

XXXII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia

Kémiai és Vegyipari Szekció

Kivonatok

KÉMIAI ÉS VEGYIPARI
SZEKCIÓ



• PE MK •

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

2015. április 9-11.

XXXII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia
Kémiai és Vegyipari Szekció
Kivonatok

Szerkesztette:

Dr. Boda Dezső

Dr. Fodor Lajos

Ható Zoltán

Kiadja:

XXXII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia
Kémiai és Vegyipari Szekció
Pannon Egyetem, Mérnöki Kar

A borítót tervezte:

Ható Zoltán

A nyomdai és kötészeti műveleteket
a Stanctech Kft végezte el.
Felelős vezető: Hermann Nikolett.

ISBN 978-963-396-070-7

Tartalomjegyzék

Köszöntő	1
A konferencia Szervező Bizottsága	2
A konferencián résztvevő intézmények listája.....	3

Tagozatok:

Analitikai Kémia	5
Anyagtudomány 1	19
Anyagtudomány 2	35
Biokémia, biotechnológia 1	49
Biokémia, biotechnológia 2	63
Biokémia, biotechnológia 3	77
Bioszervetlen kémia	89
Elméleti kémia	103
Fizikai kémia.....	115
Kémiai technológia 1	129
Kémiai technológia 2	141
Kolloid és makromolekuláris kémia	155
Koordinációs kémia	169
Környezeti kémia	183
Reakciókinetika és katalízis 1	197
Reakciókinetika és katalízis 2	209
Szerves kémia 1	221
Szerves kémia 2	235
Szerves kémia 3	247
Szerves kémia 4	261
Névmutató, résztvevő hallgatók.....	275
Névmutató, témavezetők.....	279

Köszöntő

Veszprémben hagyományosan otthon érzi magát a kémia és vegyipar. Reméljük, a Kémia és Vegyipar is otthon fogja magát érezni 2015 áprilisában.

Az Országos Tudományos Diákköri Tanács döntése értelmében a veszprémi Pannon Egyetem Mérnöki Kara kapta azt a megtisztelő feladatot, hogy megrendezze a XXXII Országos Tudományos Diákköri Konferencia Kémiai és Vegyipari Szekcióját és vendégül lássa a magyar felsőoktatás kémia iránt érdeklődő hallgatóinak javát, témavezetőiket, a zsűrik tagjait, és minden kedves érdeklődőt. A Szervező Bizottság, a Kar és az Egyetem vezetése, a sok-sok segítő hallgató, illetve minden veszprémi egyetemi polgár nevében szeretettel köszöntjük a konferencia résztvevőit.

Sokan, sokszor leírták már: az Országos Tudományos Diákköri Konferenciák rendszere igazi hungarikum. Nincs még egy olyan ország a világon, ahol két évenként ekkora embertömeget mozgatna meg egy ilyen esemény. Ezekben a hetekben az ország számos városában 16 szekcióban mintegy 5600 hallgató ad számot tudásáról szakértő zsűrik előtt. Ezeknek a hallgatóknak a munkáját az ország különböző egyetemein mintegy 6400 témavezető segíti, akik merő lelkesedésből, nem egyszer amúgy is szűkös szabadidejük rovására foglalkoztak a diákokkal. A Kémiai és Vegyipari Szekcióban 226 témavezető által irányított 244 hallgató 238 dolgozatot mutat be 20 tagozatban.

Ismerjük a rendezvénysorozat kettős természetét: egyszerre konferencia, ahol az érdeklődők áttekintést kapnak az ország különböző tudományos műhelyeiben folyó kutatásokról, és verseny is, mert a hallgatók dolgozataikra és előadásaikra pontokat kapnak, és a végén a legjobbak helyezésben részesülnek. Reméljük, hogy Veszprémben kidomborodik a konferencia harmadik arca: lehetőség van arra, hogy a résztvevők az ország egyik legszebb városát megismerjék, kellemes beszélgetések és poharazgatások mellett értékes időt töltsenek el jó és inspiratív társaságban. Az inspiráció nem csak a hallgatók számára fontos; a törvényszerűen máshogy gondolkozó, a tudatra rakódott kötöttségektől mentes fiatal elmékkel való kommunikáció nélkül mi, oktatók még jobban begyöpösödnénk.

Kívánunk a konferencia minden résztvevőjének eredményes munkát, jóízű beszélgetéseket, és kellemes időtöltést Egyetemünkön és városunkban. Reméljük, hogy élményekkel megrakodva térnek haza, és ennek folytán hamarosan újra Veszprémben üdvözölhetjük Önöket.

Veszprém, 2015. március 19.

Skodáné Dr. Földes Rita
ügyvezető elnök

Dr. Boda Dezső
ügyvezető titkár

A konferencia Szervező Bizottsága

Ügyvezető elnök:	Skodáné Dr. Földes Rita, egyetemi tanár, PE, Veszprém
Ügyvezető titkár:	Dr. Boda Dezső, egyetemi tanár, PE, Veszprém
Hallgatói képviselők:	Fertig Dávid, kémia B.Sc., PE, Veszprém Császár Zsófia, kémia B.Sc., PE, Veszprém
Szervező Bizottság tagjai:	Dr. Valiskó Mónika, egyetemi adjunktus, PE, Veszprém Csányi-Tornyos Eszter, ügyvivő szakértő, PE, Veszprém Ható Zoltán, tanszéki mérnök, PE, Veszprém

A szakmai bizottság tagjai:

Elnök: Dr. Murányi Zoltán, főiskolai tanár, EKF, Eger

Intézmények oktatói képviselői:

Dr. Hórvölgyi Zoltán, egyetemi docens, BME, Budapest

Dr. Jakusch Tamás, egyetemi adjunktus, SZTE, Szeged

Dr. Jedlovszky-Hajdú Angéla, tudományos munkatárs, SOTE, Budapest,

Pro Scientia Aranyérmesek Társasága

Dr. Kunsági-Máté Sándor, egyetemi docens, PTE, Pécs

Dr. Lakatos János, egyetemi docens, ME, Miskolc

Dr. Majdik Cornelia, egyetemi docens, BBT, Kolozsvár

Dr. Peles-Lemli Beáta, egyetemi adjunktus, PTE, Pécs

Dr. Ósz Katalin, egyetemi adjunktus, DE, Debrecen

Dr. Sarka Lajos, főiskolai docens, NYF, Nyíregyháza

Dr. Tőrinci Mercédesz, egyetemi adjunktus, BME, Budapest

Dr. Vass Gábor, egyetemi adjunktus, ELTE, Budapest

A konferencián résztvevő intézmények listája

BBTE-KVK	Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia és Vegyészmérnöki Kar
BCE-ÉTK	Budapesti Corvinus Egyetem, Élelmiszertudományi Kar
BME-VBK	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
DE-GYK	Debreceni Egyetem, Gyógyszerésztudományi Kar
DE-TTK	Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar
EKF-TTK	Eszterházy Károly Főiskola, Természettudományi Kar
ELTE-TTK	Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar
PE-MK	Pannon Egyetem, Mérnöki Kar
PTE-TTK	Pécsi Tudományegyetem, Természettudományi Kar
SZTE-TTIK	Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi és Informatikai Kar
UE-TMK	Újvidéki Egyetem, Természettudományi és Matematikai Kar

Analitikai Kémia

ILLÉS EMESE Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Boros Zoltán
tudományos segédmunkatárs, BME VBK
Dr. Poppe László
egyetemi tanár, BME VBK

Affinitás kromatográfiai hordozók fejlesztése fehérjék szelektív elválasztására

Kulcsszavak: szilikagél; lantanidák; enzim; His-Tag; átfolyósos rendszer

TDK munkám során rögzített új fémion tartalmú affiniás kromatográfiai hordozókat (Immobilized metal ion affinity chromatography, IMAC) fejlesztettünk ki, amelyek segítségével lehetséges a rekombinánsan előállított fehérjék tisztítása. Az IMAC technológia azon alapszik, hogy a fehérjét az N- vagy C-terminálisán egy fúziós „címkével” látják el géntechnológiai módszerekkel, aminek segítségével a rekombináns fehérje affinitás kromatográfiával egyszerűen elválasztható. A legjobban elterjedt címke a láncvégekhez kapcsolt oligo-hisztidin (His-Tag), amely reverzibilisen kötődik a hordozón kialakított fémkelátokhoz.

Célunk olyan segédanyagok előállítása volt, amellyel átfolyósos rendszerben megvalósítható a fermentációval előállított fehérjék szeparációja. Hordozóként a kutatócsoport által már széles körben használt, kitűnő mechanikai szilárdsággal, nagy fajlagos felülettel rendelkező és szerteágazóan módosítható szilikagéleket választottuk. A felületmódosításokat több lépésben valósítottuk meg, hogy a hordozóink tulajdonsága az alkalmazási terület kívánalmainak megfeleljen. A fejlesztés során célunk volt az is, hogy könnyen kivitelezhető és robosztus reakciókat építsünk be a technológiai folyamatba, a segédanyagok többször felhasználhatók és regenerálhatók, átfolyósos rendszerben alkalmazható legyenek, illetve kiküszöböljük a jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható IMAC hordozók hátrányait úgy, mint a nehézkes tárolási körülmények, visszaforgathatóság, toxikus fémionok.

Az előállított hordozóink szoba körülmények között stabilan tárolhatók, gyors és hatékony technológiai lépések útján építjük fel őket és általánosan alkalmazhatók His-Tag-el ellátott célfehérjék tisztítására.

UHLÁR ZSÓFIA kémia BSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Schlosser Gitta

tud. mts., MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék, ELTE

Magyar Anna

tud. főmts., MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport, Szerves Kémiai Tanszék, ELTE

Átvihető-e a szerin komplexképző tulajdonsága peptidekre?

Kulcsszavak: elektropray ionizáció; nemkovalens komplexek; peptidszintézis; királis diszkrimináció; tömegspektrometria

Célul tűztem ki szeril-szerin dipeptidek szintézisét és komplexképző sajátságainak felderítését elektropray ionizációs tömegspektrometria alkalmazásával.

A kísérleteim során nagy tisztaságú H-L-Ser-L-Ser-OH és H-L-Ser-D-Ser-OH dipeptidet állítottam elő folyadékfázisú peptidszintézis alkalmazásával. A kipróbált három féle szintézisút (aktívészteres, in situ aktívészteres, valamint vegyesanhidrides) közül a vegyesanhidrides kapcsolási technika szolgáltatta a legjobb minőségű terméket.

Az előállított vegyületek analitikai jellemzésére a vékonyrétegekromatográfiát off-line megoldással elektropray ionizációs tömegspektrometriával kombináltam. Az általam használt kísérleti megoldás gyors és hatékony technikának bizonyult.

Az általam használt tömegspektrométerre optimalizáltam a szerin nemkovalens komplexeinek detektálását. Az L-szerin komplexképzésének tanulmányozásával nyert tapasztalataimat és mérési paramétereket használtam az általam előállított két dipeptid komplexképzésének vizsgálatára.

Munkám során részletesen tanulmányoztam az L-Ser-L-Ser és az L-Ser-D-Ser dipeptidek komplexképzési hajlamát elektropray ionizációs tömegspektrometria alkalmazásával. Az eredményeim azt mutatták, hogy a két dipeptid jellegzetes nemkovalens komplexeket ad a tömegspektrumban. Nem volt azonban megfigyelhető az oktamerhez hasonló mágikus klaszterion. A szerin, valamint a szeril-szerin dipeptidek komplexképzési hajlamát a mágikus szám, valamint átlagos klaszterméret kiszámításával számszerűen jellemeztem.

Az L-Ser-L-Ser dipeptid alkalmazásával helyettesítési próbákat végeztem a szerin oktamer szerkezetű komplexében. Bár számos aminosavra és kismolekulára leírták, hogy helyettesíteni képesek egyes aminosavakat a szerin oktamerben, kísérleteim azt mutatták, hogy a mérési körülmények között nem történik meg az aminosavak dipeptidekre cserélődése.

PÉTER SZANDRA Vegyész MSc, 3. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Kilar Anikó
 tudományos munkatárs, PTE TTK

Endotoxinok tömegspektrometriás meghatározása sejtszuspenziókból

Kulcsszavak: baktériumtenyészet; elemi összetétel; lipopoliszacharid; MALDI-TOF MS; mintaelőkészítés

Az endotoxin a Gram-negatív baktériumok sejtfalában megtalálható, illetve a baktérium elpusztulása után abból felszabaduló lipopoliszacharid (LPS) jellegű komplex vegyület. Szerkezetének és szerkezeti variánsainak tanulmányozása olyan kihívást jelentő terület, amely a bakteriális fertőzés patogenezisével és a halálos kimenetelő szepszis kialakulásával kapcsolatos folyamatok megértéséhez szükséges. Céлом volt a hosszú endotoxin kivonási eljárások helyett olyan új módszerek kidolgozása és optimalizálása tömegspektrometriás analízishez, melyet majd a későbbiekben biológiai vagy akár klinikai minták vizsgálatára is alkalmazni tudnak. Kísérleteimben MALDI-TOF tömegspektrométert alkalmaztam a következő enterobakteriális törzsek R-típusú endotoxinjainak mikroliteres mennyiségű sejtszuspenzióból történő szerkezetvizsgálatára: E. coli D31, Salmonella minnesota R595 és Shigella sonnei 4350, 41, 4303. A sejtszuspenziók előállításakor csupán néhány baktériumtelepből indultam ki, és mindössze hő és vizes kezelést alkalmaztam az endotoxin sejtfalból történő felszabadítására. Az 1 napos mintaelőkészítési eljárással kapott bouillon-sejtszuspenziók esetében az összes endotoxinról teljes értékű tömegspektrumot sikerült felvennem, amik alapján elvégeztem az egyes ioncsúcsokhoz tartozó elemi összetétel meghatározásokat is.

A bakteriális endotoxinok tömegspektrometriás detektálása, majd szerkezetmeghatározása során számos kihívással kell megküzdeni. Egyrészt ezek a molekulák amfifil jellegű lipopoliszacharidok, amelyek aggregálódhatnak. A teljes endotoxinprofil akár olyan széles tömegtartományt is felölelhet, amit tömegspektrometriával nem tudunk detektálni. Ha csak az endotoxinok egyes alkotó elemeit tekintjük – a lipid A régiót, az oligoszacharid magot, és S-típusú endotoxinok esetében az O-specifikus poliszacharid oldalláncot –, mindegyiket különböző mértékű heterogenitás jellemzi. Egy R-LPS minta általában több, különböző aciláltsági és foszforiláltsági fokú, valamint eltérő oligoszacharidokat tartalmazó LPS molekulákból áll.

Pályamunkám során MALDI-TOF tömegspektrometriás vizsgálatokkal meghatároztam az intakt R-LPS-ek valódi mikroheterogenitását közvetlenül sejtszuspenzió mintákból. Az általam kidolgozott módszerek alkalmasak lehetnek nagyszámú baktérium mutánsokból származó sejtszuspenziók, és azok endotoxin tartalmának gyors összehasonlító vizsgálatára.

RENDES KATA Biomérnök BSc, 6. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Balogh György Tibor

laborvezető; c. egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt.

**Ginkgo biloba kivonatok vér-agy gát specifikus permeabilitási profiljának vizsgálata
PAMPA-BBB/LC-MS segítségével**

Kulcsszavak: vér-agy gát; permeabilitás; HPLC-MS; gyógynövény-készítmények; Ginkgo biloba

A Ginkgo biloba (páfrányfenyő) levelének kivonata világszerte az egyik legnagyobb forgalmú, központi idegrendszeri (CNS) kórképekben alkalmazott gyógynövény-készítmény. A kivonat CNS-hatásért felelős komponenseinek azonosítása, hatásmechanizmusuk feltérképezése és vér-agy gáton (blood-brain barrier (BBB)) való átjutásuk igazolása azonban máig nem teljesen megoldott. Ennek elsődleges oka, hogy a G. biloba kivonatok nehezen analizálható, rendkívül komplex anyagkeverékek.

A PAMPA-BBB (Parallel Artificial Membrane Permeability Assay for Blood-Brain Barrier) egy nagy áteresztőképességű, vér-agy gát specifikus effektív permeabilitás mérésére szolgáló in vitro tesztrendszer, amely sokkomponensű minták esetén is megőrzi szelektivitását. Fontos továbbá, hogy a PAMPA szűrés előtti és utáni minták HPLC/QQQ-MS-sel történő elemzése lehetővé teszi a potenciális CNS-hatóanyagok mátrix melletti azonosítását.

Fentiek értelmében célul tűztük ki, hogy PAMPA-BBB/LC-MS kapcsolt technika segítségével jellemezzük és összehasonlítsuk különböző G. biloba kivonatok vér-agy gát specifikus permeabilitási profilját. Több olyan hatóanyagot is sikerült azonosítanunk, amelyek mért permeabilitása jó egyezést mutat a G. biloba farmakokinetikai leírásával. Bizonyítottuk továbbá, hogy a kivonatok glikozilált komponensei nem képesek passzív diffúzióval átjutni a modellmembránon. Ezen felül tesztrendszerünk segítségével sikerült rámutattunk egy ismerten neurotoxikus hatású komponens fokozott agyi felszívódásával összefüggő kockázatra is. Kapott eredményeink hozzájárulhatnak a G. biloba és a kivonatából készített növényi gyógyszerek átfogóbb jellemzéséhez.

PALYA DÓRA Kémia BSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
 Dr. Eke Zsuzsanna
 egyetemi adjunktus, ELTE TTK
 Novák Márton
 PhD hallgató, ELTE TTK

Karbamidok klatrátképzésén alapuló minta-előkészítési módszer fejlesztése gázolajok komponens-specifikus stabil szénizotóp-analízisében

Kulcsszavak: gázkromatográfiával kapcsolt izotóparány-mérő tömegspektrométer; kémiai ujjlenyomat; zárványvegyület; n-alkánok; stabil szénizotóparány

Napjainkban a környezetünkben egyre nagyobb mennyiségben megjelenő szénhidrogén-szennyezések miatt a károkozással kapcsolatos felelősség megállapításához kiemelten fontos olyan összetett analitikai módszerek kidolgozása, amelyek segítségével következtethetünk a szennyező származási helyére. Erre egy hatékony módszer a komponens-specifikus stabil szénizotóp-analízis. A technika lényege, hogy azokat a komponenseket, amelyekben a szén stabil izotópjainak arányát mérik, előzetesen elválasztják, és az egyes komponensekre szelektíven adják meg a $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ arányt. Ez a mérés gázkromatográfhoz (GC) égetőkemencén keresztül kapcsolt izotóparány-mérő tömegspektrométerrel (IRMS) történik. A szennyező komponensek stabil szénizotóp-arányának – mint kémiai ujjlenyomatként – segítségével a kőolajszármazékok megkülönböztethetők. Célom ennek felhasználásával egy olyan módszer kidolgozása volt, amely alkalmas lehet különböző gázolajok eredetvizsgálatára.

Kutatásom során a gázolajokban lévő C_{10} – C_{24} szénatomszámú n-alkánoknak vizsgáltam a $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ arányát. Az izotóparány pontos meghatározásához fontos, hogy a kromatográfiás elválasztás során alapvonalon elváló csúcsokat kapjunk. Azonban a gázolajok összetettsége miatt szükséges az n-alkánok és a zavaró mátrixkomponensek elválasztására szolgáló minta-előkészítési eljárás alkalmazása. A kidolgozott módszer az előzetes szilikagélen végzett frakcionálás után az alifás frakció karbamidos klatrátképzésén alapuló minta-előkészítése. A karbamid ugyanis ún. aktivátor jelenlétében az n-alkánokkal klatrátot képez, de az elágazó láncú szénhidrogénekkal nem. A karbamidos minta-előkészítési módszer esetén a klatrátképzés paramétereinek optimalizálása szükséges, melyet eddig még nem írt le a szakirodalom. Az általam vizsgált paraméterek az aktivátor anyagi minősége, térfogata, az aktiválás, valamint a klatrátképzés ideje és hőmérséklete. A kifejlesztett módszer alkalmazhatóságát vizsgáltam a GC-IRMS méréshez. Továbbá négy különböző eredetű gázolajminta megkülönböztethetőségét vizsgáltam n-alkán-tartalmuk stabil szénizotóp-aránya alapján főkomponens-analízis (PCA) segítségével. Kutatómunkám során kidolgoztam egy olyan minta-előkészítési módszert, amely alkalmas az n-alkánok szelektív elkülönítésére gázolajokból 80-100%-os visszanyeréssel. A minta-előkészítés és a GC-IRMS mérés segítségével különböző földrajzi eredetű gázolajminták az n-alkán-tartalmuk stabil szénizotóp-aránya alapján PCA segítségével megkülönböztethetők.

MÁTÉFFY KORNÉL kémia BSc, 7. félév Újvidéki Egyetem Természettudományi- és Matematikai Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Mészáros Katalin
egyetemi tanár, ÚE*

Maleinsav-anhidriddel oltott kaucsukok vizsgálata termoanalitikai módszerekkel

Kulcsszavak: Termoanalitika, Ojtott polimer, NR, MA, TG/DSC

A természetes kaucsuk (NR) környezetbarát, megújuló nyersanyag. Egyes polimerek kaucsukkal való módosítása e polimerek fizikai-kémiai tulajdonságait kedvezően befolyásolja. A módosítások közül a legjelentősebbek az ojtással végzett reakciók, melyek segítségével különböző, felhasználástól függő funkciós csoportok kapcsolhatók a polimer láncához.

A termoanalitikai módszerek a polimerek vizsgálatának standard eljárásai közé tartoznak. Differenciális pásztázó kalorimetriával (DSC) rendszerint a polimerek üvegesedési átmeneteit vizsgálják. A termogravimetria (TG) és a derivatív termogravimetria (DTG) elsősorban az anyagok termikus stabilitásának megállapítására és a hő hatására lejátszódó folyamatok mechanizmusának meghatározására szolgál.

Mivel az új anyagok tulajdonságai elsősorban az összetételtől függenek, fontos egyszerű de megbízható módszert találni összetételük meghatározására. Az NR és a különböző monomerek reakciója során képződő ojtott kopolimerek összetételének kvantitatív meghatározására alkalmas az ¹H-NMR spektroszkópia. Az eljárás során a mintát deuterizált kloroformban teljesen fel kell oldani. Az összetétel a spektrum megfelelő sávjainak integrálásával számítható ki.

E munka célja különböző mennyiségű maleinsav-anhidriddel (MA) ojtott kaucsukminták (NR-g-MA) termikus tulajdonságainak vizsgálata csatolt TG/DSC mérésekkel, valamint annak megállapítása, hogy a termogravimetria alkalmas lehet-e a keletkezett minták kvantitatív összetételének meghatározására. U.i. a termogravimetriás módszer alkalmazásához minta előkészítésre nincs szükség, így az oldószer-használat is elkerülhető. A mérés viszonylag egyszerű és a többi kvantitatív módszerhez viszonyítva olcsó.

Kulcsszavak: Termoanalitika, Ojtott polimer, NR, MA, TG/DSC

SIMON LÁSZLÓ FERENC Vegyészmérnöki mesterképzési szak MSc, 1. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Gyurcsányi E. Róbert
 egyetemi docens, BME VBK

Mikrocseppentésen alapuló immobilizációs eljárás fejlesztése nagy hibridizációs hatékonyságú peptid-nukleinsav biochipek előállítására

Kulcsszavak: képzőfelületi plazmon-rezonancia; felületi receptor-sűrűség; mikroRNS biomarker; szelektív felismerés; fordított-kinetika

Napjainkban egyre nő az igény a különböző biomarkerek felismerésére alkalmas szelektív receptorok iránt, illetve a meghatározás optimalizálására és a célmolekulák kötődési kinetikájának meghatározására a későbbi bioanalitikai alkalmazásuk érdekében. Ezen a téren csoportunk egy újfajta biomarker-család tagjai, az ún. mikroRNS molekulák szelektív felismerésére alkalmas receptorok és érzékelő fejlesztését tűzte ki célul. A mikroRNS molekulák rendkívül kis koncentrációban kerülnek a keringésbe, ezért meghatározásuk nagy affinitású receptorokat igényel, amely célra a természetes oligonukleotid felismerő szálak nem minden esetben alkalmasak.

Kutatómunkám során ezért szintetikus oligonukleotid analógok, nevezetesen peptid-nukleinsav (PNS) felismerő szálak hibridizációs tulajdonságait vizsgáltam képzőfelületi plazmon-rezonanciás módszerrel (iSPR – imaging Surface Plasmon Resonance) planáris arany felületen. A PNS felismerő szálak esetében a bázisok egy peptid láncon helyezkednek el, amely egyrészt rendkívüli biokémiai stabilitást eredményez, másrészt a foszfát csoportok kiiktatása miatt nem rendelkeznek negatív töltésekkel, amely elektrosztatikus taszítás által a természetes nukleinsav felismerő szálak esetében gyengíti a hibridizált szálak közötti kölcsönhatást. Ugyanakkor a PNS szálak hibridizációs hatékonyságát sok esetben csökkenti, hogy nem specifikusan is erősen adszorbeálódnak arany felületre, ami a felületi sűrűségük és az immobilizálás körülményeinek hosszas optimalizálását igényli. Ennek a problémának a megoldására egy újfajta immobilizációs technikát fejlesztettünk ki, miszerint a PNS szálakat a vele komplementer szekvenciájú DNS szállal előhibridizált formában immobilizáljuk egy tiol-csoporton keresztül az aranyozott planáris SPR-szenzorchip felületére. A módszernek köszönhetően a szelektív felismeréshez legalkalmasabb felületi receptor-sűrűség önszerveződéssel alakul ki, így jelentősen növelhető a felismerő szál hibridizációs hatékonysága, és javítható a mikroRNS-ek kimutatási határa. Meghatározható a felismerő szál felületi receptor-sűrűsége és a hibridizáció során elérhető maximális törésmutató változás (R_{max}) értéke, így az eddigieknél nagyobb pontossággal számíthatóak ki a kinetikát leíró sebességi együtthatók, és a disszociációs egyensúlyi állandó értéke is. Az immobilizációs technika optimalizálását követően megvizsgáltam egy újfajta, ún. fordított-kinetikai módszer alkalmazhatóságát az egyensúlyi paraméterek meghatározására.

DARGÓ GERGŐ vegyéssz mérnöki szak BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Balogh György Tibor

osztályvezető, c. egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt., Szintézistámogató Laboratórium

Molekulabanki DMSO-oldatok kémiai stabilitás-vizsgálata és instabil kemotípusok azonosítása

Kulcsszavak: HTS; vegyülettár; tárolási körülmények; dimetil-szulfoxid; degradáció

A gyógyszeripari cégek kutatásaik során gyakran alkalmazzák a nagy áteresztőképességű szűréseket (HTS- High Throughput Screening) új, biológiailag aktív molekulák azonosítására. Az így vizsgált anyagokat a gyógyszeripari gyakorlatban gyakran DMSO-oldatok formájában tárolják az adott cég molekulabankjában, ahol akár hosszú időn keresztül is állhatnak az oldatok. Az oldatformában való tárolás körülményei döntően befolyásolják az elvégzett HTS sikerességét, valamint a további farmakológiai tesztek eredményeit. A nem kellően tiszta és/vagy instabil minták találatként való azonosítása azonban jelentős kockázatot hordoz és végeredményben lerontja a HTS vizsgálat költséghatékonyságát. A vegyülettárak stabilitás-vizsgálatával előre jelezhetjük azokat a körülményeket, amelyek között az akár több évig tartó oldat-fázisú tárolás a lehető legkisebb bomlást okozza.

Ennek értelmében azt a célt tűztük ki, hogy reprezentatív molekulabanki minták stabilitás-vizsgálatával előrejelezzük az oldat-fázisú tárolás legkritikusabb körülményeit. Ezért 185 db vegyület esetén vizsgáltuk LC-MS technika segítségével az UV ill. a látható fény, a DMSO törzsoldat víztartalmának és a lefagyasztás-felolvasztás ciklusok számának kémiai stabilitásra gyakorolt hatását. Ezen felül arra törekedtünk, hogy a "kémiaileg érdekes" bomlások részletes vizsgálatával rámutassunk átalakulásra érzékeny szerkezeti elemekre (kemotípusokra).

KÁLOMISTA ILDIKÓ Vegyész MSc, 4. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Galbács Gábor
 egyetemi docens, SZTE TTIK

SP-ICP-MS analitikai módszer kidolgozása vas(III)-oxid nanorészecskék vizsgálatára

Kulcsszavak: nanorészecskék, szol, részecskeméret, ICP-MS, spektrális zavaró hatások

A nanotechnológia egyre növekvő népszerűségének köszönhetően rendkívül fontos feladatot jelent a nanorészecskék karakterizálása, amely általában több módszer együttes alkalmazását igényli. Az ún. Single Particle Inductively Coupled Plasma Mass Spectroscopy (SP-ICP-MS) önmagában alkalmas a nanorészecskék méreteloszlásának, koncentrációjának és összetételének meghatározására, az ICP-MS attogram nagyságrendű abszolút kimutatási határait kihasználva. A módszerrel folyadékfázisban diszpergeált részecskék közvetlen, gyors mérésére van lehetőség optimalizált beállítások alkalmazása mellett. Egyes részecskék, mint például a hematit nanorészecskék, esetében számolni kell a poliatomos ionoktól származó spektrális zavaró hatásokkal is. Hematit esetében ezek a zavaró hatások éppen a legnagyobb gyakoriságú és így az SP-ICP-MS mérésre legalkalmasabb ^{56}Fe izotóp mérését nehezítik meg (pl. $^{40}\text{Ar}^{16}\text{O}$, $^{40}\text{Ca}^{16}\text{O}$). Tapasztalataim szerint a keletkező $^{40}\text{Ar}^{16}\text{O}$ mennyisége a várakozással ellentétben jelentős szórást mutat, ezért hatása közvetlenül nehezen vehető korrekcióba. Ütközési cella alkalmazása azonban jelentősen javít a helyzeten. Az ütközési cella hatékonyan, több nagyságrenddel lecsökkenti a vas mérését zavaró többatomos ionok jelét. Igaz ugyan, hogy emiatt a részecskéktől származó jelek is jelentősen lecsökkennek, de a mérés nagyon jó ismételhetősége miatt, a mérés így is sikeresen elvégezhető.

A kalcium jelenléte szintén problémát okozhat a hematit részecskék mérésekor. Ez az effektus azonban az ütközési cella alkalmazása mellett már a mérendő szol meghígításával is jelentősen csökkenthető, hiszen szemben az oldott kalcium tartalomtól származó jellel, a hígítás során a részecskéktől származó jel nagysága nem csökken, csak a detektált események (részecskék) száma válik kisebbé. Ez utóbbi hatás szükség esetén a mérési idő megnyújtásával kompenzálható, így a hisztogramok továbbra is megbízható statisztikai eredményeket szolgáltathatnak. Tapasztalataim szerint még alacsony, $10^4/\text{mL}$ részecske koncentráció mellett is elegendő 100 s mérési idő.

A fentiek figyelembevételével a hematit szolok mérése a módszerrel sikeresen elvégezhető. Méreseim szerint a legkisebb kimutatható részecskeméret ebben az esetben 13 nm. A mérések ismételhetősége nagyon jó, a részecske méret eredmények szórása kisebb, mint 0,3%.

DÖRGŐ GYULA ÁDÁM Vegyésszmérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Dallos András
egyetemi docens, PE MK
Capári Dániel
egyetemi hallgató, PE MK

Szén nanocső tartalmú poli(etilén-tereftalát) polimer kompozitok fázisátalakulásainak vizsgálata differenciális pásztázó kalorimetriával

Kulcsszavak: polimer kompozit, szén nanocső, differenciális pásztázó kalorimetria, kristályosodási kinetika

A poli(etilén-tereftalát) (PET) napjaink egyik legnagyobb ipari jelentőséggel bíró polimerje, köszönhetően a viszonylagosan olcsó gyártási költségeknek, illetve a jó fizikai tulajdonságoknak, mint például hőállóság, ütésálló képesség vagy könnyű formázhatóság. A hőre lágyuló, polikondenzációs eljárással készített műanyag felhasználása szerteágazó, a járműipartól a csomagolóiparig alkalmazzák, de nagy jelentőséggel bír műszalak készítésében, illetve kiváló villamos tulajdonságainak köszönhetően az elektronika területén is. Ezen kedvező tulajdonságainak köszönhetően növekedett meg nagymértékben a PET felhasználása a mindennapi használati tárgyak gyártásában, ami természetesen a PET alapú hulladékok kezelésének és újrahasznosításának problémáját is maga után vonta.

A PET termikus paramétereit (pl. üvegesedési és kristályosodási sajátságok) elsősorban a szilárd rendszer kristályossági foka határozza meg, melyet különböző erősítőanyagokkal, például szén nanocsővekkel (CNT) befolyásolhatunk. Az erősítő anyagok nagymértékben javítják a polimer mechanikai és elektromos tulajdonságait, ami tovább szélesíti felhasználási lehetőségeit. A differenciális pásztázó kalorimetria (DSC) kiválóan alkalmas módszer a polimer kompozitok termikus tulajdonságainak vizsgálatára.

Munkám során újrahasznosított PET bázisú PET-CNT polimer kompozit mintákat vizsgáltam differenciális pásztázó kalorimetriával. Méréseimhez a Magyarországon egyedül a Pannon Egyetem Mérnöki Karán üzemelő NETZSCH STA 409 CD típusú szimultán termoanalitikai berendezést alkalmaztam. Kutatásaim célja annak felderítése volt, hogy miként befolyásolja az eltérő szén nanocső tartalom a PET-CNT kompozitok üvegesedési, hideg kristályosodási, olvadási, valamint olvadékból történő visszakristályosodási hőmérséklet-tartományát, és ezen átalakulásokat kísérő hőeffektusokat. Mivel a PET bázisú termékek felhasználását nagyban a kristályossági fok határozza meg, így részletesen vizsgáltam a hidegkristályosodási és olvadékból történő visszakristályosodási folyamatok kinetikáját is.

A munka a Magyar Állam és az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 projekt keretében.

NAGY BRIGITTA Vegyészmérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK

Többváltozós kalibrációs módszerek vizsgálata mint lehetséges eszköz a Raman-térképezés alkalmazásához kontrollált technológiákban

Kulcsszavak: kemometria; Raman-spektrometria; kémiai térképezés; PAT; polimorfok

Az un. Folyamatfelügyelő és Analizáló Technológia (PAT, Process Analytical Technology) célja, hogy a gyógyszeripari folyamatok pontos nyomon követésével biztosítható legyen a készítmények állandó, megfelelő minősége. Ennek megvalósítása olyan analitikai módszereket igényel, melyek mintaelőkészítés nélküli, roncsolásmentes mérések által alkalmasak valós, vagy közel valós idejű vizsgálatra a hatóanyag előállításától a végső minőségellenőrzésig. A Raman-térképezés ezeknek a kívánalmaknak megfelelő lehetne, azonban az általa szolgáltatott óriási mennyiségű adatból a megfelelő információ kinyerése kihívást jelentő feladat. A mérési módszer alkalmazása PAT körülmények között egyre kifinomultabb többváltozós adatelemzési (kemometriai) módszerek alkalmazását igényli.

A gyógyszeriparban kiemelten fontos a polimorf hatóanyagrendszerek tisztaságának jellemzése. Polimorf szennyezők előfordulhatnak a kristályosítás során vagy akár más, nem kívánatos mellékfolyamat miatt is. A hatóanyagot és egyéb segédanyagokat tartalmazó keverékek pontos kvantitatív meghatározása a készítmények gyártásakor vagy a végtermékek ellenőrzésekor lehet szükséges. E két rendszer pontos mennyiségi elemzésével szabadalmi, technológiai és minőségbiztosítási kérdésekben egyaránt fontos tényezőkre derülhet fény.

Munkám során kétkomponensű polimorf keverékek és három komponensű tartalmazó hatóanyag-segédanyag rendszerek mennyiségi elemzését valósítottam meg. Céлом az volt, hogy a Raman-térképezéssel elérhető meghatározási pontosságot javítsam, valamint tapasztalatokat szerezzek ezen rendszerek és az alkalmazott többváltozós adatelemzési módszerek vizsgálata során fellépő főbb problémákról. Tanulmányoztam a gyógyszeripari gyakorlatban eddig nem, vagy csak ritkán használt lineáris és nemlineáris kalibrációs módszereket és összehasonlítottam olyan széles körben használt módszerekkel, mint például a Lambert-Beer törvény alapján végzett egyváltozós regresszió, vagy főkomponens-analízisen alapuló kiértékelés. Különös figyelmet fordítottam adatelőkészítési módszerek meghatározási pontosságra gyakorolt hatásának vizsgálatára és változókiválasztási módszerek tesztelésére, melyek alkalmazására Raman-térképezésben eddig nem volt példa.

Eredményeim arra engednek következtetni, hogy ezen újszerű adatelemzési módszerek jelentősen pontosabb mennyiségi meghatározást tesznek lehetővé, ezáltal hozzájárulhatnak a Raman-térképezés sikeres integrálásához a „Folyamatfelügyelő Analizáló Technológiába” is.

KECSKEMÉTI ÁDÁM Vegyész MSc, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Gáspár Attila
 egyetemi docens, DE TTK

Tripszin immobilizálása többféle felületen fehérjék gyors emésztéséhez, peptidtérkép vizsgálathoz

Kulcsszavak: tripszin; immobilizálás; mikroreaktor; peptidtérkép;

A peptidtérkép vizsgálat fehérjék összehasonlításra alapuló kvalitatív meghatározását teszi lehetővé. A klasszikus eljárás szerint a fehérjéket először valamilyen kémiai reagenssel vagy enzimmel (pl. tripszinnel) peptid fragmensekre hasítjuk. Az általunk is használt tripszin egy olyan proteolitikus enzim, mely a fehérjéket a bennük található lizin és arginin aminosavaknál specifikusan hasítja. Az ehhez szükséges reakcióidő 16 óra, aminek oka, hogy a tripszint csak alacsony koncentrációban lehet alkalmazni, ugyanis nagyobb koncentrációban számolni kell önmérsztéssel. A keletkező peptidelegyből elkészítjük a peptidtérképet. Erre leggyakrabban tömegspektrometriát (MS) vagy kapilláris elektroforézist (CE) használunk. A peptidtérképek az emésztett fehérjét ujjlenyomatszerűen jellemzik, így összehasonlítás után azonosíthatjuk a mintát. A szükséges reakcióidőt az enzim immobilizálásával csökkenthetjük. Immobilizálás során a tripszint valamilyen szilárd felületen rögzítjük. A felületen megkötött tripszint nagy felületi koncentrációban használhatjuk anélkül, hogy önmérsztés játszódna le. Kutatómunkám célja egy olyan reaktor kifejlesztése volt, amely segítségével a peptidtérkép vizsgálatok emésztését jelentősen gyorsabbá lehet tenni úgy, hogy az eljárás hatékonysága ne csökkenjen. Erre a célra immobilizált enzimreaktort fejlesztettem ki (adszorpció PDMS felületen és kovalens rögzítés NH_2 -borított szilikatölteten).

A reaktorok segítségével gyors fehérje emésztést sikerült elérni (~30 mp reakcióidő), azonban a PDMS-en adszorbeált tripszin hamar (1 nap alatt) elvesztette aktivitását a felületen történő kitekeredés miatt. Emiatt PDMS-en adszorbeált tripszines reaktorban fehérje emésztése csak akkor végezhető, ha közvetlenül a reakció előtt tripszin oldattal regeneráljuk a reaktor felületét (egyszer használatos reaktor).

A kovalensen immobilizált tripszines reaktor előnye, hogy aktivitását 1 hónapig megőrzi megfelelő körülmények között tárolva, ez idő alatt a reaktor többször felhasználható fehérje emésztésre. Az emésztésekből származó peptidtérképek jobb reprodukálhatóságának érdekében benzamidinnel védtem a tripszin aktív centrumát az immobilizálási reakcióban. Az ilyen módon elkészített reaktorok reprodukálható peptidtérképeket szolgáltatnak. A reaktor hatékonyságát mutatja, hogy még a meglehetősen nagyméretű fehérjéket is teljesen megemésztette. Az általam kifejlesztett reaktorban a reakcióidő 30 mp szemben az oldatban emésztésnél szokásos 16 órával.

Anyagtudomány 1

BÁLINT JÚLIA Szerves anyagok kémiája és technológiája, Kőolaj és Szénkémia BSc, 8. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki	
---	--

Témavezetők:

Dr. ing. Barabás Réka
egyetemi adjunktus, BBTE

Dr. Katona Gabriel
egyetemi docens, BBTE

A szén nanocső-hidroxiapatit alapú kompozitok előállítása és jellemzése

Kulcsszavak: Szén nanocső; Hidroxiapatit; Együttlecsapásos módszer; Fajlagos felület; Részecskeméret

A hidroxiapatit (HAp) a csontok fő szervesetlen összetevője, mely gyenge mechanikai tulajdonságokkal rendelkező kalcium-foszfát $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$. Szén nanocső (CNT) adagolásával küszöbölhető ki a HAp ezen hiányossága, mely kitűnő mechanikai tulajdonságokkal rendelkezik.

A kutatás célja a különböző típusú (egy-, két-, több falú, -OH és -COOH csoporttal funkcionizált) CNT-HAp és CNT-HApSi alapú kompozitok előállítása és ezeknek különböző módszerekkel való jellemzése (Lézerdiffrakciós szemcseanalizátor, TEM, SEM, BET, IR, TG).

GUBÓ RICHÁRD Vegyész MSc. MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Berkó András

tudományos tanácsadó, MTA–SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport

Au és TiO₂ ultravékony rétegek kölcsönhatásának pásztázó alagútmikroszkópiai vizsgálata

Kulcsszavak: pásztázó alagútmikroszkópia; ultranagy vákuum; erős fém-hordozó kölcsönhatás; fémgőz leválasztás; vékonyréteg szendvicsszerkezetek

Az oxid–fém határfelületek kulcsfontosságú szerepet töltenek be számos katalitikus, szenzorikai és nanoelektronikai alkalmazások esetében. Jelen munkában egy olyan nanorendszert mutatunk be, ahol TiO₂(110) egykristály felületén hordozott Rh nanorészecskék (111) fedőlapját borító ultravékony TiO₂ oxidréteg (w–TiO–UTO) néhány atomi rétegből álló kétdimenziós (2D) Au nanolapocskákat vesz körül. Bemutatott eredményeink a redukálható oxidokon (TiO₂) kialakított kétfémes (Rh–Au) katalizátorok termikusan indukált folyamataiba nyújtanak atomi léptékű betekintést pásztázó alagútmikroszkópia (STM) segítségével.

A fentiekben leírt anyagi rendszer kialakítása a következő módon történt: (i) fémgőz leválasztással (PVD) kb. 10 monoréteg ródiumot párologtattunk TiO₂(110) hordozóra ~320 K-en; (ii) ezt követően a mintát 10 percig hőkezeltük (1050 K), aminek hatására átlagosan 30x150 nm² területű és 20–25 atomi réteg vastag Rh nanorészecskék jöttek létre, amelyeknek (111) orientációjú fedőlapja w–TiO–UTO enkapszulációs oxidréteggel dekorálódott [1, 2]; (iii) az így kialakított mintára aranyat párologtattunk (500 K), majd vizsgáltuk a lépcsőzetes hőkezelések hatását 1050 K-ig.

Megállapítottuk, hogy 500 K hőmérsékleten háromdimenziós (2–3 monoréteg) 2–3 nm átmérőjű Au nanorészecskék keletkeznek, amelyek az 500–800 K hőmérsékleti tartományban szinterelődnek. Kisenergiájú ionspektroszkópiai (LEIS) mérések szerint az Au jelentős része a Rh(111) lapokhoz kötődik, vagyis a w–TiO–UTO réteg alá diffundál [3]. A kialakult 2D arany nanolapocskák 800–900 K intervallumban két atomi rétegvastagságot, míg 900 K felett egy atomi vastagságot mutatnak. Ebben a hőmérsékleti tartományban a Rh(111) felülethez (1x1), ill. (1x2) elrendeződésben pszeudomorf módon illeszkedő Au nanokrisztallitok fedőlapján már nem található TiO₂ oxidréteg, vagyis az Au leszorítja az enkapszulációs oxidréteget a Rh(111) lapról. 1000 K felett az Au fokozatosan deszorbeálódik és helyét ismét a TiO₂ rendezett réteg tölti fel.

[1] Majzik Z., Balázs N., Berkó A., J. Phys. Chem. C 115, 9535 (2012).

[2] Berkó A., Gubó R., Óvári L., Bugyi L., Szentí I., Kónya Z., Langmuir 29, 15868 (2013).

[3] Óvári L., Berkó A., Gubó R., Rácz Á., Kónya Z., J. Phys. Chem. C 118 (23) 12340 (2014).

HANCSÁKNÉ DUDÁS CSILLA Vegyész MSc, 5. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Pálinkó István
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Ádok Mónika
tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Biomimetikus elektrontranszfer katalizátorok előállítása réteges kettős hidroxidok segítségével

Kulcsszavak: LDH; nikotinamid-adenin-dinukleotid; szintézis; szerkezeti jellemzés

Olyan elektrontranszfer katalizátorokat állítottunk elő, melyekben a katalitikus hatást kifejtő vegyület egy réteges kettős hidroxid rétegei között, illetve a réteges kettős hidroxid lamelláin található meg. A kiválasztott katalizátor a nikotinsavamid-adenin-dinukleotid (a továbbiakban NAD^+) koenzim volt, a hordozó pedig kalcium-alumínium és magnézium-alumínium réteges kettős hidroxid.

