal rendelkeznek (az f-atomorbitálok részvételével akár tizenkettes koordinációs számot is elérhetnek).

A kutatómunkám során meghatároztam a terbium(III)-porfirinek fotokémiai bomlásának kvantumhasznosítási tényezőit, az oldatkomponensek erre gyakorolt hatását, illetve a fotoindukált részfolyamatok hatékonyságát. Ezen kívül vizsgáltam a komplex regenerálásának lehetőségét a fotólízis során különböző alkoholok hozzáadása esetén, melyek oxigénmentes oldatban képesek a hosszúélettartamú porfiringyököt redukálni, miközben az átmenetileg redukálódott fémion a vízből hidrogéngázt fejleszt; ezzel zárva a katalitikus fotoredoxi ciklust.

*Témavezető:
Dr. Valicsek Zsolt
egyetemi docens, PE MK*