Első lépésként előállítottuk a megfelelő réteges kettős hidroxidokat, majd előkísérleteket végeztünk a NAD^+ egyik komponenséhez hasonló vegyületnek, a nikotinsavnak a réteges kettős hidroxid rétegei közé juttatására. Vizsgáltuk különböző módszerekkel, különböző oldószerekben előállított kompozitok szerkezetét, és a legígéretesebbnek bizonyult kísérleti körülményeket reprodukálva állítottuk elő a NAD^+ -t tartalmazó mintákat.

Az elkészített minták szerkezetét és összetételét röntgen diffraktometria, közép IR spektroszkópia, termogravimetria, valamint pásztázó elektronmikroszkópia és energiadisziperzív röntgenmikroanalízis segítségével vizsgáltuk.

MEZŐ EMERENCIA Vegyész MSc, 3. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Peles-Lemli Beáta
egyetemi adjunktus, PTE TTK
Dr. Matisz Gergely
tudományos munkatárs, PTE TTK

Folyadékfázisban rendezett szerkezettel rendelkező imidazolium alapú ionfolyadékok valamint primer alkoholokkal alkotott elegyeinek spektroszkópiai és elméleti kémiai tanulmányozása

Kulcsszavak: domén; ionpár; Raman spektroszkópia; fluoreszcencia spektroszkópia; konformációs izoméria

A környezetbarát anyagokként ismert ionfolyadékok reakcióközegként történő alkalmazása szempontjából legfontosabb annak ismerete, hogy adott hőmérsékleten az ionfolyadékok milyen szerkezettel rendelkeznek. Jelen ismereteink szerint a magas strukturális rendű szerkezet kialakulásáért folyadékfázisban az ionok közötti viszonylag erős ionos továbbá az irányított kölcsönhatások a felelősek. Előbbiekén túl, az ionfolyadékokban eltérő szerkezetű, poláris és apoláris tulajdonságú molekularészeket találunk, melyek további hozzájárulást adnak a kialakuló folyadékszerkezethez. Az ionfolyadékok felhasználása szempontjából egyre nagyobb az igény különböző oldószerekkel, pl. alkoholokkal vagy vízzel alkotott biner elegyeinek gyakorlatilag fontos sajátságainak felderítésére és leírására, mivel ezen folyadékok számos sajátsága, például viszkozitás, polaritás, elektrokémiai és szolvatációs viselkedés megváltozik társoldószer hozzáadásának következtében. A tiszta ionfolyadék szerkezete a kation, az anion és a társoldószer közötti intermolekuláris kölcsönhatások révén tehát módosulni fog.

Korábbi, primer alkoholok biner elegyeire, valamint imidazólium alapú ionfolyadékokra vonatkozó tanulmányaink [1,2] felhasználásával jelen munkánkban célul tűztük ki imidazólium kation alapú ionfolyadékok, valamint primer alkoholokkal alkotott kétkomponensű elegyeinek részletes tanulmányozását. Vizsgálataink a folyadékfázisban létrejövő önszerveződéses spektroszkópiai módszerekkel történő leírása mellett az anion – kation – alkohol molekula kölcsönhatásainak molekuláris szintű tanulmányozására irányulnak.

Eredményeink felvetik annak a lehetőségét, hogy a főként imidazólium kationok asszociátumaiként felfogható domének helyett különböző konformációjú és szerkezetű kation-anion párok lehetnek jelen a folyadékfázisban. Az ellentmondás csak látszólagos, mivel a tapasztalt gerjesztési hullámhossztól függő tulajdonságok mind különböző szerkezetű ionpárok, mind nagyobb, akár több száz ion alkotta összefüggő részekhez rendelhetők, melyek értelmezhetők a kation különböző asszociátumaiként is, ugyanakkor eltérő kation-anion párokként is.

1. S. Kunsági-Máté, B. Lemli, G. Nagy, L. Kollár, J. Phys. Chem. B 108 (2004) 9246.
2. G. Matisz, A.M. Kelterer, W.M.F. Fabian, and S. Kunsági-Máté, J. Phys. Chem. A 115 (2011) 10556.

VARGA TAMÁS Vegyész MSc, 3. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Kónya Zoltán
tanszékegyetemi tanár, SZTE TTIK
Dr. Haspel Henrik
egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK

Grafít-oxid/vanadát nanoszál kompozitok szintézise és jellemzése

Kulcsszavak: nanokompozit; superkapacitás; fajlagos kapacitás; energiasűrűség; töltés-kisülés módszer

A vanádium-oxid alapú, illetve a szén nanoszerkezetekből készített kompozitok vizsgálata, azok ígéretes elektrokémiai tulajdonságai miatt, napjainkban az érdeklődés előtérbe került. A belőlük kialakított kompozitok többek között lítium-ion akkumulátorok vagy szuperkondenzátorok elektródjaként használható fel. A superkapacitások fajlagos kapacitása több ezerszerese is lehet a hagyományos kondenzátorokénak, miközben ezt több száz töltés, illetve kisülés után is képesek minimális csökkenés mellett megőrizni.

Munkám során hidrotermális szintézissel állítottunk elő különböző grafit-oxid tartalmú grafit-oxid/vanadát nanoszál kompozitokat. Megvizsgáltuk, hogy a grafit-oxid hozzáadása hogyan befolyásolja a nanokompozitok elektrokémiai tulajdonságait. Az előállított anyagok morfológiáját, szerkezetét, valamint az egyes alkotók közötti kölcsönhatásokat transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkópia (TEM, SEM), Raman spektroszkópia, röntgendiffraktometria (XRD) és energiadiszperzív röntgenspektrometria (EDS) segítségével jellemeztük. Az elektrokémiai vizsgálatokhoz galvanosztatisztikus töltés-kisülés, ciklikus voltammetriás (CV), valamint elektrokémiai impedanciaspektroszkópiás (EIS) méréseket végeztünk. Meghatároztuk a kompozitokból felépített kondenzátor fajlagos kapacitását, energia- és teljesítménysűrűségét, illetve ezen paraméterek változását a grafit oxid tartalommal.

Megállapítottuk, hogy esetünkben hibrid típusú superkapacitásról beszélhetünk. A ciklikus voltammetriás és a galvanosztatisztikus töltés/kisülési módszerből számolt fajlagos kapacitás értékek jó egyezést mutatnak, és a növekvő grafit-oxid tartalommal monoton nőnek a 210 és 270 F/g közötti tartományban. A kondenzátor energiasűrűsége 19 és 25 Wh/kg között mozog és a grafit-oxid tartalommal szintén nő. A teljesítménysűrűség grafit-oxid tartalomtól függetlenül ~410 W/kg. A kapott értékek jó egyezést mutatnak az irodalmi adatokkal, a fajlagos kapacitás azonban a töltés-kisülés ciklusokkal a vártnál nagyobb mértékben csökken.

GERENCSÉR FRUZZSINA Vegyésszmérnök BSc, 3. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Dallos András
egyetemi docens, PE MK
Dr. Varga Csilla
egyetemi adjunktus, PE MK
Járvás Zsuzsa
tanszéki mérnök, PE MK

Gumiőrlemények, valamint impregnált és hőkezelt szén nanocső minták vizsgálata inverz gázkromatográffal

Kulcsszavak: kompozit, felületi energia, sav-bázis tulajdonságok, reprodukálhatóság

Kompozitokkal az élet számos területén (járműipar, textilipar, sportszerek, stb.) találkozhatunk. A kompozitok sajátosságait az összetétel, a szerkezet és a komponensek tulajdonságai mellett jelentősen befolyásolhatja a mátrix és az erősítő fázis közötti határfelületi kölcsönhatás erőssége, melyre a vizsgált minta felületi energetikai jellemzőiből következtethetünk. Munkám során a kompozitalkotóként is használt szén nanocsövek, illetve gumiőrlemények felületi energetikai jellemzőit vizsgáltam.

Inverz gázkromatográf (IGC) segítségével gyorsan és pontosan meghatározhatók a kompozitalkotók felületi jellemzői. A mérés során a vizsgálandó anyaggal töltjük meg a kolonnát, majd ismert jellemzőkkel rendelkező folyadékok gőzeit (normál alkánok, poláris anyagok) injektáljuk a vívőgáz áramba. A méréseket az SMS (Surface Measurement System) cég által gyártott SEA (Surface Energy Analyzer) típusú, lángionizációs detektorral (FID) ellátott, második generációs inverz gázkromatográffal végeztem.

A kísérletek során többféle kezelésnek alávetett szén nanocső minta felületi jellemzőit határoztam meg két különböző hőmérsékleten (70 °C, 110 °C), valamint két különböző méretű gumiőrlemény minta tulajdonságait vizsgáltam három hőmérsékleten (70 °C, 90 °C, 110 °C). A különböző hőmérsékleteken kapott retenciós adatokat felhasználva kiszámítottam a minták felületi energiájának diszperziós komponens értékeit, az elinjektált poláris anyagok specifikus adszorpciós szabadentalpia-változásait, valamint a Gutmann összefüggés segítségével meghatároztam a szilárd felület Lewis kölcsönhatásokra jellemző sav- és bázisállandóit.

A munkám során végzett kísérletek eredményei felhasználhatók kompozitok tervezésekor, hiszen a minták felületi jellemzőit ismerve következtethetünk a különböző kompozitalkotó szálerősítő és bázisalkotó komponensek összeférhetőségére, valamint arra, hogy mennyire kötődnek egymáshoz a szálerősítő anyagok egy-egy kompozit esetében.

POGONYI ANDREA Vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Hernádi Klára
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Berki Péter
PhD hallgató, SZTE TTIK

Kétkomponensű oxidréteggel bevont többfalú szén nanocső kompozitok előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: többfalú szén nanocső; ón-dioxid; indium-oxid; kompozit

Az Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszéken évek óta foglalkoznak a szén nanocsövek előállításával, vizsgálatával és módosításával. Ezek az anyagok rendkívüli tulajdonságokkal rendelkeznek mechanikai, elektromos- és hővezető képesség szempontjából is, ami számos alkalmazásnak alapja lehet, kompozitjaik pedig további lehetőségeket nyújtanak előnyös tulajdonságaik növelésében. Éppen ezért diákköri munkám fő célja az volt, hogy ón-dioxidból és indium(III)-oxidból, illetve többfalú szén nanocsövekből állítsak elő kompozitokat. Mivel az ón, és az indium is ugyanabban a periódusban helyezkedik el, így számos hasonló tulajdonságuk van, például, hogy mindkét oxid n-típusú félvezető és együttes alkalmazásuk nagyobb aktivitást és stabilitást eredményez, mint külön-külön használva őket.

Kétféle módszerrel készítettem el a kompozitokat: imregnálásos és szolvotermális technikával. Ehhez oldószerként desztillált vizet, etanolt, metanolt, acetont és izopropanolt alkalmaztam, prekursoraim pedig InCl_3 és $\text{SnCl}_2 \times \text{H}_2\text{O}$ voltak. A végtermékben az oxidok aránya 3:2 volt, azaz 60% SnO_2 -ot és 40% In_2O_3 -ot tartalmaztak a mintáim.

A kész kompozitokat 400 és 600°C-on hőkezelttem, majd többféle módszerrel is megvizsgáltam: transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM), pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM), kristályszerkezetüket röntgendiffrakcióval (XRD); továbbá Raman-analízist és energiadiszipperzív röntgenanalízist (EDX) is alkalmaztam.

Eredményeimet tekintve megállapítható, hogy a kompozit előállításának sikeressége nagymértékben függ az oldószertől és a technikától is, melyek közül a szolvotermális eljárás hozott jobb eredményeket, az oldószereket tekintve pedig az alkoholos oldószerek bizonyultak jobbnak. Továbbá a hőmérséklet hatása is jelentősen befolyásolja a minták összetételét és kristályosságának mértékét.

Ezen kompozitok kiválóan működhetnek gáz szenzorként a nagyobb érzékenység és szelektivitás miatt, így a jövőben elképzelhető alkalmazásuk is.

MÉSZÁROS BRIGITTA Vegyésszmérnök MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Dallos András
egyetemi docens, PE MK
Járvás Zsuzsa
tanszéki mérnök, PE MK

Kezeletlen és kationcserével kezelt Na-montmorillonit minták felületi tulajdonságainak meghatározása inverz gázkromatográffal

Kulcsszavak: agyagásvány; felületi energia; Dorris-Gray módszer; adszorpciós entalpiaváltozás; sav-bázis állandók

Az ipar és a tudomány területein széles körben alkalmaznak agyagásványokat, ami főként természetes előfordulásuknak, valamint fizikai és kémiai módosíthatóságuknak köszönhető. Felhasználják őket a gyógyászatban, a kozmetika iparban, szennyezett vizek tisztításánál adszorbensként, katalizátorként és egyre nagyobb szerepet kap nanokompozitokban való alkalmazásuk is. Az egyik gyakran alkalmazott agyagásvány a montmorillonit, melyet napjainkban nagy érdeklődéssel vizsgálnak, hiszen nagy hatékonysággal képesek megkötni a szennyezett vízből mind a szerves anyagokat, mind pedig a fémionokat. Mindemellett fizikai és kémiai módosíthatóságuk révén igényeinknek megfelelően javíthatjuk felületi jellemzőiket, ezzel növelve hatékonyságukat.

Munkám célja, hogy kezeletlen és kezelt montmorillonit minták felületi energetikai tulajdonságait határozzam meg. A felületi energiák fontos szerepet kapnak az anyag felhasználása során: meghatározzák a létrejövő felületi kölcsönhatásokat katalizátorok és adszorbensek esetén is, befolyásolják mind az agglomerációs jelenségeket, mind pedig a nedvesedési tulajdonságokat is.

Az általam vizsgált montmorillonit agyagásvány mintákat ioncserével kezelték. Az agyagásvány felületi energetikai tulajdonságai miatt a különböző anyagok nem egyformán adszorbeálódnak rajta. A montmorillonit minták felületi jellemzését egy dinamikusan fejlődő módszer, az inverz gázkromatográfia segítségével végeztem. A mérések során nyert retenciós adatokból többféle (Dorris-Gray, Schultz) módszer alkalmazásával számolható a felületi energia diszperziós komponense. Mindemellett meghatározhatóak az adszorpciós szabadentalpia poláris komponensei, valamint a Gutmann összefüggés segítségével a felület Lewis kölcsönhatásokra jellemző sav- és bázisállandói.

A mérések során a minták felületi energetikai tulajdonságait lángionizációs detektorral felszerelt, második generációs inverz gázkromatográf segítségével vizsgáltam. A hőmérséklet függvényében meghatároztam a vizsgált agyagásvány minták felületi energetikai tulajdonságait kis tesztanyag-koncentrációk esetén. Meghatároztam a minták felületi energiájának diszperziós komponensét, az adszorpciós szabadentalpia-változás és entalpia-változás specifikus komponensét, és a minta-felület sav-bázis állandóit. A különböző előkezelésen átesett minták esetén kapott felületi energetikai analízis eredményeket összevetve következtettem a kezelés során elért változásokra, melyek hatással vannak az anyag felületi tulajdonságaira.

GÖNCZI BARBARA Vegyészmérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Csiszár Emilia
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Renner Károly
tudományos munkatárs, BME VBK

Len szakítószilárdságának jellemzése akusztikus emissziós vizsgálattal

Kulcsszavak: kompozit, bioelőkészítés, kikészítés

A len anyagtudományi szempontból kompozitnak tekinthető, ahol a főként cellulózból álló elemi szálakat pektin ragasztja rostokká. A len textilkémiai folyamatai közül az előkészítés a kísérőanyagok megfelelő mértékű eltávolításával hidrofíl szálfelület létrehozását, a műgyantás kikészítés pedig a gyűrődésfeloldó képesség javítását célozza. A bioelőkészítés során a pektináz enzim megbontja a pektin réteget a rostkötegek felületén és ezáltal javul a kelme nedvesíthetősége [1]. A pektin túlzott mértékű, a rostköteg belsejéből történő eltávolítása viszont a szakítószilárdság romlásával járhat. Műgyantás kikészítéskor amino-aldehid gyantákkal savas közegben a cellulóz egységek között keresztkötéseket hozunk létre. A kelme gyűrődésfeloldó képessége jelentősen javul, de nagymértékű szilárdságcsökkenés is bekövetkezik a cellulóz savas hidrolízise és a keresztkötések révén kialakuló merevebb szerkezet következtében [2].

Az elmúlt időszakban különböző próbatestek (pl. szálerősítésű kompozitok) szakítási vizsgálata során bebizonyosodott, hogy a szakítóerő mérése során keletkező hangeffektusok alkalmasak a vizsgált mintadarab degradációjának sokkal részletesebb jellemzésre. A kibocsátott hang – vagy más néven akusztikus emisszió – lehetőséget nyújt a vizsgált anyagok szerkezeti tulajdonságainak jellemzésére [3]. Textil alapanyagok vizsgálatához ezt a módszert eddig csak néhány esetben használták.

Tudományos diákköri munkámban lenszövetek pektináz enzim bioelőkészítését és műgyantás végkikészítését vizsgáltam, és a szilárdsági jellemzők valamint a hangeffektus alapján a szakadás során lejátszódó folyamatok meghatározására tettem kísérletet. Az akusztikus emisszióval kombinált szakítóvizsgálatokkal célom volt az alkalmazott kezelések hatására a szálszerkezetben lejátszódó változások részletesebb megismerése. Az eredmények azt bizonyítják, hogy a szövetek szakítószilárdságának a mérésével meghatározható szövetjellemzők jelentősen bővíthetők a degradáció során keletkező hangeffektusok detektálásával.

[1] Lewin, M., Pearce, E. M.: Handbook of Fiber Chemistry, Second Ed., Marcel Dekker Inc. (1998)

[2] Kim, E., Csiszár, E.: Chemical Finishing of Linen and Ramie Fabrics, Journal of Natural Fibres, 2(3), 35-48 (2005)

[3] Dányádi L, Renner K, Móczó J, Pukánszky B.: Wood flour filled polypropylene composites: interfacial adhesion and micromechanical deformations, Polymer Eng. Sci., 47(8), 1246-1255 (2007)

KECSENOVITY EGON Vegyész MSc, 2. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Hernádi Klára
egyetemi tanár, SZTE TTIK

Milliméter magas szén nanocső erdők előállítása és vizsgálata PLD-vel készült katalizátor rétegeken

Kulcsszavak: szén nanocső erdő; katalitikus szintézis; lézeres deponálás; kontrollálhatóság;

Az elmúlt két évtizedben fontos eredmények születtek a szén nanocső kutatások területén, mivel mechanikai és elektromos tulajdonságaik páratlanok, és ebből kifolyólag felhasználásuk is igen széleskörű lehet. A szén nanocsővek legelterjedtebb előállítási módszere a szénhidrogének gőzfázisú katalitikus bontása (CCVD – catalytic chemical vapor deposition). Az eljárás során használt katalizátor tulajdonságait megfelelően megválasztva elérhető az, hogy a szintetizált szén nanocsővek függőlegesen irányítottak legyenek, így további lehetőségeket nyitva a felhasználásuk területén.

TDK munkám során impulzus üzemű lézeres vékonyréteg építéssel (PLD – pulsed laser deposition) létrehozott katalizátor rétegekre választottam le függőlegesen irányított szén nanocsőveket CCVD szintézissel. A fő célom, hogy vizsgáljam a katalizátor rétegek és a szén nanocső szintézis paramétereinek hatását a szén nanocsővek méreteloszlására (hossz, átmérő, valamint egyenesség).

A TDK dolgozat részletesen áttekinti a szükséges háttérismereteket, a használt eljárásokat, azok előnyeit és hátrányait, valamint bemutatja az optimalizálás menetét és eredményét, továbbá két saját fejlesztésű eszközt, amellyel a munkám során jelentkező problémákat sikeresen megoldottam.

A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy mind a rétegépítés, mind a CCVD szintézis jelentős mértékben befolyásolja a végtermék minőségét. A PLD módszer kiváló eszköz arra, hogy tetszőlegesen változtassuk a katalizátor réteg szerkezetét, ennek köszönhetően pedig a szintetizált szén nanocső erdő paraméterei is jól kontrollálhatók. Ez lehetővé teszi az ilyen szén nanocső struktúrák alaposabb megismerését és tulajdonságainak közvetlen változtatását.

BUCHHOLCZ BALÁZS Vagyész MSc, 3. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Kónya Zoltán

tanszékvezető egyetemi tanár, SZTE TTIK

Dr. Haspel Henrik

egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK

Nitrogénnel adalékolt TiO₂ nanorészecskék alacsony hőmérsékletű előállítása titanát nanocsövekből

Kulcsszavak: hőkezelés; stabilitás; fázisátalakulás; nanoszerkezetek; fázisdiagram

Az elmúlt két évtizedben a nanocsövek váltak a gyorsan fejlődő új kutatási terület, a nanotechnológia, szimbólumává. Trititanát szerkezetű nanocsöveket (Na_xH_{2-x}Ti₃O₇) először Kasuga és munkatársai állítottak elő. Nagy fajlagos felületű TiO₂-ot szerettek volna előállítani, így javítva annak fotokatalitikus tulajdonságait. Az általuk alkalmazott alkáli lúgos kezelés hatására azonban morfológiai változást tapasztaltak, és ~8 nm átmérőjű, ~100 nm hosszúságú csőszerű képződmények jelentek meg a mintában. Napjainkban számos felhasználási lehetőségük ismert: nagy fajlagos felületű mezopórusos katalizátor-hordozók, adszorbensek, ioncserélők, alkalmazzák lítium-ionos akkumulátorok fejlesztéséhez, az orvosbiológiában, valamint ígéretes fotokatalizátorok.

Munkánk során hidrotermális eljárással titanát nanocsöveket állítottunk elő, amelyeket protonálás után nitrogénnel adalékoltunk. Nitrogénforrásként karbamid hőbontásával fejlesztett ammóniagázt használtunk, ami a későbbiekben az eddig ismert gázfázisú eljárások olcsó és alacsony hőmérsékletű alternatíváját jelentheti. Az adalékolás idejének változtatásával előállított mintasorozat egyes tagjait különböző hőmérsékleteken kalcináltuk, és az anyag morfológiájában, valamint fázisában bekövetkező változásokat tanulmányoztuk. Vizsgálatainkhoz transzmissziós és pásztázó elektronmikroszkópiát (TEM, SEM), energiadisperzív röntgenspektrometriát (EDS), valamint röntgen-, és határolt területű elektrondiffrakciós (XRD, SAED) méréseket alkalmaztunk.

A nitrogéntartalom növekedésével, illetve a kalcinálás hőmérsékletének emelkedésével a titanát nanocsövek méret-, és alakbeli változást szenvedtek, továbbá fázisösszetételük is módosult. A nanocsövek az alkalmazott hőkezelés hatására fokozatosan előbb anatáz, majd rutil fázisú TiO₂-dá alakultak át. Ezzel párhuzamosan a kezdeti csöves morfológia felbomlott: az alacsonyabb hőmérsékletekre jellemző rúdszerű formából szabályos alakú, nitrogénnel adalékolt nanorészecskék alakultak ki.[1]

[1] Buchholcz, B.; Haspel, H.; Kukovecz, Á.; Kónya, Z. Low-temperature conversion of titanate nanotubes into nitrogen-doped TiO₂ nanoparticles. CrystEngComm 2014, 16 (32), 7486-7492.

MIKULA GERGŐ JÁNOS Vegyésmérnök BSc, 6. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Szilágyi Imre Miklós
tudományos munkatárs, BME VBK

Baji Zsófia
tudományos segédmunkatárs, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont
Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet (MTA TTK MFA)

Nukleáció atomi rétegleválasztás során módosított szilícium felületeken

Kulcsszavak: nukleáció; vékonyréteg; ultravékony

A vékonyréteg-leválasztási technikák egyik legígéretesebb képviselője az atomi rétegleválasztás (ALD). Egy ALD-ciklus során a gázfázisú prekursorok felváltva, pulzusszerűen jutnak be a reaktorba. Az első megkötődik a szubsztrát felületén, majd egy öblítési lépés során a felesleg távozik. A második prekursor is megkötődik, és reagál az elsővel. A módszer segítségével a filmvastagságot a ciklusok számának növelésével lehet szabályozni.

Munkám fő kérdése az ALD-vel növesztett új szilárd fázis nukleációja, ami különösen nagy jelentőséggel bír az ultravékony rétegek esetében. A felületi kémiai reakció miatt a nukleációs helyeket elsősorban a funkciós csoportok jelentik, így a célunk a felület módosítása volt. A fő modellvegyületünk a cink-oxid, melynek vékonyrétegei átlátszóak, félvezető filmek, melyek alkalmasak napelemek elektródájának, de más elektrotechnikai alkalmazás is ismert.

A ZnO leválasztását szilícium egykristály felszínén végeztem el dietil-cink és víz prekursorok segítségével. A megfelelőnek bizonyult módszereket teszteltem Al_2O_3 és TiO_2 rétegek esetén is. A szilíciumot több kezelési módszernek is alávettem: plazmamarással két különböző teljesítményű készüléken és két anyagi minőségű plazmával is kísérleteztem, valamint az ún. piranha-oldatot is kipróbáltam. Valamennyi mintát vízbe helyeztem, hogy elősegítsük azok hidroxilációját. A felületek hidrofilitását peremszög mérésével vizsgáltam. A szubsztrátokra ALD-reaktorban választottam le a fém-oxidot 5, illetve 10 ciklussal. A kész mintákat atomerő mikroszkóppal vizsgáltam. Azokon a mintákon, melyekre ZnO-ot választottam le, hidrotermális úton cink-oxid nanorudakat alakítottam ki, melyek kizárólag a ZnO szemcséken/filmen nőnek. Ezek mennyisége pásztázó elektronmikroszkóppal jól vizsgálható, és indirekt módon mutatják a ZnO szigetek sűrűségét.

Vizsgálatainkból az állapítható meg, hogy a kiválasztott felületkezelési eljárások közül a nagyobb teljesítményű plazmás, illetve a piranha-oldatos kezelés növelte a cink-oxid nukleációs készségét a szilícium felületen és hasonló tendencia figyelhető meg más fém-oxidok esetén is. Ezt a vizsgálatok és a módosított szubsztrát hidrofilitása is igazolta. A hidrotermális leválasztás utáni vizsgálat bizonyította, hogy piranha-oldattal kezelt szubsztráton a plazmával kezeltekhez képest is több cink-oxid sziget jött létre. Vizsgáltam még az első ciklus hosszának hatását a növekedésre, ami a módosított minták esetén is a szakirodalomban leírtaknak megfelelő.

MÉSZÁROS REBEKA ILDIKÓ Vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Ádok Mónika
tudományos munkatárs, SZTE TTIK
Dr. Sipos Pál
egyetemi docens, SZTE TTIK

Réz-tartalmú réteges kettős hidroxid előállítása, szerkezetvizsgálata és egy alkalmazási lehetőségének bemutatása

Kulcsszavak: réteges kettős hidroxid; CuFe-LDH; szintézis optimalás; katalízis; klikk-reakció

A réteges kettős hidroxidok (layered double hydroxides, LDH) egy az utóbbi években igen gyakran szintetizált és tanulmányozott anyagcsaládok egyike. Az irányukba mutatott nagy érdeklődést szerkezetük érdekessége, a sokoldalú jellemzőhetőség, a sokféle szintézismódszer, az interkalációs tulajdonságaik, valamint a széles tartományban változtatható rétegtávolság magyarázza. A rétegeket két- és három vegyértékű ionok hidroxidjai alkotják, melyek pozitív töltéstöbbletet hoznak létre. A kétértékű ionok általában Mg(II), illetve Ca(II), de én a kísérleteim során Cu(II)-iont kíséreltem meg felhasználni. A háromértékű ionok általában Al(III) vagy Fe(III). A pozitív töltéseket kompenzálni kell, erre a rétegek közötti térben lévő anionok képesek. A rétegek között ezeken kívül víz is található.

A réteges kettős hidroxidokat széles körben alkalmazzák a szennyvíztisztításban, a gyógyszeriparban, illetve katalizátorként. Munkám során egy CuFe-LDH-t készítettem el, melyre irodalmi példát a kísérletek kezdetén nem találtunk (CuAl-, CuCr-, illetve vegyes típusú CuMgFe-LDH-k előfordultak már, de CuFe-LDH-ra nem volt még példa), ezért is tartottuk fontosnak, hogy foglalkozzunk a témával, hiszen a réz mint szerkezetalkotó ion széleskörűen alkalmazható lehet például katalitikus reakciókban. Az LDH előállítása nem volt lehetséges egyszerű együttes lecsapással, rázómalommal vagy ultrahang segítségével. Nejati és munkatársai [1] viszont találtak egy megfelelő szintézis módszert, melynek fontos összetevője a propanol és az etilén-glikol. Az elkészített réteges kettős hidroxidot megvizsgáltam röntgen diffraktometriával, infravörös spektroszkópiával, pásztázó elektronmikroszkóppal és energiadisperzív spektrométerrel. Ezek a vizsgálatok kimutatták, hogy vannak különbségek az eddig megismert réteges kettős hidroxidokhoz képest (például nem szabályos kristályszerkezet, inkább amorf jelleg), ennek ellenére a termék alkalmazható egy 1,3 dipoláris cikloaddíció, közkedvelt nevén „klikk-reakció” katalizátoraként.

[1] Nejati, K., Davary, S., Saati, M., Applied Surface Science 280, 67–73 (2013)

KOVÁCS TEODÓRA Vegyésszmérnök MSc, 2. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Szilágyi Imre Miklós
tudományos munkatárs, BME VBK

Dr. Lukács István
tudományos munkatárs, MTA TTK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet

Vas-volframát (FeWO_4) nanolemezek előállítása hidrotermális eljárással

Kulcsszavak: nanoszerkezet; fotokatalízis; hidrotermális; FeWO_4 ; WO_3

A volfrám-oxidokat és fém-volframátokat elterjedten alkalmazzák katalizátorként, fotokatalizátorként, gázszenzorként, elektrokróm és fotolumineszcens eszközökben. Közülük kutatómunkám középpontjában a hexagonális (h-) WO_3 , köbös (c-) WO_3 és a vas-volframát (FeWO_4) állt. Közös bennük, hogy gyakran alkalmazott előállítási módszerük a hidrotermális szintézis, mely nátrium-volframátból (Na_2WO_4) és sósavból (HCl) indul ki. A reakció végeredményét befolyásolják a felhasznált prekursorok, segédanyagok és hőmérséklet (jellemzően 180-200 °C). A szakirodalom szerint a h- WO_3 előállításához Na_2SO_4 vagy $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ szükséges segédanyagként, c- WO_3 -hoz FeSO_4 , FeWO_4 -hez pedig $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ vagy FeCl_3 .

Kutatómunkám célja annak vizsgálata volt, hogy miképpen befolyásolja a termékösszetételt a szulfát segédanyagban a kation minősége (Na^+ , NH_4^+ , Fe^{2+} , Fe^{3+}). A reakciótermékek kristályszerkezetét röntgen-pordiffrakcióval (XRD), morfológiáját pásztázó és transzmissziós elektronmikroszkópiával (SEM-EDX, TEM), az optikai tulajdonságaikat UV/VIS spektroszkópiával vizsgáltam. Végül pedig a termékek fotokatalitikus aktivitását mértem.

Minden reakciót 180 és 200 °C-on is elvégeztem. Először segédanyagként Na_2SO_4 -ot alkalmaztam és a termék h- WO_3 lett nanorudas formában. Majd FeSO_4 -ot használtam adalékként, azonban itt termék a korábbiakkal ellentétben nem c- WO_3 lett, hanem FeWO_4 , amit egyben elsőként sikerült nanolemezes formában előállítani. Ezt követően Fe^{2+} , Fe^{3+} és NH_4^+ tartalmú segédanyagok hatását tanulmányoztam. Mohr-só $[(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$ és ammónium-vastimsó $[(\text{NH}_4)\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]$ alkalmazásakor a termék egy keverék lett, melyben megjelent a h- WO_3 , és egyéb, Fe-ionokat tartalmazó vegyületek (pl. $\text{Na}_{0,24}(\text{H}_3\text{O})_{0,76}\text{Fe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$, $\text{Fe}_2(\text{WO}_4)_3$, FeCl_3 használatával a termék $\text{Fe}_2(\text{WO}_4)_3$ lett.

Összefoglalva, a korábbiakkal ellentétben kizárólag FeSO_4 adalékanyag használata mellett kaptunk Fe(II)WO_4 -et. Minden más esetben vagy tiszta h- WO_3 keletkezett, vagy $\text{Fe(III)}_2(\text{WO}_4)_3$, vagy pedig különböző fázisok keveréke. Kutatómunkám eredményeként elsőként sikerült az FeWO_4 -et nanolemezek formájában előállítani, melyek vastagsága 20-30 nm, hosszúsága és szélessége 0,5-10 μm . Mind a h- WO_3 nanorudak, mind az FeWO_4 nanolemezek fotokatalitikusan aktívak voltak.

BÚS CSABA kémia BSc BSc, 6. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Pálinkó István

egyetemi docens, SZTE TTIK

Szabados Márton

PhD hallgató, SZTE TTIK

ZnAl réteges kettős hidroxidok szintézise szonokémiai és mechanokémiai módszerek kombinálásával

Kulcsszavak: ZnAl-LDH; szerves nanokompozit; XRD, SEM–EDX

Az utóbbi években jelentősen megnőtt az érdeklődés a réteges kettős hidroxidok (angol nevük: layered double hydroxides, rövidítve LDH-k) iránt. A réteges kettős hidroxidok az ionos réteges szilárd anyagok fontos csoportját alkotják. Ezeket a vegyületeket egy két- és egy háromértékű fémion alkotja, melyekhez hidroxidionok koordinálódnak oktaéderesen. A rétegek pozitív töltését anionok kompenzálják. Nemcsak a kutatásban fontosak, gyakorlati felhasználásuk is széleskörű (ioncsere eljárásokban, katalizátorként, szelektív adszorbensként, polimer adalékanyagként, stb.). Munkám során ultrahang és őrlés segítségével, szonokémiával kombinált mechanokémiai módszerrel, ZnAl-LDH-k szintézisét hajtottam végre, valamint a cisztin anionját is sikeresen interkaláltam a réteges kettős hidroxidba. Az ultrahang folyadék közegen áthaladva kavitációs buborékokat hoz létre, melyek keletkezése és összeomlása okozza a kívánt hatásokat. A szintézisek során különböző paramétereket változtattunk az optimális körülmények beállításához (előőrlés ideje, a hozzáadott lúgoldat koncentrációja, ultrahangos kezelés ideje és hőmérséklete), majd az optimális paraméterekkel szintetizáltam a szerves-szervetlen kompozitot. Az előőrlést rázómalommal végeztem, ennek célja a kiindulási anyagok homogén eloszlása, és mechanokémiai aktiválása volt. Röntgendiffraktometriával (XRD), infravörös spektroszkópiával, valamint pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM), energia-diszperzív röntgenanalizátorral (EDX), és termogravimetriás mérésekkel (TG) jellemeztük a kapott anyagokat. XRD mérésekkel követtük nyomon az optimalizálási kísérletek eredményeit, a keletkező LDH-ra jellemző reflexiók vizsgálatával. Az interkalálási reakciók esetén az XRD mérések rétegtávolság-növekedést mutattak, ez a sikeres beépítését tényét igazolja. Az IR vizsgálatok az LDH-kra jellemző spektrumokat adták, valamint az cisztin anionjának jelenlétét is a módosított LDH-k esetén. TG mérések szintén az LDH-kra jellemző tömegvesztéseket mutatták, valamint a SEM–EDX mérések is megerősítették az LDH-ák keletkezését.

Anyagtudomány 2

SÁRI GRÉTA Vegyészmérnöki szak BSc, 6. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Szilágyi András Ferenc
egyetemi docens, BME VBK

Alakmemória poli(N-izopropil-akrilamid) hidrogélekben

Kulcsszavak: intelligens; polimer gél; nanokompozit; oldószer-érzékenység; alakváltozás

Az alakemlékező anyagok, köztük az alakmemóriás polimerek és polimer gélek, olyan rendszerek, melyek valamilyen specifikus környezeti hatásra (pl. hő, fény, elektromos tér) képesek irányítottan változtatni az alakjukat. Az alakemlékező polimerek az eredeti, permanens alakjukból egy új, átmeneti alakba deformálhatók és ez az alak rögzíthető. Az átmeneti alak egészen addig megmarad, míg az anyagot a fent említett környezeti hatás nem éri, mely kiváltja a permanens alak visszaalakulását.

A munkám során két különböző agyagásvánnyal (Laponite XLG és XLS) térhálósított poli(N izopropil-akrilamid) [PNIPAAm] alapú nanokompozit hidrogélekkel foglalkoztam. A PNIPAAm egy alsó kritikus oldhatósági hőmérséklettel [LCST] rendelkező hőmérsékletérzékeny polimer, azaz a belőle készített hidrogélek fizikai tulajdonságai (pl. duzzadásfok) az LCST környezetében (~ 34 °C) ugrásszerű változáson mennek keresztül. A duzzadásfok megváltozása nem csak a hőmérséklet, hanem a duzzasztószer összetételének változtatására is bekövetkezik. A PNIPAAm Laponite rendszerekben kialakuló fizikai térháló és a fent említett hőmérséklet- és oldószer érzékenység következtében ezek a gélek alakmemóriás viselkedést mutatnak.

Kutatómunkám célja a PNIPAAm Laponite hidrogélek oldószer indukált alakemlékező tulajdonságainak vizsgálata volt. Hajlítós deformációt alkalmazva az elhajlás szögével jellemeztem a rögzített alakot és a szögváltozás segítségével nyomon követtem a permanens alak visszaalakulását. Az alakmemória kialakulásáért felelős kölcsönhatások jellegére a gélek különböző oldószerekben történő duzzasztásával igyekeztem fényt deríteni. Fourier transzformációs infravörös spektroszkópiával [FTIR] és röntgendiffrakciós méréssel [XRD] vizsgáltam a gél szerkezetét.

MOLNÁR TÍMEA Vegyésszmérnök MSc MSc, 1. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Varga Csilla
egyetemi adjunktus, PE MK

Alapanyag tisztítás hatása szén nanocsövet tartalmazó PET kompozitok tulajdonságaira

Kulcsszavak: kapcsoló ágens, húzószilárdság, hulladék palack ,újrahasznosítás, extruder

A dolgozatomban a hulladék poli(etilén-tereftalát) (PET) palack mechanikai újrahasznosításáról szólok, mert a műanyag hulladékok újrahasznosítása döntő fontosságú napjainkban. A PET alapanyag mosásának hatását vizsgáltam a szén nanocsővel (CNT) erősített másodlagos nyersanyagot tartalmazó kompozitok tulajdonságaira. Az első lépésben a mosás során alkalmazható előnyös vegyületeket és azok koncentrációját határoztam meg. A megfelelő mosási módszer kiválasztása után az extrudált PET szálak tulajdonságait vizsgáltam, a szén nanocsövek hatását és kapcsoló ágensek hatását vizsgáltam a kompozitok mechanikai és reológiai tulajdonságaira.

Az alapanyag mosás a műanyag hulladékot nem befolyásolta a húzószilárdságot tiszta szén nanocsöveket tartalmazó minták esetén, de a kapcsoló adalék a kompozitok mechanikai tulajdonságait jelentősen változtatta. Magasabb kapcsoló ágens koncentráció alkalmazásakor (20 m/m%), például a húzószilárdság több mint 60%-kal javult, míg modulusz legalább 20%-kal nőtt.

HURSÁN DOROTTYA Vegyész MSc, 3. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Visy Csaba
professor emeritus, SZTE TTIK
Dr. Janáky Csaba
egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK

CO₂ fotoelektrokémiai átalakítása tüzelőanyagokká N-tartalmú vezető polimer elektródokon

Kulcsszavak: CO₂ redukció; fotoelektrokémia; vezető polimer; CO₂ adszorpció; tüzelőanyagok

Napjainkban a fokozódó energia- és környezetvédelmi problémák megoldása érdekében egyre nagyobb figyelem irányul a légköri CO₂ mennyiségének csökkentésére. A számos módszer közül kiemelkedő jelentőségük van azoknak, melyek a CO₂-ot közvetlenül tüzelőanyagokká (pl. metanol) alakítják. A CO₂-redukciós folyamatok jelentős energiaigénye miatt előtérbe kerülnek a napenergiát használó eljárások, különös tekintettel a környezeti hőmérsékleten és légköri nyomáson működő fotoelektrokémiai módszerekre.

Munkám során négy elektromosan vezető polimer-alapú fotokatód (polipirrol, poli-(3,4-etiléndioxitiofén), polianilin, poli(N-metilanilin)) CO₂ redukcióban mutatott fotoelektrokatalitikus aktivitását vizsgáltuk. Az elektrokémiai úton előállított polimer rétegek katalitikus viselkedését fotoelektrokémiai módszerekkel tanulmányoztuk. A N₂ és CO₂ atmoszférában felvett fotovoltammogramok összehasonlító elemzése alapján megállapítottuk, hogy a polianilin jelentős fotoelektrokatalitikus aktivitással rendelkezik a folyamatban, míg a másik három polimer fotoelektrokatalitikus hatást vizsgálati körülményeink között nem mutat. A polianilin esetén a redukciós termékek detektálását GC-MS technikával végeztük hosszú idejű fotoelektrolízist követően, melynek során alkoholok valamint aceton jelenlétét sikerült kimutatni.

Szakirodalmi adatok szerint a N-tartalmú polimerek jelenleg a CO₂ legjobb szilárd fázisú adszorbensei között vannak, a szubsztrát molekula adszorpciója az elektród felületén pedig elősegíti a többelektronos redukciót. Ezeket a tényeket figyelembe véve, a vezető polimereken végrehajtott fotoelektrokémiai CO₂ redukció mechanizmusának és feltételeinek felderítése érdekében CO₂ adszorpciós méréseket végeztünk kvarckristály mikromérleg segítségével mind a négy vizsgált polimer esetén. Ezek a vizsgálatok a polianilin és a polipirrol lényegesen nagyobb adszorpciós kapacitását mutatták a másik két polimerhez képest. A polianilin és a poli(N-metilanilin) vékonyrétegek esetén CO₂ adszorpciós infravörös spektroszkópiás vizsgálatokat is végeztünk, mellyel információkat szereztünk a folyamat mechanizmusáról is.

A vezető polimerek párhuzamos fotoelektrokémiai és CO₂ adszorpciós vizsgálatával megállapítottuk a vezető polimerek szerkezete és fotoelektrokémiai aktivitása közötti összefüggést, illetve rávilágítottunk arra a három fontos kritériumra, melyeknek a vezető polimereknek meg kell felelniük annak érdekében, hogy alkalmazhatóak legyenek fotoelektrokémiai CO₂ redukcióban.

LÁSZLÓ ISTVÁN Vegyész MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Zrínyi Miklós
egyetemi tanár, SE ÁOK
Rábai József
egyetemi tanár, ELTE TTK

Dopaminnal módosított poli(szukcinimid) előállítás és enzimatis degradációjának vizsgálata

Kulcsszavak: Gógyszerkonjugátum; Poli(aminosav); Biodegradáció; Szabályozott hatóanyag leadás

Konzulens: Juriga Dávid, PhD hallgató
 SE-ÁOK, Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

Napjainkban a gyógyszeripar egyik intenzíven kutatott területe olyan célzott, és szabályozott hatóanyag leadó rendszerek kiépítése, amelyek segítségével az alkalmazott dózis lecsökkenthető. Ezek segítségével nagymértékben kiküszöbölhetőek a mellékhatások és javítható a terápia hatásossága. Ilyen hatóanyag szállító rendszerek alapját képezhetik olyan biokompatibilis, és/vagy biodegradábilis polimerek gyógyszer konjugáltjai, amelyek a szervezet által lebonthatóak, és a bomlástermékei nem fejtenek ki káros hatást. Nagy jelentőségűek olyan gyógyszeres kezelések esetén, ahol a megfelelő hatás eléréséhez a hatóanyag napi többszöri adagolására van szükség.

A dopamin a szervezetben előforduló és a szervezet által is előállított vegyület. A szervezetre jótékony hatásai vannak, mint például a vérnyomás és pulzusszám növelése. Az agyban az alacsony dopamin koncentráció a Parkinson-kort okozhatja. Fontos feladat olyan hatóanyag leadó rendszer kifejlesztése, amely alkalmas a dopamin hiányból keletkező betegségek esetén a szükséges dopamin mennyiségének pótlására és a dopamin koncentrációjának állandó értéken tartására a központi idegrendszerben.

Munkám célja biodegradábilis és biokompatibilis poli(aminosav) alapú gyógyszerkonjugátum előállítása volt, amellyel dopaminnal (DOPA) történő gyógyszeres terápia esetén nagymértékben csökkenthető a gyógyszer bevitel gyakorisága. A gyógyszerkonjugátum alapjául szolgáló poli(szukcinimid)-et (PSI), a poli(aszparaginsav) (PASP) anhidridjét, L-aszparaginsav termikus polikondenzációjával állítottam elő. Ezt követően dopamint különböző mennyiségben tartalmazó dopamin-poli(szukcinimid) (PSI-DOPA) gyógyszer konjugátumokat szintetizáltam. A dopamint tartalmazó makromolekulák szerkezetét NMR vizsgálatokkal tanulmányoztam. Igazoltam, hogy a polimerhez kötött dopamin valós és a sztöchiometria alapján számított mennyisége hibahatáron belül megegyezik. Vizsgáltam a minták oldhatóságának és lipofilitásának függését a kötött dopamin mennyiségétől és megállapítottam, hogy a konjugátumok a dopamin mennyiségétől függ. RP-HPLC-MS technikával nyomon követtem a dopamin degradációját, illetve a dopamin enzimekkel történő lehasításának kinetikáját fiziológiai körülmények között.

Az enzimes kísérletek alapján megállapítható, hogy a gyógyszerkonjugátumról a dopamin folyamatosan szabadul fel, így hosszabb távon pótolható az elbomlott dopamin.

VADAS DÁNIEL Vegyészmérnöki BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK

Fröccsöntéssel gyártható önerősített polipropilén kompozitok égésgátlása

Kulcsszavak: polimer szál; gyártástechnológia; újrafelhasználhatóság; éghetőség; termomechanika

TDK munkám során nagymértékben nyújtott, izotaktikus polipropilén szállal erősített polipropilén alapú termoplasztikus elasztomer mátrixanyagú (azaz önerősített) kompozit lapok gyártásával és égésgátlásával foglalkoztam.

A mátrixanyag és egy ammónium-polifoszfát alapú felhabosodó égésgátló rendszer felhasználásával háromféle (0, 10 és 15%) égésgátló tartalmú, erősítetlen elasztomer lapokat fröccsöntöttem. Az erősítő szálakat tartalmazó kompozit lapok előállítását egy hosszabb, több-lépcsős gyártási folyamat szerint végeztem. A fröccsöntéshez nélkülözhetetlen szálerősített granulátum alakot a rétegeléses eljárással készült, unidirekcionálisan önerősített kompozit előgyártmányok szálirányú darabolásával és granulálásával értem el. Az 50% száltartalmú fröccsöntött elasztomer lapokból az erősítetlen lapokhoz hasonlóan háromféle (0, 10 és 15%) égésgátló tartalmú kompozit készült, melyek mátrixanyagát rendre 0, 20 és 30% égésgátlóval adalékoltam az erősítetlen lapokkal egyező bruttó égésgátló-tartalom érdekében.

Kutatómunkám során a fröccsöntött termékeket termoanalitikai (DSC, TGA), morfoló-giai (optikai mikroszkópia, SEM), mechanikai (DMA, szakítópróba, ejtőszúlyos ütésállósági vizsgálat), valamint éghetőségi (UL-94 teszt, LOI mérés, cone kalorimetria) vizsgálatoknak vetettem alá. Az önerősítéses kompozitok húzószilárdsága az erősítetlen referencia próbates-tekhez képest 4-szeresére nőtt, a rugalmassági modulus is 5-6-szorosára emelkedett. A növek-vő égésgátló tartalom azonban a mechanikai tulajdonságok romlásához vezetett, a 15% égés-gátló tartalmú önerősített kompozit húzószilárdsága mindössze 2-szeresre adódott a referenci-ához viszonyítva. Az UL-94-es teszteken majdnem sikerült elérni a V-0 (önkioltó) minősítést a 15%-os próbatesteknél, az oxigén index értéke pedig 29,5 lett az adalékmentes referencia 18-as értékéhez képest. Az égésgátolt kompozitok mass loss kaloriméteren mért hőkibocsátása is jelentősen csökkent, az önerősített kompozitok némileg kedvezőbb eredményt produkáltak, mint az erősítetlen elasztomer lapok.

Kísérleteimmel demonstráltam, hogy megoldható az önerősített polipropilén rendszerek fröccsöntéssel történő gyártása akár égésgátolt formában is, ezzel az eddigi kétdimenziós gyártási eljárások mellett háromdimenziós termékek előállítása is megvalósítható. A termék a szigorúbb biztonságtechnikai előírásoknak is megfelel mind éghetőség, mind a mechanikai tulajdonságait tekintve, ezek mellett életciklusának lejártaival könnyen újrafeldolgozható.

KALMÁR SZABOLCS Műanyag- és száltechnológiai mérnöki mesterszak MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Renner Károly

tudományos munkatárs, Magyar Tudományos Akadémia, Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimer Fizikai Kutatócsoport

Heterofázisos PP kompozitok: szerkezet, tulajdonságok és deformáció

Kulcsszavak: ütésállóság; kavitáció; modell számítás; polimer keverékek; faliszt

A faliszttal társított polipropilén (PP) kompozitokból készült termékek egyre nagyobb teret hódítanak, különösen a gépjármű- és az építőiparban. A töltőanyag hatására a műanyag merevsége jelentősen nő, azonban az ütésállóság drasztikusan csökken, ami korlátozza a lehetséges felhasználási területet. Ez utóbbi hatás kompenzálására általában elasztomert adnak a rendszerhez, azonban az eredmény még nem minden esetben felel meg az elvárásoknak. A kompozitok törési ellenállása szempontjából kulcsfontosságú a szerkezet és a mikromechanikai deformációs folyamatok szerepe. A különböző folyamatok a deformáció során eltérő mennyiségű energiát nyelnek el, így ezek módosítása az ütésállóság javításának egyik ígéretes lehetősége.

A kutatás célja jobb ütésállóság elérése volt, a szerkezet és a deformációs mechanizmus módosításának segítségével. A munkám során a legújabb fejlesztésekben is használt heterofázisos etilén-propilén kopolimert alkalmaztam. Korábbi vizsgálatokban megállapították, hogy ezen mátrixok deformáció során több energiát nyelnek el akkor, ha kavitáció helyett nyírási folyás a domináns lejátszódó folyamat. A kavitáció visszaszorításának érdekében munkám során nagysűrűségű polietilént (HDPE) kevertem a rendszerhez, ennek hatását vizsgáltam a szerkezetre és a deformációs mechanizmusra. Kísérletet tettem továbbá egy modell kidolgozására, melynek segítségével meghatározható, hogy egyes tényezők mennyiségileg mekkora szerepet játszanak a törési ellenállásban, illetve megjósolható a PP/faliszt/elasztomer kompozitok ütésállósága.

Munkám során a kompozitokat kétcsigás kompaunder és fröccsöntőgép segítségével készítettem. Jellemzésükre szakító- és ütésállósági vizsgálatot végeztem, illetve a deformációs folyamatok nyomon követésére térfogati deformáció mérést és akusztikus emissziós vizsgálatot használtam. A kompozitok szerkezetét pásztázó elektronmikroszkópia segítségével jellemeztem.

GYÖRGY CSILLA Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Kasza György

tudományos munkatárs, MTA TTK AKI, Polimerkémiai Csoport

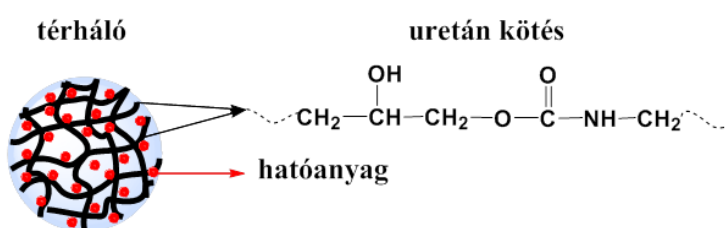
Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Hiperelágazásos poliglicidol alapú poliuretán térhálók, mint hatóanyag-leadó mátrixok

Kulcsszavak: HbPG;poliuretán;hidrogél;hatóanyag-hordozó rendszer

Ma az orvostudományban egyre nagyobb igény mutatkozik szabályozott hatóanyag-leadó rendszerek fejlesztésére. Az időben és térben szabályozott hatóanyag célba juttatás új terápiás lehetőségeket kínál. Ilyen típusú gyógyszerhordozóra példa az úgynevezett mátrix kontrollált hatóanyag-leadó rendszer. Ezek a mátrixok olyan térhálós polimerek, amelyek a hatóanyagot szerkezetükben egyenletesen elosztatva tartalmazzák, és megfelelően lassú sebességgel bocsájtják ki. Tudományos diákköri munkám első lépéseként glicidolból, anilin iniciátor alkalmazásával anionos gyűrűfelnyílásos multielágazásos polimerizációval két különböző molekulatömegű hiperelágazásos poliglicidolt (HbPG) állítottam elő. A HbPG egy biokompatibilis poliéter polioli, mely elágazásos szerkezetű analógja a lineáris poli(etilén-glikol)-nak (PEG), amely ígéretes lehet különböző gyógyászati területeken [1]. A HbPG molekula hidrofilitása, nagyszámú terminális hidroxil-csoportja miatt alkalmas kiindulási anyag különböző hidrogélek szintézisére. Munkám során a szakirodalomban eddig még nem publikált, HbPG alapú poliuretán térhálókat állítottam elő egy lépéses eljárással hexametilén-diizocianát (HDI) felhasználásával. A térhálók szintézisének két különböző molekulatömegű HbPG-t és eltérő NCO/OH arányokat alkalmaztam. Emellett előállítottam olyan HbPG alapú poliuretán kotérhálókat, amelyek PEG illetve politetrahydrofurán hidroxil-telekelikus polimerek előpolimerizációjával készültek.



Meghatároztam a kapott térhálók duzzadási kinetikáját eltérő polaritású oldószerekben: desztillált víz, etanol, tetrahydrofurán illetve az élő szervezethez hasonló körülményeket biztosító Ringer-laktát oldatban is. Az eredmények szerint, az eltérő összetétellel a térhálók duzzadási tulajdonságai változtathatók. Ezt követően egy modellhatóanyag, a teofillin felhasználásával gravimetriásan és UV/VIS spektroszkópia segítségével vizsgáltam a gélek által felvett hatóanyag mennyiséget, majd spektrofotometriás módszerrel követtem a felvett hatóanyag-leadásának a mértékét. A kapott eredmények alapján elmondható, hogy a HbPG alapú poliuretán gélek az egyensúlyi duzzadás elérése után képesek a hatóanyag közel lineáris sebességű lassú diffúzióval történő leadására. Az előállított térhálók új lehetőséget jelenthetnek a jövőben költségkímélő, gyors, egy lépéses eljárással biokompatibilis hatóanyag-hordozó rendszerek előállítására. [1] Zhengxi Zhu, Molecular Pharmaceutics. 11, 776-786 (2014)

SZŐKE ÁRPÁD FERENC Szerves Anyagok Kémiaja és Technológiája, Kőolaj- és Karbokémia BSc, 8. félév Babes-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki	
---	--

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

Indigó kármin inkubálása szolgélbevonatokba

Kulcsszavak: indigó kármin; inkubáció; kitozán; nyújtott hatóanyag leadás; célzott hatóanyag leadás

A kutatások célja az indigó kármin színezék bevitel volt különböző bevonatokba (elsősorban szolgél bevonatokba), továbbá az inkubált bevonatok tulajdonságainak és alkalmazhatóságának a vizsgálata.

Kutattam a lehetséges alkalmazást, mint módosított elektród.

Inkubáltam az indigó kármint, mint hatóanyag modellt, kitozán filmekbe, majd vizsgáltam ezek alkalmazhatóságát nyújtott/célzott hatóanyag leadó mátrixként.

A mérések elsősorban spektrofotometrián és ciklikus voltammetrián alapultak.

A kitozán-filmek a modell alapján alkalmazhatónak bizonyultak nyújtott/célzott gyógyszer-hatóanyag leadásra.

SIPOS EVELIN Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Zrínyi Miklós
egyetemi tanár, SE ÁOK
Juriga Dávid
PhD hallgató, SE ÁOK
Pászli István
egyetemi docens, ELTE TTK

In vitro sejtenyésztés poli(aminosav) alapú géleken

Kulcsszavak: poli(aszparaginsav) gél; szövettámasz; biokompatibilitás; foggyökérhártya őssejt

A háromdimenziós mesterséges szövettámaszként alkalmazható natív extracelluláris mátrix (ECM) előállítása az elmúlt évtizedekben a sejtbiológia fő feladatává vált. A sejtenyésztés kétdimenziós megközelítése kulcs szerepet játszott az alapvető sejt ECM kölcsönhatások megértésében, de a 3D szövettámaszok használatában rejlő lehetőségek messze felülmúlják ezeket. Az ideális szövettámasz nem csupán egy inert környezetet jelent a sejtek tenyésztéséhez, hanem rendelkezik a megfelelő mechanikai és diffúziós tulajdonságokkal, biokompatibilis, biodegradábilis, és biztosítani tudja a sejt mátrix és a sejt sejt közötti kommunikációt [1].

A természetes ECM alapvetően aminosavak összekapcsolásából létrejött polimerekből épül fel, mint például a kollagén, az elasztin, a fibronektin. A mesterséges ECM előállításához épp ezért mesterséges aminosav alapú polimerek, például poli(aszparaginsav) használhatók. Munkám fő célja olyan homogén, biokompatibilis polimer gélek előállítása, amelyekben a polimer térháló kizárólag aminosavból épül fel, és ezen gélek alkalmazhatóságának vizsgálata szövettámaszként sejtek in vitro tenyésztéséhez.

Poli(aszparaginsav) alapú gél előállításához poli(szukcinimid) et (PSI) szintetizáltam termikus polikondenzációval. A PSI szobahőmérsékleten, katalizátor használata nélkül könnyedén reakcióba lép nukleofilekkel, így keresztkötések alakíthatók ki a láncok között. Munkám során két bifunkciós ament, cisztamint és lizin metilésztert alkalmaztam különböző arányban keresztkötések létrehozására. Poli(aszparaginsav) alapú géleket lúgos hidrolízissel állítottam elő. A gélek mechanikai tulajdonsága és a környezeti hatásokra adott válaszreakciója befolyásolja a sejtek adhézióját és hosszútávú szaporodását. Vizsgáltam a gélek duzzadásfokának és rugalmassági moduluszának függését a közeg összetételének illetve pH értékének változásától. A cisztamin diszulfid kötéseinek felnyitásával tiol csoportokat hoztam létre a gél felületén, a sejtek adhéziójának elősegítése érdekében.

A sejtek életképességét (WST 1) méréssel követtük nyomon. A kísérlethez PDLSC (periodontal ligament stem cell) sejt vonalat használtunk. Az eredmények azt mutatták, hogy a rugalmassági modulusz és a polimer térhálóban kialakított tiol csoportok elősegítik a PDLSC sejtek adhézióját és szaporodását.

Eredményeink alapján elmondható, hogy a PASP gélek megfelelőek lehetnek sejtek in vitro tenyésztéséhez.

Hivatkozások:

[1] E. Santos, Trends in biotechnology, 30, (2012) 331.

FEHÉR BENCE Vegyész Msc MSc, 1. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
Varga Imre
egyetemi docens, ELTE TTK

Polielektrolit/tenzid rendszerekben lejátszódó fázisszeeparáció hatása az oldat/levegő határfelületi tulajdonságokra

Kulcsszavak: komplex; nemegyensúlyi; molekulatömeg

Az elmúlt években a polielektrolitot és ellentétesen töltött tenzideket tartalmazó oldatok a kutatások középpontjába kerültek. Ezen rendszerek megértésének nagy jelentősége van, hiszen számos mosóporban, mosószerben és élelmiszeripari cikkben is található polielektrolit és tenzid^[1]. Thomas és Penfold vizsgálták ezen rendszerek felületi feszültség izotermáját és arra jutottak, hogy a polielektrolit/tenzid rendszerek két típusba sorolhatók. Az 1. típusba tartoznak azok a rendszerek, amelyek felületi feszültsége a sztöchiometrikus keverési arányhoz közeledve csökken, majd egy plató található a felületi feszültség izotermában. A 2. típusba sorolták azokat a rendszereket, amelyek izotermájában a felületi feszültség kezdeti csökkenését egy plató követi, majd egy csúcs látható^[2]. A tapasztalatok értelmezésére egy felületaktív és egy felületinaktív komplex képződését feltételezték a tömbfázisban és ezek relatív stabilitásával magyarázták az izotermák típusait. De számos tömbfázisbeli vizsgálat azt az eredményt adta, hogy a töltött komponensek kölcsönhatása miatt a polielektrolit/tenzid rendszerek hajlamosak metastabil és nemegyensúlyi állapotok létrehozására. Ezért Varga és Campbell vizsgálni kezdték, hogy a tömbfázis nemegyensúlyi jellege hogyan befolyásolja az oldat/levegő határfelületi tulajdonságokat. Vizsgálataik azt mutatták, hogy ezek a rendszerek a mérések időskáláján nincsenek egyensúlyban és a felületi tulajdonságokat a rendszer tömbfázisbeli tulajdonságai határozzák meg a fázisszeeparációs tartományban. Az irodalomban azonban felvetődött, hogy a nemegyensúlyi viselkedés csak nagy molekulatömegű és koncentrációjú polielektrolitok esetén jellemző. Munkám célja ennek a lehetőségnek a vizsgálata volt és a tömbfázisban lejátszódó folyamatok hatásának vizsgálata az oldat/levegő határfelületi tulajdonságokra. Méréseimet a NaPSS/DTAB rendszeren végeztem és a tömbfázisban lejátszódó aggregáció és csapadékképződés jellegzetességeit vizsgáltam 17 kDa-os és 1000 kDa-os NaPSS esetén. Méréseim azt mutatták, hogy a rendszer tömbfázisbeli és határfelületi viselkedését a vizsgálatokhoz használt polielektrolit molekulatömege és koncentrációja nem befolyásolja, azokat csak az aggregáció és fázisszeeparáció előrehaladottsága határozza meg.

[1] Campbell A. R.; Arteta M. Y.; Angus-Smyth A.; Nylander T. Varga I. J. Phys. Chem. B 2011, 115, 15202-15213

[2] Bell, C. G.; Breward, C. J. W.; Howell, P. D.; Penfold, J.; Thomas, R. K. Langmuir 2007, 23, 6042–6052.

KÁRPÁTI LEVENTE Műanyag- és száltechnológiai mérnöki mesterszak MSc, 1. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Pukánszky Béla
egyetemi tanár, BME VBK
Hári József
egyetemi tanársegéd, BME VBK

Térhálós szerkezetű, szűk szemcseméret eloszlású modell töltőanyagok előállítási lehetőségeinek vizsgálata

Kulcsszavak: diszperziós polimerizáció; szemcsekezdő-magos polimerizáció; térhálósítás; monodiszperz polimer szemcsék; metil metakrilát

- A műanyag feldolgozó iparban már kezdetektől alkalmaztak töltőanyagokat a termékek mechanikai tulajdonságainak befolyásolására. Az iparban használt kereskedelmi töltőanyagok széles eloszlású, gyakran szabálytalan alakú szemcsékből állnak, ami alapvetően befolyásolja az előállított termék mechanikai jellemzőit. A töltött rendszerek nagy gyakorlati jelentősége miatt azok modellezése különösen fontos. Gömb alakú monodiszperz szemcsék alakjukból, s szűk méreteloszlásukból következően tökéletesen megfelelnek modell töltőanyagnak. Ilyen polimer szemcséket viszonylag könnyen elő lehet állítani diszperziós polimerizációval. De kompozitokban való alkalmazáshoz elengedhetetlen, hogy a műanyagba történő bekeverés során ne torzuljon a szemcsék alakja. Kutatási munkám jelenlegi célja olyan szintézis módszer kidolgozása, amellyel magas hőmérsékleten (150-200°C) bekövetkező mechanikai igénybevétel mellett is gömb alakját megőrizni képes térhálós polimer szemcséket állíthatunk elő.
- Munkámban alapvetően a szemcsekezdő-magos polimerizáció kivitelezésének két módjával foglalkoztam, a kétlépcsős diszperziós polimerizációval és a szakaszos szemcsekezdő-magos polimerizációval. Első lépéseként szűk eloszlású szemcsekezdő poli(metil-metakrilát) magokat állítottam elő a monomer és sztérkus stabilizátor koncentrációarány változtatása mellett, és vizsgáltam a szemcseméret eloszlás változását. A pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatok alapján az arány növekedésével a szemcsék mérete nő és a méreteloszlása szélesedik.
- Az utó térhálósítás során szemcséket a térhálósító (etilén-glikol-dimetakrilát) koncentrációjának függvényében vizsgáltam 1-10% között (szemcsekezdő-magra nézve). Kétlépcsős módszernél a térhálósító és iniciátor ágenseket a diszperziós polimerizáció reakció elegyében adagoltam, s indítottam újra a polimerizációt. Ekkor térhálósító koncentrációjától függetlenül széles méret eloszlású terméket kaptam. A szakaszos módszernél szemcsekezdő magokat metanolos diszperzióként mértem be a reaktorba, majd adagoltam be a sztérkus stabilizátort, az iniciátort, a térhálósítót és indítottam el a reakciót. Így közel azonos, szűk szemcseméret eloszlású termék keletkezett térhálósító mennyiségétől függetlenül. Az térhálósító tartalom növelésével 5% felett felületi egyenetlenség jelent meg. Az előállított reakció termékeket mikroszkópiás módszerekkel, oldat viszkozimetriával, oldhatósági és duzzadási vizsgálatokkal, illetve differenciál pásztázó kalorimetriával (DSC) jellemeztem.

VARGA BENCE Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Szabó Ákos

*tudományos munkatárs, Magyar Tudományos Akadémia, Természettudományi Kutatóközpont,
Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimer Kémiai Kutatócsoport*

Újszerű, amfifil polimer kotérhálókön alapuló aranytartalmú nanohibridek

Kulcsszavak: PHEMA-l-PIB; PDMAAm-l-PIB; nanorészecske; nanoreaktor; katalízis

Munkám elsődleges célja arany nanorészecskék újszerű előállítása volt, hidrofil és hidrofób polimer szegmensek kovalens összekapcsolásával létrejövő amfifil polimer kotérhálókat mint nanotemplátokat felhasználva. Ennek során korábban szintetizált poli(2-hidroxietil-metakrilát)-l-poliizobutilén (PHEMA-l-PIB), illetve általam előállított poli(N,N-dimetil-akrilamid)-l-poliizobutilén (PDMAAm-l-PIB) kotérhálókkal dolgoztam.

A PDMAAm-l-PIB kotérhálók előállításának kiindulási lépése a telekelikus PIB makrokeresztítő szintézise volt. Kvázielő karbokationos polimerizációval állítottam elő a polimert, majd hidrobórással a hidroxil-telekelikus, végül metakrilálással a metakrilát-telekelikus származékát alakítottam ki. A sikeres láncvégi funkcionalizálást ^1H -NMR spektroszkópiai mérések igazolták. N,N-dimetil-akrilamid és az előállított metakrilát-telekelikus PIB szabad gyökös kopolimerizációjával sikeresen szintetizáltam PDMAAm-l-PIB kotérhálókat.

A PHEMA-l-PIB és a PDMAAm-l-PIB kotérhálók duzzadását vizsgáltam HAuCl_4 oldatban. Ezt követően a magas duzzadási fokot mutató kotérháló gélekben redukáltam az Au^{III} -at arannyá, többféle redukálószerrel is kipróbálva. A nanoméretű aranyrészecskék képződését transzmissziós elektronmikroszkópiai vizsgálatok támasztották alá. 4-nitrofenol NaBH_4 -del való redukcióját mint modellreakciót felhasználva vizsgáltam az előállított nanohibridek katalitikus aktivitását. Sikertől olyan arany/kotérháló (PHEMA-l-PIB) nanohibridet létrehozni, amely magas katalitikus aktivitást mutatott, azaz viszonylag rövid idő alatt 100%-os átalakulást eredményezett.



Olyan, amfifil polimer kotérhálókkal stabilizált nanoméretű aranyrészecskéket tartalmazó hibrid géleket sikerült létrehozni, melyek közül találunk olyat, melyet hatékony katalizátorként is tudunk alkalmazni. Tekintve, hogy számos polimer biokompatibilis, elképzelhető, hogy az ily módon szintetizált nanoméretű aranyrészecskék a gyógyászatban, biológiai kutatásokban is szerephez jutnak majd. Nem elképzelhetetlen, hogy a polimer kotérhálókön alapuló arany nanorészecskéket tartalmazó hibrid anyagok előállítása révén a nanoméretű aranyrészecskék kémiájának újabb fejezetét nyitottuk meg.

Biokémia, biotechnológia 1

VARGA ZSÓFIA biomérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Székely Edit
 egyetemi docens, BME VBK

1-feniletanol biokatalizált, kinetikus reszolválása légköri nyomáson és szuperkritikus szén-dioxidban

Kulcsszavak: enantiomereválasztás; Candida antarctica lipáz B; észterezés; trigliceridek; természetes olajok

Az enantiomertiszta vegyületek előállításának egyre nagyobb jelentősége van a gyógyszer-, agrokémiai- és élelmiszeriparban. Szekunder alkoholok racém elegyből kiindulva a lipáz-katalizált kinetikus reszolválás az egyik legrégebbi és legáltalánosabb módja a tiszta alkohol enantiomerek elérésének. Hagyományosan az alkoholok kinetikus reszolválását enantioszelektív észterezési reakciókkal végzik, melyekhez szintetikus észterezőszeret használnak. A szintetikus acil-donorok alternatívái lehetnek a természetes olajok, melyek a növényekből szuperkritikus szén-dioxidos extrakcióval jó szelektivitással nyerhetők ki. Ilyen módon lehetőség nyílik a tiszta alkohol-enantiomerek környezetkímélőbb technológiával történő előállítására.

Munkám során modellreakcióként racém 1-feniletanol biokatalizált reszolválását vizsgáltam. A reakciókhoz katalizátorként immobilizált *Candida antarctica* lipáz B enzimet alkalmaztam. A kísérleteket n-hexánban, illetve a szerves oldószer elhagyásával oldószermentesen, továbbá szuperkritikus szén-dioxidban 10 MPa nyomáson és 40 °C hőmérsékleten végeztem. Észterező ágensként glicerín-triacetátot, glicerín-tributíratot és természetes olajokat (tökmag-, szója- és kukoricacsíra-olaj) használtam.

Az enantiomer-elválasztás tekintetében az észterezőszeret mindegyike hatékonynak bizonyult: 99%-os alkohol-enantiomerfelesleg volt elérhető légköri nyomáson. Az észterezőszeret nagy feleslegben alkalmaztam, ezáltal a reakció egyetlen limitáló komponense a szekunder alkohol volt, így a reakció kinetikai leírására a Michaelis-Menten modellt használtam. Az észterező ágens karbonsav-részének szénatomszáma hatással volt a reszolválási reakció sebességére, a legnagyobb maximális reakciósebességet glicerín-tributírat esetén kaptam.

A reakciót szuperkritikus szén-dioxidban is vizsgáltam glicerín-triacetát és kukoricacsíra-olaj észterezőszeret alkalmazva. Glicerín-triacetát esetén az alkohol enantiomertisztasága 85-99 % volt 80-99 % termelés mellett. A reakciók hatékonyságuk mellett jól ismételhetőnek bizonyultak, mely a reszolváló rendszer megbízhatóságát jellemzi. Kukoricacsíra-olajjal végezve az észterezést 93%-os konverzió mellett 87%-os alkohol enantiomerfelesleget értem el.

A reakciókörülmények optimalizálásával lehetőség nyílt szuperkritikus szén-dioxid oldószert és természetes olaj észterezőszeret alkalmazó reszolválási rendszerek megvalósítására, illetve a reakció lejátszódása után a nyomáscsökkentéssel alapuló frakcionált termék-elválasztásra.

VÁRHELYI MELINDA Vegyésszmérnöki BSc, 6. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyésszmérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. ing. Paizs Csaba
egyetemi docens, BBTE
drd. ing. Varga Andrea
doktorandus, BBTE

A PAL- és PAM-enzimek tisztítása és vizsgálata

Kulcsszavak: fenil-alanin ammónia-liáz; fenil-alanin 2,3-aminomutáz; optikai izomerek; elektroforézis; HPLC

A PAL (fenil-alanin ammónia-liáz) és PAM (fenil-alanin 2,3-aminomutáz) baktériumokban, gombákban, növényekben előforduló enzimek. Fontos szerepük van biokatalitikus átalakulásokban és optikai izomerek szétválasztásában.

Munkánk során a PAL és PAM enzimek feltárásával és tisztításával foglalkoztunk. A tisztítást Ni affinitású kromatográfiával végeztük, majd elektroforézissel ellenőriztük a feltárás és tisztítás sikerességét. Továbbá az említett enzimek aktivitását vizsgáltuk az általuk katalizált természetes reakciójukban. A PAL enzim az (S)- α -fenil-alanint alakítja trans-fahéjsavvá az ammónia nem oxidatív eliminációja során, míg a bakteriális eredetű PAM az (S)- α -fenil-alanin izomerizációját katalizálja (S)- β -fenil-alaninná. Az átalakulásokat királis HPLC segítségével követtük nyomon.

BORZA BEÁTA Biomérnök BSc, 9. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	ORLOVITS KATALIN Biomérnök BSc, 7. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar
---	--

*Témavezető:
Bakonyi Péter
tudományos munkatárs, PE MK*

Biohidrogéntermelés anaerob mikrobakonzorciummal: konvencionális előkezelési módszerek és a környezeti paraméterek szerepe a folyamat hatékonyságában

Kulcsszavak: öregítés; parciális nyomás; pH; kísérlettervezés; gáz-folyadék arány, biogáz

Munkánk során a mezofil biogáz fermentorból származó iszapon végeztünk különböző vizsgálatokat a célból, hogy meghatározzuk a különböző iszap előkezelési módszerek és a fermentációt befolyásoló paraméterek hatását a biohidrogén termelés fokozása érdekében.

Először is az iszap „öregedését”, mint előkondicionáló stratégiát tanulmányoztuk, melynek eredményeként kiderült, hogy az képes javítani a mikroflóra hidrogéntermelő képességét.

Az így előkondicionált iszapon végeztük el a különböző előkezelési módszerek (pl. hő-sokk, bázikus kezelés, kémiai kezelés, levegőztetés) hatékonyságának felfedésére szolgáló kísérleteket. Elsősorban a hővel történő előkezelés, majd a bázikus kezelés eredményeként kaptuk a legmagasabb hidrogén kihozatali értékeket.

További vizsgálataink alatt hővel előkezelt mikrobakonzorciumot használtunk fel, s különböző kezdeti pH és gáz-folyadéktérfogat (g/f) arányokat alkalmaztunk. Az eredmények tükrében mindkét változó szignifikánsnak tekinthető, melyek nem csak a hidrogéntermelő baktériumok termelékenységét, hanem a fejlődő H₂ parciális nyomását is egyaránt befolyásolják. Következésképp elmondható, hogy magasabb bioH₂ kihozatalt sikerült elérnünk magasabb gáz-folyadék arányok és alacsonyabb H₂ parciális nyomásviszonyok mellett.

NAGY FLÓRA Biomérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Poppe László
egyetemi tanár, BME VBK
Weiser Diána
PhD. hallgató, BME VBK

Funkcionalizált szilika nanorészecskék alkalmazása új típusú enzim aggregátumok előállítására

Kulcsszavak: enzimrögzítés, CLEAs, szilika nanorészecske, kísérletterv

TDK munkám során szilika nanorészecskéket alkalmazva a jól ismert CLEAs technika egy új változatával együtt egy új, eddig le nem írt enzimrögzítési módszert dolgoztam ki.

A CLEAs módszer elve, hogy egy keresztkötő reagenssel az enzim molekulák kicsapása után, azok aminosav oldalláncai között kovalens kötések kialakítva hozunk létre oldhatatlan aggregátumokat. A módszer igen egyszerű, és hatékony, szinte bármely enzim esetében sikeres. A létrehozott aggregátumban kialakuló diffúziós gát azonban alacsony fajlagos enzimaktivitást eredményez, emellett a készítmény mechanikai sajátságai és mechanikai stabilitása is kedvezőtlenek. Másrészt ismert, hogy szilika nanorészecskék megfelelő funkcionalizálás után felhasználhatóak hordozóként enzimek hatékony és diffúziós hatásoktól gyakorlatilag mentes rögzítésére, azonban a nanorészecskék igen kis mérete miatt az ilyen készítmények kezelése, visszanyerése technológiailag nehéz.

Az említett két módszer ötvöztetésével egy olyan hibrid (általunk elnevezve nano-hibrid mátrix) szerkezet alakítható ki, amely a két rendszer előnyös vonásait ötvözi. A nano-hibrid mátrix egyfelől hordozza a CLEAs módszer egyszerűségét és univerzalitását, hiszen az általam alkalmazott bisz-epoxid keresztkötő ágensek többféle aminosav oldallánccal is reakcióba vihetők, így általánosan alkalmazhatóak enzimek rögzítésére. Másfelől a szilika nanorészecskék jelenlétében képződő aggregátum jobb mechanikai, morfológiai jellemzőkkel bír, mint a hagyományos, tisztán csak enzimből felépülő CLEAs készítmények. Emellett a nano-hibrid készítmények pórusainak mérete megnő, ami csökkenti a diffúziós gátat és így növeli a jelenlevő enzim fajlagos aktivitását. A nano-hibrid készítmények előállítása során vizsgáltam a nanorészecskék méretének és felületének, valamint a keresztkötő ágensek hatását a biokatalizátor aktivitásra.

SZABÓ KÁRMEN Vegyész MSc, 2. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Gyémánt Gyöngyi
egyetemi docens, DE TTK*

ITC módszer alkalmazása a glikogén foszforiláz enzim vizsgálatára

Kulcsszavak: glikogén foszforiláz; ITC; enzimkinetika; inhibíció

Munkám során a glikogén foszforiláz enzimnek a kinetikai és gátlási vizsgálatával foglalkoztam, amely glikogénen ható enzim fontos szerepet tölt be a humán anyagcserében. A glikogén foszforiláz reverzibilis folyamatot katalizál. Fiziológias körülmények között, az energiatároló vegyületként funkcionáló glikogén lebontását végzi, miközben glükóz-1-foszfát (G-1-P) szabadul fel, de in vitro képes a fordított irányú reakció katalizálására is. G-1-P jelenlétében az $\alpha(1,4)$ glikozidos kötés kialakításával glükóz egységeket kapcsol megfelelő oligomer akceptorra miközben szervetlen foszfát is keletkezik. A glikogén foszforiláz enzim a cukorbetegség terápiájában potenciális célpontnak számít, ugyanis ezen enzim inhibíciója a kettes típusú cukorbetegség kezelésére alkalmazható módszer lehet. Az enzim vizsgálatokban elterjedőben van egy új módszer, az izotermális titrációs kalorimetria (ITC) alkalmazása, amelynek a fő előnye, hogy lehetővé teszi az enzim természetes szubsztrátján történő közvetlen vizsgálatát. Munkám során a korábban humán nyál alfa-amilázon (HSA) beállított módszerek segítségével a glikogén foszforiláz b enzim kinetikáját, és néhány szintézissel előállított inhibitor gátlási tulajdonságát vizsgáltam.

A kinetikai vizsgálatokat négy szubsztráton (G5, G7, CNP-G7, glikogén) végeztem el, melyeknél rendre meghatároztam a Michaelis-Menten állandókat (KM). Ezen értékek összehasonlításával megtudtam állapítani a glikogén foszforiláz enzim aktivitás mérése és gátlásvizsgálata számára a megfelelő körülményeket.

Ezt követően gátlásvizsgálatokat végeztem két olyan inhibitorral, melyet a Szerves Kémiai Tanszék bocsátott rendelkezésünkre. Mind a két gátlószer esetén a glikogén lebontás irányában végeztem méréseket, mely során meghatároztam az inhibitorok IC50 értékeit. Az általam lebontás irányában végzett kísérletek eredményeit összevetettem egy másik kutatócsoport által, a szintézis irányában meghatározott értékekkel.

GAZSÓ ZITA Biomérnöki MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Barta Zsolt
egyetemi adjunktus, BME VBK
Fehér Csaba
tanársegéd, BME VBK

Kukoricarost biofinomító szemléletű feldolgozása

Kulcsszavak: biofinomító, kukoricarost, arabinóz, xilóz, C. boidinii

Századunk egyik fontos feladata a fosszilis erőforrások helyett új nyersanyagforrások keresése, és azok biofinomító koncepcióban történő feldolgozása. Ilyen nyersanyag a Magyarországon nagy mennyiségben keletkező kukoricarost. A rost egy lignocellulóz biomassza, pontos összetétele eredetétől függően változik. Cellulóz és hemicellulóz tartalma szárazanyagra vonatkoztatva körülbelül 50%. A xilóz legjelentősebb felhasználási területe az élelmiszeripar: a xilitgyártás alapanyaga. Az arabinózt számos területen felhasználják: jelentős édesítőszer, vegyipari alapanyag, valamint számos bioaktív anyag prekursora. A xilitelőállítás alapanyagaként szolgáló xilózt lignocellulózok savas hidrolízisével nyerik. Ez kémiai és biológiai úton is xilitté redukálható. A kémiai eljárás hátránya, hogy a katalitikus redukció nagytisztaságú xilózt igényel, ezért több, nagy költségű tisztítási lépést kell beiktatni. Alternatív módszer a mikrobiális úton történő redukció: a legfontosabb xilitelőállítók az élesztők, közülük is a *Candida* nemzetség tagjai. A biológiai redukció előnye, hogy kisebb költségű lehet, mint a kémiai eljárás, valamint, hogy nem igényel nagy tisztaságú xilózoldatot. Biológiai redukcióval különböző biomasszák - növényi, mezőgazdasági, vagy erdészeti hulladékok - is feldolgozhatók. Munkám célja a kukoricarost hemicellulóz frakciójában található arabinóz és xilóz szelektív eltávolítása volt. Az arabinóz és xilóz szelektív kinyerésének lehetőségét savas kezelések során vizsgáltam. A savas kezeléseket kísérleti tervek alapján végeztem: megvizsgáltam a savkoncentráció és a kezelési idő hatását híg kénsavas, illetve borostyánkósavas kezelés során. A kezelések eredményeit statisztikailag elemeztem. Arabinóz biotisztítási kísérleteket végeztem, melyek során megvizsgáltam négy élesztőtörzs, a *Candida boidinii*, *Candida guilliermondii*, *Candida parapsilosis* és *Hansenula anomala* szaporodását xilóz-, illetve arabinóztartalmú tápoldaton, majd az eredmények alapján kiválasztottam azt a törzset, amelyik az arabinózt nem fogyasztja. Xilitfermentációs kísérleteim során célom volt a kiválasztott törzssel különböző rázatási, töltöttségi, kiindulási sejt- és xilózkoncentráció, valamint pH beállítások mellett xilit előállítása, és az eredmények alapján a legjobb beállítási kombináció meghatározása. A kapott eredmények alapján a kukoricarost alkalmas alapanyaga lehet olyan biofinomító eljárásnak mely arabinóz és xilit egyidejű előállítását teszi lehetővé.

HOVANYEC HENRIETTA Kémia BSc, 6. félév Eszterházy Károly Főiskola Természettudományi Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. B. Tóth Szabolcs
adjunktus, EKF TTK*

Zearalenon bomlásának vizsgálata különböző adalékanyagok hatására

Kulcsszavak: mikotoxin, zearalenon, gabona

Az élelmiszerek előállításakor fontos, hogy a fogyasztók biztonságosan fogyasztható élelmiszerekhez jussanak, ez pedig csak akkor valósítható meg, ha már a magok vetésétől, a növénytermesztésen és feldolgozáson át minden folyamat biztonságos körülmények között zajlik. A mikotoxinok már a vetés során elkezdhetik a növény megfertőzését és ez tovább folytatódhat a raktározás során, majd fogyasztáskor a szervezetbe kerülve fejtik ki mérgező hatásukat. A több ezer fajta között vannak rákkeltő, immunrendszer működését gátló hatású, mutagén, fejlődési rendellenességet okozó, ösztrogén hatású, idegrendszeri ártalmakat okozó vegyületek.

Kísérleteim fő célja a mikotoxinok mennyiségének csökkentése sütés során és annak megfigyelése, hogy a különböző gabona adalékanyagok felhasználása hogyan befolyásolja a toxin bontását. Vizsgálataimban egy normál háztartásban is elkészíthető kenyér-féléket készítettem. Tértfogatnövelő szerként szalalkált alkalmaztam, mivel korábbi kísérletek alapján ez az anyag bizonyult leghatékonyabbnak a toxin bontására. Gabona-adalékanyagként zabpelyhet és korpát használtam. Vizsgálataim során négy kísérletsorozatot végeztem, mindegyikben 5×3 párhuzamos méréssel, melyeknél az első volt az előírt recept alapján készített kontrollminta, a következő négyhez pedig zabpelyhet és korpát tettem adalékanyagként 1 illetve 2 g mennyiségben. Az első kísérletsorozatot hozzáadott toxin nélkül készítettem, a következő sorozatokhoz zearalenon toxint adtam egyre nagyobb koncentrációban.

Az eredmények biztosítottak arról, hogy az alapanyagok zearalenon toxint nem tartalmaztak, a hozzáadott toxin mennyisége pedig minden esetben csökkent, mely a szalalkáli toxinbontó hatásának köszönhető. A leghatékonyabb toxinbontás az adalékanyag-mentes kenyereknél volt megfigyelhető, a zabpelyhet és a korpa már valamennyire meggátolta a toxin bontását. Érdekes továbbá, hogy nagyobb toxinkoncentráció alkalmazásakor a sütés után több visszamaradó toxinmennyiséget várnánk a pogácsákon. A legnagyobb mértékű bontás azonban a 100 ppm-es koncentráció esetében volt, hígabb és töményebb koncentrációt alkalmazva már kevesebb toxin bomlott. Valószínűsíthető, hogy a reakció során autokatalitikus folyamatok játszódnak le, mely során a toxin bomlásakor keletkező termékek visszahatnak a bomlási folyamatokra, ezáltal segítve a toxin bontását. További céljaim között szerepel más adalékanyagok és térfogatnövelő szerek vizsgálata illetve a sütés során keletkezett bomlástermékek megfigyelése.

KOÓK LÁSZLÓ Biomérnöki BSc, 7. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

*Témavezető:
Bélafiné Dr. Bakó Katalin
egyetemi tanár, PE MK*

Mikrobiális üzemanyagcellák vizsgálata szervesanyag-tartalmú hulladékok energetikai hasznosítására

Kulcsszavak: biomassa; elektromos energia; megújuló energiaforrás; mikrobiális üzemanyagcella; szennyvíz hasznosítás

A jelen dolgozat a megújuló energiaforrások területén új alternatívát jelentő mikrobiális üzemanyagcellák összeállítását és azok magas szervesanyag-tartalmú szennyvíz (présvíz) energetikai hasznosítására irányuló vizsgálatát mutatja be.

A munka első része mezofil anaerob iszapból származó mikroba konzorciummal inokulált laboratóriumi méretű üzemanyagcellák előkészítési és tesztelési folyamatait kíséri végig, beleértve a Na-acetát szubsztráttal két periódusban elvégzett adaptálási lépéseket, valamint a kialakított anódfelületi biofilm stabilitását és a cellák présvíz szubsztrátra adott válaszreakcióját szimultán módon ellenőrző kísérleti tervet. A mért értékek alapján a technológiára jellemző fajlagos energetikai és szervesanyag-eltávolítási mutatók kiszámítása lehetővé tette az irodalmi adatokkal való mennyiségi-minőségi összevetést.

Az előkísérletek során kapott pozitív adatok nyomán folytatásként bemutatásra kerül a présvíz, mint önálló szubsztrát által működő üzemanyagcellák alkalmazástechnikai vizsgálata, valamint a cellákban alkalmazott Nafion kationcserélő membrán mikroszűrő membránnal való kiváltására tett kísérlet.

Az eredmények alapján megállapítható, hogy a módszer alkalmas volt a koncepció megvalósítására, szennyvíz alapon működő mikrobiális üzemanyagcellák létrehozására.

SALEKOVICS ALEXANDRA Biomérnöki alapszak BSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

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

Mikrobiológiai kén-hidrogén mentesítés szakaszos rendszerben

Kulcsszavak: kén-hidrogén eltávolítás; biogáz; biotechnológia; Thiobacillus thioparus; Thiomonas intermedia

A kén-hidrogén technológiai szempontból gondot okoz, mivel korrozív és mérgező tulajdonságairól ismert. Jelen van különböző gázáramokban, még ha csak kis koncentrációban is, de például megtalálható a biogáz komponensei között, melyből a további felhasználás előtt káros hatásai miatt el kell távolítani. Számos eljárást dolgoztak ki ennek megvalósítására, de a legelterjedtebben fizikai-kémiai módszereket alkalmaznak. Viszont biológiai úton is történhet az eliminálása, különböző autotróf és heterotróf baktérium törzsek felhasználásával. Ez a módszer, előnyei miatt egyre jobban előtérbe került, mivel alacsonyak a megvalósítási költségek, könnyű a működtetés, nincs speciális vegyszer és berendezés igény. A minél kedvezőbb ipari alkalmazhatóság és nagyobb eltávolítási hatások elérése érdekében folytak és folynak kutatások ezen a területen, különböző mikroorganizmusok és technológiai megoldások felhasználásával.

A TDK munka során a kiválasztott nem patogén, aerob, kemoautotróf baktériumok alkalmazhatóságának igazolása volt a cél a kén-hidrogén eliminálására laboratóriumi körülmények között. Thiobacillus thioparus és Thiomonas intermedia baktériumokat választottuk kedvező tulajdonságaik miatt. Először a baktériumok felnevelését, majd inokulum készítését kellett megvalósítani a tápközegek elkészítésével. A kísérleti berendezés összeállításánál a legfontosabb szempont az volt, hogy minél pontosabban igazolhatóvá váljon a baktériumok szulfid oxidálása révén bekövetkező kén-hidrogén csökkenés. Ezért a megfelelő analitikai módszer kidolgozása után, elvégeztük a kalibrációkat, végül a szuszpendált szakaszos rendszerű kísérleti berendezés működtetése során a folyadék fázis és a gáz fázis koncentráció változásainak nyomon követésével összesítettük a mért adatokat.

LÓKA MÁTÉ Biomérnök BSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	LÓRÁNT BÁLINT Biomérnök BSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar
--	--

Témavezető:
Dr. Tardy Gábor Márk
egyetemi adjunktus, BME VBK

Mikrobiológiai üzemanyag cella fejlesztése és alkalmazása biodegradáció kinetikai vizsgálatára

Kulcsszavak: bioszenzor; biotechnológia; exoelektrogén mikroflóra; megújuló energia

Az elmúlt évtizedben a biotechnológiai kutatásokban egyre inkább teret nyerő mikrobiológiai üzemanyag cellák (Microbial Fuel Cell – MFC) alkalmazása merőben új lehetőséget teremt megújuló elektromos energia („bioelektromosság”) előállítására. A baktériumok egy speciális csoportja, az ún. exoelektrogének a szervesanyag oxidálásából nyert elektronokat – szigorúan anaerob környezetben – képesek közvetlenül egy szilárd vezető felületére transzportálni. Az exoelektrogén baktériumokból kialakított biofilm segítségével az MFC-ben közvetlenül szervesanyag lebontásból nyerhető elektromos energia.

A mikrobiológiai üzemanyag cellák felhasználása sokrétű: az MFC-vel kapcsolatos kutatások elsősorban a megújuló energia előállításra, a szerves szennyezések lebontására/hasznosítására és a szennyvíztisztításra koncentrálnak. A szakirodalom kisebb szegmense foglalkozik az MFC-k bioszenzorként történő alkalmazásával, összefüggésbe hozva a cellában kialakuló feszültséget az anódtérben zajló biodegradáció sebességével. Kutatásunkban egy, a szervesanyag lebontás vizsgálatára alkalmas, bioszenzorként jól alkalmazható, félfoltyonos ill. folytonos üzemben működtethető cella megalkotását tűztük ki célul.

A technológia kifejlesztésének első szakaszában az ún. H-típusú cellában megvizsgáltuk az anódtér beoltását követően a biofilm növekedését jellemző feszültséglefutást, és meghatároztuk a biofilm aktivitás növekedésének sebességét. Megvizsgáltuk továbbá, hogy az elektrolit összetétele, valamint az elektródák minősége (grafit szövet ill. grafit lap), ill. a katód/anód felület aránya hogyan befolyásolja a cella teljesítményét és a kialakuló feszültséget. A vizsgálatok eredményére támaszkodva megalkottuk a szenzornak alkalmas, átfolyó anódtérrel rendelkező mikrobiológiai üzemanyag cellát. Az új technológia segítségével tanulmányoztuk az anódfelületen zajló biodegradáció kinetikáját ecetsav szubsztrát esetében. Eredményeink arra utalnak, hogy az exoelektrogén mikroflóra a szakirodalomban korábban leírtakhoz képest (~1 mM-os) egy nagyságrenddel alacsonyabb ecetsav koncentráció mellett is hatékony metabolizmust folytat, a cella teljesítményének jelentős visszaesése nélkül. A kifejlesztett cella segítségével a jövőben különböző szubsztrátok biodegradálhatóságát/toxicitását kívánjuk részletesen tanulmányozni.

MOLNÁR DÓRA Biomérnöki MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:

Zalai Dénes

Kutató-fejlesztő, Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt., Biotechnológiai osztály

Monoklonális antitest-termelő CHO sejtvonalak produktivitásának kontrollálása különböző rá táplálási stratégiák segítségével

Kulcsszavak: fed-batch; bioreaktor; emlőssejt; kínai hörcsög petefészeksejt; specifikus produktivitás

Az elmúlt két évtizedben jelentősen megnőtt a terápiás célú rekombináns fehérjék iránti kereslet. Az iparban ezen fehérjetermékek mintegy 70%-át CHO sejtekkel termeltetik. A CHO sejtek által termelt fehérjék terápiás célú felhasználhatósága jól ismert, azonban a gyártásukra vonatkozó folyamatos technológia-fejlesztés gazdasági szempontból kívánatos. A cél minél nagyobb termékhozam elérése a termékek minőségének romlása nélkül.

A tenyésztési körülmények optimalizálásával és megfelelő feed-stratégia kidolgozásával szabályozhatóvá válhat a termelő produktivitása, ami igen nagy jelentőséggel bír a rekombináns fehérjegyártás területén. Munkánk során egy CHO sejtvonalt két klónját (a és b) vizsgáltuk fed-batch tenyészetekben. Két kísérleti körben 7 kísérletet végeztünk 1 liter hasznos térfogatú bioreaktorban. Célunk a két klón fiziológiájának és produktivitásának összehasonlítása volt, továbbá megvizsgáltuk két különböző rá táplálási stratégia (szakaszos vs. folytonos) hatását a tenyészetekre. Célunk volt továbbá a sejtek specifikus produktivitásának (qp) befolyásolása aminosav-limitáció célzott kiváltásával.

Az első kísérleti körben megtörtént a két klón fiziológiájának és a rá táplálási stratégiáknak az összehasonlítása. Az esszenciális aminosavakat tartalmazó oldat folytonos rá táplálásával magasabb értéken sikerült tartani a tenyészetek produktivitását, mint az oldat szakaszos adagolásával, mely esetben a specifikus produktivitás csökkenését tapasztaltuk, amit az ozmolalitás ugrásszerű növekedése okozhatott.

A második kísérleti körben a qp befolyásolása érdekében az esszenciális aminosavak koncentrációját az adagoló pumpa fordulatszámának változtatásával szabályoztuk a reaktorokban. Ezekben a kísérletekben már csak folytonos rá táplálást alkalmaztunk. A kísérletek során a sejtlegzés indikátoraként on-line követtük nyomon az O₂ MFC jelet, és ezen indikátor jel alapján dinamikusan változtattuk a pumpák fordulatszámát. Az O₂ MFC jel görbék a qp görbékkel hasonló trend szerint futottak, a görbék csökkenését feltételezhetően egy esszenciális aminosav, a tirozin kimerülése okozhatta. Ezt a feltételezést NMR módszerrel sikerült igazolnunk. Az esszenciális aminosavak rá táplálásának változtatásával így az egyik klón esetében (a) sikerült először lecsökkenteni, majd újra megnövelni a qp-t.

Összefoglalva elmondható, hogy tápanyag limitációval sikerült kialakítanunk egy olyan rá táplálási stratégiát, mellyel kontrollálható a qp az a klón esetén, fed-batch tenyészetben.

KISS KATA Biomérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Csiszár Emilia
 egyetemi docens, BME VBK

Szilárd fázisú fermentációval előállított enzimek extrakciójának vizsgálata ultrahangos rendszerben

Kulcsszavak: enzimaktivitás; biofehérítés; nyers lencszövet; Aspergillus oryzae

A szilárd fázisú fermentáció (SSF) ígéretes alternatívája az ipari enzimtermelésre széles körben elterjedt szubmerz fermentációs eljárásnak [1]. Az SSF módszerrel szubsztrát specifikus enzimkeverékeket állíthatunk elő, amelyek például a biofehérítés során eredményesen alkalmazhatók [2]. Az SSF módszer gazdaságosabb, ha a nyers fermentált termékeket közvetlenül - downstream műveletek nélkül - használjuk enzimforrásként. Számos alkalmazás előtt viszont szükséges a szilárd szubsztrátumból az enzimek kinyerése extrakcióval [3]. Az élelmiszeriparban már használtak ultrahangot a bioaktív komponensek extrakciójának a segítésére. Az SSF mintákból a nyers enzimkeverékek kinyerésére viszont eddig még nem alkalmazták az ultrahangot.

Munkám célja: szilárdfázisú fermentációval előállított fermentumokból a nyers enzimkeverékek extrakciójának fokozása kisfrekvenciás ultrahang alkalmazásával; az ultrahang enzimaktivitásra gyakorolt hatásának a jellemzése; lencszövet biofehérítése az extrahált enzimidatokkal és közvetlenül a szilárd fermentumokkal.

Ligninolitikus és hidrolitikus enzimeket termeltettünk len rost szubsztráton hat fonalas gomba törzssel SSF módszerrel. Az egyik legjobb enzimtermelő törzset (*Aspergillus oryzae* NRRL 3485) tovább vizsgáltam kisfrekvenciás ultrahanggal különböző amplitúdók mellett. Eredményeim bizonyítják, hogy az ultrahang (40 kHz, 60 perc) kezelés nagymértékben segíti a nyers enzimek extrakcióját és jelentős szűrőpapír lebontó, lignin-peroxidáz, poligalakturonáz és lakkáz aktivitás növekedést eredményez a kontroll rázott rendszerhez viszonyítva. Kisfrekvenciás ultrahang az alkalmazott körülmények között nem befolyásolja számottevően az enzimidat előbb említett aktivitás értékeit. Az ultrahang segíti a nyers lencszövet enzimidattal és szilárd fermentummal végzett biofehérítését.

[1] Pandey, A., Sevakumar, P., Soccol, C.R. and Nigam, P. (1999) Solid state fermentation for the production of industrial enzymes. *Curr. Sci.*, 77, 149-162

[2] Christopher, L., Bissoon, S., Singh, S., Szendefy, J. and Szakacs, G. (2005) Bleach-enhancing abilities of *Thermomyces lanuginosus* xylanases produced by solid state fermentation. *Process Biochem.*, 40, 3230–3235

[3] Singh, S.A., Ramakrishna, M. and Appu Rao, A.G. (1999) Optimisation of downstream processing parameters for the recovery of pectinase from the fermented bran of *Aspergillus carbonarius*. *Proc. Biochem.*, 35, 411–417

Biokémia, biotechnológia 2

LOVÁSZ KRISZTINA Biomérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Sveiczter Ákos
 egyetemi docens, BME VBK

A hasadó élesztő sejtciklusában működő G₁- és G₂-fázisú méretkontroll matematikai modellezése inhibitor hígulás által

Kulcsszavak: fehérjehálózat; in silico; ellenőrzési mechanizmus; Pom1; mitózis

A méretkontroll a sejtciklusban ható ellenőrzési folyamat, amelynek köszönhetően a sejtek mérete egyes osztódások után, valamint az egész populációra nézve állandó marad. A hasadó élesztő régóta fontos modellorganizmusként használatos egyedi osztódási tulajdonságai miatt. Szimmetrikus osztódásának köszönhetően nagyon jó szinkronizálási eljárásokra ad lehetőséget. A hasadó élesztő sejtciklusát rövid G₁ és hosszú G₂-fázis jellemzi. A méretkontroll gyakorlatilag csak a mitózis előtt működik, a DNS-szintézis előtt nem. A mechanizmusban meghatározó szereppel a ciklin-függő kinázok rendelkeznek, melyek különböző fehérjék foszforilezése útján a sejt ciklus következő fázisába juttatják a sejtet. Közülük a két legfontosabb: az SPF, ami az S-fázisba és az MPF, ami az M-fázisba való átlépést segíti elő.

Az ellenőrzési mechanizmus legfontosabbnak vélt és ismert molekuláris kölcsönhatásainak minden tagjára kinetikai egyenletet írunk fel. Az egyenlet több részből áll (szintézis, lebomlás, aktiválás, stb.), így sokparaméteres differenciálegyenlet rendszert kapunk. A méretkontroll működését leíró modellt a WinPP® nevezetű differenciálegyenleteket numerikusan megoldó szoftverrel vizsgáltam. Munkám célja az volt, hogy a G₁- és a G₂-fázisú méretkontrollt tovább vizsgáljam. A G₁-fázisú méretkontroll rejtett a vad típusú sejtben, míg wee mutáns sejt esetében ez a releváns ellenőrző pont. A G₁-fázis hosszát meghatározó fehérjék. Közülük az egyik legfontosabb az APC (Anaphase Promoting Complex) egyik alegysége, a Ste9, mely a korai G₁-fázisban folyamatosan ubikvitinezéssel megjelöli az újonnan szintetizált Cdc13 fehérjét degradációra, így nagyon alacsony lesz egy ideig az MPF aktivitása. Továbbá a Rum1 sztöchiometrikus inhibitor, mely a CDK-ciklin dimerhez kapcsolódva gátolja annak működését. A G₂-fázisú méretkontroll kvantitatív leírását fejlesztettem tovább a Pom1 és Cdr2 fehérjék figyelembevételével. A Pom1 fehérje a sejt mindkét végén jelen van a kortexben és aktivitása a sejt belseje felé haladva csökken. Ha a sejt mérete megnő, akkor a Pom1 aktivitása lecsökken a sejt belsejében. Így a Cdr2 kináz módosítani tudja a Wee1 fehérjét és a sejt az M-fázisba léphet. Munkám során a Pom1 fehérjére építettem be méretkontrollt, Cdr2 fehérjére pedig Goldbeter-Koshland egyenletét írtam fel, ahol a Cdr2 foszforilezését leíró sebességi egyenletben a Pom1 fehérje is szerepel.

MÉSZÁROS CSILLA Biomérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Horváth Anna
PhD. Hallgató, BME VBK
Dr. Sveiczzer Ákos
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Sipiczki Mátyás
egyetemi tanár, DE TTK

A hasadó élesztő Sep15 sejtosztódási proteinjének filogenetikai analízise

Kulcsszavak: bioinformatika; fehérje evolúció; gomba taxonómia; dimorfizmus; Mediátor komplex

A hasadó élesztőgombaként is ismert *Schizosaccharomyces pombe* a 20. század második felében vált népszerű modellorganizmussá. Kedvező fiziológiai tulajdonságai miatt gyakran alkalmazzák sejtbiológiai, genetikai és mikrobiális fiziológiai kutatásokban is. Munkám során a hasadó élesztő Sep15 proteinjét vizsgáltam, ami az elsőként azonosított Mediátor homológ volt a *S. pombe*-ban. A Mediátor komplex az RNS polimeráz II-dependens gének transzkripciójához szükséges, ezáltal a sejtseparációban is fontos szerepet játszik.

Bár a fehérje megtalálható a legtöbb eukarióta élőlényben, kutatásomat a gombák királyságára szűkítettem. Egyes növényi, állati és humán patogén gombafajok virulenciájához elengedhetetlen a váltás az élesztőszerű és a fonalas növekedés között; ez a jelenség a dimorfizmus. A sejtseparációban szerepet játszó proteinek vizsgálata lehetővé teszi a dimorfizmus mechanizmusának pontosabb megismerését, ami hosszú távon új gombaellenes szerek felfedezéséhez vezethet.

Munkám során az NCBI, a BROAD és a JGI adatbázisokat használtam, amikben az ortológok kereséséhez fajok közötti BLASTp analízist végeztem. A találatok közül a későbbi analízisekhez 58 faj (46 Ascomycota, 9 Basidiomycota, 2 Zygomycota, és 1 Chytridiomycota faj) szekvenciáját használtam fel. Annak érdekében, hogy a rokonsági kapcsolatot bizonyítsam, reciprok BLASTp analízist végeztem, azaz a feltételezett ortológ szekvenciával kerestem a *S. pombe* genomjában. A fehérje doménstruktúrájának vizsgálatához a Pfam adatbázist használtam. A többszörös illesztéseket különböző algoritmusokkal (ClustalX, PRANK, MAFFT) végeztem el. Ezek a programok a szekvenciák közötti hasonlóságokat emelik ki, amivel elősegítik a fajok rokonsági kapcsolatainak azonosítását. Ezek után törzsfákat szerkesztettem három különböző módszerrel (neighbor joining, maximum parsimony és maximum likelihood). Ehhez több programot (MEGA, PHYLIP, PhyML) alkalmaztam annak érdekében, hogy az eredményeimet alátámasszam, és a megfelelő következtetéseket vonjam le.

A különböző topológiákban megjelenő kisebb eltéréseket leszámítva azt tapasztaltam, hogy a Sep15 protein filogenetikája a gombák királyságának feltételezett evolúciójához hasonló. A négy ábrázolt törzs (Ascomycota, Basidiomycota, Zygomycota, Chytridiomycota) elválik egymástól, akárcsak az aszkuszos gombák három altörzse (Taphrinomycotina, Saccharomycotina és Pezizomycotina).

BOGDÁN FANNY Biomérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	KOCSI VIKTÓRIA Biomérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar
--	--

*Témavezető:
Dr. Bakonyi Péter
tudományos munkatárs, PE MK*

Biohidrogén szeparáció PDMS membránnal modell- és valós gázelegyekkel

Kulcsszavak: biohidrogén;PDMS;biotechnológia

A kutatási munkánk célja az volt, hogy egy kereskedelmi forgalomban kapható pórusmentes, kapilláris csöves, PDMS anyagú membránt vizsgáljunk biohidrogén tisztításra modell- és valós gázelegyekkel egyaránt. A kísérleteket laborméretű tesztberendezésben végeztük, adott nyomás és hőmérséklet körülmények között, a változó gázösszetétel, valamint a kitermelés, mint fontos üzemeltetési paraméterek hatását elemeztük a membrán teljesítőképességére (permeabilitás, szelektivitás) vonatkozóan. Munkánk első részében különböző összetételű hidrogén és szén-dioxid gázelegyeket vizsgáltunk, majd meghatározott mennyiségű kén-hidrogént is adagoltunk a rendszerhez és az így kapott három komponensből álló keveréket alkalmaztuk. A tesztek utolsó fázisában a PDMS membrán modult valós fermentációs gázokkal is teszteltük (ami egy steady-state állapotú, hidrogéntermelő bioreaktorból származott) és bebizonyosodott, hogy a hidrogén feldúsítható komplex gázelegy esetén is.

NÁSZ BOGLÁRKA kémia BSc, 6. félév Eszterházy Károly Főiskola Természettudományi Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Forgó Péter
Főiskolai tanár, EKF TTK*

Esszenciális zsírsavak stabilitásának és lehetséges átalakulási folyamatainak vizsgálata

Kulcsszavak: hődegradáció; UV-degradáció; bomlástermék; lánctüredés; oxidáció

Dolgozatom témája az esszenciális zsírsavak stabilitásának vizsgálata hővel és UV-fénnyel szemben, a cél pedig olyan tejalapú édesipari termékek és szárazárak előállítása, melyek gazdagok ezen zsírsavakban. A vizsgált minták liofilizált tehén- és kecsketej, illetve alvadékok voltak.

A liofilizátumokat 24 órán keresztül 40, illetve 95°C-os hőkezelésnek, valamint 24 és 48 órán át tartó kevert hullámhosszú UV-fénnyel történő megvilágításnak vetettük alá. Referenciaként szobahőmérsékleten sötétben tartott mintákat használtunk.

A zsírok szerves oldószerkeleggyel való extrahálása és metanolban oldott KOH-dal történő hidrolitikus átszterezése után a tejtermékek zsírsavösszetételének meghatározását GC-MS technikával végeztük, így szimultán nyerhettünk minőségi és mennyiségi információt a standard oldatok kromatogramja, a tömegspektrumok és a TIC csúcs alatti területének elemzésével.

A hő- és fénykezelések által kiváltott degradáció közötti különbség abban mutatkozik meg, hogy utóbbinál nem az új bomlástermékek keletkezése dominál, hanem a fő alkotók egymásba való átalakulása. Tapasztalataink szerint hővel és fénnyel szemben is stabilnak mutatkozik a mirisztinsav. A vizsgált hőmérsékleti tartományban állandó értéket figyeltünk meg a sztearinsavnál is, viszont 48 órás megvilágítás után értéke csökken 1-2%-kal. Mind a hő-, mind a fénykezeléseket követően fogyás látható az olajsav mennyiségében (2-4 %-os csökkenés), míg a laurinsav és kaprinsav aránya minden esetben növekedett 1-2 %-kal.

A fő zsírsavkomponensek mellett vizsgálataink során megfigyeltük minor termékek keletkezését is. Legnagyobb mennyiségben hidrox- és oxo-származékok képződtek, de rövidláncú alkánok jelenlétét is észleltük.

Összegzésképp megállapítható, hogy az általunk vizsgált hőmérsékleti tartományban és UV-fény hatására is megkezdődik a zsírsavak degradációja és az oxidációs reakciók révén hidrox- és oxo-származékok, valamint lánctüredés során rövidláncú alkánok és zsírsavak keletkeznek.

KISS KRISZTINA Kémia BSc, 6. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:
 Mező Gábor
 tud. tanácsadó, ELTE TTK

Fág könyvtárból kiválasztott peptidek alkalmazása irányító molekulaként a célzott tumorterápiában

Kulcsszavak: peptidszintézis; kemoszelektív ligáció; peptid-daunomicin konjugátumok; vastagbél tumor; in vitro citosztázis

A vastagbélrák napjaink egyik leggyakoribb rákos megbetegedése. 2012-ben 1,4 millió új esetet regisztráltak világszerte.[1] Az esetszámok kimagaslóan magasak a közép-európai régióban. Magyarország a harmadik ebben a rangsorban. Ezért különösen fontosak a vastagbél daganatok gyógyítására irányuló kutatások. Kutatócsoportunkban az irányított tumorterápiával kapcsolatos kutatásokban kiemelt szerep jutott a gonadotropin releasing hormon (GnRH) és szomatostatin hormon peptideknek, mint irányító molekuláknak.[2] Az így előállított konjugátumok igen hatásosnak mutatkoztak HT-29 humán vastagbél tumoron mind in vitro, mind in vivo körülmények között.

A dolgozatom során két fág könyvtárból kiválasztott HT-29 vastagbél tumorra specifikus lineáris illetve ciklopeptid (VHLGYAT, c[CPIEDRPMC]) daunomicin konjugátumait kívántam előállítani és azok antitumor hatását vizsgálni.[3,4] A konjugátumok tumorelles hatását összehasonlítottam a kutatócsoport által korábban előállított hormon peptid – daunomicin konjugátumok hatásával, hogy lássuk vajon a fág könyvtárból kiválasztott peptidek megfelelő alternatívái lehetnek-e a hormon peptideknek, mint irányító molekuláknak. Elsőként a peptidhez aminosavak helyett keresztlül közvetlenül kapcsoltuk a daunorubicint oxim-kötéssel (Dau=Aoa-VHLGYAT-NH₂; Dau=Aoa-c[CPIEDRPMC]-NH₂), a többi variánsba a fent említett két spacer is beépítettük (Dau=Aoa-GFLG/LRRY-VHLGYAT-NH₂; Dau=Aoa-LRRY-c[CPIEDRPMC]-NH₂). A konjugátumokat HPLC-vel és tömegspektrometriával jellemeztük, citosztatikus hatásukat MTT teszt segítségével határoztuk meg, sejtbejutásukat pedig áramlási citometriával.

Az eredmények azt mutatják, hogy az így előállított konjugátumok, különösen a lineáris peptidszármazékok esetén hatékonyabban bejutnak a sejtekbe, mint a hormon peptidek, ugyanakkor tumorelles hatásuk kisebb, mint azoké. Ez valószínűleg azzal magyarázható, hogy a peptid hormon alapú irányító molekulák szerepe nem csak az irányító funkció, hanem önmagukban is van antitumor aktivitásuk. Ennek ellenére, azt mondhatjuk, hogy a fágkönyvtárból kiválasztott HT-29 sejtre specifikus peptidek alkalmasak hatóanyagok sejtbe juttatására, így az irányított tumorterápia céljára.

[1] http://www.wcrf.org/cancer_statistics/data_specific_cancers/colorectal_cancer_statistics.php

[2] E. Orbán, et al.; Amino acids, 41, 469-483 (2011)

[3] Y. Zhang, et al.; Journal of Biomolecular Screening, 12, 429-435 (2007)

[4] K. A. Kelly, et al.; Neoplasia, 5, 437-444 (2003)

DOMOKOS ANDRÁS vegyésszámérnök BSc, 6. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszámérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Balogh György Tibor

osztályvezető, címzetes egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt.

Dr. Riethmüller Eszter

kutató-fejlesztő, Richter Gedeon Nyrt.

Flavonoidok humán szérúm albuminhoz való kötődésének vizsgálata nagyhatékonyságú folyadékromatográfiás módszerrel.

Kulcsszavak: flavonoid; HPLC, human serum albumin,

A szájon át adagolt hatóanyagok a tápcsatornán keresztül felszívódva a véráramba kerülnek, ahol reverzibilisen kötődhetnek a vér plazmafehérjéihez. A gyógyszerhatóanyagok ezen fehérjék közül jellemzően a humán szérúm albuminnal (HSA) lépnek kölcsönhatásba. Mivel a célszövethez kizárólag a szabad gyógyszerforma képes eljutni, a molekulák plazmafehérje-kötődése befolyásolhatja a gyógyhatás kialakulását. Az albuminkötődés vizsgálatára számos különböző módszer áll rendelkezésre, melyek közül a legfontosabb általánosan is használt az egyensúlyi dialízis, ultrafiltrálás, ultracentrifugálás, spektroszkópiás és kromatográfiás technikák [1].

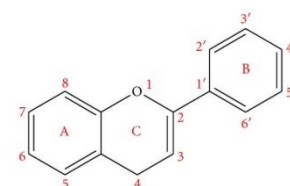
A flavonoidok a növényvilágban széles körben elterjedt, számos gyógyhatással rendelkező vegyületcsalád. A szervezetbe jutva a fent leírtak szerint e vegyületek is kötődhetnek a plazmafehérjékhez, de az ezzel foglalkozó irodalom nem egységes, illetve hiányosnak mondható [2].

Célunk egy olyan nagyhatékonyságú folyadékromatográfiás módszer fejlesztése volt, mellyel a különböző flavonoid vegyületek HSA-hoz való kötődése, valamint a molekulaszerkezet hatása a kötődés erősségére vizsgálható.

A mérésekhez királis állófázison immobilizált HSA oszlopot használtunk [3]. Az általunk fejlesztett módszert 10 különböző gyógyszerhatóanyag segítségével validáltuk. Jó korrelációt tapasztaltunk az általunk mért albuminkötődés, és az irodalmi adatok között [3]. A módszer segítségével 25 különböző flavonoid humán szérúm albumin kötődését vizsgáltuk.

Vizsgáltuk az egyes szerkezeti elemek hatását a kötődés erősségére. Ilyen szerkezeti elemek a hidroxil-csoportok száma az A, B, és C gyűrűben, ezek metiláltságának mértéke, az esetleges glikozid-csoportok pozíciója, és típusa, valamint a pirán gyűrűben található C2-C3 kötés telítetlensége (1.ábra).

Összességében sikerült egy nagy áteresztőképességű, reprodukálható, gyors módszert kifejleszteni flavonoidok humán szérúm albuminhoz való kötődésének kiterjedt vizsgálatára.



[1] Antonia Kotsiu, Christine Tesseromatis, Protein Binding of Drugs in Ming Hu, Xiaoling Li (ed.), Oral Bioavailability. John Wiley&Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, USA, 2011.

[2] Pandey és munkatársai, 2013.

[3] Valko és munkatársai, 2003.

SZABÓ ÉVA Biomérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Gergely Szilveszter
egyetemi docens, BME VBK

Hőhatásnak kitett emlőssejtes tápoldatporok vizsgálata infravörös spektroszkópai- és preparatív, lombikos minősítési módszerekkel

Kulcsszavak: mAb; CHO; sokváltozós adatelemzés; kísérlettervezés; PAT

A rekombináns fehérjék jelentős része olyan polipeptid, mely bonyolult poszttranszlációs módosításokat követően nyeri el aktív formáját. Az ilyen jellegű gyógyszerhatóanyagok termeltetése legtöbb esetben csak emlős sejtvonalakkal valósítható meg, melyek érzékenyek a környezeti változásokra. A biotechnológiai úton előállított hatóanyagok gyártása során összetett tápoldat biztosítja a sejtek számára a szükséges fiziológiás körülményeket. A felhasznált alapanyag kiválasztása és ellenőrzése különösen nagy odafigyelés igényel, hiszen egy rossz összetételű vagy nem megfelelő minőségű tápközeg jelentős anyagi veszteséget okozhat.

TDK munkám keretein belül kínai hörcsög petesejtekkel (CHO) végzett fermentációknál felhasznált tápoldatport vizsgáltam, hogyan reagál különböző időtartamú és hőmérsékletű hőhatásokra. Ezért egy előkísérletek eredményein nyugvó kísérlettervet (DoE) felhasználva hőkezelés-sorozatokat hajtottam végre. Az ilyen módon kezelt mintákat a látható (VIS) és közeli infravörös (NIR) tartományú diszperziós, valamint közeli és közép (analitikai) infravörös tartományú Fourier-transzformációs (FT-NIR/FT-IR) spektrofotométerekkel vizsgáltam a mintacsoportok közötti spektrális különbségek feltérképezése érdekében. Emellett lombikos kísérletsorozatot hajtottam végre, hogy ellenőrizsem, milyen hatásokat gyakorol a hőkezelés a CHO sejtek kezdeti növekedési sebességére és a termelt rekombináns fehérje mennyiségére a mintákból készített tápoldatokban. Az így kapott eredményeket korreláltattam a matematikailag kezelt VIS és NIR spektrumokkal a hőkezelés okozta változásra irányuló mennyiségi kalibráció létrehozása érdekében.

Az eredményeink alapján a vizsgált tápoldatpor erősebb hőhatásokra spektroszkópiusan kimutatható változásokat szenved, melyek igazolhatóan hatással vannak a sejttenyészet kimenetelére. Jövőbeli terveink között szerepel, hogy az egyes komponensek változását specifikusan követő referencia módszerekkel (pl. NMR spektroszkópia) is elvégezzük az elemzéseket.

KOLTAI ANDRÁS Vegyész MSc. MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:
Perczel András
egyetemi tanár, ELTE TTK

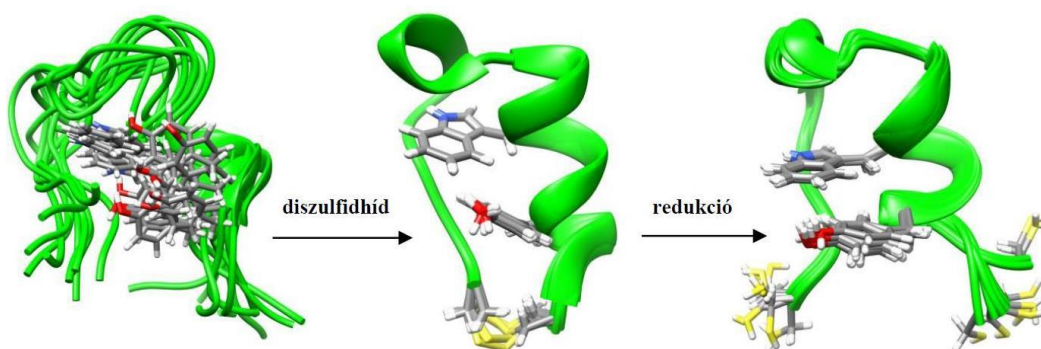
Kis rendszer – nagy kérdés

Kulcsszavak: bioNMR, fehérje, peptid, szerkezet, dinamika

A minifehérjék néhányszor tíz aminosavból álló polipeptidek, melyeket fehérjének nevezünk, ugyanis jól definiált harmadlagos szerkezettel rendelkeznek, amelyet ráadásul vizes közegben spontán módon felvesznek; így ezeken a kicsi és egyszerű modellrendszereken minden olyan szerkezeti, stabilitási és dinamikai jelenség megfigyelhető és tanulmányozható, melyek a nagy fehérjék működését is meghatározzák.

A világ legkisebb, mindösszesen 20 aminosavból álló minifehérjéje a Tc5b, melynek harmadlagos szerkezetét Trp-kalitkának nevezzük. Mivel a Tc5b szoros szerkezeti rokonságban áll a kettes típusú diabétesz kezelésében ma is gyógyszerként alkalmazott Exendin-4 fehérjével, az ún. Trp-kalitka minifehérjék szerkezeti tökéletesítése komoly gyakorlati jelentőséggel bír. Az ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratóriumában számos lehetőséget vizsgáltak már meg a Trp-kalitka stabilizálására.

Munkám során Trp-kalitka modellfehérjék szerkezetét igyekszünk diszulfidhíd beépítésével stabilizálni. Ezeket a molekulákat különféle NMR technikákkal vizsgáltam. Egy-, két- és háromdimenziós, homo-, és heteronukleáris mérések alapján meghatároztam a vizsgált molekulák atomi felbontású térszerkezetét, feltérképeztem a különböző időskálán megvalósuló belső mozgásaikat, valamint a szerkezetvizsgálatból levont következtetéseket DOSY mérések alapján meghatározott diffúzióállandókkal támasztottam alá.



Mivel a modellrendszerünkbe épített diszulfidhíd redukciója során igen különös jelenségeket figyeltünk meg, fő célkitűzéssé vált a redukció vizsgálata, melynek eredményei segítségünkre vannak a szerkezeti jelenségek magyarázatában is.

GORGOSILITS KATA KRISZTINA Vegyésmérnöki BSc, 7. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Bocsi Róbert
PhD hallgató, PE MK
Rippelné Dr. Pethő Dóra
egyetemi adjunktus, PE MK

Különböző paraméterek hatása a mikroalga aminosav tartalmára

Kulcsszavak: mikroalga; aminosav; hidrolízis; spektroszkópia; táplálék kiegészítő

A mikroalgák jelentős szerepet játszottak az atmoszféra kialakításában, Földünk oxigénkészletének mintegy 90 %-át ma is az algák termelik. Emellett egyre gyakrabban alkalmazzák őket táplálék kiegészítőként, hiszen nagyon sok tápanyagot tartalmaznak, melyek nélkülözhetetlenek számunkra (esszenciális zsírsavak, aminosavak, vitaminok, ásványok, flavonoidok). Különböző algafajokban más-más ezen tápanyagok aránya, mennyiségüket számos tényező befolyásolja.

Munkám során különböző tápoldattal kezelt különféle algafajok aminosav tartalmát vizsgáltam. Ehhez a leszüretelt algákat szárítás és őrlés után savas hidrolízisnek vetettem alá, hogy a fehérjetartalma aminosavakra bomoljon. Ezután megmértem az aminosav tartalmakat a különböző mintában, így meg tudtam vizsgálni a különböző tápoldatok és szüretelési időpontok aminosav-tartalomra való hatását.

BARTA MÁTÉ GÁBOR Biomérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	NYULI GÁBOR TAMÁS Biomérnök BSc, 7. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar
--	---

Témavezető:
Dr. Nemestóthy Nándor
egyetemi docens, PE MK

Poli-imid gázszeparációs membrán permeabilitásának vizsgálata kén-hidrogénes roncsolás előtt és után

Kulcsszavak: roncsolás, permeáció, biogáz, földgáz

A kutatásunkhoz kapilláris szerkezetű, pórusmentes poliimid (PI) membránt használtunk kétszálal modulba építve, 6-8 cm hosszú szálakkal. A modulhoz egy 0,3 dm³ belső térfogatú, nyomásálló, termosztált acéltartályt csatlakoztattunk acélcsővek segítségével. A membránmodul és a tartály közé nyomáscsökkentő szelepet helyeztünk a pontosabb szabályozhatóság érdekében. A szelep előtt és után nyomásszenzorok voltak, amik számítógépre vitték az adatokat. Az adatokat LabVIEW segítségével regisztráltuk, majd Excelben értékeltük ki őket. Egyszerre három tartályon és modulon folytak a mérések a gyorsabb munka érdekében. A mérésekhez CO₂-t, H₂-t, CH₄-t és N₂-t használtunk gyakorlati jelentőségük miatt. Ezen gázok fluxusát mértük először a sértetlen, majd a H₂S-el roncsolt membránokon.

A kutatás során a tartályokba H₂-ből 10 bar-t, a másik három gázból 20 bar-t töltöttünk, melyeket a nyomáscsökkentő szelep segítségével 4 bar-ra redukáltunk. A mérések közben nyomásszenzorok 10 mp-nként egy-egy feszültségértéket regisztráltak, melyeket megfelelő kalibrálás után nyomásra tudtunk átszámolni, ezekből az értékekből számítottuk később a keresett adatokat. (Az átszámításhoz szükséges egyenletet is mérésekkel határoztuk meg.)

A laborban a nagy nyomások miatt ügyeltünk a megfelelő óvintézkedésekre és a felszerelés biztonságos használatára. A kénhidrogénes roncsolást elszívófülke alatt végeztük, egy 1 dm³ térfogatú, légmentesen lezárt reaktorban, melybe a kénhidrogént egy septumon át fecskendővel juttattuk be. A membránokat különböző H₂S koncentráció mellett roncsoltuk és különböző időközönként vizsgáltuk a fluxus változását.

A kiértékelés során az egységnyi idő alatt bekövetkezett nyomáscsökkenésből kiszámoltuk a membránon átjutó gáz térfogatáramát, majd ezt a membrán felületével osztva megkaptuk a fluxust, amit grafikonon ábrázoltunk.

A különböző gázok fluxusának eltérése teszi lehetővé a szétválasztást, ezek az eltérések jól látszanak a grafikonokon, és a különböző roncsolások hatására különbözőképpen változtak.

CZAKÓ ÉVA Vegyész MSc, 1. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	KRAM NASSIMA DOROTTYA Vegyész MSc, 1. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar
---	---

Témavezető:
Mező Gábor
tud. tanácsadó, ELTE TTK

Tuftsin és tuftsin antagonisták alkalmazása irányított tumorterápiára alkalmas konjugátumokban

Kulcsszavak: rák; leukémia; peptid; daunomicin

Napjainkban a világon az egyik vezető halálozási oknak a rákos megbetegedéseket tekintik. Mivel rengeteg típusa van ennek a kórnak, ezért nincs rá általánosan alkalmazható gyógymód. Ellenben számos módszer létezik a kezelésére, melyeknek megvannak a maguk előnyei és hátrányai is. A cél viszont mindig ugyanaz; a lehető legszelektívebben elpusztítani a rákos sejteket. Erre a küzdelemre úgy tűnik, hogy nagyon ígéretes módszer az irányított tumorterápia, mely során az antitumor drogot egy irányító molekulára kapcsoljuk (pl. peptidre) ami specifikusan kötődik a tumorsejteken túlexpresszált receptorokhoz. Így a hatóanyag szelektíven a rákos sejtbe juttatható.

A tudományos diákköri munkánk során nyolc, az irányított tumorterápiára potenciálisan alkalmas peptid-hatóanyag konjugátumot állítottunk elő. Irányító molekulaként tuftsin antagonistát és tuftsint, egy négy aminosavból álló természetes tetrapeptidet (vagy annak származékait) alkalmaztuk, melyhez aminooxiecetsavon keresztül oxim-kötéssel kapcsoltuk a rákellenes hatóanyagot, ami jelen esetben a daunomicin volt. A nyolc peptid – hatóanyag konjugátum segítségével vizsgálni kívántuk, hogy a tuftsin/tuftsin antagonisták kópiák száma a peptidláncban, illetve egy enzimlabilis spacer beépítése az irányító molekula és a hatóanyag közé hogyan befolyásolja a biológiai aktivitást.

A peptideket szilárdfázisú peptidszintézissel állítottuk elő, majd a daunomicint oldatban kemoselektív ligációs eljárással kötöttük az aminooxiacetyl-csoportot tartalmazó peptidhez. A konjugátumokat RP-HPLC módszerrel tisztítottuk, tisztaságukat analitikai HPLC-vel ellenőriztük, majd tömegspektrumukkal jellemeztük azokat.

Az elkészített konjugátumok in vitro citosztázisát HL-60 leukémia sejtvonalon vizsgáltuk, melyből kiderült, hogy azok a konjugátumok hatásosabbak a többinél melyekben egy GFLG enzim labilis spacer is található. Annak viszont nincs jelentősége, hogy a tuftsin/tuftsin antagonisták hány kópiában található meg a peptidláncban.

A leghatásosabb konjugátumnak a Dau=Aoa-GFLGTKPPR-OH bizonyult, így a későbbiekben ezt a vegyületet még érdemes további biológiai vizsgálatoknak alávetni és hatásosságát akár in vivo vizsgálatok során tesztelni.

DÁVID BARNABÁS Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Balogh György Tibor

osztályvezető, Richter Gedeon Nyrt., 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21. Szintézistámogató

Laboratórium

Új szövetspecifikus in vitro permeabilitási modell kidolgozása gyógyszerhatóanyagok eloszlásának előrejelzésére

Kulcsszavak: gyógyszerkutatás; farmakokinetika; PAMPA; foszfolipid; ADME

A gyógyszerkutatásban az elmúlt húsz évben bekövetkezett stratégiaváltásnak köszönhetően egyre nagyobb szerephez jutott a hatóanyagjelölt vegyületek fizikai-kémiai jellemzése. Célja az egyes molekulák oldhatósági, lipofilitási, ionizációs, továbbá a permeabilitási sajátosságainak megismerése. A felsorolt tulajdonságok ismeretében lehetőségünk van a hatóanyagjelölt vegyületek szervezetbeni sorsának előrejelzésére. Az egyes szövetekre/szervekre vonatkoztatva a hatóanyagok eloszlása nem egyenletes. Ennél fogva a vegyület fizikai-kémiai tulajdonságai, továbbá az egyes szövetek sajátosságai meghatározzák, hogy egyes szövetekben nagyobb mennyiségben halmozódhat fel a hatóanyag, mint máshol. A szöveten belüli akkumuláció toxikus hatás kialakulásának lehet a kiindulópontja.

A gyógyszerek felszívódását, sejtmembránon való átjutását legjobban a permeabilitással lehet leírni. A gyógyszerkutatásban a hatóanyag felszívódásának előrejelzésére egyik általánosan alkalmazott nem-sejtes alapú in vitro vizsgálat a PAMPA (Parallel artificial membrane permeability assay) permeabilitás modell. Munkánk során vizsgálataink kiterjednek a vér-agy gát, a máj, a szív, a tüdő, és a vese szöveti megoszlásának modellezésére PAMPA módszerrel.

Biokémia, biotechnológia 3

PÁLINKÁS HAJNALKA LAURA Biomérnöki MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Vértessy G. Beáta
 egyetemi tanár, BME VBK

A genom integritását biztosító mechanizmusok vizsgálata humán sejtvonalakban helyspecifikus biallélikus génkiütés technológiával

Kulcsszavak: genomi integritás; dUTPáz; génkiütés; cink-ujj nukleáz

Élő szervezetekben a genomi integritás megőrzését számos élettani folyamat látja el. Kiemelt jelentőséggel bír a dUTPáz enzim, ami a dUTP-t dUMP-vé és pirofoszfáttá hidrolizálja, biztosítva ezzel a sejtekben az alacsony dUTP/dTTP arányt, ezáltal a genom uracilmentességét. Az enzim esszenciálisnak bizonyult számos organizmusban (pl.: *Escherichia coli*-ban, *Saccharomyces cerevisiae*-ben, *Caenorhabditis elegans*-ban, *Arabidopsis thaliana*-ban), ahol a dUTPáz hiánya sejthalálhoz vezetett. A dUTPáz hiánya által kiváltott timin-mentes sejthalál mechanizmusa kevésbé ismert, jóllehet ennek indukálása a klinikumban széles körben elterjedt: a rákellenes szerek közel egyharmada ezen útvonal érintésével fejt ki hatását (fluoropirimidinek, methotrexát és származékai). A dUTPáz túlműködése részleges rezisztenciát okoz a fluoropirimidinekkel szemben, hiánya pedig érzékenyít, ennél fogva különösen fontos a fehérje működésének és szerepének alaposabb megismerése. A gén szerepét emlős rendszerekben eddig csupán csendesítéssel vizsgálták, génkiütést még nem írtak le.

Kutatási célunk a dUTPáz gén kiütése által okozott sejthalál mechanizmus vizsgálata humán sejtvonalon, ezáltal a kemoterápiás ágensekkel szembeni rezisztencia jobb megértése. Ehhez egy nemrég kifejlesztett, úttörő módszert használunk, mely a tetszőleges DNS szekvenciát felismerő cink-ujj nukleázok (ZFN-ek) révén mindkét allélon lehetővé teszi a helyspecifikus genomi manipulációkat (tetszőleges gének kiütése, ill. menekítő konstruktok bevitele). Esszenciális gén (a dUTPáz várhatóan emlős rendszerben is ilyen) kiütését azonban meg kell előznie a fehérje kondicionális menekítése, mert enélkül nem lehetne életképes kiütött sejtvonalat létrehozni. A menekítéshez a genom egy másik ismert pontjára egy olyan exogén floxolt konstrukciót építettünk be, ami a dUTPáz sejtmagi és mitokondriális izoformáját egyaránt biztosítja. Ez az exogén dUTPáz forrás azonban tetszőleges időpontban megszüntethető egy indukálható aktivitású Cre rekombinááz segítségével. A menekítő kazetta ellenőrzését követően sikeresen kiütöttük az endogén dUTPázt.

A létrehozott indukálható dUTPáz kiütött sejtvonal lehetővé teszi a dUTPáz genomi integritás megőrzésében és a klinikai terápiában játszott szerepének jobb megértését, a timin-mentes sejthalál útvonal eddig nem tanulmányozott részleteinek megismerését. Az általunk kifejlesztett kombinált génkiütési/menekítési stratégia pedig alkalmas lehet egyéb potenciálisan esszenciális gének vizsgálatára is.

FRANK TAMARA Biomérnöki alapszak BSc, 7. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Kovács Tamás
vezérigazgató-helyettes, Enviroinvest Zrt.

Bakteriofágterápiás növényvédő szerek

Kulcsszavak: Xanthomonas; fágterápia; bakteriofág; növénybetegség;

Egyes bakteriális növénybetegségek ellen jelenleg nem rendelkezünk hatékony vegyszeres vagy biológiai védekezési eljárással. Az almafélék tűzelhalásos betegségét okozó *Erwinia amylovora* az alma-, körte- és birs ültetvényekben okoz jelentős gazdasági károkat Európában és az USA-ban. A közelmúltig e betegségnek nem volt hatékony ellenszere. A diófák egyik leggyakoribb betegsége a baktériumos levél- és gyümölcsfoltosság, melyet a *Xanthomonas arboricola* pv. *juglandis* baktérium okoz. A betegség az egész világon komoly károkat okoz a diófákban, így nagy termés kiesést jelent a diósgazdáknak. E betegségnek jelenleg nincs hatásos ellenszere. Új, alternatív gyógymódot jelenthet a fágterápia, melynek lényege, hogy a kórokozó baktériumot a rá specifikus bakteriofággal fertőzzük meg, ezzel visszaszorítva a gyümölcsfák nagymértékű károsodását. Végső cél, hogy olyan hatékony fágterápiás készítményt tudjunk előállítani, mely a gazdák számára is elérhető és széles körben alkalmazható. Az *E. amylovora* ellen 2012-ben Magyarországon (egy hazai fejlesztésnek köszönhetően) forgalomba került az ERWIPHAGE márkanévű fágterápiás növényvédő szer. Jelen dolgozatban az e készítmény felhasználásával kapcsolatos tapasztalatokat vizsgálom. Dolgozatom másik, kísérletes részében a *X. arboricola* pv. *juglandis* - ellenes fágterápiás növényvédő szer kutatásának, fejlesztésének a részlépéseit mutatom be. Sikeresen izoláltam és vizsgáltam olyan bakteriofágot, amely több *Xanthomonas arboricola* pv. *juglandis* törzset is képes megfertőzni. A különböző baktérium törzseknél megfigyeltem, hogy a fág milyen mértékben szorítja vissza azok szaporodását. A fertőzés lefolyását összehasonlítottam más, korábban izolált fágok hatásával is. Vizsgálataim alapján a bakteriofágterápia hatékony megoldást nyújthat azon bakteriális növénypatogén kórokozók elleni küzdelemben, melyek ellen jelenleg nem rendelkezünk hatásos ellenszerrel.

BALOGH RIA KATALIN Vegyész MSc, 3. félév Szegei Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Gyurcsik Béla
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Jancsó Attila
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Egy transzkripció aktivátor fehérje lehetséges alkalmazása toxikus fémionok szelektív kimutatásában

Kulcsszavak: fémszabályzó fehérje; fluoreszcens fehérje; fehérje tisztítás; fémion-érzékelés; CD spektroszkópia

Az egyértelműen toxikus sajátosságú átmenetifém-ionok mellett több olyan 3d-fémiont ismerünk, melyek elengedhetetlenek a sejtek normális működéséhez, azonban nagyobb mennyiségben ezek is káros hatásúak. A toxikus fémionok szelektív megkötésére és eltávolítására alkalmas molekulák, illetve érzékeny detektálási módszerek kifejlesztése potenciális környezetvédelmi és gyógyászati alkalmazási lehetőségeik miatt fontos feladat.

A fémionokat szelektíven megkötő molekulák tervezését a bakteriális fémion-szabályzó mechanizmusok jobb megértése segítheti. A baktériumokban a fémionok optimális szintjének fenntartásában fontos szerepet játszanak a transzkripció szintjén működő ún. fémszabályzó fehérjék. A dimer MerR fehérjék szerkezete a családon belül nagyon hasonló, közöttük jelentősebb eltérés csak a C-terminális végen található fémion-kötő szakasz aminosav-szekvenciájában figyelhető meg. Ez a különbség jelentős szerepet játszik a megfelelő fémion-szelektivitás elérésében. A transzkripció szabályozása aktivációs mechanizmussal zajlik. Ennek lényege, hogy a fémion-koordináció következtében megváltozik a DNS-hez kötődő dimer fehérje konformációja, és ennek következtében a DNS szerkezete is. Ennek hatására az RNS polimeráz enzim működésbe lép, ami a feleslegben lévő fémionok eltávolításához szükséges fehérjék termelődéséhez vezet.

Munkám során rekombináns DNS-technológia segítségével olyan baktériumokat alakítottam ki, melyekben ezt a mechanizmust kihasználva, a megfelelő fémion jelenlétében zöld fluoreszcens fehérje fejeződik ki. Ez lehetőséget teremt a fémionok érzékeny és szelektív kimutatására. A MerR családba tartozó CueR (Cu efflux Regulator) fehérje több baktériumtörzsben is a Cu^I-ion koncentrációját szabályozza. A fehérje transzkripció választ kizárólag egyértékű átmenetifém-ionok (Cu^I, Ag^I és Au^I) hatására ad. A szelektivitás oka lehet a különböző fémionok eltérő koordinációja vagy a megkötődésük hatására bekövetkező eltérő konformáció-változás.

A CueR fémion-kötő sajátosságainak alaposabb megismerése céljából a fehérje megfelelő tisztaságban történő előállítása szükséges. Ehhez a CueR fehérje E.coli BL21 sejtekben történő kifejezése utáni tisztításának optimalizálását végeztem el, ami különleges mintaelőkészítési és többféle kromatográfiás módszer kombinálását igényelte. A fehérje tisztaságát SDS-poliakrilamid gélelektroforézissel és nano-ESI-MS módszerrel igazoltuk, szerkezetét és fémkötő tulajdonságait pedig CD spektroszkópiával vizsgáltuk.

TIHANYI GERGELY Vegyésszmérnök BSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Vértessy G. Beáta
egyetemi tanár, BME VBK

Egy uracil szenzor in vitro és in vivo alkalmazási lehetőségei

Kulcsszavak: uracilkvantifikálás; ELISA; immunocitokémia; genom integritás; kemoterápiás ágens

A DNS-be számos hiba kerülhet különböző mechanizmusok szerint. Egy gyakran megjelenő hiba az uracil, egy nitrogéntartalmú heterociklusos bázis, mely az RNS molekulák természetes alkotóeleme. Az uracil megjelenése történhet a DNS replikáció során beépüléssel, mivel szerkezetileg igen hasonló a timinhez, valamint a citozin spontán oxidatív dezaminálódása következtében. Az élőlényekben több enzimes család szakosodott e hibák korrekciójára, melyek közül az emberben a legaktívabb – az uracil-DNS-glikoziláz családhoz tartozó – UNG enzim.

Laboratóriumunkban létrehoztak egy olyan módosított UNG fehérjét, amely képes specifikusan megkötődni az uracilhoz, ám nem vágja ki azt. Ezzel a fehérjével képesek vagyunk kvantitatívan meghatározni a DNS-beli uracil mennyiségét. Ez orvosi biológiai vonatkozásban is különösen fontos, hiszen a mai kemoterápiás szerek jelentős része a de novo timidilát szintézis gátlásán keresztül hat. Kutatásom célja egy új, érzékeny és könnyen alkalmazható, kvantitatív uracil-meghatározási módszer kifejlesztése és optimalizálása volt. A mérés ELISA módszeren alapszik, a DNS-beli uracilhoz kötött UNG fehérje mennyiségét határozza meg, antitestekhez kötött enzimreakciók segítségével. Méréseim során kemoterápiás drogokkal (5FdUR) kezelt és kezeletlen egér embrionális fibroblaszt és Escherichia coli sejtek DNS-ét használtam fel. A megfelelő kezelési körülmények tesztelése és a sejtek DNS-ének optimális izolálásának kidolgozása szintén a feladatomból volt. Az in vitro kvantifikálás mellett, ugyanezen módosított UNG és egy piros fluoreszcens fehérje (DsRed) fúziójával létrehozott konstrukcióval, in vivo vizsgálatokat is végeztem. Ezek során egér embrionális fibroblaszt sejtekben próbáltam mesterségesen bejuttatott magas uraciltartalmú extrakromoszómális DNS-t specifikusan jelölni, immunocitokémiai módszerekkel. A festés detektálásához nagy felbontású konfokális mikroszkópiát használtam.

A kutatásaim során sikeresen kifejlesztettem egy ELISA módszert, mely alkalmas nagy érzékenységgel, számos organizmusból kinyert DNS-minták uraciltartalmának meghatározására. Továbbá a továbbfejlesztett uracil szenzorral sikerült in vivo uracilt jelölnöm egér embrionális fibroblasztokban. Reményeim szerint a módszer egyszerűsége és reprodukálhatósága miatt a későbbiekben diagnosztikai célokra is felhasználható lesz, annak gyors eldöntésére, hogy a beteg mennyire érzékenyen reagál azokra a kemoterápiás szerekre, melyek ezt az anyagcsere-útvonalat érintik.

SÜDY ÁGNES biomérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:

Dr. Góczy Elen

tudományos tanácsadó, csoportvezető, NAIK-Mezőgazdasági Biotechnológiai Kutatóintézet

Össejt specifikus markerek kimutatása madár primordiális csírasejtekben

Kulcsszavak: házityúk; embrió; génexpresszió; qPCR; RNS

A házityúk (*Gallus gallus domesticus*) kiváló alanya a fejlődésbiológiai és össejt kutatásoknak elsősorban az embriók könnyű hozzáférhetősége miatt. A primordiális csírasejtek (PG sejtek, ősvasejtek) a csíravonal prekursorai, melyek a későbbiekben érett pete-, illetve hímivasejtekké differenciálódnak. Az embrió sejteji közül egyedül az ősvasejtek képesek genetikai információjukat továbbadni a következő generációnak. A madarak fejlődésének különlegessége, hogy ősvasejtheik – az emlősökkel ellentétben – a vérkeringést használják, hogy a majdani ivarszervek területére vándoroljanak. E jelenséget kihasználva két napos házityúk embriók dorzális aortájából őscsírasejtek izolálhatóak és in vitro sejtenyésztésben hosszabb ideig fenntarthatóak.

TDK munkám során embrionális össejtekre jellemző markereket vizsgáltunk. Az össejt specifikus transzkripciós faktorokra specifikus primereket terveztem, majd két napos házityúk embriókon teszteltem azok expresszióját. Ezt követően a primereket a fent említett módszerrel izolált PG sejtenyésztés expressziós profiljának vizsgálatára használtam.

Emellett kilenc napos embriók jobb és bal oldali ivarszervkezdeményeiben is megnéztem a markergének expresszióját. Jelentős aszimmetria látható mindkét nem esetében, de a nőstények ivarszervének jobb és bal oldala között, az OCT4 és VASA expressziójában szignifikánsan nagyobb különbség figyelhető meg, mint a hímek esetében.

További kutatásaink során a miRNS-ek primordiális csírasejtek differenciálódásában betöltött szerepét szeretnénk vizsgálni, illetve feltérképeznénk a ivarszervkezdeményekben az össejt specifikus miRNS-ek expresszióját, és a kapott mintázat esetleges különbségeit a két oldal között.

Az ősvasejtekre jellemző expressziós mintázat segítségével megfigyelhető, hogy történik-e változás a sejtekben huzamosabb idejű fenntartás, illetve fagyasztás során. A szerzett ismeretek felhasználhatóak az őshonos baromfifajtáink ősvasejtheinek differenciálatlan állapotban való fenntartására irányuló kutatásokban, melyek távlati célja a madarak genetikai állományának ex situ megőrzésére alkalmas módszer kifejlesztése.

CZOBOR ÁDÁM Biomérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	HAJDINÁK PÉTER Biomérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
---	--

Témavezető:
 Dr. Szarka András
 egyetemi docens, BME VBK

Reaktív oxigénvegyületek a növényvédelemben

Kulcsszavak: harpin fehérjék; biotikus stressz; aszkorbinsav; C-vitamin; oxidatív stressz

Biotikus stressz során az egyik legkorábbi sejtválasz az úgynevezett oxidatív kitörés, amely a reaktív oxigénvegyületek szintjének hirtelen emelkedésével jár. Az oxidatív kitörés során keletkező reaktív oxigénvegyületek védelmi szerepe kettős. Akkumulációjuk nagy reaktivitásuknak köszönhetően közvetlenül károsítja a patogént, ezen felül szignálmolekulaként is funkcionálnak, ezáltal részt vehetnek további védekező mechanizmusok beindításában.

A reaktív oxigénvegyületek azonban nem csak a patogént, hanem a termelő sejtet is károsíthatják. Az oxidatív károsodások kivédésére a növényi sejtek enzimatis és nem enzimatis antioxidánsokat termelnek. A nem enzimatis antioxidánsok közül az egyik legfontosabb az aszkorbinsav, amely közvetlenül, illetve aszkorbát-peroxidázok elektrondonorjaként is részt vehet a reaktív oxigénvegyületek redukciójában.

Munkánk során *Pseudomonas syringae* eredetű, elicitor hatású harpin fehérjével biotikus stresszt váltottunk ki *Arabidopsis thaliana* szuszpenziós sejt kultúrákban, majd vizsgáltuk, hogyan változik a sejtekben az aszkorbinsav mennyisége, redox státusza, illetve a szintézisében és regenerációjában résztvevő egyes kulcsenzimek aktivitása és expressziója. Vizsgáltuk továbbá a mitokondrium oxidatív károsodásának megelőzésében kiemelt szerepet játszó alternatív oxidáz enzim génexpressziójának változásait.

A kísérleteink során kapott adatok segíthetnek a növényi válaszreakciók megértésében, ezen keresztül pedig a biopeszticidek hatékonyságának növelésében, amely lehetővé teheti egyes manapság is használatos környezetre káros permetszerek természetes, környezetre ártalmatlan anyagokra való cseréjét.

KÓHEGYI BIANKA KITTI Biomérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Vértessy G. Beáta
 egyetemi tanár, BME VBK

Staphylococcus aureus patogenitási szigeteinek kifejeződését szabályozó fehérje-DNS és fehérje-fehérje kölcsönhatás vizsgálata

Kulcsszavak: fehérjetudomány; genetikai mérnökség, molekuláris kapcsoló; Stl represszor fehérje

A baktériumok evolúciójában fontos szerep jutott a horizontális géntranszfernek, így genomjuk egy jelentős részét mobilis genetikai elemek teszik ki. Ezek megismerésében fontos szerepet játszik a Staphylococcus aureus patogenitási szigetek (Staphylococcus aureus pathogenicity island – SaPI) kutatása. A SaPI elemek gyakran hordoznak virulenciáért és az antibakteriális rezisztenciáért felelős géneket, így ezek tanulmányozása közvetlen és kiemelt orvosi biológiai jelentőséggel bír.

Ezen genetikai elemek és a temperált bakteriofágok között számos hasonlóság figyelhető meg, akár a szerkezeti sajátosságokat, akár a működésüket tekintjük. A SaPI a genomba történő integrálódását követően, egy represszor fehérje, az Stl hatására egészen addig a gazdasejt kromoszómájában marad, míg egy úgynevezett helper fág meg nem fertőzi a baktériumot. A fág dUTPáz enzime komplexet képez az Stl fehérjével, megszűnik a represszió, így a SaPI kivágódik a genomból, replikálódik, majd a helper fág fehérjeburkába csomagolódik (molekuláris kalózkodás), aminek segítségével el tud jutni másik baktériumhoz [1].

Kutatásom célja az volt, hogy molekuláris szinten megismerjem egy ilyen patogenitási szigetet szabályozó Stl fehérje szerkezetét és működését. Eddig nem ismert egyetlen Stl fehérje térszerkezet sem, de azt kutatócsoportunk már közölte, hogy az Stl a dUTPáz aktivitását jelentősen csökkenti [2]. A vizsgálatokhoz a génmérnökség eszköztára nyújtotta lehetőségeket kihasználva különböző mutációkat hoztunk létre a fehérjében, és ezeket tanulmányoztuk. Először eltávolítottuk a fehérje feltételezett DNS-kötő doménjét, majd az így keletkezett fehérjének vizsgáltuk a DNS-sel, illetve a fehérjével (dUTPáz) való kölcsönhatását, amihez elsősorban különböző elektroforetikus módszereket, illetve enzimaktivitás mérést alkalmaztunk. Ezt követően pontmutáns fehérjék esetében is megfigyeltük, hogyan változik a fehérje DNS-sel, illetve az enzimmel való kölcsönhatása.

Vizsgálataink eredményeként azonosítottuk a fehérje DNS-kötő doménjét, illetve valószínűsítettük a hélix-turn-hélix motívum helyzetét.

Források:

[1] R. P. Novick et al. "The phage-related chromosomal islands of Gram-positive bacteria," Nat. Rev. Microbiol., 2010.

[2] J. E. Szabó et al. "Highly potent dUTPase inhibition by a bacterial repressor protein reveals a novel mechanism for gene expression control," Nucleic Acids Res., 2014.

DOBROTKA PAULA Biomérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Vértessy G. Beáta
egyetemi tanár, BME VBK

Szabó Judit Eszter
tudományos segéd munkatárs, BME VBK

Staphylococcus aureus transzkripció faktor Mycobacterium tuberculosis dUTPáz-ra gyakorolt gátló hatásának mechanizmusa

Kulcsszavak: enzimkinetika, inhibíció, stopped-flow, enzimaktivitás, fluoreszcencia

A genom integritás szabályozásában résztvevő fehérjék gyakori célpontként szolgálnak a különböző megbetegedések kezelésére alkalmazott gyógyszerek tervezésében. Ilyen célpont lehet a sejt számára esszenciális dUTPáz enzim is, melynek specifikus gátlása számos kutatás tárgyát képezi.

Az irodalomban közölt eredmények alapján a Staphylococcus aureus $\Phi 11$ fággal történő fertőzése során, a fág dUTPáz enzime képes kölcsönhatásba lépni egy, a S. aureus-ban található, Stl nevű represszor fehérjével. Csoportunk a dUTPáz és az Stl között kialakuló kölcsönhatás vizsgálatába kezdett, mely során kimutatta, hogy az Stl gátolja a $\Phi 11$ dUTPáz enzim aktivitását. Az is kiderült, hogy az Stl nem csupán a $\Phi 11$ dUTPáz-t képes gátolni, hanem más dUTPáz-okat is, többek között a Mycobacterium tuberculosis-ban (MTB) található dUTPáz-t. A gátlás fajspecifikus elemeinek feltárása fontos információkkal szolgálhat további inhibitorok tervezéséhez. Az egyes dUTPáz-ok és az Stl fehérje közötti kölcsönhatás jellemzése megalapozhatja az Stl fehérje dUTPáz inhibitoroként történő in vivo használatát. Így a dUTPáz gátlás in vivo hatásai könnyen vizsgálhatóvá válhatnak.

Munkám célja az Stl és a Mycobacterium tuberculosis dUTPáz közötti kölcsönhatás in vitro módszerekkel történő jellemzése volt.

Megállapítottam, hogy Stl jelenlétében az MTB dUTPáz aktivitásában erőteljes csökkenés mutatható ki, mely a $\Phi 11$ dUTPáz-tól eltérően nem 100 %-os. Meghatároztam, hogy hasonlóan a $\Phi 11$ dUTPáz és az Stl kölcsönhatásához, az Stl és az MTB dUTPáz között is egy lassú, de erős kötődésen keresztül megvalósuló inhibíció jön létre. Ebben a speciális esetben nem teljesülnek a steady-state feltételek, ezért a kölcsönhatás behatóbb vizsgálatához triptofán fluoreszcencián alapuló tranziens kinetikai módszereket alkalmaztam. Ehhez egy, az aktív helyén triptofán mutációt tartalmazó MTB dUTPáz variánst használtam. A vad típusú és a triptofánt tartalmazó dUTPáz variáns Stl-el kialakított kölcsönhatásában nem tapasztaltam eltérést. Fluoriméter, valamint stopped-flow berendezések segítségével megállapítottam, hogy az Stl jelenléte a szubsztrát megkötésével interferál, de a $\Phi 11$ dUTPáz-nál megfigyeltektől eltérően.

Munkám során jellemeztem az Stl MTB dUTPáz-ra gyakorolt gátlásának főbb aspektusait, mely megalapozta, hogy az Stl segítségével in vivo, Mycobacterium smegmatis-ban is vizsgálni tudjuk a dUTPáz gátlás hatását a DNS anyagcserére és a DNS uracil tartalmára.

ESSŐ KATALIN Biomérnök BSc, 5. félév Budapesti Corvinus Egyetem Élelmiszertudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Nguyen Duc Quang
egyetemi docens, BCE ÉTK

Müller Judit

PhD hallgató, Richter Gedeon Nyrt.

Dr. Balogh György Tibor
egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt.

Szövetspecifikus in vitro permeabilitási modell kidolgozása

Kulcsszavak: vér-agy gát;PAMPA

A gyógyszerkutatás során fontos, hogy már a korai fázisban előrejelezzük a gyógyszerjelölt vegyületek felszívódását. A hatóanyagok felszívódásának alapja a sejtmembránon való átjutás, melyet ezen vegyületek permeabilitásával jellemezhetünk. A sejtmembrán gátat képez az exogén molekulákkal szemben a különböző vizek között, ilyen belépési kapu például a vér-agy gát (BBB, blood-brain barrier). A vér-agy gáton keresztüli átjutás különösen nagy jelentőséggel bír, hiszen a központi idegrendszerre ható gyógyszerek csak ezt a gátat átlépve juthatnak el a hatáshelyükre, más gyógyszerek azonban mellékhatásokat okozhatnak az agyba jutva.

A PAMPA (Parallel Artificial Membrane Permeability Assay) egy in vitro nem-sejtes módszer, mellyel a transzcelluláris passzív transzportfolyamatokat modellezzük. A PAMPA szűrőmembránját szerves oldószerben oldott foszfolipiddekkal bevonva - alkalmas a szövetspecifikus felszívódás modellezésére. Munkám során célunk volt, hogy ismert agyi felszívódású vegyületek segítségével optimális vér-agy gát specifikus permeabilitási modellt dolgozzunk ki az in vitro nem-sejtes PAMPA modellrendszerrel. Az optimális modell beállításához változtattam a modell paramétereit: az oldószerkelet összetételét, a lipid mellett alkalmazott koleszterin és DMSO mennyiségét. Ezáltal sikerült beállítani az eddig ismert felszívódási modellekhez képest pontosabb BBB-PAMPA rendszert, mely megbízhatóan képes előrejelezni a gyógyszerjelölt vegyületek jellemzően passzív diffúzió által vezérelt in vivo agyi penetrációját.

DÜRVANGER ZSOLT Vegyész MSc, 9. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
 Karancsiné Menyhárd Dóra
 tudományos főmunkatárs, ELTE TTK

Tioéter típusú belső linkerek hatásának vizsgálata egy proteáz enzim ciklikus peptid inhibitorainak körében, elméleti módszerekkel

Kulcsszavak: molekuladinamikai szimuláció; immunrendszer; Bowman-Birk inhibitor; védőcsoport; diaminopropionsav

TDK munkám során az immunrendszer működésében kulcsszerepet játszó MASP2 enzim új, peptid típusú inhibitorait vizsgáltam, melyekben tioéter kötést tartalmazó linkerekkel helyettesítették az eredeti inhibitor diszulfidhidját.

Az eredeti, diszulfidhidat tartalmazó átkötés hosszát közelítve (lizin, ornitin, diaminovajsav, diaminopropionsav beépítésével) nőtt az inhibitorok hatékonysága, azonban az eredeti ciklus tagszámánál mindössze egy nehézatommal hosszabb, aminoglicint tartalmazó inhibitor esetén a tendencia megfordult. Meglepő tapasztalat volt, hogy a diaminopropionsavat tartalmazó inhibitor esetén a szintézis két izomert eredményezett, melyek hatékonysága eltért.

Molekulamechanikai és kvantumkémiai módszerek segítségével meghatároztam a szabad inhibitorok konformációját.

Megmutattam, hogy az aminoglicint tartalmazó peptid esetén a linkerben található amidkötés cisz állása stabilabb, míg a többi peptid esetén a transz izomer bizonyult energetikailabbb kedvezőbbnek.

Ezt a viselkedést a linker rövidülésekor csökkenő konformációs szabadság magyarázza. Eredményeim alapján a diaminopropionsavat tartalmazó peptidből előállított két izomer a linker amidkötés cisz és a transz izomereinek felel meg.

Megállapítottam, hogy a szabad inhibitorok szerkezete egymástól kis mértékben különbözik. Az inhibitorok kötődés szempontjából fontos tulajdonságainak vizsgálata során nem találtam olyan eltérést, mely magyarázatot adhatna az eltérő hatékonyságukra. A vizsgálatokat ezért az inhibitorok és az enzim komplexeinek szimulációjával folytattam.

A komplexek vizsgálata során két, egymástól különböző, stabil szerkezetet sikerült előállítani, melyek valószínűleg a komplexképződés különböző lépéseihez tartoznak.

A láncvégi védőcsoportok beépítésével elért aktivitás növekedés magyarázatára is javaslatot tettem. A védőcsoportok Jelentlétének hatására az inhibitor kötődésekor az enzim egyik hurokrégiója elmozdul, mely az inhibitor egy tirozin oldallánca számára lehetővé teszi hogy egy hidrofób zsebbe ékelődjön, így növelve a kölcsönhatási felszínt.

A szorosan kötött komplexek szerkezetének vizsgálata során azonosítottam a kötődést jellemző fontos paramétereket. Megállapítottam, hogy az egyes inhibitorok eltérő hatékonyságának magyarázatához ezeket a tulajdonságokat együtt kell vizsgálni, ugyanis nem található olyan jellemző, mely önmagában magyarázatot adna a hatékonyságok vizsgálatakor talált tendenciára.

NÉMETH ÁDÁM Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Mező Gábor

tud. tanácsadó, MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Hegedűs Rózsa

tud. segédmunkatárs, MTA-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport

Vajsavval módosított GnRH-I és GnRH-II – hatóanyag konjugátumok szintézise és in vitro tumorelles hatásuk vizsgálata

Kulcsszavak: irányított tumorterápia; peptidhormon; daunorubicin; enzimstabilitás; citosztázis

A rák az egyik legtöbb áldozatot követelő betegség. Mivel a rák kifejezés egy egész betegségcsoportot jelöl (kb. 130 féle daganatos megbetegedés), egyetlen átfogó gyógymód kifejlesztése lehetetlen. Kezelésükre számos módszer létezik: sebészeti beavatkozás, sugár-, hormon-, kemo-, immun- és irányított terápia. A kemoterápiás kezelések többsége azonban nem elég szelektív, így súlyos mellékhatásokat okoznak.

Az irányított tumorterápia igen hatékony módszernek ígérkezik. Egyik válfaja azon alapul, hogy a hatóanyagot egy olyan irányítómolekulához kapcsolják, melynek receptora a tumoros sejteken nagy számban expresszálódik, így a hatóanyag specifikusan a rákos sejtekbe juttatható. Ezzel jelentősen csökkenthetők a mellékhatások. E célra irányítómolekulaként pl. különféle peptideket (gonadotropin-releasing hormon) használhatunk. Egyes GnRH analógok előnye, hogy önmagukban is tumorelles hatásúak.

Munkám során olyan GnRH – hatóanyag konjugátumokat állítottam elő, melyekben irányítómolekulaként 4-es (vajsavval acilezett Lys) és 6-os (aminooxiacetilezett D-Lys) helyzetben módosított GnRH-I és GnRH-II analógok találhatók, a hatóanyag pedig daunorubicin. Az ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport korábbi eredményei alapján a GnRH-III esetén a ⁴Ser – ⁴Lys csere, illetve ε-aminocsoportjának acilezése különböző rövid szénláncú zsírsavakkal jelentősen növelte a konjugátumok enzimstabilitását és tumorelles hatását. Ezen eredmények a vajsav alkalmazása során voltak a legjobbak, ezért esett a választás az említett módosításokra a GnRH-I és GnRH-II analógok esetén is. Vizsgálni szerettem volna ugyanis, hogy ez a módosítás a GnRH-I és GnRH-II analógok esetében is pozitívan befolyásolja-e a konjugátumok tumorelles hatását.

A GnRH analógokat szilárdfázisú peptidszintézissel állítottam elő. Tisztításuk RP-HPLC-vel, azonosításuk ESI-MS tömegspektrométerrel történt. A GnRH analógokat oxim-kötéssel daunorubicinhez konjugáltam, oldatfázisban. A kész konjugátumok (GnRH-I(⁴Lys(nBu), D-⁶Lys(Dau=Aoa)) és GnRH-II(⁴Lys(nBu), D-⁶Lys(Dau=Aoa))) in vitro citosztátikus hatásának vizsgálata MTT-teszttel történt, HT-29 humán vastagbél karcinóma sejteken. Az eredmények azt mutatták, hogy a 4-es pozícióban, az oldalláncán vajsavval acilezett Lys beépítése a Ser helyére a GnRH-II esetén szignifikánsan növelte a tumorelles hatást, míg a GnRH-I származék esetén a hatásvékedés elhanyagolható volt. A kapott eredmények hozzájárulhatnak az irányított tumorterápiára alkalmas konjugátumok tervezéséhez.

Bioszervetlen kémia

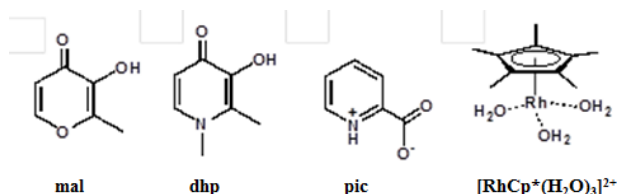
KISS GABRIELLA ILONA vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Enyedy Éva Anna
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Dr. pharm. Dömötör Orsolya
tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK

Antitumor RhCp*-komplexeik oldatkémiai és kölcsönhatásuk albuminnal

Kulcsszavak: hidrolízis; stabilitás; transzportfehérje; markervegyületek

Az elmúlt években a rákos megbetegedések elleni küzdelemben egyre nagyobb hangsúlyt kapnak az átmenetifémek komplexei, köszönhetően a ciszplatin sikeres alkalmazásának. Ez irányban elindulva napjainkban számos kutatás irányul olyan fémkomplexeik kifejlesztésére, melyek citotoxikus hatása a rákos sejtekre specifikus. Ígéretes kutatások folynak többek között Rh(III)-vegyületekkel is. Munkánk során a $[\text{RhCp}^*(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ fémorganikus vegyület hidroxipiron (maltol), illetve hidroxipiridinon (dhp) típusú ligandumokkal való komplexképződését oldategyensúlyi módszerekkel (pH-potenciometria, UV-látható spektrofotometria, ^1H NMR spektroszkópia) vizsgáltuk kloridionoktól mentes, vizes közegben. Meghatároztuk a képződő komplexek összetételét és stabilitási szorzatait. Az általunk vizsgált RhCp* vegyület hidrolízisének tanulmányozására eddig csak kloridionok jelenléte mellett került sor [1], így azt kloridmentes közegben is jellemeztük.



Egy potenciálisan bioaktív vegyület farmakokinetikai jellemzése során a vérben található transzportfehérjékkel való kölcsönhatás leírása is fontos, így a $[\text{RhCp}^*\text{Z}_3]$ ($\text{Z} = \text{H}_2\text{O} / \text{Cl}^-$) vegyületnek, valamint a dhp-val és egy piridinkarbonsav (pikolinsav, pic) típusú ligandummal képzett komplexeinek humán szérum albuminnal való kölcsönhatását vizsgáltuk elsősorban spektrofotometrián, a kötődés helyének megismerése érdekében kötőhely markerek és védett aminosav modellek bevonásával.

[1] O. Dömötör, S. Aicher, M. Schmidlehner, M.S. Novak, A. Roller, M.A. Jakupc, W. Kandioller, C.G. Hartinger, B.K. Keppler, É.A. Enyedy; J. Inorg. Biochem. 134, 57-65 (2014)

KOZSUP MÁTÉ Kémia BSc, 6. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Buglyó Péter
 egyetemi docens, DE TTK

A $[\text{Pd}(\text{en})(\text{H}_2\text{O})_2]^{2+}$ és hidroxámsavak kölcsönhatásának vizsgálata

Kulcsszavak: ciszplatin; palládium; szilárd fázis; $[\text{M}_3\text{A}_2\text{H}-2]^{2+}$

A ciszplatin antitumor hatása régóta ismeretes, ezért a Pt(II) koordinációs kémiai sajátosságait széles körben vizsgálják. A Pt(II) ezen típusú reakciói azonban lassúak, ezért a hasonló tulajdonságokkal rendelkező, de 4-5 nagyságrenddel gyorsabb ligandumcserére képes Pd(II)-t használják a Pt(II) modellezésére. A hidroxámsavak jó fémion megkötő sajátosságuk miatt enzim inhibitorok, ezért alkalmasak lehetnek antitumor hatás kifejtésére.

A Tanszéken már korábban vizsgálták a Pd(II) – hidroxámsav rendszerek koncentráció eloszlását a pH függvényében, pH potenciometriás és NMR módszerekkel. Munkám célja volt ezen oldategyensúlyi vizsgálatok kiegészítése ESI-MS mérések alkalmazásával, valamint a korábbi eredmények alapján feltételezett szerkezetű komplexek szilárd fázisú előállítása és azok vizsgálata.

Az oldategyensúlyi vizsgálatok esetén az ESI-MS mérések egyértelműen alátámasztják a korábban feltételezett összetételű komplexek megjelenését. A szekunder hidroxámsavakkal végzett szilárd fázisú kísérletek alapján elmondhatjuk, hogy a kis térkitöltésű szubsztituensekkel rendelkező MeAha esetén komplexképződés helyett redoxi reakció játszódott le, melyben a Pd(II) ion fém palládiummá redukálódott. A MeBha esetén nem képződött egységes komplex. PhBha alkalmazásával $[\text{MA}]^+$ összetételű tiszta komplex keletkezett, melyben a Pd(II) a hidroxamáthoz (O,O) koordinációval kapcsolódott. Ennek oka a ligandumban lévő két fenil-csoport nagy térkitöltése.

Primer hidroxámsavak esetén ezen tapasztalatok alapján a nagyobb térkitöltésű BhaH-t választottuk a kísérletekhez. Ebben az esetben is próbálkoztunk egymagvú komplex létrehozásával, de a megfelelő pH tartomány és ligandum mennyiség ellenére is a többmagvú komplexek képződése volt a preferált. A kétmagvú komplex esetén a keletkezett szilárd anyag nem volt egységes. Az $[\text{M}_3\text{A}_2\text{H}_2]^{2+}$ szerkezetű hárommagvú komplex vizes és metanolos közegből egyaránt előállítható volt. ¹H NMR mérések alapján a komplex vegyes ellenionnal, azaz egy Bha⁻-al és egy BF₄⁻-al kristályosodott. A komplexet metanoltól átkristályosítva szobahőmérsékleten egykristály keletkezett, amelynek röntgendifrakciós vizsgálata alátámasztotta a hárommagvú komplex szerkezetét. Eszerint két $[\text{Pd}(\text{en})]^{2+}$ egység (O,O) egy pedig (N,N) koordinációval kapcsolódik a két hidroxamát ligandumhoz.

Eredményeink azt támasztják alá, hogy a „lágý” sajátosságú Pd(II) szilárd fázisban is erős kölcsönhatásra képes primer hidroxámsavakkal azok O és N donoratomjához való koordinálódással.

TAKÁCS GERGELY Vegyészmérnök BSc, 7. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Várnagy Katalin
 egyetemi docens, DE TTK

Az oldalláncok hatása a két hisztidint tartalmazó tetrapeptidek komplexképződési tulajdonságaira

Kulcsszavak: tetrapeptid; átmenetifém; komplex; hisztidin

Az emberi szervezet számára feltétlenül szükséges a réz(II)-, cink(II)- és nikkel(II)-ion jelenléte. Kis mennyiségük ellenére nélkülözhetetlenek, nem csak az emberi szervezet számára. A kadmium(II)-ion ezzel ellentétben karcinogén hatású. Ezek a fémionok az emberi szervezetben fehérjékhez kötött formában találhatók meg. A fehérje nagy mérete miatt csak az oldalláncokon keresztül tudnak kötődni.

A legfontosabb kötőhely a hisztidin oldalláncában megtalálható imidazol donorcsoport. A vele alkotott komplex szerkezetét befolyásolja a hisztidin elhelyezkedése, illetve a peptidet felépítő aminosavak oldalláncai.

Munkám során egy C-terminálisan védett, két hisztidint tartalmazó tetrapeptidet (His-Ala-Ala-His) szintetizáltam mikrohullámmal működő automata peptidszintetizáló készülékkel. A peptid tisztaságának ellenőrzése után a nikkel(II)-, cink(II)- és kadmium(II)-ionokkal alkotott komplexeit tanulmányoztam pH-potenciometriás, UV-látható- és CD-spektrószkópiás mérésekkel.

A pH-metriás mérések során 1:1 fémion-ligandum arányú komplexeken kívül biszkomplex és többmagvú komplex kialakulását is feltételeztük. Savas tartományban a fémion hisztaminszerűen kötődik a ligandumhoz. A pH-t emelve a C-terminális részen elhelyezkedő imidazolnitrogén deprotonálódása és koordinálódása figyelhető meg. Ezt követően a cink(II)- és kadmium(II)-HAAH rendszereknél csapadékkiválás volt megfigyelhető. A nikkel(II)-komplexeknél a három amidnitrogén egy lépésben koordinálódik a fémionhoz. A ligandumfelesleg esetén nagy mennyiségben kialakuló biszkomplex a nagyobb pH tartományba tolja ezt a folyamatot. A három koordinálódott amidnitrogén és az aminocsoport telíti a nikkel(II)-ion koordinációs szféráját, így a $[\text{NiAH}_3]^-$ szerkezetnél már nem képes a C-terminális imidazolnitrogén kötődni a fémionhoz.

A Cu(II)-ion esetében lehetőség van hárommagvú komplex kialakulására is fémfelesleg jelenlétének.

OZSVÁTH ANDRÁS Kémia BSc, 6. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Buglyó Péter
egyetemi docens, DE TTK*

Az ólom(II)ionok kölcsönhatásának vizsgálata peptidhidroxámsavakkal

Kulcsszavak: oldategyensúly; Pb(II); stabilitási állandó; koordinációs kémia

Munkám során az ólom(II)ionok kölcsönhatását vizsgáltam két dipeptidhidroxámsavval, az AlaAlaNH₂-val és az AlaAlaN(Me)OH-val, pH-potenciometriás, ¹H-NMR spektroszkópiás és ESI-MS spektrometriás módszerek segítségével. Mivel korábbi vizsgálatok nem mutattak erős kölcsönhatást az igen mérgező ólom(II)ionok és monohidroxámsavak között, ezért jelen munkában a dipeptidhidroxámsavakkal végeztünk vizsgálatokat, melyek az oxigén donoratomokon túl „lágyabb” jellegű nitrogén atomokat is tartalmaznak. Mivel a szekunder származék nem állt rendelkezésünkre, ezért azt mi magunk állítottuk elő.

A pH-potenciometriás eredmények alapján két modellt feltételeztünk attól függően, hogy [PbA]⁺ vagy [Pb₂A₂]²⁺ komplex keletkezik-e. Ennek eldöntésére ESI-MS vizsgálatokat végeztünk különböző pH-jú rendszereken, és azt kaptuk, hogy keletkezik [PbA]⁺ komplex, de jelen van a [Pb₂A₂]²⁺ is. Összhangban a pH-potenciometriás modellel, ¹H-NMR mérésekkel kimutattuk, hogy 1:1 fémion-ligandum arány mellett pH = 4 fölött a [PbAH]²⁺ komplexben hidroxamát kelát alakul ki, majd pH = 7 fölött [N_{amino}, O_{karbonil}] kötésmód is detektálható, ami azt támasztja alá, hogy a hidroxamát kötésmódú [PbA]⁺ mellett [Pb₂A₂]²⁺ is megjelenik. A „B” modellnek megfelelő koncentráció-eloszlási görbék ábrázolása után láthatóvá vált, hogy a pH-potenciometria, valamint a ¹H-NMR spektroszkópia összhangban van egymással, ezért a „B”modell helyességét feltételezhetjük.

A különböző vizsgálati módszerekkel nyert eredmények alapján összességében elmondható, hogy nem mutatkozott számottevő különbség a primer és szekunder dipeptidhidroxámsavak ólom(II)ion megkötő képessége között. Hidroximát kelát kialakulását egyik rendszer esetén sem tudtuk kimutatni, mint ahogy szintén nem tudtuk igazolni a peptidváz koordinációját sem. Továbbá a vizsgálatok során arra is fény derült, hogy a peptidváz jelenléte nem eredményezi stabilabb ólom(II) komplexek kialakulását a monohidroxámsavakhoz képest.

BORSOS PÉTER Kémia BSc, 5. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Gajda Tamás

egyetemi tanár, SZTE TTIK

Dancs Ágnes

PhD hallgató, SZTE TTIK

Egy új C-terminális hisztidint tartalmazó tripodális peptid előállítás és réz(II)komplexeinek vizsgálata

Kulcsszavak: tripodális; peptid; fémkomplex; en

A modern bioszervetlen kémiai kutatások egyik területe a mesterséges enzimek tervezése és kialakítása. A potenciális enzimutánzó katalizátorok egyik csoportja a kismolekulás fémkomplexek, melyek funkcionális modelljei lehetnek az élő szervezetben működő metalloenzimeknek. A funkcionális tripodális ligandumok több szempontból is megfelelőek lehetnek e célra. Kutatócsoportunk nemrégiben kezdett el foglalkozni tripodális peptid típusú ligandumok előállításával és fémkomplexeik vizsgálatával, melyek tulajdonságai párhuzamba állíthatók hasonló kisméretű lineáris peptidek fémkomplexeinek eredményeivel, amiknek már előnyös oxidoreduktáz utánzó tulajdonságai ismertek.

Az általunk szintetizált ligandum (tris-(L-hisztidil)-2,2',2"-nitrilotriacetamid, továbbiakban ntaHis3) azonosítása és tisztaságának ellenőrzése MS és NMR módszer segítségével történt, a ligandum tisztítását preparatív HPLC alkalmazásával végeztük. Potenciometriás módszerrel jellemeztük a ligandum oldategyensúlyi sajátságait, és a képződő komplexeket réz(II)ionok jelenlétében. A réz(II)komplexek szerkezeti sajátságait UV-látható ill. cirkuláris dikroizmus spektroszkópiás módszerekkel tanulmányoztuk, valamint a domináns komplexek enzimutánzó tulajdonságait két modellreakción keresztül vizsgáltuk: a 3,5-di-tercbutil-pirokatechin szubsztrát oxidációját, illetve a szuperoxid gyökanion diszproporcióját követtük a ligandum-réz(II) komplexek jelenlétében.

A ligandum réz(II)ionok jelenlétében 1:1, illetve 2:1 fém-ligandum arányú komplexeket képez. A domináns koordinációs mód a $\{N_{\text{terc}}, N^-, N_{\text{im}}\}$, mely analóg a C-terminális hisztidint tartalmazó Gly-His peptid CuH_1L komplexének szerkezetével. Réz(II)ionok feleslegénél már pH 4 felett uralkodóvá válnak a kétmagvú komplexek, a lúgos pH tartományban az amidnitrogének fémion indukált protonvesztése és koordinációja zajlik. A $\text{Cu}_2\text{H}_3\text{L}$ komplex képződése pH 8 körül indul meg, s igen tekintélyes pirokatechin oxidáz aktivitást mutat ($k_{\text{cat}} = 0,444 \text{ s}^{-1}$, $K_M = 1,93 \times 10^{-4} \text{ M}$). Vizsgáltuk a komplexek szuperoxid dizmutáz aktivitását is pH 7,4 kémhatású oldatban, az IC50 érték viszonylag erős SOD aktivitást jelez más réztartalmú peptidkomplexek értékeihez viszonyítva ($\text{IC}_{50} = 0,13 \times \text{M}$).

HUSZENICZA GYÖNGYI Vegyésszmérnök BSc, 7. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Várnagy Katalin
egyetemi docens, DE TTK

Hisztidintartalmú tetrapeptid átmenetifém komplexeinek vizsgálata

Kulcsszavak: hisztidin; tetrapeptid; átmenetifém; komplex

A réz(II)-, nikkel(II)- és a cink(II)ion létfontosságú az élő szervezetek számára. A biológiai rendszerekben főként fehérjéhez kötötten találhatóak meg. Az enzimeknek létfontosságú alkotójaként szerepet játszanak különböző biokémiai folyamatok katalizálásában. Hiányuk, illetve a szervezetben felhalmozott fölöslegük is különböző elváltozásokhoz, betegségekhez vezethet. A kadmium a cinkhez nagyon hasonló elem, gyakran kísérőelemeként is előfordul, de a cinkkel ellentétben erősen toxikus hatású.

A metalloenzimekben a legfontosabb kötőhely a fémionok számára a hisztidin aminosav oldalláncában található imidazol nitrogén. Az így kialakult komplexek szerkezete függ a horgonycsoportot tartalmazó hisztidin helyzetétől és az aminosav szekvenciájától, ugyanis az egyes oldalláncok is hatással vannak a koordinációra. A komplexkéimiai folyamatokat nagyban befolyásolja továbbá a fémion természete és a fémion-ligandum arány.

Munkám során egy két hisztidint tartalmazó tetrapeptidet (HisGlyValHis-NH₂) állítottam elő szilárd fázisú peptidszintézissel. Először a peptid tisztaságát ellenőriztem, majd pedig a ligandum réz(II)-, nikkel(II)-, cink(II)- és kadmium(II)-komplexeit vizsgáltam pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás és CD-spektroszkópiás módszerekkel.

A pH-potenciometriás mérési adatok alapján réz(II)- és nikkel(II)ion esetében is 1:1 fémion-ligandum arányú komplexek ([MLH], [ML], [MLH-1], [MLH-2], [MLH-3]) illetve egy biszkomplex ([ML₂]) kialakulását feltételeztük, melyet az UV-látható- és a CD-spektroszkópiás mérések is alátámasztottak. A fémfölsleget tartalmazó mintákban a többmagvú komplexek ([M₃L₂H-6]) létezését tömegspektrometriai vizsgálatokkal is bizonyítottuk. Cink(II)- és kadmium(II)ion jelenlétében azonban csak [MLH], [ML] és [ML₂] összetételű komplexek keletkeztek, az amidnitrogének deprotonálódása nem játszódtott le.

Savas pH-tartományban a ligandum hisztaminszerű koordinációval kapcsolódik a fémionokhoz. A lúgos tartomány felé haladva a peptid C-terminális végén lévő imidazolnitrogén deprotonálódása és kapcsolódása is megfigyelhető. Ligandumfelesleg esetén ezt a folyamatot a biszkomplexek képződése késlelteti. A pH további növelése a réz(II)- és a nikkel(II)ion esetében az amidnitrogének deprotonálódásához vezetett, míg a cink(II) és a kadmium(II)ion esetében a titrálás során csapadék jelent meg.

ERDEI JUDIT ZSUZSA Vegyész MSc, 1. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Várnagy Katalin
 egyetemi docens, DE TTK

Hisztidint és aszparaginsavat tartalmazó peptidek szintézise és átmenetifém-komplexeik vizsgálata

Kulcsszavak: Ni(II); pH-potenciometria; oldategyensúly; szerkezetvizsgálat spektroszkópiai módszerekkel

A nikkel(II)- és cink(II)ion legtöbbször hisztidint is tartalmazó fehérjékhez kötődve van jelen. Ezek megismeréséhez vizsgálunk kisebb hisztidintartalmú peptidek átmenetifém-ionokkal alkotott komplexeit.

Ezen kutatásokba kapcsolódtam be. Munkám során két, aszparaginsavat és hisztidint is tartalmazó pentapeptidet (Ac-HAHDH-NH₂ és Ac-HDHAH-NH₂) állítottunk elő automata szintetizáló készülékkel, majd ezek átmenetifém-ionokkal alkotott komplexeit vizsgáltam.

A két szintetizált peptid a korábban vizsgált peptidekhez képest az oldalláncában egy karboxilátcsoporthoz tartozik, ami a kialakuló komplexekben eltérő töltést eredményez.

A Cd(II)- és Zn(II)-ionokkal alkotott komplexek nagy hasonlóságot mutatnak. Mindegyik ligandum esetében [ML] komplex jelenlétét mutattuk ki, de a [CdL] komplexeknél stabilitás növekedést észleltünk, a korábban vizsgált három és négy hisztidint és szarkozint is tartalmazó penta- és heptapeptidhez képest. A keletkezett [ML] komplex azonban egyik ligandum jelenlétében sem akadályozta meg a fémionok hidrolízisét.

A Ni(II)-ionokkal alkotott komplexek esetében a karboxilátcsoporthoz tartozó jelenléte kis mértékben növeli az [ML] stabilitását és kedvezően hat az [ML₂] komplex kialakulására. Az amidnitrogének deprotonálódása játszódik le lúgos tartományban, és izomer szerkezetű komplexek képződését feltételeztük. Az UV-Vis és CD spektroszkópiás vizsgálatok azt mutatták, hogy az az izomer komplex, melyben a C-terminálison lévő hisztidinhez kötődik a fémion, nagyobb arányban van jelen az Ac-HDHAH-NH₂ peptid esetében, mint az Ac-HAHDH-NH₂ peptid esetében. Ezen feltételezéseket erősítette meg a ¹H-NMR spektroszkópiás vizsgálat is, ahol a szabad ligandumok pH-függését, illetve lúgos tartományban a [NiLH₃] komplex spektrumát vettük fel. A kapott adatokból láthattuk, hogy izomer szerkezetek vannak jelen, mely összhangban van a CD spektroszkópiás vizsgálatokból kapott eredményekkel. Amennyiben az aszparaginsav az N-terminuson van, a fémion a C-terminális végen kötődik, míg ha az aszparaginsav a C-terminálison helyezkedik el, az N-terminális végen való kötődés a kedvezményezettebb.

LASKAI ALIZ Kémia BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Várnagy Katalin
 egyetemi docens, DE TTK

Hisztidint tartalmazó peptidek átmenetifémekkel történő oldategyensúlyi vizsgálata

Kulcsszavak: peptid; hisztidin; átmenetifém; komplex;

Munkám során célul tűztük ki az egy, két, illetve három hisztidin aminosavat tartalmazó peptidek komplexképzésének vizsgálatát Cd(II)-ionnal, ahol az egy hisztidint tartalmazó peptid vizsgálatát kiegészítettük a Cu(II), Ni(II) és a Zn(II)-fémionok vizsgálatával is.

A Cu(II), Ni(II), Zn(II) és Cd(II)-fémionok Ac-SPKTNMKHA-NH₂ nonapeptiddel való komplexképzésének vizsgálatánál meghatároztuk az adott fémion-ligandum rendszerekre jellemző komplex összetételeket és a részecskék stabilitását, amelyen át információt kaphattunk az egyes fémionok ligandum-affinitásáról.

Legstabilabb komplexeket a Cu(II)-ion képezte, amely fémion-ligandum rendszerében változatos összetételű monokomplexek jöttek létre a titrálás előrehaladtával, s amelyek nagyobb koncentrációban fordultak elő az oldatban (MLH₂, ML, MLH-1, MLH-2, MLH-3).

Ugyancsak stabil komplexeket képez a Ni(II)-ion, de kevésbé változatos összetétellel, mint a Cu(II)-nonapeptid minta esetén (MLH, MLH-1, MLH-2, MLH-3).

Eredményeink alapján gyenge komplexképző ligandumnak bizonyult a Zn(II)- és a Cd(II)-ion, amelyekkel a vizsgált nonapeptid gyakorlatilag nem képzett komplexeket.

A leírt megfigyelések és tapasztalatok alapján a ligandum fémionmegkötő képessége a Cu(II) > Ni(II) > Zn(II) ~ Cd(II) sorrendben változik.

A Cd(II)-tetrapeptidekkel alkotott rendszerében sikerült kimutatnunk részecskeképződést. A vizsgálati eredmények kiértékelései azt az eredményt hozták, hogy a hisztidin-szám növelése összességében megnöveli a kialakuló komplexek stabilitását, azonban nem mindegy, hogy a kötőhelyet biztosító aminosavak milyen pozícióban vannak jelen a molekulában.

A vizsgált hisztidin-elrendeződések az alábbi sorrendben biztosítanak optimálisabb kötődést és stabilabb koordinációt: HisXHis > HisHis > HisXXHis.

Az eredmények alapján így megállapíthatjuk, hogy önmagában a hisztidin oldalláncbéli imidazolgyűrűje - a hisztidinek számának növelésével sem - jelent stabilis kötőhelyet a Cd(II)-ion számára. Ugyanakkor növelhetjük a peptid Cd(II)-ion megkötő képességét és szelektivitását olyan peptidekkel, amelyek a hisztidin mellett vagy helyett oldalláncbéli kén-donoratomot tartalmaznak. Így munkánkat ilyen peptidek tervezésével, szintézisével és vizsgálatával fogjuk folytatni.

LASKAY KRISZTINA Vegyész MSc, 4. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Jakusch Tamás
 egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

L-cisztein [(h⁶-p-cimol)Ru(II)] komplexeinek oldategyensúlyi folyamatai

Kulcsszavak: [(η⁶-p-cimol)Ru(II)]; L-cisztein; oldategyensúly; stabilitási állandó; protonálódási folyamatok

A potenciálisan rákellenes hatású [1], általában két- esetleg háromfogú ligandumot is tartalmazó [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] komplex a szervezetbe kerülve kölcsönhatásba lép a testfolyadékok komponenseivel [2]. Az L-cisztein a vészérum kis molekulatömegű alkotórésze, mely koordinációjával hatással lehet a [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] szérumbeli speciációjára.

Fő célunk az L-cisztein és a [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] között fiziológiás pH-tartományban létrejövő komplexek összetételének, szerkezetének, esetleges protonálódási folyamatainak, illetve stabilitásának vizsgálata. A rendszer bonyolultsága miatt, valamint megbízhatóbb eredmények érdekében jellemeztük a [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] és a védett aminocsoportot tartalmazó N-acetil-L-cisztein, valamint a védett karboxilcsoporttal rendelkező L-cisztein-metilészter közötti kölcsönhatást is.

A [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] és N-acetil-L-cisztein rendszer esetében ligandumfelesleg mellett a (RuC)₂(acys)₃H₀₋₃ komplex képződése gyakorlatilag kizárólagos a teljes pH-tartományban. Ezen komplex három protonálódási folyamattal jellemezhető, melyek mindegyike a szabad, nem koordinálódó karboxilátcsoportokhoz köthető. RuC:acys=1:1 arány mellett a (RuC)₂(acys)₂H₂₋₀ komplexek dominálnak, de megjelennek (RuC)₂(acys)₃H₀₋₃ komplexek is. A komplexek képződése kvantitatív, így egyensúlyi állandókat meg tudunk határozni az egyes komplexféleségek között, de stabilitási állandót nem.

A [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] és L-cisztein rendszerrel megjelentek fémfelesleget tartalmazó - (RuC)₂(cys)H_x - komplexek is. (RuC)₂(cys)₃H_x komplexek is keletkeztek, de sokkal kevésbé voltak hangsúlyosak, mint az N-acetil-L-cisztein esetében. További különbség a két rendszer között, hogy itt a (RuC)(cys)₂H_x összetételű komplexek jelentősége jóval nagyobb.

A [(η⁶-p-cimol)Ru(II)] és L-cisztein-metilészter között kialakuló komplexek jellemzése folyamatban van.

[1] A. Bergamo, G. Sava, Dalton T, 40, 7817-7823 (2011)

[2] W. Kandioller, C. G. Hartinger, et al., Organometallics, 28, 4249-4251 (2009)

NAGY IMRE kémia BSc, 6. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Buglyó Péter
 egyetemi docens, DE TTK

Pb²⁺ kölcsönhatásának vizsgálata maltollal és piridinonnal

Kulcsszavak: komplex; mérgező fémion; pH-potenciometria; NMR

Összefoglalás

Az ólom élő szervezetekre gyakorolt káros hatása ismert, ez olyan ligandumok kifejlesztését teszi szükségessé, melyek kis toxicitás mellett szelektíven és stabilan kötik meg a fémiont. Számos kísérletet végeztek, ezek közül több, O,O-donoratomot tartalmazó vegyületet is bevontak a kutatásokba. Az eredmények megmutatták, hogy ezek a ligandumok akár megfelelő ólom(II) kelátorok is lehetnek.

Munkám során (O,O) koordinációra képes ligandumok Pb(II)-vel történő kölcsönhatását vizsgáltam. A felhasznált maltol nem mérgező, élelmiszeradalékként is használt vegyület. A piridinon-származék, DHP, pedig a humán gyógyászatban is alkalmazott vas(III)ion megkötő. Az ólom(II)ionnal kialakuló kölcsönhatásokat három módszerrel pH-potenciometriásan, ¹H-NMR spektroszkópiásan és ESI-MS spektrometriásan végeztem.

Az eredményekből megállapítható, hogy mindkét rendszerben nagy stabilitású komplexek jönnek létre és az ólom(II) hidrolízise erősen visszaszorítható. A titrálási görbék legjobb leírását [MA]⁺, [MA₂] és [MAH₁] összetételű komplexek feltételezésével kaptuk, ahol egy, illetve két (O,O) kelátot tartalmaznak a képződő részecskék. Mind az NMR mind az ESI-MS mérések alátámasztották a potenciometriás modellt. Az NMR mérések során nyert kiátlagolt jelek alapján azonban az ólom-komplexekben gyors cserefolyamatok valószínűsíthetőek. Ez azt jelenti, hogy labilis komplexek keletkeznek, és ebből az következik, hogy ezek a ligandumok, noha nagy termodinamikai stabilitással rendelkező komplexeket képeznek, kinetikai okok miatt nem feltétlenül lehetnek megfelelőek az ólom(II) szervezetből történő eltávolítására.

MOLNÁR MILÁN Kémia Bsc. BSc, 8. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Kaizer József
egyetemi tanár, PE MK
Lakk-Bogáth Dóra
PhD hallgató, PE MK

Réz-aminosav komplexek előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: enzimek; ACC-oxidáz; ROS; MCO; enzimmodellek

Az ACC-oxidáz (1-amino-ciklopropán-1-karbonsav oxidáz) vastartalmú enzim, amely a gyűrűs aminosav lebontásán keresztül etilént eredményez. Amely növényi hormonként többek között a gyümölcsök érési folyamatát befolyásolja, valamint az öregedési folyamatokban is fontos szerepet játszik. Tehát az ACC-oxidáz enzim működésének megértése, reakciómechanizmusának feltérképezése igen fontos feladat [1].

Az enzimatis reakciókon túl az aminosavak oxidációja az élő szervezetben egyrészt fémkatalizált oxidációs folyamatokon (MCO), másrészt reaktív oxigén részecskék (ROS) részvételén keresztül történik. Az aminosavak ROS indukált oxidációs reakcióinak mechanizmusa ismert, azonban sokkal kevesebbet tudunk a MCO folyamatokról. A MCO folyamatok reaktív intermedierek keletkezését eredményezheti (pl.: a hidroxil-gyök), amelyek káros elváltozásokat idézhetnek elő az élő szervezetekben (pl.: Alzheimer-kór kialakulása), tehát a fenti reakciók mechanizmusának megértése gyógyászati célokat is szolgálhat [2].

Ezen kutatásoknak az ivóvíz tisztításában is nagy hasznát vehetik az aminosav-mentesítés során, mivel az aminosavakból az alkalmazott tisztítási módszerek hatásának eredményeként az élő szervezetekre káros vegyületek keletkezhetnek.

A személyes munkám a következő volt: Réz-aminosav komplexek előállítása, azonosítása spektrofotometriai módszerekkel (infravörös spektroszkópia IR, UV-VIS spektrofotometria), szerkezetük feltérképezése (röntgendiffrakció), valamint a komplexek oxidációs reakcióinak vizsgálata az aminosav bomlási mechanizmusának megismerése céljából.

Referenciák:

- [1] S. Góger, D. Bogáth, G. Baráth, A.J. Simaan, G. Speier, J. Kaizer, J. Inorg. Biochem. 2013, 123, 46.
[2] F. E. Ali, K. J. Barnham, C. J. Barrow, F. Separovic, Letters in Peptide Science 2003, 10, 405.

BÁLINT SÁRA vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Jancsó Attila
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Toxikus fémionok analitikai célú kimutatására tervezett cisztein tartalmú oligopeptid kölcsönhatása higany(II)ionokkal

Kulcsszavak: peptid; ¹H-NMR; fluorimetria; fémion-megkötés; immobilizálás

Az utóbbi években egyre inkább a környezeti kémiai kutatások fókuszába került a nehézfém-ionok érzékelésére és eltávolítására alkalmas módszerek fejlesztése. A kifejezetten toxikus elemek közé sorolható higany a természetes előfordulások mellett számos emberi tevékenység révén jelentős mennyiségben került és kerül környezetünkbe. Emiatt eltávolítása és kis koncentrációban való kimutatása meglehetősen fontos feladat. A ma elterjedten használt robusztus műszeres módszerek mellett egy egyszerűbb, alternatív technika lehet a fémiont hatékonyan és szelektíven megkötni képes biomolekulákat, mint receptorokat tartalmazó kémiai szenzorok alkalmazása. A számos fémion szállító- [1], raktározó- [2], ill. dajkafehérjére [1] jellemző „soft” fémion-kötő CXXC motívum (ahol X ciszteintől eltérő aminosavat jelöl) alapján egy DCSSCY szekvenciájú hexapeptidet terveztünk. A ligandum két Cys tiolátcsoportja a higany(II)ionok hatékony megkötését, míg a megkötődésre adott potenciális „választ” a fluorofór tirozin aminosav biztosíthatja.

Célunk volt, hogy részletesen tanulmányozzuk az Ac-DCSSCY-NH₂ (DY) peptid kölcsönhatását higany(II)ionokkal vizes oldatban. A kölcsönhatást pH-potenciometria, UV-, ill. ¹H-NMR spektroszkópia valamint fluorimetriás módszerekkel vizsgáltuk. Az oldatban végzett vizsgálatokkal megállapítottuk, hogy már egészen savas pH-tól kiemelkedő stabilitású Hg^{II} : DY 1:1 összetételű komplexek képződnek. Fluorimetriás mérésekkel kimutattuk, hogy a fémion kötődése koncentráció arányos fluoreszcencia csökkenést eredményez 1:1 fémion:ligandum arányig pH = 2 – 6 tartományban, mely jelenség alkalmassá teheti a rendszert higany(II)ionok detektálására. A potenciális receptorként való alkalmazhatóság tesztelése céljából a DY peptidet egy szilárd hordozón rögzítve is előállítottuk. Az immobilizált vegyület higany(II)-kötő képességét ICP-MS vizsgálatok segítségével jellemeztük. Megállapítottuk, hogy 1:1 fémion:ligandum arányig a peptid a higany(II)ionok 94-98 %-át megköti a vizsgált mintákból.

[1] Opella, S.J., DeSilva, T.M., Veglia G., Curr. Opin. Chem. Biol., 6, 217-223 (2002)

[2] Blindauer, C.A., J. Biol. Inorg. Chem., 16, 1011-1024 (2011)

Elméleti kémia

FERTIG DÁVID Kémia BSc BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Boda Dezső
 egyetemi docens, PE MK

A Calsequestrin-fehérjehálózat hatása kalciumcsatornákon keresztül történő iontranszport erősségére

Kulcsszavak: Ioncsatorna; diffúzió; Calsequestrin-fehérjehálózat; DERD; Ryanodin-receptor

Az izomsejtekben az izomösszehúzódást a szarkoplazmikus retikulumból (SR) nagy mennyiségben felszabaduló kalcium ionok okozzák. Ezek az ionok a Ryanodin Receptor (RyR) kalciumcsatornákon keresztül szabadulnak fel, a nagy fluxust pedig az SR és az izomsejt közötti nagy koncentrációkülönbség okozza. Az SR-ben a kalcium egy Calsequestrin (Casq) fehérjehálózatban tárolódik. Ezek a henger alakú fehérjék kalcium kötőhelyekkel és nagy negatív felületi töltéssűrűséggel rendelkeznek.

Az ionáram növekedését a feltételezések szerint azonban nem csak az ionkoncentráció növekedése okozza az SR oldalon, hanem szerepet játszik a dimenziócsökkenés általi diffúziógyorsulás (Diffusion Enhancement by Reduction of Dimensionality, DERD) is. Eszerint ha egy három dimenziós térben valamilyen részecske diffundál, hatékonyabb és gyorsabb lesz a diffúzió, ha a teljes tér helyett egy adott felület mellett halad az adott anyag. Három dimenzióban a megtett út nagysága a szabad diffúzió végett sokkal nagyobb lehet, mint a kiindulási- és a végpont távolsága.

Dolgozatomban egyszerű modellt alkottam a RyR ioncsatornához kapcsolt Casq fehérjére és a fenti jelenséget vizsgáltam a Nernst-Planck (NP) transzportegyenlet és Lokális Egyensúlyi Monte Carlo (LEMC) szimulációk segítségével. Az NP egyenlet szolgáltatja a fluxust, míg az LEMC módszer az NP egyenletben szereplő mennyiségek (koncentráció és elektrokémiai potenciál) közötti kapcsolatot írja le. Vizsgálataim fő célja az volt, hogy szétválasszam az ionkoncentráció növekedése illetve a DERD miatt létrejövő áramnövekedést. Számításaim azt mutatták, hogy nagyobb az áram, ha az ionkoncentrációt növelő töltést egy henger felületén helyezem el, szemben azzal amikor ugyanezt a töltés tértöltésként (szabadon mozgó ionokon) van jelen a rendszerben. Eredményeim tehát alátámasztják a DERD jelenségét.

TÓTH ZSUZSANNA Vegyész MSc, 10. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

*Témavezető:
Szabados Ágnes
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

Alsó becslés molekulák energiaszintjeire

Kulcsszavak: alsó becslés; közrefogó függvény; variációs elv; alapállapot; Davidson algoritmus

Dolgozatomban molekuláris rendszerek Hamilton-operátorának sajátérték problémájával foglalkozom a Born-Oppenheimer közelítés keretei között. A variációs elven alapuló közelítő kvantumkémiai módszerek mindig egy felső becslést adnak a sajátértékekhez. Ha alsó becslést is ismernénk, akkor ezzel közre lehetne fogni az energiaszinteket. Ennek az egyszerű elképzelésnek a megvalósítása nehézkes, mert a kvantumkémiai irodalom nem tud könnyen számítható és kellően szoros alsó korlátról.

Dolgozatomban az irodalomban ismert közrefogó függvényből indultam ki, amely felső becsléshez alsót rendel és viszont. Beláttam, hogy a közrefogó függvény által kapott alsó korlát variációs, vagyis stacionárius a Hamilton-operátor sajátfüggvényeinél. A variációs tulajdonságból következően a közrefogó függvény egyre jobb próbafüggvénnyel számolva, egyre jobb becslést ad. Így lehetőség van arra, hogy az alsó korlát maximálásának elvén számoljunk hullámfüggvényt és szoros alsó korlátot.

A közrefogó függvénnyel számított alsó korlát és így az ennek maximálásán alapuló eljárás igen számításigényes. Azt tapasztaltuk, hogy egy adott hullámfüggvénnyel számolt alsó korlát sokkal jobb közelítés, mint ugyanezzel a hullámfüggvénnyel számolt várható érték. Ez indíttatást jelent arra, hogy olyan közelítéseket keressünk amelyek csökkentik a számításigényt és a pontosságot nem rontják lényegesen.

BENDA ZSUZSANNA Vegyész MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Lluís Blancafort

egyetemi tanár, University of Girona, Institute of Computational Chemistry and Catalysis

Szalay Péter

egyetemi tanár, ELTE TTK

Az 5-fluorcitozin molekula sugárzásmentes dezaktivációs útvonalainak elméleti vizsgálata

Kulcsszavak: gerjesztett állapot élettartama; CCSD; CASPT2; kónikus átmetszés; gátmagasság

A DNS molekulát az ultraibolya sugárzás káros hatásaitól a nukleotidbázisok védik meg, ezek ugyanis képesek az abszorpció során elnyelt energiát hihetetlenül gyorsan, sugárzásmentes módon átadni a környezetnek. Az ultragyors sugárzásmentes dezaktivációhoz az elektronállapotok potenciálfelületei között fellépő alacsony energiájú, könnyen megközelíthető kereszteződések szükségesek, ezek teszik lehetővé a rendszer gyors visszajutását az alapállapotba.

Ebben a tanulmányban az 5-fluorcitozin molekula dezaktivációs útvonalait feltérképezve szeretnénk többet megtudni a citozin molekula ultragyors dezaktivációjáról. Korábbi kísérleti vizsgálatok ugyanis kimutatták, hogy az 5-fluorcitozin gerjesztett állapotbeli élettartama százszorosa a citozinénak vizes oldatban [1], és közel duplája gázfázisban [2], az 5-ös helyzetű szubsztitúció tehát kedvezőtlenebbé teszi a citozinéhoz hasonló útvonalon történő relaxációt.

CASSCF, CASPT2 és CCSD kvantumkémiai módszerekkel három olyan útvonalat vizsgáltam meg, amelyek a citozinnál alacsony energiájúnak bizonyultak, és emiatt magyarázhatják a molekula rövid élettartamát.

Az első útvonalra, amely egy $n_O-\pi^*$ állapoton keresztül vezet, a szén-oxigén kötés jelentős megnyúlása, a C6 és N1 atomok körüli piramidalizáció jellemző.

A második útvonalon az N3 atom és az amino csoport kihajlik a gyűrű síkjából, a kereszteződésben közel merőleges lesz rá. A kísérletileg gerjesztett $\pi-\pi^*$ állapot minimumából CASSCF szinten egy 0,36 eV magasságú gáton keresztül juthat el a rendszer a kereszteződésig.

A harmadik útvonalon a gyűrű megcsavarodik a C5-C6 kötés körül, a szubsztituenseik ellentétes irányba fordulnak ki. A kónikus átmetszés és a $\pi-\pi^*$ állapot minimuma között még egy minimumot találtunk, ez CASSCF és CCSD szinten 0,4-0,5 eV-tal magasabb energiájú, mint a $\pi-\pi^*$ minimum, tehát az útvonalon fellépő gát ennél biztosan magasabb lesz. A citozin molekulánál ennek a kereszteződésnek az eléréséhez jóval kisebb energia kellett ($\approx 0,1$ eV).

Eddigi eredményeink alapján az 5-fluorcitozin dezaktivációja inkább a második útvonal mentén játszódik le. Az itt talált gát pedig magasabb, mint a citozin legalacsonyabb gátja, így ez magyarázhatja a különbséget a két molekula élettartamában.

[1] Blancafort et al., J. Phys. Chem. A 109, 20 (2005), 4431-4436.

[2] Lobsiger et al., J. Phys. Chem. B 118, 11 (2014), 2973-2984.

PAPP TAMARA

vegyész

MSc, 3. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

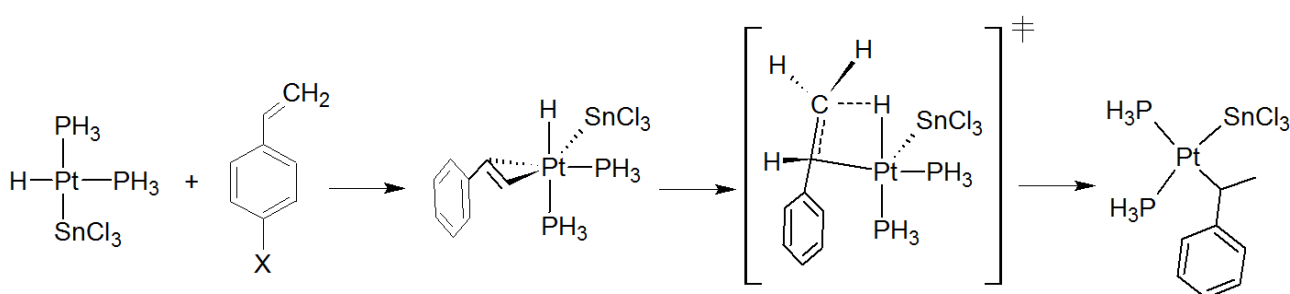
Témavezető:

Dr. Kégl Tamás

tudományos főmunkatárs, PTE TTK

Az elektronikus tulajdonságok finomhangolása platinatartalmú hidroformilező katalizátorrendszerekben

Kulcsszavak: olefin-inzerció, reakciómechanizmus, szubsztituens-hatás, elektrosztatikus potenciál, NBO



X = NMe₂, NH₂, OH, OMe, Me, Ph, H, F, Cl, COOMe, Ac, CF₃, CN, NO₂

A platínakatalizált hidroformilezés egyik kulcsfontosságú elemi lépését, az olefin beékelődést befolyásoló elektronikus hatásokat a PBEPBE sűrűségfunkcionál módszerrel vizsgáltam az SMD szolvatációs modell alkalmazásával. Egyszerű modellvegyületek segítségével tanulmányoztam a szubsztrátumok, a foszfin ligandumok, és a kokatalizátor szerepét.

Az olefin szubsztrátum hatását para-szubsztituált sztirolok segítségével vizsgáltam és meghatároztam a sztirolok kötési energiájának, valamint az olefininzerció aktiválási szabadentalpiájának a szubsztituensek elektronikus hatásától való függését. Megállapítottam, hogy mindkét parameter igen jó lineáris korrelációt adott a para-szubsztituensek Hammett konstansával. Az olefin beékelődés mechanizmusát a mellékelt ábra szemlélteti.

A foszfin ligandumok etilén-inzerciók aktiválási szabadentalpiára gyakorolt hatását az elektronszívó jelleg finomhangolásával vizsgáltam. Amennyiben a foszforatomokon mérsékelt elektronszívó szubsztituensek találhatók, úgy nagyobb reakciósebesség várható, mint a skála két végén található metil és trifluorometil szubsztituensek esetében.

A trihalogenosztannát kokatalizátor szerepét különféle kvantumkémiai eszközökkel vizsgáltam, mint a töltésdekompozíciós analízis (CDA), Bader-analízis (QTAIM), doménen átlagolt Fermi-lyuk analízis (DAFH). A korábbi feltételezésekkel ellentétben azt találtam, hogy a triklorosztannát ligandum mérsékelt szigma-donor és gyenge pí-akceptor sajátsággal rendelkezik. Az elektronikus tulajdonságok aránylag erős oldószerfüggést mutattak, mely kihangsúlyozza az oldószerhatások figyelembe vételének fontosságát átmenetifém-komplexek elektronszerkezetének számításakor is.

KONTOS JÁNOS Vegyésszmérnök MSc MSc, 3. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Dallos András
egyetemi docens, PE MK
Dr. Járvás Gábor
tudományos segéd munkatárs, PE MIK

COSMO-RS momentumok alkalmazása hőmérsékletfüggő folyadék-gáz határfelületi feszültség becsléséhez

Kulcsszavak: folyadék-gáz határfelületi feszültség, COSMO-RS, σ -momentum, ANN, QSPR

A 0,1 μm -nél kisebb átmérőjű cseppek párolgása esetén - a csepp görbült geometriája miatt - a párolgó anyagok göznyomását a Kelvin-egyenlet szerint kell számítani. A Kelvin-összefüggés a csepp átmérője mellett a komponensek folyadék-gáz határfelületi feszültség értékeit is figyelembe veszi. A felületi feszültség becslésére szolgáló eljárások kiindulási adatait legtöbbször ún. csoportadalek módszerekkel becsüljük. Bonyolultabb atomcsoportokat tartalmazó molekulák esetén nem minden esetben áll rendelkezésünkre az adott csoportra jellemző adalek. Mivel a csepp párolgása nem izoterm folyamat, ezért figyelembe kell vennünk a felületi feszültség hőmérsékletfüggését is. Ezért egy olyan módszer, mely csupán a molekulaszervezet felhasználásával képes az adott molekulára jellemző illesztendő paraméterek nélkül, a felületi feszültség becslésére különböző hőmérsékleten, nagy érdeklődésére tarthat számot. Ezért célul tűztam ki egy olyan becselő módszer kifejlesztését, mely a molekulák felületi töltés-sűrűség eloszlását jellemző paraméterek (COSMO-RS σ -momentumok mint molekuláris jellemzők) és a hőmérséklet felhasználásával képes a felületi feszültség értékének pontos számítására.

A rendelkezésemre álló szakirodalom kritikus feldolgozásával létrehoztam egy adatbázist, mely 187 vegyület, különböző hőmérsékleten kísérletileg meghatározott folyadék-gáz határfelületi feszültség értékeit tartalmazza. Ezt követően kvantumkémiai COSMO számítás segítségével meghatároztam az egyes anyagok σ -momentumait. Elsőként többváltozós lineáris regressziót (MLR) végeztem, vagyis a σ -momentumok és a felületi feszültség között lineáris kapcsolatot felételeztem. Mivel sokváltozós minimumkeresési feladatról van szó, ezért többféle minimumkeresési eljárást is megvizsgáltam. A MLR segítségével nem sikerült megfelelő illeszkedést elérnem, ezért a mesterséges neurális hálózatot (ANN) - mint nem-lineáris problémák leírására alkalmas fekete doboz modell - használtam. A mesterséges neurális hálózat optimalása során vizsgáltam a neuronok számának, a tanítási algoritmusnak, illetve a neuron átviteli függvényének hatását a becslés minőségére.

A legjobbnak talált „idegháló” esetén a tanítási és teszt szetthez 0,967, illetve 0,961 négyzetes korrelációs együttható értékek tartoznak, ami a mért és a számított felületi feszültség értékek jó egyezését igazolta.

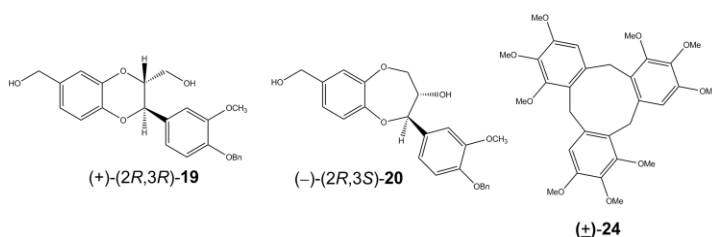
KOVÁCS TIBOR Kémia BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:
 Dr. Mándi Attila
 tudományos munkatárs, DE TTK
 Dr. Kurtán Tibor
 egyetemi docens, DE TTK

Flexibilis molekulák konformációs analízise és TDDFT-ECD vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel

Kulcsszavak: DFT konformációs analízis; TDDFT-ECD számítás; abszolút konfiguráció; konformáció; háromkötéses proton-proton NMR csatolási állandó

A tudományos diákköri munkám során a 19, 20 és 24 vegyületek kvantumkémiai számításaival foglalkoztam. A konformációk elektronikus cirkuláris dikroizmus (ECD) spektrumaik a 20 vegyület esetén háromkötéses NMR proton-proton csatolási állandó meghatározása illetve kísérleti mért értékek reprodukálása.



1. A (+)-19 és (-)-20 vegyületek enantioszelektív szintézissel nyert vegyületek, melyek szintetikus intermedierek flavanolignán származékok előállítására. E vegyületek DFT konformációs analízisét végeztem el több szinten vákuumban és PCM oldószermodellel. A számolt konformerekre TDDFT-ECD spektrumokat számoltam több módszerrel, és a Boltzmann súlyozott ECD spektrumokat összehasonlítottam a mért spektrumokkal, meghatároztam az abszolút konfigurációjukat. Ez összhangban volt az enantioszelektív reakciósor alapján várható abszolút konfigurációval és a 19 származék helicitási szabályával.
2. A (-)-20 vegyület 2- és 3-H kísérleti háromkötéses proton-proton csatolási állandója váratlanul alacsony értéket mutatott (7,4 Hz), ami látszólag nem volt összhangban a protonok transz-diaxiális orientációjával. A csatolási állandó DFT számításával igazoltam, hogy az alacsony érték összhangban van a (-)-20 konformációjával és relatív konfigurációjával. A csatolási állandó alacsony értéke a számításim alapján a C-2 és C-3 atomokhoz kapcsolódó elektronvonzó szubsztituensek hatásának köszönhető.
3. A 24 vegyület esetén DFT konformációsanalízist végeztünk, több módszerrel annak eldöntésére, hogy a planárisan királítást mutató (cserép alakú) konformerek egyensúlyban van egy akirális (propeller) formával, amit kísérleti HPLC, HPLC-CD és NMR mérésekkel igazoltunk. TDDFT-ECD számításokkal meg tudtam határozni a planárisan királis forma enantiomereinek abszolút konfigurációját a HPLC spektrumokkal összevetve.

KATONA RICHÁRD vegyészmérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Kristóf Tamás
egyetemi docens, PE MK
Ható Zoltán
tanszéki mérnök, PE MK

Kaolinit-metanol komplexek molekuláris szimulációs vizsgálata

Kulcsszavak: kaolinit; metanol; molekuláris szimuláció

Molekuláris szimulációban atomi szinten definiált rendszerekre vonatkozóan, viszonylag kevés információ birtokában jutunk termodinamikai (és/vagy dinamikai) adatokhoz, és emellett atomi szinten nyerhetünk betekintést a rendszer szerkezetébe. Mindezt többnyire a jelenleg rendelkezésre álló kísérleti módszerek képességeit felülmúló mértékben tehetjük meg.

A kaolinit többlépcsős interkalációs eljárásában az egyik gyakran használt köztes interkalálószer a metanol. Munkám során a metanolnak a kaolinit rétegei közé történő beépülését vizsgáltam molekuláris dinamikai szimulációkkal. A kaolinitet és a metanolt leíró modelleket korábbi kutatások eredményei alapján választottam, és a GROMACS programcsomag felhasználásával végeztem velük szimulációkat. Számításaimban a kaolinit rétegeinek különböző betöltöttségeihez vizsgáltam a kialakult rétegtávolságokat. A létrejött interkalációs komplexekre jellemző rétegek közötti távolságok mellett a komplexet alkotó vendégmolekulák összességének elhelyezkedését leíró eloszlásokat is meghatároztam, majd ezekből megállapítottam a legjellemzőbb rétegek közötti molekulaorientációkat. Az a kísérleti eredményekből valószínűsíthető tény, hogy a metanol hidroxil-csoportja a kaolinit oktaéderes rétegéhez, míg a metil-csoportja a tetraéderes rétegéhez orientálódik, az eredményekből egyértelműen látható. A számítások alapján a kísérletekből ismert stabil metanol-kaolinit komplex mellett egy nagyobb rétegtávolsággal bíró komplex kialakulásának lehetősége is felmerült.

DÉNES NÓRA Vegyész MSc, 1. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Császár Attila
egyetemi tanár, ELTE TTK
Furtenbacher Tibor
tudományos főmunkatárs, ELTE TTK

Rezgési-forgási energiaszintek a D₂¹⁶O, D₂¹⁷O és D₂¹⁸O molekulákra

Kulcsszavak: rezgési-forgási energiaszint, MARVEL, spektroszkópiai hálózat

A TDK munkám során a kétszeresen deuterált víz izotopológok rezgési-forgási energiaszintjeit vizsgáltam elméleti úton. Munkám során feldolgoztam a molekulák összes, az irodalomban fellelhető mért átmenetét, majd adatbázisba rendeztem őket. A MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) [1] programot használtam az átmenetek kísérleti rezgési-forgási energiaszintekké konvertálásához. Az eljárás során az átmenetekből egy kétkomponensű spektroszkópiai hálózatot [2] hoztam létre. A MARVEL eljárás önkonzisztens adatbázist eredményez, ami azt jelenti, hogy az átmeneteket reprodukálni lehet az átmenetek bizonytalanságán belül a MARVEL energiaszintek alapján.

A MARVEL energiaszintek validálásához ab initio kvantumkémiai számításokat használtam fel. A variációs magmozgás számításokat a D²FOPI [3] program segítségével végeztem, míg az átmenetek címkéit az RRD (Rigid Rotor Decomposition, merev rotátor szétoztás) [4] módszerrel ellenőriztem.

A D₂¹⁶O adatbázisa 57133 mért átmenetet tartalmaz, ebből 56396-t sikerült validálni, melyek 12002 rezgési-forgási energiaszintet határoznak meg. Az energiaszintek közül 6988 a para, míg 5014 az orto spektroszkópiai hálózat tagja. A D₂¹⁷O adatbázisa 566 mért átmenetet tartalmaz, ebből 550-et sikerült validálni, melyek 338 rezgési-forgási energiaszinten keresztül kapcsolódnak össze. Az energiaszintek közül 189 a para, míg 149 az orto spektroszkópiai hálózat tagja. A D₂¹⁸O adatbázisa 11660 mért átmenetet tartalmaz. A MARVEL eljárás során 11490 átmenetet sikerült validálni, melyek 3354 rezgési-forgási energiaszinten keresztül kapcsolódnak össze. Az energiaszintek közül 1760 a para, míg 1594 az orto spektroszkópiai hálózat tagja.

[1] T. Furtenbacher, A. G. Császár, J. Quant. Spectr. Rad. Transfer 2012, 113, 929-935.

[2] A. G. Császár, T. Furtenbacher, J. Mol. Spectrosc. 2011, 266, 99-103.

[3] T. Szidarovszky, A. G. Császár and G. Czakó, J. Chem. Phys. 2010, 12, 8373-8386.

[4] E. Mátyus, C. Fábri, T. Szidarovszky, G. Czakó, W. D. Allen, and A. G. Császár, J. Chem. Phys. 2010, 133, 034113.

KÁNNÁR DÁNIEL Vegyész MSc MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
 Szalay Péter
 egyetemi tanár, ELTE TTK

Szingulett elektrongerjesztett állapotok elméleti vizsgálata a Coupled-Cluster módszer alkalmazásával

Kulcsszavak: gerjesztési energia; oszcillátorerősség; nukleobázisok; EOM-CCSD; CC3-LR

Munkánk során a szingulett elektrongerjesztett állapotokat tanulmányoztuk a különböző Coupled-Cluster módszerek teljesítőképességének meghatározása céljából. Vizsgálataink során 28 különböző funkciós csoportot tartalmazó fotokémiaailag érdekes szerves molekula közel 150 elektrongerjesztett állapotának leírása történt a CC2, CCSD és CC3 módszerek által. A kétszeres gerjesztést tartalmazó CC2 és CCSD módszerek által szolgáltatott vertikális gerjesztési energia és oszcillátorerősség értékeit a két különböző formalizmusban (EOM és LR) részletesen megvizsgáltuk a magasabb elméleti szintet képviselő CC3 módszer eredményeihez képest.

Vizsgálataink eredményeként elmondható, hogy a vertikális gerjesztési energia szempontjából a CCSD módszer valamivel szisztematikusabb, mint a CC2 módszer, azonban az utóbbi lényegesen gazdaságosabb, így nagyobb rendszerek esetén ennek használata javasolható. Az oszcillátorerősség értékeket tekintve a mind a CC2, mind pedig a CCSD módszer kvalitatívan és kvantitatívan megfelelő eredményeket szolgáltat, azonban a CCSD értékek megbízhatóbbak. A két formalizmusból származó adatok közül az LR értékek mindig pontosabbak, azonban közöttük nagy különbség nem tapasztalható, ebből kifolyólag a számítási idő egy része megtakarítható az EOM típusú értékek számításával.

A dolgozatban bemutatott eredmények két nemzetközi folyóiratban megjelent publikáció formájában is dokumentálásra kerültek [1,2].

[1] D. Kánnár and P. G. Szalay, J. Chem. Theory Comput. 10, 3757 (2014).

[2] D. Kánnár and P. G. Szalay, J. Mol. Model. 20, 2503 (2014).

RIEDER NORBERT Vegyészmérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Dallos András
egyetemi docens, PE MK
Kontos János
PhD hallgató, PE MK

Többkomponensű elegyek lobbanáspontjának becslésére szolgáló módszer fejlesztése

Kulcsszavak: COSMO-RS; UNIFAC; NRTL

Az éghető folyadékok lobbanáspontjának pontos ismerete elengedhetetlen a biztonságtechnikai és a veszteség-megelőzési előírások betartásához. A többkomponensű folyadékelegyek leírása igen bonyolult feladat. Az egyes komponensek közötti intermolekuláris kölcsönhatások, olyan nagy mértékben módosíthatják az elegy tulajdonságait, hogy lobbanáspont extrémum tapasztalható az összetétel függvényében. Ezen kölcsönhatások leírására az aktivitási tényező szolgál. Célom egy olyan modell kifejlesztése, mely alkalmas csak részben elegyedő illetve nem éghető komponenst tartalmazó többkomponensű folyadékelegyek lobbanáspontjának becslésére is, az adott rendszerre jellemző illesztendő paraméter nélkül.

A becslőmódszer létrehozása során a kvantumkémiai COSMO elméletre épülő COSMO-RS módszert használtam fel, mely a molekulák optimalizált szerkezetének felhasználásával képes az elegy komponenseinek aktivitási tényezőjének becslésére. Az így létrehozott modell csak a tiszta komponensekre vonatkozó lobbanáspont értékeket, a gőznyomás számításához szükséges paramétereket és a komponensek molekulaszervezetét igényli bemeneti adatként. A COSMO-RS módszer mellett, más aktivitási modellek (UNIFAC, NRTL) is implementálásra kerültek a becslőmódszerben, mely segítségével lehetőség van összehasonlítani a különböző aktivitási modellek által számított eredményeket.

Munkám első részeként áttekintettem a többkomponensű elegyek lobbanáspontjára vonatkozó szakirodalmat, valamint mérési adatokat gyűjtöttem a modell validálásához. Ezután szakirodalmi adatok felhasználásával összegyűjtöttem a különböző aktivitási modellek paramétereit, a tiszta komponensek lobbanáspontját és a gőznyomás számításához szükséges paramétereket tartalmazó adatbázisokat. Ezt követően kémiai rajzolóprogramok segítségével létrehoztam az egyes anyagok molekulaszervezetét, majd kvantumkémiai COSMO számítást végeztem. A különböző összetételek esetén a lobbanáspontot iterációs módszerrel határoztam meg. Továbbiakban összehasonlítottam az egyes aktivitási modellekkel számított eredményeket.

A létrehozott modellt a szakirodalomban talált kísérleti eredmények felhasználásával validáltam. A tesztelés során megállapítottam, hogy a modell alkalmas többkomponensű elegyek lobbanáspontjának becslésére.

A munka a Magyar Állam és az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 projekt keretében.

FÁBIÁN BALÁZS Vegyészmérnök MSc, 11. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Jedlovsky Pál
tudományos tanácsadó, BME VBK
Dr. Szőri Milán
főiskolai docens, SZTE JGYPK

Víz-HCN elegyek gőz-folyadék határfelületének vizsgálata számítógépes szimulációval - mit mondhatunk a 'HCN Világ' elméletéről?

Kulcsszavak: molekuláris dinamika; GROMACS; felület analízis; ITIM; prebiotikus HCN

Munkám során molekuláris dinamikai szimulációk segítségével a határfelületi adszorpció jelenségét tanulmányoztam hidrogén-cianid különböző összetételű vizes oldataiban. A számításokat a kanonikus (NVT) sokaságon, 273 K hőmérsékleten végeztem. Az összehasonlításhoz emellett a tiszta vízből és a tiszta hidrogén-cianidból álló rendszereket is megvizsgáltam. A gáz folyadék határfelületi réteget és az alatta húzódó további két molekuláris réteget az ITIM módszer segítségével határoztam meg. A szimulációkból kimutatható, hogy a hidrogén-cianid erős felületi adszorpciót mutat, amely a felületi réteg alatt található további két réteg esetén is jelentős mértékű. Továbbá, a határfelületi réteg szélessége is nagyobb, mint az azt követő rétegeké, ellenben ez a hatás azok esetén már nem tapasztalható. Emellett a molekuláknak a felületi réteg és a tömbfázis közötti kicserélődése egy nagyságrenddel lassabb, mint a többi réteg esetében. Mindezen eredmények alapján az adszorpció mértékétől eltekintve, a határfelület közelsége kizárólag a felületi rétegben tartózkodó molekulákra fejt ki hatást. A felületen való tartózkodási idő a hidrogén-cianid esetében egy nagyságrenddel nagyobb, mint ami a vízmolekuláknál tapasztalható. Ezen túlmenően, a vizsgált rendszerek határfelületi rétegében a hasonló molekulák laterális asszociációja is megfigyelhető. A tény, hogy a hidrogén-cianid feldúsul a határfelületen, laterális önasszociációt mutat és híg oldatok esetén szokatlanul hosszú a felületen való tartózkodási ideje, messzemenő következményekkel járhat a hidrogén-cianidnak a prebiotikus evolúció során betöltött szerepére és biológiai fontosságára nézve, különös tekintettel a „HCN-világ” hipotézis esetére.

Fizikai kémia

KISS VIRÁG Vegyész MSc, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Ósz Katalin
egyetemi docens, DE TTK
Józsa Éva
egyetemi tanársegéd, DE TTK

1,4-benzokínok és szulfítion reakciójának vizsgálata

Kulcsszavak: kinon; reakciókinetika; redukzív dehalogénezés

A halogéneket tartalmazó környezetszennyező szerves anyagok halogénmentesítése fontos ipari probléma. A halobenzokínok a víztisztítás melléktermékei. Érdekes, hogy csővezetékben kisebb, míg az uszoda vizében koncentrációjuk nagyobb, ahol a napvédő testápolók, krémek, kozmetikumok prekursorokként elősegítik a képződésüket. Eltávolításukat UV-fénnyel való megvilágítással és ozonizálással kísérelték meg. Na_2SO_3 -t alkalmazva a halobenzokínoknak egy már a környezetre kevésbé káros anyaggá történő átalakítása valósulhat meg.

Munkám során a 2,5-diklór-1,4-benzokín Na_2SO_3 -tal lejátszódó reakcióját vizsgáltam. Céлом az egymás mellett lejátszódó fotoreakció és a redukciós, valamint egyéb folyamatok elkülönítése, illetve a kinetikájuknak a tanulmányozása.

Vizes közegben a kinonszármazékok fény hatására diszproporcióval hidrokinonná és hidrokínonná alakulnak át. Egy másik reakcióúton oxigén felszabadulása közben hidrokinonná redukálódhatnak. Ezen reakciók spektrofotometriásan jól követhetők, mivel a kiindulási kinon és a termékek abszorpciós spektruma eltérő.

Kis szulfítkoncentrációnál a kétsugaras fotométer nem, de a diódasoros fotométer fotoreakciót indukált. A feltételezett keton-biszulfít reakció olyan gyors, hogy spektrofotometriásan nem tudtam követni, ezért gyorskinetikai méréseket végeztem. Kinon, valamint redukálószer koncentrációfüggést vizsgáltam. Stopped-flow technikával a reakció sztöchiometriájának meghatározását kíséreltem meg.

Kloridion-szelektív elektródos mérések azt igazolták, hogy a kinongyűrűről egy ekvivalens klór disszociál, mivel az oldatban lévő kloridionok koncentrációja megnőtt, azaz redukzív dehalogénezés történt.

ESI-MS-mérések segítségével igazoltuk az irodalomban feltételezett hidrokinon-monoszulfonát képződését. A 2,5-diklór-1,4-benzokín és szulfítion reakcióját vizsgálva két összetételnek megfelelő szerkezetet írtunk le, amiket a számolt izotópeloszlások igazoltak.

DFT-számítások alapján 1,4-benzokín és szulfít reakciójából hidrokinon-monoszulfonát képződött. Az általunk vizsgált rendszerben képződő egyik addukt a hidrokinon-monoszulfonát képződésével megegyező mechanizmus szerint keletkezik. További elméleti számítások alátámasztották, hogy van egy olyan addukt, amelynek képződése során a klór helyére lép be a szulfocsoport.

KOVÁCS SÁNDOR LAJOS vegyészmérnök BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Nagy Miklós
egyetemi adjunktus, DE TTK

4-amino-4'-izocianobifenil származékok, mint potenciális szolvatokróm fluoroforok

Kulcsszavak: fluoreszcencia, intelligens molekula, benzidin, Kamlet-Taft, komplexképződés

Összefoglaló

Az új, sokoldalúan felhasználható „intelligens” fluoreszcens anyagok fejlesztése napjaink egyik legnagyobb kihívása. Az ilyen anyagok közé tartoznak a szolvatokróm fluoreszcens vegyületek is, melyek a környezettel való kölcsönhatásnak megfelelően képesek az emittált fény hullámhosszát és/vagy intenzitását változtatni. Ezek között is különösen jelentősek a kék fényt emittáló anyagok ugyanis megfelelő szűrők/festékanyagok segítségével bármilyen szín előállítható segítségükkel.

Munkánk során új, hatékony, 4-amino-4'-izocianobifenil (ICAB) alapú vegyületcsaládot fejlesztettünk ki a jól ismert benzidint használva kiindulási anyagként. Az előállított anyagok fluoreszcenciás tulajdonságait UV-látható és fluoreszcencia spektroszkópiával vizsgáltuk. Az izociano csoport bevitele a molekulán belül létrejövő töltésmegoszlás miatt jelentős batokróm eltolódást okozott az abszorpciós maximum helyzetében az UV spektrumban a benzidinhez képest (279 nm vs 301 nm, hexánban), amit az amino csoport metilezésével tovább tudtunk növelni (monometil származék (monoMICAB) esetében 313 nm-re, dimetil származék (diMICAB) esetén 323 nm-re). Az emissziós spektrumokban sokkal kifejezettebben jelenik meg ez az effektus. Míg a benzidin nem mutatott szolvatokróm tulajdonságokat (eltolódása $\Delta\lambda_{em,max} \sim 30$ nm), ICAB-nál ez az érték jelentősen megnőtt $\Delta\lambda_{em,max} \sim 104$ nm az izociano csoport bevitelének köszönhetően a molekulába. monoMICAB és diMICAB esetében is hasonlóan kiváló szolvatokróm tartományokat kaptunk: $\Delta\lambda_{em,max} \sim 92$ nm és $\Delta\lambda_{em,max} \sim 90$ nm. A diMICAB esetében az emittált fény a látható kék tartományba esett, lehetőséget teremtve a molekula gyakorlati felhasználására hétköznapi fluoreszcens alkalmazásokban.

A szolvatokróm viselkedés jellemzésére a Kamlet-Taft-, illetve a Catalán-elmélet bizonyult hatékornak. ICAB és monometilezett származéka esetén fluoreszcenciás kvencselődést figyeltünk meg, amit a szabad hidrogént tartalmazó NH csoport és a piridin közötti hidrogén kötéses komplex kialakulásával magyaráztunk.

Az ICAB származékok fluoreszcenciás tulajdonságait kvantumkémiai számítások segítségével értelmeztük. Megállapítottuk, hogy az 1-1' kötés körüli szabad rotáció gátolja az egész molekulára kiterjedő konjugációt, ezáltal jelentősen befolyásolja az emissziós tulajdonságokat

HERCZEGH TÜNDE CSILLA Vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Horváth Dezső
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Schusztér Gábor
egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK

A hidrogénion diffúziós együtthatójának meghatározása hidrogélekben

Kulcsszavak: agaróz; konduktometria; impedancia; PFGSE-NMR; numerikus modellszámítások

Kutatómunkánk célja a hidrogénion diffúziós együtthatójának meghatározása különböző hidrogélekben. Méréseink folyamatát és eredményeit egy kiválasztott közegben, 2 (m/V)%-os agaróz gélben mutatjuk be. Rendszerünk viselkedését numerikus számításokkal és segédmérésekkel is tanulmányoztuk. Témánk motivációját egyrészt a hidrogélek széleskörű alkalmazása jelenti, többek között élettudományi és anyagtudományi területeken, ezen gélek biokompatibilitásából és fizikai tulajdonságainak jó szabályozhatóságából következően. Másrészt, a reakció-diffúzió vezérelt kémiai mintázatképződést szintén hidrogélekben vizsgálják, ahol sok esetben a diffúzióval kölcsönható autokatalitikus kémiai reakcióban az autokatalizátor szerepét a hidrogénion tölti be. A mintázat megjelenéséért sokszor a reakcióban résztvevő részecskék eltérő diffúziós sebessége a felelős, ezért a dinamikai vizsgálatokhoz fontos, hogy megismerjük a hidrogénion diffúzióállandóját az adott kísérleti körülmények között. Mivel nem áll rendelkezésünkre olyan módszer, amellyel ezt közvetlenül megtehetnénk, ezért egy kombinált mérés technikát alkalmazunk. Egy konduktometriás módszerrel erős, biner elektrolitok effektív diffúziós együtthatóját mérjük, amely magában foglalja az elektrolit mindkét ionjának diffúzióállandóját:

$$D_{eff} = \frac{2D_a D_k}{D_a + D_k}$$

Egyedi ionos komponensek diffúzióállandóját a pulzus gradiens spin echo NMR technikával mérhetjük meg, ez azonban a hidrogénion közvetlen mérésére nem alkalmas hidrogélekben. A két módszerből nyerhető eredmények között az előbbi képlet teremt kapcsolatot: amennyiben vezetésméréssel meghatározzuk egy olyan erős, biner elektrolit effektív diffúzióállandóját, amelyben a hidrogénion a kation, illetve ismerjük az anion egyedi diffúziós együtthatóját, akkor az egyenlet értelmében kiszámíthatjuk a hidrogénionra vonatkozó értéket. Egy alkalmas elektrolit a HCl, a kloridion azonban nem mérhető eredményesen az NMR módszerrel, a nátriumion viszont igen. Amennyiben tehát NaCl és HCl effektív diffúziós együtthatóit is megmérjük vezetésméréssel, valamint PFGSE-NMR mérésekkel meghatározzuk a nátriumion egyedi diffúziós együtthatóját, akkor a fenti egyenlet kétszeri alkalmazásával eljutunk a hidrogénion diffúziós együtthatójához a közös anion révén.

KONCZ BENEDEK ÁRPÁD Kémia BSc, 4. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

*Témavezető:
Tarczay György
egyetemi docens, ELTE TTK*

Aromás szénhidrogének fotolízisének vizsgálata alacsony hőmérsékletű inert és reaktív mátrixokban

Kulcsszavak: fotokémia; gerjesztett állapotok; UV- és IR-spektroszkópia; reaktív spécieszek; mátrixizoláció

Manapság egyre nagyobb mennyiségben kerülnek a légkörbe aromás szénhidrogének antropogén forrásokból. Nagyfokú stabilitásuk miatt ezeknek a vegyületeknek kevés kiürülési lehetőségük van a légkörből, ezek közül az egyik út a fotokémiai bomlás. Azonban ennek részletei, a korábbi erőfeszítések ellenére, nem teljes mértékben megértettek.

Ezért kutatásom céljából a benzol, a toluol és a xilolok első gerjesztett elektronállapotához kötődő fotokémiájának vizsgálatát tűztam ki, még hozzá a magas légköri körülmények szimulálására alkalmas inert (Ar és N₂) és reaktív, oxigéntartalmú mátrixok alkalmazásával.

A fotolizáló hullámhosszok meghatározása érdekében felvettem a kérdéses vegyületek UV-spektrumát. A fotolízis termékeit IR-spektrumuk alapján azonosítottam. A benzol fotolízise során az azonosítható termékek a fenilgyök, az o-benzin, a m-benzin, a fulvén és a benzvalén voltak. Megállapítottam a fotokémiai termékek arányát, ami alapján elmondható, hogy a termékképződésben hullámhosszfüggés tapasztalható. A benzvalén képződésének aránya a fotonenergiával együtt nő. A fenilgyök képződése 259 nm-en a leghatékonyabb, arányában pedig ebből keletkezik a legtöbb a többi termékhez képest. A toluol és a xilolok esetében csak disszociációs termékek képződése volt megfigyelhető, azaz rendre a benzil-, az *orto*-, a *meta*-, és a *para*-metilbenzilgyök. Az *orto*- és *para*-xilol esetében egy további hidrogén leszakadásával xililének keletkeztek. A két mátrixot összehasonlítva a nitrogénben minden esetben kisebb a termékhozam az argonhoz viszonyítva, és minden esetben a legnagyobb hullámhossz párosítható a bomlás legnagyobb hozamával.

Az egyes mátrixokban, különböző hullámhosszokon mért relatív foszforeszcencia-intenzitásának összevetése az adott mátrixban tapasztalható relatív bomlási hatékonysággal rámutatott, hogy a két mennyiség korrelál. Ezek a kísérleti eredményeim egyértelműen igazolják azt a korábbi feltételezést, hogy a gyökök képződése triplet állapotokon keresztül valósul meg. Szintén ezt a mechanizmust igazolja az is, hogy a kioltó oxigénmolekulákat tartalmazó reaktív mátrixokban nem hatékony az elsődleges termékképződés, és így az aromás peroxigyökök előállítása sem.

Megmutattam, hogy nagyobb hatékonysággal lehet a gyököket generálni, ha az oxigént tartalmazó Ar-t egy külön réteg formájában választjuk le a mintát tartalmazó Ar-mátrixra. Ilyen leválasztási módszerrel, majd a fotolízist követő hőkezeléssel sikerült kis mennyiségben előállítani az igen reaktív fenil-peroxigyököt.

LÉGRÁDY BONIFÁC Vegyész MSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:
Tarczay György
egyetemi docens, ELTE TTK
Vass Elemér
egyetemi docens, ELTE TTK

Cisztein konformerek vizsgálata Raman és Raman optikai aktivitás spektroszkópiával

Kulcsszavak: kísérleti; DFT; implicit; explicit; oldószermodell

TDK munkám során a ciszteinmolekula ikerionos és protonált formáinak vizes oldatokban felvett konformereit vizsgáltam Raman és Raman optikai aktivitás (ROA) spektroszkópiai módszerekkel. A mérési eredmények kiértékeléséhez DFT számításokat végeztem a konformereloszlásra, valamint ezen a szinten számítottam a konformerek Raman és ROA spektrumait is. A vizes közeg ciszteinmolekulára, illetve annak spektrumaira gyakorolt hatását implicit és explicit vízmolekulákkal kombinált oldószermodellel modelleztem. A ciszteinmolekula konformereloszlásának meghatározásakor az ikerionos forma esetében Pecul és munkatársai eredményeiből [1] indultam ki. A protonált forma konformációs analízisét magam végeztem a molekula négy diéderes szögének szisztematikus változtatásával. A protonált konformerek az ikerionosokból formailag levezethetők, azok NH_3^+ -csoportjukhoz közelebbi, illetve attól távolabbi karboxilát-oxigénjük protonálásával. A konformerek szerkezet-meghatározásához IEF-PCM oldószermodellt használtam, és első közelítésben azok spektrumainak számításakor is ezzel a modellel vettem figyelembe az oldószer és a ciszteinmolekula között kialakuló kölcsönhatásokat. A tisztán implicit oldószermodellel számított spektrumok a kísérletiekkel csak azokban a spektrumtartományokban mutattak elfogadható egyezést, ahol a molekula olyan rezgései találhatók, amelyekben csak kis mértékben vesznek részt azok a csoportok, melyeknél specifikus solvatáció, intermolekuláris hidrogénkötés kialakulására számíthatunk. A specifikus solvatáció számításba vételére vizsgáltam a ciszteinmolekula négy, illetve öt vízmolekulával alkotott komplexeit. A vízmolekulák explicit módon történő figyelembevételével jelentős javulást értünk el az elméleti és kísérleti spektrumok egyezésének tekintetében. Számításaink azt mutatták, hogy specifikus solvatáció kialakulásakor az intramolekuláris kölcsönhatások elveszítik jelentőségüket a molekulák közt kialakulókkal szemben. Ennek alátámasztására MP2 számításokat is végeztem. Eredményeink alapján kiemelkedő fontosságú a vízmolekulák között kialakuló hidrogénkötések figyelembevétele is.

A további terveink között szerepel hasonló vizsgálatok elvégzése más aminosavak esetében is. Mindenképpen szükséges az alkalmazott számítási szint (B3LYP/aug-cc-pVDZ) megbízhatóságának ellenőrzése más funkcionálokkal, illetve magas szintű elektronkorrelációs módszerekkel.

[1] Kamiński, M.; Kudelski, A.; Pecul, M. J. Phys. Chem. B, 116(16), 4976-4990 (2012)

DERDÁK DIÁNA Kémia BSc, 7. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Peles-Lemli Beáta
egyetemi adjunktus, PTE TTK

Citrinin-ciklodextrin kölcsönhatások fluoreszcencia spektroszkópiai vizsgálata

Kulcsszavak: oldószerhatás; termodinamikai paraméterek; molekuláris dokkolás

A mikotoxin elnevezés a görög mykes = gomba és a latin toxikum = méreg szóból ered. A gombák által termelt méreganyagoknak látszólag nincs szerepük a gomba metabolizmusában, mégis potenciális veszélyforrást jelentenek a növényekre és állatokra, továbbá a táplálékláncba bejutva az emberre is. Elsősorban az állati takarmányban találhatók meg nagy mennyiségben. A különböző gabonafélékben, az aratási időszak előtt, illetve azt követően termelődnek. A termények feldolgozása, tárolása és az etetés körülményei is kedvezőek lehetnek szaporodásuknak, mely komoly gazdasági veszteséget okozhat. Statisztikai adatok alátámasztották, hogy az alapvető élelmiszerek 25-50 %-a - melyet világszerte termelnek - fertőzöttek valamilyen mikotoxin által. Biológiai hatásuk rendkívül szerteágazó; elsősorban vese-, idegrendszer- és májkárosító sajátságuk kiemelkedő, valamint egyes származékok karcinogén tulajdonsággal is rendelkeznek.

A mikotoxinok kimutatására alkalmas módszerek fejlesztése napjainkban nagy jelentőségű. Ezen törekvések egy része olyan kölcsönhatások tanulmányozására irányul, melyben általában olyan vegyületeket használnak, amelyek a kimutatandó mikotoxinokkal gyenge kölcsönhatásba lépnek, komplexet alkotnak és ennek eredményeképpen valamely jól mérhető fizikai-kémiai tulajdonságuk megváltozik. Az egyik ilyen eredményesen alkalmazott vegyületcsoport a ciklodextrinek, melyek számos mikotoxinnal, mint például az Ochratoxin A-val, Zearalenonnal vagy éppen a Citrininnel is komplexet alkotnak és a komplexképződés során erősítik a mikotoxin természetes fluoreszcenciáját. A környezeti, élelmiszer vagy takarmányminták esetében az egyik legnehezebb, ugyanakkor legfontosabb feladat a mikotoxinok szelektív kimutatása mellett a minták toxinmentesítése. Ehhez kapcsolódóan munkánk során mikotoxinok nagy érzékenységű szelektív kimutatása valamint a toxinmentesítési eljárások fejlesztése céljából tanulmányoztuk e vegyületeknek, mint vendégmolekuláknak ciklodextrinekkel mint gazdamolekulákkal létrejövő kölcsönhatását, annak fizikai-kémiai hátterét. Jelen munkánkban öt β -ciklodextrin származék citrininnel alkotott komplexének stabilitását tanulmányoztuk valamint meghatároztuk a komplexképződést kísérő termodinamikai paramétereket. A molekuláris szintű értelmezés céljából méréseinkhez elméleti kémiai számításokat végeztünk.

LUKÁCS NORBERT Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Balogh György Tibor

osztályvezető, címzetes egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt., Szintézistámogató Laboratórium

Gyógyszerjelölt vegyületek lipofilitásának jellemzése a gyógyszerkutatás korai fázisában

Kulcsszavak: proton-disszociációs állandó; megoszlási hányados; lipofilitás

Az elmúlt két évtizedben az ipari gyógyszerkutatásban bekövetkezett változásnak köszönhetően az újonnan szintetizált gyógyszerjelölt vegyületek fizikai-kémiai jellemzésében, a korábban egy-egy kizárólagosan alkalmazott fizikai-kémiai paraméter használata helyett, a komplex jellemzés vált meghatározóvá. A gyógyszerek felszívódásának előrejelzésére, illetve a farmakokinetikai és a farmakodinamikai fázisban lejátszódó folyamatok értelmezésére egyik legrégebben használt fizikai-kémiai paraméter a lipofilitás. A log P mérése klasszikusan rázótolcséres, illetve pH-metriás módszerek alkalmazásával történik. Ezen technikák előnye, hogy pontos értéket szolgáltatnak, viszont áteresztőképességük kicsi, illetve a lipofilitás potenciometrikus meghatározása csak ionizációra képes vegyületek esetén végezhető. Ezen módszerek mellett jó alternatívát jelent a fordított fázisú kromatográfiás (RP-HPLC) technika, ami jóval nagyobb áteresztőképességű, viszont eddigi ismereteink szerint csupán lipofilitási trendek felállítására, illetve közelítő adat megadására alkalmas.

Munkám során célul tűztük ki egy RP-HPLC alapon megadott lipofilitási adatokat ($\log k_{0,\text{grad.}}$) felhasználó automatizált rendszer kidolgozását, ami alkalmas lehet egy adott szerkezeti körbe tartozó vegyület pontos log P értékének megadására, a lehető legkevesebb elemszámú, nagy pontosságú lipofilitási adat felhasználásával. A modellrendszer kialakításához a Richter Gedeon Nyrt. molekulabankjából szerkezeti diverzitásuk (Tanimoto-index) és ionizációs készségük alapján három központi idegrendszerre ható vegyületcsaládból összesen 70, illetve 68 különböző sav-bázis karakterű gyógyszeripari „gold standard” vegyületet választottunk ki. A vegyületek lipofilitását potenciometrikus, illetve pK_a értéküket figyelembe véve különböző pH-jú mozgófázisokat alkalmazva, RP-HPLC módszerrel is megmértük. Az eredmények felhasználásával, statisztikai módszerekkel vizsgáltuk, hogy egy adott Tanimoto tartományba eső vegyületkör minimálisan hány tagjának a lipofilitását szükséges klasszikus, nagy pontosságú módszerrel megmérni a lehető legpontosabb $\log P - \log k_{0,\text{grad.}}$ összefüggés megadásához. A kapott eredmények alapján szeretnénk a jövőben RP-HPLC alapú $\log k_{0,\text{grad.}}$ paraméterek birtokában, és további célzottan kiválasztott vegyületek nagy pontosságú log P értékeinek megadásával, egy olyan robusztus modellrendszert kialakítani, mely alkalmas lehet nagyszámú, központi idegrendszerre specifikus vegyület lipofilitásának meghatározására.

KOVÁCS NOÉMI Vegyész MSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Vesztergom Soma

tudományos munkatárs, Department für Chemie und Biochemie, Universität Bern

Zsélyné Ujvári Mária

egyetemi adjunktus, ELTE TTK

Kettős potenciodinamikus módszerek fejlesztése és alkalmazása forgó gyűrűs korongelektrodokon

Kulcsszavak: elektrokémiai mérés technika; elektrod folyamatok; generátor-kollektor rendszerek; polimerfilm-elektrodok; ciklikus voltammetria

TDK munkám során az ELTE Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratóriumában folyó módszertani fejlesztésekbe kapcsolódtam be. Részt vettem egy új mérőrendszer kialakításában, amely elsősorban ún. generátor-kollektor rendszerek (pl. forgó gyűrűs korongelektrod, RRDE) vizsgálatára alkalmas. Ennek eredményeképp nemcsak hagyományos RRDE mérések végezhetők, melyek során az egyik munkaelektrod potenciálját állandó értéken tartjuk, hanem a két munkaelektrod egyidejű potenciodinamikus vezérlése is megvalósíthatóvá vált.

A laboratóriumban kifejlesztett új módszereket – melyek előnyeit eddig csak az Au | 0,5 M H₂SO₄ rendszer példáján mutatták be – alkalmaztam a Pt | 0,5 M H₂SO₄ rendszer vizsgálatára. Az úgynevezett kettős ciklikus voltammetriás méréseket alkalmazva sikerült kimutatnunk, hogy mind a platinafelület oxidációja, mind annak redukciója során redukálható köztitermék (feltehetően oxidált állapotú Pt) keletkezik. Ez a jelenség azonban nem olyan kifejezett, mint az Au | 0,5 M H₂SO₄ rendszerben, ahol nagy mennyiségben keletkezett oxidált állapotú arany.

A kettős ciklikus voltammetria jól alkalmazhatónak bizonyult a kénsavoldatba merülő arany felületre (az RRDE korongjára) leválasztott poli(3,4-etiléndioxitiofén) (PEDOT) polimerfilm degradációjának vizsgálatára is. Az RRDE gyűrűjén gyors pásztázást végezve sikeresen kimutattuk, hogy a polimerfilm irreverzibilis oxidációja során továbboxidálható (közti)termék keletkezik.

E kísérletek jól szemléltetik a korábban kifejlesztett kettős potenciodinamikus módszerek sokoldalúságát. A módszertani fejlesztésekhez hozzájárulva megvizsgáltam az RRDE gyűrűjének kapacitásváltozását a PEDOT filmmel módosított korongelektrod kénsavoldatban történő polarizációja során. E módszer alkalmas lehet a reverzibilis redoxi-átalakulásokat kísérő ionvándorlási folyamatok követésére. A kettősréteg kapacitásának közvetett mérését két különböző módon is megkíséreltük: egyrészt a kettősréteg töltőáramának mérésével, másrészt a gyűrű impedanciájának kis amplitúdójú szinuszhullám-perturbáción alapuló meghatározásával. Mindezekkel elsődleges célunk az volt, hogy tanulmányozzuk az RRDE gyűrűelektrodján végzett kapacitásmérésben rejlő lehetőségeket, ilyen méréseknek ugyanis nincs előzménye az RRDE irodalmában. Mindkét kettősréteg-kapacitás meghatározási módszer további finomítást igényel, az ezzel kapcsolatos kísérletek jelenleg is folynak.

MARSAI ÁDÁM Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Péter László

tud. tanácsadó, MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

Neuróhr Katalin

tud. mts., MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

Mangán-nikkel ötvözetek elektrokémiai leválasztása metanolból és vizsgálatuk

Kulcsszavak: bevonat; morfológia; elemösszetétel; röntgendiffrakció; mágneses ellenállás

Fémsók nemvizes közegből történő elektrokémiai leválasztása kevésbé tanulmányozott, új ága az elektrokémiának. Munkám során mangán-nikkel ötvözetek elektrokémiai leválasztásával és vizsgálatával foglalkoztam. A mangán vizes közegből való leválasztása a nagy negatív standardpotenciálja miatt nem lehetséges, azonban adódik a lehetőség, hogy a közeg megváltoztatásával a potenciálablakot kiszélesítsük, a leválási potenciált eltoljuk.

Dolgozatomban az elektrokémiai fémleválasztás elméleti hátterét és a mérésekhez használt műszerek működését mutattam be.

Munkám során elsősorban a Mn-Ni fürdők állandó árammal és állandó potenciálon történő leválasztását vizsgáltam, valamint csoportokba osztottam a 200 nm nominális vastagságú, különböző összetételű mangán fürdőkből különböző potenciálokra leválasztott bevonatokat felületi morfológiája szerint.

Ciklikus voltammogramok felvétele során megállapítottam a mangán és a nikkel leválási határpotenciálját metanolban, mely -1,1 V illetve -0,9 V volt, valamint a 25 %, 50 % és 75 % mangán tartalmú fürdők ciklikus voltammogramját is felvettem. Ezen kiindulási adatok alapján kezdtem a bevonatok elektrokémiai leválasztását.

Az állandó árammal történő leválasztások megmutatták, hogy ez a leválasztási mód nem megbízható, a leválasztott minták nem tapadnak jól a hordozóhoz, felületük a legtöbb esetben matt és egyenetlen. Azonban az állandó potenciálon történő mérések megbízhatóan sikerültek, az elemösszetételi analízis során kapott eredmények szórása kicsi, ennek ellenére néhány mintában adott fürdőösszetételen eltérő fázisbeli összetételt kaptam. Ezen mérések eredményei megmutatták, hogy a mangán fürdőbeli aránya és a leválasztott bevonat mangán tartalma közel normális. A 25 % mangán tartalmú fürdőből, különböző potenciálokra leválasztott minták esetén megállapítottam, hogy a -1,6 V potenciálon leválasztott bevonat mangán tartalma ugrásszerűen megnő 5 %-ról 32 %-ra a -1,4 V potenciálon leválasztott bevonat mangán tartalmához képest.

Állandó potenciálon leválasztott mintákon röntgendiffrakciós vizsgálatokat is végeztem, hogy megállapítsam az adott anyagok módosulatát és rácsparamétereit az egyes mintákban. A hordozó réz csúcsa minden esetben jól látszódik a röntgendiffrakciós mérések eredményein. A nikkelt is egyértelműen be lehetett azonosítani több minta esetén. A mangán csúcsok egyértelmű azonosítása nem volt lehetséges. Egy-egy, több mangán módosulatra jellemző csúcs jelent meg a diffraktogramon.

DÚZS BRIGITTA Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Szalai István
 egyetemi docens, ELTE TTK

Mozgó csapadékfrontok által létrehozott mintázatok

Kulcsszavak: csapadékképződés; reakció-diffúzió; mintázatképződés; alumínium-hidroxid; nemlineáris dinamika

A mintázatképződés alapvető fontosságú jelenség a természetben, élő és élettelen környezetünk megannyi példát szolgáltat a térben vagy időben periodikus jelenségekre. A csapadékleválás során kialakuló mintázatok, a szilikanövények illetve a Liesegang-jelenség behatóan tanulmányozott jelenségek az irodalomban.

Munkám célja reakció-diffúzió jelenségek vizsgálata volt olyan csapadékképződési reakcióban, ahol a csapadék a sajátion felesleg hatására komplex formában oldódni képes. Ehhez agaróz gélbe két oldalról savas alumínium-klorid oldatot és nátrium-hidroxid oldatot diffundáltattam be, állandó utánpótlással. A folyamatokat, csapadékmintázatok a diffúzió irányára merőleges síkban figyeltem meg. Kísérletenként az alumínium-ion koncentrációját változtattam, ennek eredményeképpen három nagyon különböző mintázat kialakulásáról számolhatok be:

1. periodikus oldódási-leválási frontok ("oszcilláció")
2. a rendszerben levő inhomogenitások által indukált mozgó csapadékfrontok ("gerjeszthetőség")
3. laterális front instabilitás révén dendrites szerkezetű mintázatok kialakulása.

0,05 M alumínium-ion koncentráció értéknél tranziensen megjelenő periodikus oldódási-leválási ciklusokat figyeltem meg, melyek magyarázatához fontos figyelembe vennünk a kiindulási- és peremfeltételeket. A kezdetben üres gélbe, annak két oldaláról indul meg az ionok diffúziója. A két front találkozásánál csapadékszóna alakul ki, amely azután a növekvő hidroxid-ion koncentráció hatására oldódik. Mindeközben az hidroxid-ion front tovább halad a gél mélységében és újabb csapadékszónát hoz létre, amely később az első zónához hasonlóan oldódik. Egy csapadékszóna egy leválási-oldódási ciklust mutat, de a gél mélységében több ilyen zóna is kialakul és ezek ciklusai időben eltolódnak egymáshoz képest, oszcillációt látunk. Az oldódási-leválási ciklusokat követően csapadékfrontok jelennek meg a gélben levő inhomogenitásoknak megfelelően. A mozgó frontok nagy távolságot képesek megtenni, találkozáskor pedig kioltják egymást, tehát viselkedésük a homogén autokatalitikus reakció-diffúzió frontokéhoz hasonló.

0,20 – 0,40 M alumínium-ion koncentráció tartományban mozgó oldódási és csapadék-leválási frontok alakulnak ki, melyek idővel instabillá válnak, tűszerű, dendrites mintázatot hozva létre. Ehhez hasonló, Mullins-Sekerka instabilitással magyarázható mintázatképződést korábban még nem figyeltek meg csapadék-képződési reakciókkal végzett kísérletekben.

A kísérletek kiegészítésére egydimenziós szimulációt végeztem.

FILOTÁS DÁNIEL Vegyész MSc, 3. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Nagyné Dr. Zengő Livia
tudományos főmunkatárs, PTE TTK
Dr. Nagy Géza
egyetemi tanár, PTE TTK

Nagy molekulájú ferrocén származékok elektrokémiai jellemzése voltammetriás módszerekkel

Kulcsszavak: diffúziós együttható; elektronszám változás; tetraferrocenil-kavitand; szupramolekuláris kémia; voltammetriás viselkedés

Munkám során egy új, tetraferrocenil kavitand és az 1,1'-bisz(difenilfoszfino)-ferrocén (dppf) két komplexének, a (dppf)PtCl₂ és a (dppf)PdCl₂ elektrokémiai jellemzését tűztem ki célul. Vizsgálataimat saját készítésű platina és szén mikro- illetve makroelektrodokkal végeztem. Több különböző elektrokémiai módszerrel határoztam meg a vizsgált anyagok diffúziós együtthatóját valamint az elektród folyamatban résztvevő elektronok számát. Dinamikus elektrokémiai módszereket (forgó korongelektrodos méréseket kronoamperometriás üzemmódban, ciklikus voltammetriás technikát) és más elektroanalitikai mérés technikákat alkalmaztam. Mikroelektrodokkal felvett kronoamperometriás mérések kiértékelését Aoki és Osteryoung módszere szerint végeztem. A felső peremén négy ferrocenil csoportot tartalmazó kavitand elektrokémiai viselkedését vizsgáltam, dimetil-formamid oldószerben. A tetraferrocenil-kavitand kvázi-reverzibilis viselkedést mutat, egy oxidációs és egy redukciós csúcsot eredményez ciklikus voltammetriás mérés során. Az elektronszám változás meghatározására elsőként alkalmaztam új, komplex kiértékelési módszert, melynek eredménye jó egyezést mutat a széles körben használt mérés technikák eredményeivel. A (dppf)PtCl₂ és a (dppf)PdCl₂ kvázireverzibilis voltammetriás viselkedést mutatnak. A különböző módszerekkel egymáshoz közeli csúcs potenciál értékeket mértem. A diffúziós együttható és az elektronszám változás meghatározására szolgáló különböző módszereket összehasonlítottam, eredményeim alapján értékeltem.

BOROS KRISZTINA kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Péter László

tud. tanácsadó, MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet Komplex

Folyadékok Osztály

Neuróhr Katalin

tud. mts., MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet Komplex

Folyadékok Osztály

Nikkel-kadmium ötvözetek elektrokémiai leválasztása és vizsgálata

Kulcsszavak: ciklikus voltammetria; elemanalízis; mélységprofil-analízis; EQCN; szacharin

A fémes nanoszerkezetek elektrokémiai úton történő leválasztása és vizsgálata témakörön belül dolgozatom a Ni-Cd ötvözetek tanulmányozására összpontosít. Célom az egyes fémek polarizációs tulajdonságainak, valamint a két fém együttléválási jellegzetességeinek vizsgálata, továbbá a különböző publikációkban található ellentmondások feloldása volt. Munkám során törekedtem a rendelkezésemre álló kísérleti technikák minél szélesebb körű felhasználására, valamint a kapott eredmények feldolgozására.

Dolgozatomban először a mérések elméleti hátterét, valamint az alkalmazott készülékek működési elvét ismertettem. A következő fejezetben a mintakészítés menetét és a kísérleti módszereket mutattam be.

A Ni-Cd ötvözetek elektrokémiai leválasztásának tanulmányozását ciklikus voltammetriás előkísérletekkel kezdtem. Ezen méréseim alapján meghatároztam a Ni és a Cd leválási és oldódási potenciálját, valamint vizsgáltam a polarizációs jellegzetességeket olyan elektrolitoldattal is, mely mind a két fémiont tartalmazta. A ciklikus voltammogramokat elemezve megállapítottam, hogy a Cd leválás inhíbeálja a Ni leválását.

Ciklikus voltammetriás méréseimet megismételtem mikroelektród használatával is, valamint elektrokémiai kvarckristály-nanomérleggel összekötve is. Azt tapasztaltam, hogy eredményeim jelentős eltérést mutatnak attól függően, hogy makroszkopikus- vagy mikroelektródot használtam.

A Ni-Cd ötvözetek további tanulmányozásához mintákat készítettem potenciosztatikus, valamint többlépéses, többciklusos módszerekkel, melyeket fordított mélységprofil-analitikai vizsgálatoknak vetettem alá. E vizsgálatok eredményei azt mutatták, hogy a Ni és a Cd együttléválásakor nem mutatható ki ötvözetképződés. Ennek ellenére egy új jelenség vált megfigyelhetővé, mely szoros összefüggésben áll az elektrolitoldathoz adalékanyagként hozzáadott szacharin kéntartalmával.

Pásztázó elektronmikroszkópos és röntgendiffrakciós méréseim célja a készített minták morfológiájának, összetételének, valamint szerkezeti paramétereinek tanulmányozása volt. Ezen méréseim eredményei összhangban voltak egymással, illetve ciklikus voltammetriás méréseimmel az oldódási folyamatok tekintetében. Megállapítottam, hogy a Ni-Cd rendszerben a Cd a preferáltan leváló komponens, azonban nem kaptam olyan eredményt, mely az ötvözetképződésre való hajlamra utalna.

BRODA BALÁZS Kémia BSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Inzelt György
egyetemi tanár, ELTE TTK*

Poli(5-aminoindol) előállítás elektropolimerizációval és vizsgálata elektrokémiai kvarckristály nanomérleggel

Kulcsszavak: 5-aminoindol; elektropolimerizáció; elektrokémiai kvarckristály nanomérleg; túloxidáció

Az indol, illetve az indolszármazékok adszorpciós és elektrokémiai tulajdonságai, illetve elektropolimerizációja között jelentős különbség van; a szubsztituens minősége és helyzete alapvető jelentőségű. Az én feladatom ebben a kutatásban az 5-aminoindol elektropolimerizációjának vizsgálata, majd a keletkező polimer tulajdonságainak feltérképezése volt. Dolgozatomban a mérés elméleti háttérének bemutatása után a méréshez használat műszerek működését ismerttettem. Bemutattam az elektrokémiai kvarckristály nanomérleg használata során szükséges ismereteket, melyek segítségével vizsgálni tudtam az 5-aminoindol elektropolimerizációját, a képződött poli(5-aminoindol) film redoxi átalakulásait, valamint a túloxidálás jelenségét. A film felületi struktúrájának megismerése végett pásztázó elektronmikroszkopos méréseket végeztem.

Az 5-aminoindol elektropolimerizációja hasonlít a többi indolszármazék polimerizációjára, savas közegben nem túl nagy pozitív potenciálon megindul a monomer oxidációja, a polimerképződés; a képződött poli(5-aminoindol) leválik az elektródfémre, emellett kimutattam, hogy PIGE | poli(6-aminoindol) elektródra is leválasztható a poli(5-aminoindol), mely esetben a leválasztás sebessége nagyobb, mint borítatlan elektródok esetén. A polimer leválási folyamatának mennyiségi elemzését, a leváló vegyület molekulatömegének meghatározását az elektrokémiai kvarckristály (EQCN) által kapott eredmények tették lehetővé. Ezek alapján megállapítható, hogy a leválás határfoka 50% körüli. A pásztázó elektronmikroszkopos mérések eredményei pedig arra utalnak, hogy a film egyenletesen fedi be az alapfémeket, de helyenként nagyobb alakzatok is megjelennek.

A poli(5-aminoindol) redoxi átalakulását vizsgálva megállapítható, hogy két lépésben történik, és deprotonálódás kíséri. Az ellenionok elhanyagolható mértékben vesznek részt a töltéstranszport folyamatban, ezzel egyben azt bizonyítottam, hogy az aminocsoportokat a polimerizációs reakció nem érinti. Bebizonyítottam, hogy az első elektronátlépés gátoltabb folyamat, mint a második, ezért csak kis polarizációsebességnél észlelhető. Nagyobb pozitív potenciáloknál a polimer további oxidációja történik (túloxidálás), ekkor a polimer redoxireakciója már nem lesz reverzibilis, vezetése is csökken. A poli(5-aminoindol) redoxi átalakulását színváltozás kíséri, ily módon a polimer felhasználható elektrooptikai kijelzőkben. A túloxidált film kékes-lilás színű, ami indigó típusú vegyület képződésére utal.

Kémiai technológia 1

PAPP ANITA Vegyésszmérnök MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK

Alternatív eredetű komponenseket tartalmazó sugárhajtómű üzemanyag előállítása

Kulcsszavak: kókuszolaj; katalitikus hidrogénező átalakítás; NiMo/Al₂O₃; lepárlási petróleum; bioüzemanyag

A sugárhajtómű üzemanyagok szerepe napjainkban a nemzetközi légi személy- és áruszállítás mértékét figyelembe véve nagyon jelentős. A repülési magasságokban uralkodó rendkívüli körülmények következtében a légi közlekedésben nagyon fontos, hogy az üzemanyag megfelelő alkalmazástechnikai tulajdonságokkal rendelkezzen, a biztonságot és gazdaságosságot is figyelembe véve. A fejlesztések ösztönzésére a Nemzetközi Légiközlekedési Szövetség célként határozta meg 2050-re az 50 %-os károsanyag-kibocsátás csökkentést a légiközlekedési szektorban, 2020-ig pedig 2 millió tonna/év bioeredetű sugárhajtómű üzemanyag felhasználását az Európai Unióban.

Az alternatív eredetű sugárhajtómű üzemanyagokra vonatkozó, a közeljövőben érvénybe lépő előírások miatt tudományos diákköri munkám célja kókuszolajból bioeredetű sugárhajtómű üzemanyag előállítási lehetőségeinek vizsgálata volt heterogén katalitikus úton NiMo/Al₂O₃ hidrogénező katalizátoron. Ezen területen eddig viszonylag kevés kutatási eredmény áll rendelkezésre a lehetséges alternatív hajtóanyagokról. Összehasonlításként vizsgáltam a kőolaj-eredetű lepárlási petróleum alapú sugárhajtómű üzemanyagok minőségjavítását is.

A kísérletsorozatot 260-360 °C hőmérséklettartományban, 50 bar nyomáson, 1,0-3,0 l/h folyadékterhelés és 600 Nm³/m³ hidrogén/alapanyag térfogat arány mellett végeztük folyamatos üzemmódban a Tanszéken lévő ikerreaktor-rendszerben. Az alapanyagok és cseppfolyós termékek minőségi jellemzőit szabványos módszerekkel, az összetételét pedig gázkromatográfiás módszerrel vizsgáltam.

A kísérletek eredményei alapján megállapítottam, hogy a céltermék petróleumfrakció hozama kókuszolaj alapanyagból kiindulva 48% volt, a teljes szerves termékhozam megközelítette a 70%-ot. A nagymértékű hidrogénezésnek köszönhetően a termékek savszáma jelentős mértékben csökkent a magasabb hőmérsékleten végzett kísérletek során, és elérte a szabványban rögzített 0,015 mgKOH/g értéket. Kókuszolaj alapanyag esetén 340°C-on és 1,0 l/h folyadékterhelés mellett a kéntartalom 10 mg/kg, a kristályosodáspont pedig -10 °C volt.

Megállapítottam, hogy a kókuszolaj nagy konverzióval alakítható át a megfelelő paraffinokká az alkalmazott katalitikus rendszerben, de a termék a magas kristályosodáspontja miatt csak további izomerizáció után válik alkalmassá sugárhajtómű üzemanyag komponensnek. Ugyanez a katalitikus rendszer megfelelő petróleum párlatok minőségjavítására: a termék kis kén (4 mg/kg) - és aromástartalma (7,6%).

BORBÁS ENIKŐ Vegyészmérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi tanársegéd, BME VBK

Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK

Dr. Balogh György Tibor
osztályvezető, Richter Gedeon Nyrt. Vegyészeti Gyár

Antipszichotikumok formulálása és in vitro analitikai vizsgálati módszerei

Kulcsszavak: elektrosztatikus szálképzés; kioldódás-felszívódás modellezés; biorelevancia; gyógyszer technológia; permeabilitás

A gyógyszer technológia kiemelkedően fontos kihívásainak egyike a BCS II. osztályba sorolható rossz vízoldhatóságú, de jó permeabilitású hatóanyagmolekulák kioldódásának javítása és így módon a biohasznosulásuk növelése. Munkánk során vízben rosszul oldódó antipszichotikumok kioldódásának javítását tűztük ki célul. Ehhez a ciklodextrinek komplexképző és oldhatóság javító tulajdonságát, illetve a formulálás során az oldószeres elektrosztatikus szálképzést használtuk fel.

A pszichiátriai eseteknél gyakori probléma, hogy a betegek elutasítják az előírt gyógyszeres terápiát, emellett gyermekek, idősek és nyelési nehézségekkel küzdők esetében is kellemetlenséget jelenthet tabletták lenyelése. A betegek igényeit és terápiás szempontokat figyelembe véve már az Egészségügyi Világszervezet irányelvei közt is szerepel az új gyógyszerformák keresése. Ezért a hagyományos tabletták helyett szájban gyorsan oldódó gyógyszerformát választottunk a pszichiátriai betegségek (skizofrénia és bipoláris zavar) kezelésére alkalmazott hatóanyagokhoz.

Ezen formulációknál elengedhetetlen a hatóanyag gyors kioldódása és felszívódása. Azonban a gyógyszerkönyv mindössze a kioldódás vizsgálatok elvégzését írja elő, melyből azonban a hatóanyagok biohasznosulására vonatkozóan nem vonhatunk le egyértelmű következtetéseket, hisz a kioldódást segítő adalékok: ciklodextrinek, polimerek negatív és pozitív irányba egyaránt képesek befolyásolni a biológiai membránokon keresztül történő transzport folyamatokat. Így vizsgálataink tárgyát képezte a gyógyszerformulációk kioldódásának és szimultán felszívódásának in vitro modellezése, mely lehetőséget nyújt az in vivo biohasznosulás jobb előrejelzésébe, és így a szükséges állatkísérletek száma is csökkenthetővé válhat.

NAGY DÁVID ILLÉS Gyógyszervegyész-mérnök MSc MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

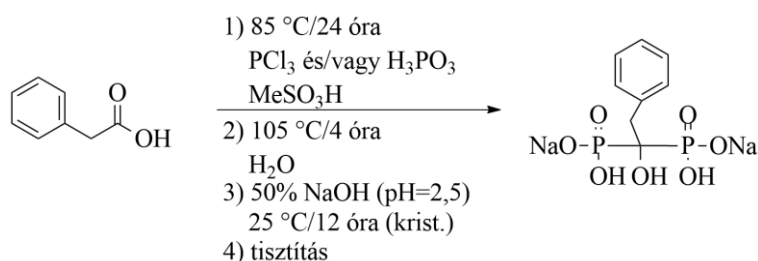
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBKDr. Grün Alajos
egyetemi docens, BME VBK

Benzidronát szintézisének vizsgálata

Kulcsszavak: biszfoszfónát, hatékony előállítás, optimalizálás, foszforossav, foszfor-triklorid

Biszfoszfónátokat posztmenopauzás osteoporózis (csonttritkulás), Paget-kór, és tumorindukált hypercalcaemia kezelésére alkalmazzák, de újabban egyre több adat szól a direkt daganat (mell, prosztata) és parazitaellenes hatásokról is, továbbá csökkentik a HIV-vírus egyes gyógyszerekkel szemben mutatott rezisztenciáját, így egyre növekszik irántuk az érdeklődés.

Kutatómunkám során az 1-hidroxi-2-feniletildén-1,1-bisz(foszfonsav), illetve nátrium sójának (benzidronsav, illetve benzidronát) az előállításával foglalkoztam.



Benzidronsav/benzidronát esetén az irodalomban leírt eljárások döntő része az Arbuzov-reakción alapul (α -ketofoszfónát előállítása, majd egy P-species addíciója az oxocsoportra), és nem vizsgálták a többi dronát előállításánál leggyakoribb szintézis utat, a megfelelő karbonsavból foszfor-trikloriddal és foszforossavval történő előállítást. Célunk a Tanszéken kifejlesztett módszer kiterjesztése^{1,2} volt, egy hatékony, magas termelést biztosító szintézis kidolgozása a reagensek optimális arányának felderítésével. A korábbi tanszéki tapasztalatok alapján a dronsavak/dronátok előállítására az egyedül foszfor-trikloridot alkalmazó eljárás vált be legjobban, ezt kívántuk megvizsgálni benzidronát esetében is. Elsősorban a fenilecetsavból kiinduló eljárást vizsgáltuk, de tanulmányoztuk a fenilecetsav kloridból és fenilecetsav etilészterből történő előállítás lehetőségeit is. Új megfigyelés a foszforossav pozitív hatása a termelésre, amely eddig a tanszéken vizsgált egyik biszfoszfónát előállításakor sem volt tapasztalható metánszulfonsav oldószer használata esetén.

1. Gy. Keglevich, A. Grün, K. Aradi, S. Garadnay, I. Greiner; Tetrahedron Lett., 2011, 52, 2744-2746.

2. R. Kovács, A. Grün, S. Garadnay, I. Greiner, Gy. Keglevich; Green Proc. Synth., 2014, 3, 111-116.

KÖRÖSI MÁRTON Vegyésmérnöki mesterképzési szak MSc, 2. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Székely Edit
egyetemi docens, BME VBK

Diasztereomer sók oldhatósági szorzatainak meghatározása szuperkritikus szén-dioxid közegben

Kulcsszavak: 2-metoxi-2-fenilecetsav; antizsolvens; rezolválás; módszerfejlesztés; mintavételezési eljárás

A szuperkritikus szén-dioxid a jelenleg nagy mennyiségben felhasznált szerves oldószerek környezetbarát alternatíváját jelentheti. A szén-dioxiddal végzett műveletek viszonylag nagy költségét ellensúlyozza a kapott termékek kiváló minősége, nagy tisztasága. A királis vegyületek enantiomerjeinek elválasztása azok különböző élettani hatása miatt fontos feladat.

Laboratóriumi munkám során szén-dioxid antizsolvenst alkalmazó diasztereomer sóképzéses rezolválást fejlesztettem ki a 2-metoxi-2-fenilecetsavra 1-ciklohexiletánamin rezolváló ágenssel. A módszer jó enantiomer-megkülönböztetés mellett a raffinátumra nézve megközelítőleg 88%-os, az extraktumra nézve pedig 90% fölötti termelést nyújt, 1:1 térfogatarányú toluol-acetonitril antizsolvenst alkalmazva, 120 bar nyomáson, 40°C hőmérsékleten. A rendszerben a szén-dioxid tömegtörtje közelítőleg 0,87 volt. A kísérletek ismételhetőnek bizonyultak.

A kristályosítási kísérletek után, TDK munkám legnagyobb részében az eljárás hátterét vizsgáltam az oldhatósági szorzat meghatározása segítségével. Mérési eljárást dolgoztam ki a nagynyomású fluid fázisból történő mintavételre, majd a levett minták elemzésére. A meghatározáshoz végül a mikromérlegen történő tömegvisszamérést választottam. A méréseket a racém anyag két tiszta enantiomeréből képzett diasztereomer sókkal végezve és a műveleti paramétereket (nyomás, hőmérséklet) változtatva vizsgálható azok hatása a diasztereomer sók oldhatósági szorzatai közötti különbségre. A rezolválás várhatóan azok között a körülmények között fogja a legjobb eredményt adni, melyek mellett a különbség maximális. Egy ilyen kísérletsorozattal jelentősen lerövidíthető egy új rezolválási rendszer vizsgálatához szükséges idő.

DRÁVAVÖLGYI GÁBOR Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK

Folyamatos eljárásokkal előállított spironolakton tartalmú szilárd diszperziók bomlástermék-tartalmának vizsgálata

Kulcsszavak: gyógyszer technológia; folyamatos technológiák; szilárd oldatok; olvadék alapú extrúzió; elektrosztatikus szálképzés

Napjainkban a gyógyszeripari vállalatok egyik legnagyobb kihívása az egyre élesedő gazdasági versenyhez való alkalmazkodás az egyre szigorodó gyógyszerhatósági direktívák betartása mellett. A verseny eredményeként az utóbbi években a gyógyszerpiac vezető termelői egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek az innovációs lehetőségek kihasználására, ezen belül is a számos gazdasági és technológiai előnyt magában hordozó folyamatos üzemű technológiákkal előállított gyógyszerkészítmények fejlesztésére.

Az olvadék alapú extrúzió (melt extrusion; ME) nagy múltra tekint vissza a polimerek feldolgozásában. Ezt a folyamatos gyártási eljárást az elmúlt pár évtizedben sikeresen alkalmazták a gyógyszeriparban is, elsősorban szilárd diszperziók előállítására. Az előállított extrudátumokból granulátum, pellet, film, implantátum készíthető orális, transzdermális és transzmukozális gyógyszerhordozó rendszerekhez. Az eljárás – számos előnye mellett – igen nagy hátránya, hogy alkalmazása során a betáplált anyag intenzív hőmérsékleti és nyírási igénybevételnek van kitéve. Ezen igénybevételek gyógyszerhordozó rendszerek előállításakor bizonyos esetekben döntően meghatározhatják az előállított termék szennyezésprofilját és farmakokinetikai tulajdonságait.

A tanszéki kutatások során az elmúlt években számos eredmény és tudományos közlemény született, amelyek igazolják a fent említett eljárás gyógyszeripari alkalmazhatóságát. Ezekben a munkákban elsősorban rossz vízoldhatóságú hatóanyagok kioldódásjavítását tűzték ki célul. Dolgozatomban azt vizsgáltam, hogy a folyamatos eljárással előállított, lehetséges gyógyszerkészítmények bomlástermék-tartalma mennyire felel meg a szigorú gyógyszerkönyvi előírásoknak.

Munkám fő célja annak elemzése volt, hogy az olvadék alapú extrúzióval előállított készítmények szennyezésprofilja milyen módon és mértékben befolyásolható az egyes feldolgozási paraméterek változtatásával, illetve különféle adalékanyagok alkalmazásával. Ennek során részletesebben is vizsgálni kívántam a molekuláris hatóanyag-diszperziók termikus viselkedését (elektrosztatikusan szálképzett termékek segítségével), ami alapján várhatóan következtetések vonhatók le egy olvadékextrúziós rendszer viselkedésével kapcsolatban.

BARANYI BERNADETT Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 2. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Marosi György
 egyetemi tanár, BME VBK

Gyógyszerhatóanyagok morfológia módosítása újszerű kristályosítási eljárásokkal

Kulcsszavak: segédanyag; kristályhabitus; Raman spektrometria; ultrahang; gördülékenység

A gyógyszerhatóanyagok kedvezőtlen formulálási tulajdonságainak javítására speciális eljárásként a segédanyagos kristályosítás, továbbá az iparban ritkán előforduló szonokristályosítás egyaránt alkalmazható. A folyamatok kinetikai mechanizmusának feltárásában és szabályozásában kiváló módszer a valós idejű Raman spektrometrián alapuló monitorozás. Munkám célja ennek értelmében a kiválasztott famotidin és gabapentin gyógyszerhatóanyagok morfológiájának tervszerű változtatása volt segédanyagok jelenlétében elvégzett ultrahangos és ultrahang nélküli hűtéses kristályosítással; továbbá ezen folyamatok nyomon követése és feltérképezése valós idejű Raman spektrometria alkalmazásával.

Famotidin hűtéses kristályosítása során rossz gördülékenységű, kinetikailag preferált Form B módosulat válik ki. A gabapentin metanolban történő hűtésével a termodinamikailag stabil Form II polimorfot nagy szemcseméretű termékként kristályosítottam, tehát direkt préseléses tablettázásra egyik hagyományosan kristályosított hatóanyag sem alkalmas.

A segédanyagos kristályosítások során különböző szerkezetű és molekulatömegű polimereket alkalmaztam, különböző tömegarányban. Famotidin esetén segédanyag jelenlétében minden esetben polimorfia változás történt, in-line, off-line Raman spektrometriás, valamint röntgen por-diffrakciós vizsgálatokkal a termodinamikailag stabil Form A módosulatot azonosítottam. A polimer kristályosodást gátló és kristálynövekedést orientáló hatásának köszönhetően a molekulatömeg és koncentráció függvényében változatos habitusú, minden kísérletben kiváló gördülékenységű, direkt préselésre alkalmas famotidint állítottam elő. Gabapentin kristályosítása során habitus és polimorfia változás nem történt. A termékeket kioldódás, szemcseméret eloszlás, kifolyás vizsgálatokkal, valamint tömöríthetőséggel jellemeztem. A polimer tartalom meghatározására ¹H-NMR spektroszkópiát alkalmaztam.

Szonokristályosítások során kihasználva az ultrahangos besugárzás gócképződés sebesség növelő hatását famotidin esetén – a polimer növekedés orientáló hatását megtartva – sikerült a Form A polimorfot kiváló gördülékenységgel, átlagosan 200 µm-es szemcsemérettel előállítanom. Gabapentin esetén szűk szemcseméret eloszlású, kedvező szemcseméretű termék kristályosodott. Az általam kidolgozott eljárások alkalmasak akár közvetlenül tablettázható végtermék előállítására – további feldolgozási lépéseket elhagyva – energia- és költséghatékonyabbá téve a gyógyszerformulálást.

TOMASEK SZABINA Vegyészmérnöki MSc, 3. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK

Könnyű FCC-benzin olefin tartalmának motorhajtóanyag célú oligomerizációja savas ioncserélő gyanta katalizátoron

Kulcsszavak: könnyű olefinek; oligomerizáció; savas ioncserélő gyanta

A fluid katalitikus krakkolás (FCC) és a különböző termikus szénhidrogén átalakító technológiák során nagy mennyiségben keletkeznek 3-6 szénatomos könnyű olefinek is. A könnyű FCC-benzin motorhajtóanyagba való keverhetősége nagy olefin-tartalma és gőznyomása miatt korlátozott. Ezért olyan eljárásokra van szükség, amelyekkel a kevésbé értékes „könnyebb” szénhidrogénekből (kis szénatomszámú olefinek és paraffinok) „nehezebb” (nagyobb szénatomszámú) és értékesebb termékek (motorbenzin vagy dízelgázolaj) állíthatók elő. A hagyományos megoldásokkal szemben (alkilezés, éterek előállítása) egyre nagyobb jelentősége lehet a termék összetétele szempontjából nagy rugalmassággal rendelkező oligomerizációs technológiáknak. Oligomerizáció során különböző forráspont-tartományba eső izoolefinek keletkeznek, amelyek katalitikus hidrogénezéssel izoparaffinokká alakíthatók. Az izoparaffinok viszonylag „tisztán égő” komponensek, melyek kiváló fizikai-kémiai és alkalmazástechnikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Jelenleg motorhajtóanyagokba keverhető mennyiségüket előírások nem korlátozzák.

A TDK munkám során könnyű FCC-benzinből desztillációval nyert szűk frakció oligomerizálási lehetőségeit vizsgáltam különböző műveleti paraméterkombinációk alkalmazása mellett kétféle savas ioncserélő gyanta katalizátoron, továbbá ezekből készített kétrétegű ágyon. A célom motorhajtóanyag komponens előállítása volt.

A legnagyobb olefin konverziót (92,4%) kétrétegű ágy esetén értem el.

A C₁₂₊ szelektivitás szintén a kétrétegű ágy alkalmazásakor volt a legnagyobb (26,2%), míg az „A” jelű gyantán a legkisebb (7,6%). Az oligomerizáció szempontjából kedvező műveleti paraméterek: 120-130°C hőmérséklet, 30 bar nyomás,

1,0 h⁻¹ folyadékterhelés volt. Ezen paraméterek mellett sikerült megfelelő hozammal előállítani - hidrogénezés után - kiváló motorhajtóanyag keverőkomponensként felhasználható terméket.

SZÉKELY ISTVÁN Szerves anyagok kémiája és technológiája, kőolaj- és szénkémia BSc, 8. félév Babes - Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki	
--	--

Témavezetők:

Dr. Csavdári Alexandra
egyetemi docens, BBTE

Dr. Kovács Gábor
tudományos kutató, BBTE

Különböző morfológiájú WO₃ nanokristályok előállítása és fotokatalitikus vizsgálata

Kulcsszavak: Volfram-trioxid, hidrotermális kezelés, fotokatalitikus aktivitás, kristálytani “alakszabászat”, nanokompozitok

Különböző alakú WO₃ félvezetőket és WO₃/TiO₂ nanokompozitokat állítottunk elő volframsavból (H₂WO₄), nátrium-volframát-hidrátból (Na₂WO₄·2H₂O) és ammónium metavolframát-hidrátból ((NH₄)₆H₂W₁₂O₄₀·xH₂O), hidrotermális kristályosítást alkalmazva a WO₃ előállítás esetében. Az így előállított nanokristályos anyagokat úgy szerkezetileg, mint morfológiailag sikeresen jellemeztük különböző mérés technikákkal (TEM, SEM, XRD és DRS). A fotokatalitikus aktivitásuk meghatározására UV és/vagy látható fény megvilágítás mellett fenolt, metil-narancsot és oxálsavat bontottunk.

TELKES LŐRINC Gyógyszervegyészmérnök MSc MSc, 2. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Marosi György
 egyetemi tanár, BME VBK

Nanoszál hordozós királis fázistranszfer katalizátorok szintézise és alkalmazása aszimmetrikus Michael-addícióban

*Kulcsszavak: Királis fázistranszfer katalízis; Hordozós katalizátor; Nanotechnológia;
 Elektrosztatikus szálképzés; Aszimmetrikus Michael-addíció*

Napjainkban az enantiomertiszta vegyületek előállításának egyre nagyobb a jelentősége a finomkémiai iparban. Különösen fontos ez a gyógyszeripar számára, ahol a hatóságok óriási követelményeket támasztanak az intermedierek és a hatóanyagok optikai tisztaságával szemben. Különböző módon juthatunk ezekhez a vegyületekhez, viszont zöldkémiai szempontokat is figyelembe véve az enantioszelektív katalízis alkalmazása célszerű.

A királis koronaéterek fázistranszfer tulajdonságukon túl aszimmetrikus indukciót fejtenek ki számos reakcióban. Széleskörű elterjedésük akadályozza az aszimmetrikus szerves szintézisekben, hogy felhasználásukat követően visszanyerésük nehézkes, illetve szintézisük hosszú és költséges.

Munkám során célul tűztük ki olyan hordozós királis fázistranszfer katalizátorok szintézisét, amelyek aszimmetrikus szintézisekben várhatóan magas enantioszelektivitást mutatnak, amellet, hogy a reakcióelegyből könnyen és egyszerűen visszanyerhetők, illetve regenerálás nélkül újra felhasználhatók. A célok elérése érdekében első lépésként egy nagy fajlagos felületű, mégis jól kezelhető (könnyen visszaforgatható), nanoszálak szerkezetű hordozó előállítását valósítottam meg.

A nanoszálak hordozó előállítása tetraetil-ortoszilikátból (TEOS) kiindulva, savkatalizált hidrolízist követő polikondenzációs reakcióban szintetizált polimerből, elektrosztatikus szálképzéssel történt.

A nanoszálak felületén a királis koronaéterek kovalens kötással történő rögzítését a makrociklusokon kialakított különböző funkciós csoportok tették lehetővé. A kapcsolási reakciókat követően röntgen-fotoelektron spektroszkópiát (XPS) alkalmaztam a hordozó felületi összetételének és a koronaéter szerkezetének azonosítása érdekében.

A nanoszálak felületén kovalensen rögzített monoaza-15-korona-5 típusú makrociklus fázistranszfer tulajdonságát és enantioszelektivitását β -nitrosztírol és dietil-acetamidomalonát Michael-addíciójában vizsgáltam. A kísérletek eredményeképp megállapítottam, hogy szilárd-szilárd-folyadék háromfázisú reakcióban a koronaéter megőrizte fázistranszfer tulajdonságát, továbbá 82%-os enantiomerfelesleggel generálta a kívánt Michael-adduktot, valamint a szálak szerkezetnek köszönhetően a katalizátor teljes mennyisége visszanyerhető a reakcióelegyből.

Távlati cél lehet a kidolgozott módszer alapján más királis katalizátorok szilika szálakon történő kovalens rögzítése és vizsgálata aszimmetrikus szintézisekben.

KIS-JAKAB KÁLMÁN Vegyésmérnök BSc, 7. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Varga Csilla
egyetemi adjunktus, PE MK*

Olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú kompatibilizáló adalékok alkalmazása hulladék PET/HDPE blendek összeférhetőségének javítására

Kulcsszavak: Újrahasznosítás; Műanyag; Extrúzió; Fröccsöntés; Gyártás

Kísérleti munkám során olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú kompatibilizáló adalékok alkalmazását vizsgáltam hulladék PET/HDPE blendek összeférhetőségének javítására, extrudált és fröccsöntött termékekben egyaránt. Négy, különböző funkciós csoporttal rendelkező kísérleti és egy kereskedelmi adalék hatását tanulmányoztam. A kereskedelmi adalék jelenlétében csak az adalék nélküli blend jellemzőit értem el. Sikertült viszont olyan kísérleti adalék összetételt választanom, amely a húzó és ütő mechanikai tulajdonságokat egyidejűleg javította, utalva arra, hogy a komponensek közötti összeférhetőség is javult.

Kémiai technológia 2

HORVÁTH BERNADETT anyagmérnök BSc, 7. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Kukovecz Ákos
egyetemi docens, SZTE TTIK
Nagy László
tudományos ügyintéző, SZTE TTIK

Acélöntészetben alkalmazott cirkon-alapú tűzálló mag- és héjforma-bevonatok jellemzése és fejlesztése

Kulcsszavak: tűzálló anyagok; cirkónium-szilikát; öntészet

A dolgozatom elkészítése során az acélöntészetben alkalmazott mag-és héjforma bevonatok minőségi és mennyiségi tulajdonságait vizsgáltam. Meghatároztam egy kereskedelmi forgalomban kapható bevonat összetételét (EDS, XRD, TG, TEM, SEM, IR spektroszkópia, Raman spektroszkópia). Az eredményeket felhasználva megpróbáltam a termék ár-érték arányán javítani. Első lépésben megpróbáltam egy drágább, de jobb minőségű tűzálló bevonatot alkotni. Tűzálló karbidvegyületekkel adalékoltam a kereskedelmi forgalomban kapható bevonatot azért, hogy tűzállóságát javítsam. A kapott bevonatok tapadása nem érte el a kívánt hatást. A második részben egy olcsóbb, de a kereskedelmi forgalomban kapható bevonattal azonos tűzállóságú bevonatot alkottam. Az árcsökkentést az oldószer lecserélésével értem el. Az eredeti etil-alkohol helyett vizet használtam és megváltoztattam a magnézium-karbonát alapú kötőanyagot kálium-magnézium-dihidrogén-foszfát és nátrium-szilikát keverékére. A kísérletek igazolták, hogy a bevonat előállítása sikeres volt.

SZEPESI MIKLÓS Vegyésszmérnök MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK

FCC könnyű ciklusolaj és hulladékzsiradék gázolaj árammal történő együttes minőségjavítása

Kulcsszavak: biogázolaj, katalitikus, hidrogénezés, alternatív, könnyű ciklusolaj

A világ hagyományos módszerekkel és kis költségekkel kitermelhető kőolajkészlete fogy. Ezzel szemben évről évre növekszik a motorhajtóanyag kereslet, és a minőségi előírások is egyre szigorodnak. Ezek a tények a biológiai, megújítható eredetű motorhajtóanyag komponensek piacbővülésének irányába hatnak.

Az előzőek hatására kezdődött meg a fosszilis eredetű motorhajtóanyagok komponenseihez hasonló, akár azokkal megegyező szerkezetű biokomponensek és azok előállítására irányuló technológiák fejlesztése. Környezetvédelmi szempontok alapján és az import energiahordozóktól való függőség csökkentése érdekében például az Európai Unióban a közlekedési szektor által felhasznált motorhajtóanyagokban a megújuló komponensek részarányát 10 energia%-ra kívánják növelni. A megadott számítási képletben a hulladék alapanyagból előállított termék kétszeres súllyal számít.

Az Európai Unió motorhajtóanyag piacára a középpárlatok, köztük főként a dízelgázolajok iránti igény folyamatos növekedése jellemző. A dízelgázolajba napjainkban főleg növényolaj (trigliceridek) alapon előállított biodízelt (zsírsav-metil-észterek) kevernek be, mint biomotorhajtóanyag. Ennek részarányát azonban

7,0 V/V%-ra korlátozták. Ezért új, más kémiai szerkezetű, jobb tulajdonságokkal rendelkező biohajtóanyagra van szükség. Ilyen például a biogázolaj, amely n- és i-paraffinok elegye. A növekvő dízelgázolaj igény kielégítésére a kőolajfinomítók a kisebb értékű gázolaj forrásponttartományba eső áramokat is igyekeznek felhasználhatóvá átalakítani. Ilyen áram a fluidkatalitikus krakkolás során keletkező, nagy aromás tartalmú (>75-80%) és kis cetánszámú (20-25) könnyű ciklusolaj (LCO). Kísérleti tevékenységemet a témavezetőm és konzulensem útmutatásával a Tanszék nagylaboratóriumi kísérleti reaktorrendszerén végeztem.

A kísérletek során vizsgáltam különböző arányú lepárlási gázolaj, könnyű ciklusolaj és hulladék állati zsiradék együttes hidrogénező minőségjavítási lehetőségeit. Ezen kívül tanulmányoztam a műveleti paraméterek (hőmérséklet: 300-380 °C, nyomás 40-70 bar, folyadékterhelés: 0,75-3,0 h⁻¹ H₂/alapanyag arány: 600 Nm³/m³) hatását a termék mennyiségére és minőségére.

Megállapítottam, hogy a kísérleti eredmények alapján kiválasztott kedvező műveleti paraméterkombináció alkalmazása esetén végbement a trigliceridek paraffinokká való átalakulása, az LCO aromástartalmának jelentős mértékű telítése, valamint a lepárlási gázolaj kéntartalmának nagymértékű csökkentése.

MOLNÁR TÍMEA Vegyésszmérnök MSc MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Varga Csilla
egyetemi adjunktus, PE MK*

Feldolgozási módszerek hatása PET alapú szén nanocsövet tartalmazó kompozitok tulajdonságaira

Kulcsszavak: fröccsöntés, extrúzió, műszaki műanyagok, erősítő anyag, mechanikai tulajdonságok

A műanyagok nélkülözhetetlen szerepet töltenek be napjainkban, mindenhol találkozhatunk velük, az autóalkatrészekről egészen a játékokig, mert tulajdonságaik alapján széles körben kedvelt anyagok. Ma már azonban szinte nincs olyan emberi tevékenység, amely közvetlenül vagy közvetett módon ne járna hulladéktermeléssel. A növekvő termékigény kielégítése már a termelés során nagyobb mértékű műanyag alapanyag felhasználást, több feldolgozási hulladékot, és a folyamat vagy az életciklus végén is több hulladékot eredményez. A hőre lágyuló műanyagokat többféleképpen dolgozhatják fel, PET esetén ez lehet extrúzió, fűvás és fröccsöntés.

Kísérleti munkám során kereskedelmi és tanszéki szelektív gyűjtésből származó PET alapanyagok esetén vizsgáltam a műanyag feldolgozhatóságát szén nanocső jelenlétében és anélkül. Kereskedelmi PET esetén mintegy 34% tulajdonság különbséget tapasztaltam az extrúziós és fröccsöntéses feldolgozás között. Hulladék PET esetén ez a különbség már kisebb volt (16%). Kezeletlen CNT bedolgozása általában csökkentette a mechanikai jellemzőket, mert a szén nanocső homogén eloszlását nem lehetett elérni a feldolgozás során. A kapcsoló ágenssel történő felületkezelés ezzel szemben elősegítette a szén nanocső bekeverését a műanyag ömledékbe mind kereskedelmi, mind pedig hulladék alapanyag esetén, és adalék szerkezettől függően akár 20-35%-kal nagyobb húzó- és hajlítószilárdságot, illetve moduluszt is elérni lehetett.

KATÓ ZOLTÁN Vegyészmérnöki BSc, 6. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Benkő Tamás
egyetemi adjunktus, BME VBK

Félüzemi fluidizációs mérőberendezés tervezése

Kulcsszavak: vegyipari műveletek; mérőperem; hallgatói mérés; megvalósíthatósági vizsgálat; koncepcionális terv

2013 nyarán lezajlott a Vegyipari Műveletek Félüzemi Laboratórium költöztetése a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem K épületéből az újonnan felépített DCs épületbe. Egyes mérőberendezések átköltöztetése állapotuk miatt nem volt lehetséges. Ezek közé tartozott a fluidizációs mérés elvégzésére szolgáló oszlop, és a hozzá tartozó áramlásmérők is.

A Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék megbízásából a tudományos diákköri munkám keretében egy új mérőberendezést terveztem, amely alkalmas a fluidizáció jelenségének vizsgálatára. Az oszlopban szilárd anyag fluidizációja történik vizes közegben.

Munkám során elvégeztem a fluidizációs oszlop méretezését, a töltet kiválasztását és beszerzését. Emellett elvégeztem a méréshez szükséges áramlásmérők tervezését, többek között egy mérőperem a hatályos szabvány előírásainak megfelelő részletes megtervezését is. A tervezés során nagy hangsúlyt fektettem a berendezés elhelyezésére szánt terület maximális kihasználására, valamint arra, hogy a mérés szivattyú alkalmazása nélkül is elvégezhető legyen. Az oszlop és a mérőperem méretezése után azok tervrajzát is elkészítettem AutoCAD 2007 programmal. A terveket átadtam kivitelezésre.

A továbbiakban ismertettem a mérés tervezett folyamatát, melyhez egy hallgatói segédletet is készítettem. A készülékkel a hallgatók egy olyan jelenséget vizsgálhatnak laboratóriumi mérés keretében, amit az élelmiszer- és vegyipar számos területén alkalmaznak.

CZIMER BARNA Vegyésmérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Kovács András
c. egyetemi docens, BME VBK

Használt MEROX lúgok ártalmatlanítása

Kulcsszavak: kénmentesítés; biogáz; Merox eljárás; kolloidkémia; hulladékkezelés

A kőolajfeldolgozás egyik fontos lépése a kénmentesítés. A könnyű szénhidrogén párlatokat a MEROX eljárással kénmentesítik. A MEROX lúgot regenerálják, de egy idő után annyira telítődik a merox lúg különféle szerves vegyületekkel, hogy a lúg ismételt használatra alkalmatlan lesz. A használt merox lúg pH-ja meghaladhatja a 13-as értéket, kémiai oxigénigénye a 150000 mg/dm^3 értéket. Az oldott oxigén-, illetve kéntartalmú szerves vegyületek - fenolok, szulfidok, diszulfidok, stb. - miatt veszélyes - toxikus - hulladékként tartják nyilván. Vizsgálatom célja a jelenleg használt égetéshez képest környezetkímélőbb, költséghatékonyabb módszer fejlesztése volt. A gyakorlati cél az volt, hogy a kezelés után a hulladék biológiai szennyvíztisztítóban kezelhető legyen.

Vizsgáltam a hulladék ártalmatlanítását nedves levegős oxidáció, adszorpció és kolloidkémiai módszerekkel. A kolloidkémiai vizsgálatok alapján egyértelművé vált, hogy miért nem sikerült a bonyolult szerkezetű anyagot a kiválasztott technikákkal ártalmatlanítani.

Kedvező eredményt a papíripari gyakorlatból merítettem. Alkalmasan aprított szalmát kezeltem a hulladékkal. Vizsgáltam a merox lúg: szalma, valamint a kezelés hőmérsékletének és nyomásának hatását a merox lúg lúgosságának, kémiai oxigénigényének csökkentésére. A biológiai lebonthatóságot mezofil anaerob kezeléssel vizsgáltam.

A javasolt technika nem csak jelentősen hozzájárul a használt merox lúgok ártalmatlanítási költségeinek, környezeti hatásainak csökkentéséhez, de hasznos energiahordozó és alapanyag melléktermékeket szolgáltat.

TÓTH ORSOLYA Vegyésszámőr MSc, 4. félév Pannon Egyetem Mérnői Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK*

Hulladék eredetű biokomponens tartalmazó dízelgázolajok tárolási stabilitása

Kulcsszavak: gázolaj; tárolási stabilitás; FAME; biodízel; oxidációgátlók

Ez a dolgozat a biokomponens tartalmú dízelgázolajok tárolási stabilitásának vizsgálatával foglalkozik. A jelenleg érvényben lévő EU direktívák az alternatív motorhajtóanyag keverőkomponensek arányának növelését írják elő. Dízelgázolajok esetén a legelterjedtebb bioeredetű keverőkomponens a biodízel, melynek a hosszútávú tárolás során kifejtett hatásait vizsgálni kell. A biodízelek és biodízel/gázolaj elegyek tárolási stabilitását befolyásoló tényezők két csoportba sorolhatók. Egyrészt a biodízel alapanyagául szolgáló növényi olaj vagy használt sütőolaj minősége, a biodízelben jelenlévő zsírsavláncok mennyisége és a bennük lévő észter-kötések száma, másrészt a tárolási körülmények, azaz a környezet hőmérséklete, a környezetben jelenlévő levegő, víz, fémek és különböző mikroorganizmusok is befolyásolják a stabilitást.

A tárolás során fellépő oxidációs reakciók minőségromláshoz vezetnek. Ezen folyamatok nyomon követése a biodízel/gázolaj elegyek szabványos minőségi jellemzőinek vizsgálatával lehetséges. Munkám során vizsgáltam a biodízelek és biodízel/gázolaj elegyek sűrűségét, kinematikai viszkozitását, hidegszűrhetőségi határhőmérsékletét, víztartalmát, savszámát és Rancimat indukciós periódusát a tárolási idő függvényében. Továbbá vizsgáltam a minőségromlást szenvedett biodízel minták utóadalékolási lehetőségeit.

Az elvégzett vizsgálatok alapján megállapítottam, hogy 7 v/v%-nál nagyobb mennyiségű biodízel bekeverése a gázolajokba az elegyek jelentős minőségromlását (nagyfokú RIP csökkenés, savszámnövekedés) okozza hosszú távú tárolás során, ezért az elegyekbe a tárolás megkezdése előtt oxidációgátló adalék adagolása szükséges. A biodízeleket hat hónapon belül fel kell használni, hogy a tulajdonságai még biztosan megfeleljenek a szabvány előírásainak.

Az utóadalékolással javítható a minőségromlott biodízelek Rancimat indukciós periódusa, de az utóadalékolt biodízel bekeverésével nyert elegyek tulajdonságai kevésbé kedvezőek, mint a tárolás megkezdésekor adalékolt elegyeké. Ennek oka, hogy az adalékok hatásukat a tárolás során folyamatosan fejtik ki.

SIMON ÁBEL Vegyészmérnöki BSc, 8. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar	
---	--

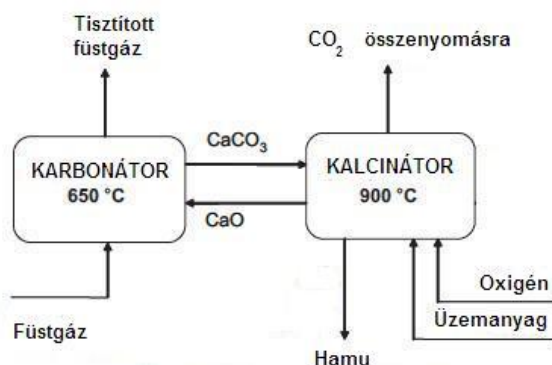
Témavezető:
Dr. Cormoş Ana-Maria
adjunktus, BBTE

Karbonátor dinamikus viselkedésének tanulmányozása a Ca-looping eljárásban

Kulcsszavak: Ca-looping, karbonátor, szénelnyelés

A szénelnyelő és tároló technológiák (CCS) az egyik leghatékonyabb módszernek számítanak a tüzelőanyagokból származó CO_2 emisszió csökkentésében. A Ca-looping egy ilyen technológia, amelyet az utóbbi években fejlesztettek ki és nagy potenciállal bír a üvegházhatású gázok emissziójának visszaszorításában. A technológia egy karbonátort és egy regenerátort feltételez. A karbonátorban történik a CO_2 elnyelése a füstgázból CaO segítségével CaCO_3 -t eredményezve, míg a regenerátorban a CaCO_3 -t termikus úton bontjuk CaO-ra és CO_2 -ra. A regenerált szorbent visszaforgatjuk egy újabb szoprciós ciklusra.

Kutatásom fő célja, hogy egy olyan dinamikus matematikai modell írjak fel, amely megjósolja illetve követi a dinamikus viselkedését az egész folyamatnak. A karbonátorra felírt modell figyelembe veszi a CO_2 egyensúlyi koncentrációját illetve a szorbens szénelnyelő kapacitásának romlását, ezért új szorbens bevezetése szükséges az állandó szénelnyelő kapacitás fenntartása érdekében. A modell validálása irodalomból átvett mérésekkel történt (INCAR-CSIC). A használt egydimenziós hidrodinamikai modell értelmében (Kunii és Levenspiel - 1991, 1997) a folyamatos keringetésű fluidizált ágy reaktorban egy alsó sűrűbb és egy felső ritkább zónát különíthetünk el. Az alsó zónában a szemcsék térfogataránya (ε_{sd}) állandónak tekinthető, míg a felső zónában exponenciálisan csökken a magasság növekedtével.



BATA HENRIK Vegyészmérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Csontos István
 egyetemi adjunktus, BME VBK

Kémiai reakciók Raman-jel alapú szabályozásának fejlesztése

Kulcsszavak: Raman; MATLAB; PLC; PAT;

A folyamat analitikai technológiák (PAT) alkalmazása, a modern gyógyszeripar egyre alapvetőbb eszközzé válik, mert így tudják biztosítani a termék megfelelő minőségét és a piaci versenyképességet. E trendeknek megfelelően a Szerves Kémia és Technológia Tanszéken olyan rendszer fejlesztése folyik, amely valós idejű Raman spektrometriás mérésekkel képes egy szakaszos-félfolytonos reaktorban végbemenő folyamatok nyomon követésére. E spektrumok értékelésével lehetőség nyílik a reaktorban lejátszódó folyamatok mélyebb megértésére, illetve azok szabályozására is, egy az egész berendezést irányító folyamatirányító számítógép segítségével.

Az OTDK dolgozatomban a berendezésen elvégzett szoftveres fejlesztéseimet, illetve a vele végrehajtott kísérletléti eredményeimet mutatom be. A szoftveres fejlesztés eredményeként a kemometriai feldolgozást, a spektrumok kiértékelését jelentősen hatékonyabbá tettem. Raman spektrometriás módszeren alapuló szabályozási algoritmusokat dolgoztam ki oximálási reakciók szabályozására. A szabályozás egyik eredménye a reakció végpontjának pontos megállapítása, a másik eredménye, hogy a reagens adagolásának módosításával sikerült megakadályozni az intermedier felhalmozódását. Az oximálásban elért eredményeket rangos nemzetközi folyóiratban is publikáltuk^{*}.

^{*} Csontos I., Pataki H., Farkas A., Bata H., Vajna B., Nagy K. Zs., Keglevich Gy., Marosi Gy., Feedback Control of Oximation Reaction by Inline Raman Spectroscopy, Organic Process Research & Development, <http://dx.doi.org/10.1021/op500015d>, 2014

BENEDEK DÓRA Vegyipari és folyamatmérnök MSc, 2. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Gresits Iván
tudományos főmunkatárs, BME VBK*

Közreműködés elhasznált gumiabroncsok újrahasznosításában

Kulcsszavak: xrf, elhasznált gumiabroncs, elemanalízis, égetés, anyagmérleg

Tudományos Diákköri Munkám során a tanszék környezetvédelmi kutatás-fejlesztési munkájában vettem részt. Elhasznált autó gumiabroncs feldolgozási - újrahasznosítási lehetőségeit vizsgáltuk, elsősorban környezetvédelmi szempontokat figyelembe véve. A kutatómunkán belül az abroncsok elemösszetételét kellett meghatároznom, röntgenfluoreszcencia analízissel.

A gumiabroncs közvetlenül ugyan nem veszélyezteti a környezetet, de nagyban terheli azt. Nedves közegben kioldódhatnak belőle a veszélyes szennyezők, nagyobb mennyiségben felhalmozódva pedig könnyen meggyulladhat. Azon túlmenően, hogy oltása nagyon nehéz feladat, a képződő égéstermékek veszélyeztetik a környezetet. A hulladék gumiabroncs újrahasznosítása tehát környezetvédelmi, gazdasági haszna miatt alapvető érdeke a társadalomnak.

A röntgenfluoreszcenciás méréssel roncsolás mentes vizsgálatot tudunk végezni, így a mérés során semmilyen káros anyag nem keletkezik, illetve ezzel a méréssel lényegében nincs szükség semmilyen minta előkészítési folyamatra. A vizsgálatok során néhány eredeti és új, mások által eddig még nem használt módszert is alkalmaztunk.

Habár tény, hogy nagy mennyiségű gumiabroncs hulladék található szerte a világban – és annak mennyisége folyamatosan tovább növekszik – mégis nagyon kevés irodalmi adat áll rendelkezésünkre ebben a témában. A hulladék tárolása, annak teljes vagy részleges újrahasznosítás során az összetételt lehetőleg minél teljesebb mértékben meg kell ismerni annak érdekében, hogy a környezeti hatásokkal tisztában legyünk.

HOCKSTOCK ÁRON Vegyészmérnök MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	PARÁDI VANDA Vegyészmérnök MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar
--	--

*Témavezető:
Tóth Csaba
egyetemi tanársegéd, PE MK*

Nagy szabadzsírsav-tartalmú alapanyagok biodízel célú előészterezése ioncserélő gyantán

Kulcsszavak: hulladék; biokomponens; Eu direktíva; szappanképződés

Az Európai Unió – a kőolajimport-függőség visszaszorítása és az üvegházhatásúgáz-emisszió csökkentése érdekében – energiapolitikájában támogatja a biomotorhajtóanyagok minél szélesebb körű felhasználását és fejlesztését. Az EU által meghatározott irányelvek szerint 2020-ra a megújítható erőforrásokból származó motorhajtóanyagoknak 10 e%-ot kell kitenniük a közúti közlekedésben. Napjainkban a dízelgázolajokban legnagyobb mennyiségben alkalmazott biokeverőkomponens a biodízel.

Dolgozatunkban az élelmiszeripari felhasználásra alkalmatlan vagy hulladékként keletkező nagy szabadzsírsav(FFA)-tartalmú állati, valamint növényi eredetű zsiradékok és olajok ioncserélő gyantán történő előészterezését vizsgáltuk a hagyományos biodízelgyártási technológiákba való integrálhatóság céljából. Célunk az ioncserélő gyanták észterező aktivitásának vizsgálata és a kedvező műveleti paraméterek meghatározása volt különböző alapanyagok esetén. Kísérleteinket négy eltérő tulajdonságú ioncserélő gyanta katalizátoron (LANXESS Lewatit GF 101, CHEMRA Treverlyst RN300, RN360 és XS10200) végeztük nagylaboratóriumi és méretnövelt reaktorrendszerben. Alapanyagként használt sütóolajat (HSO), valamint 10% és 30% fehérjefeldolgozói zsírt tartalmazó repceolaj elegyet (GF10, GF30) dolgoztunk fel.

Mind a nagylaboratóriumi-, és mind a méretnövelt reaktorrendszer esetében az RN 300 jelű ioncserélő gyanta aktivitása volt a legnagyobb a szabad zsírsavak észterezése során. A kedvező műveleti paraméterkombinációk mellett a nagylaboratóriumi reaktorrendszerben csak a HSO és GF10 alapanyagokból előállított termékek esetében értünk el megfelelő konverziót (savszám: A kísérleti eredményeink alapján megállapítottuk, hogy az általunk kiválasztott ioncserélő gyanta katalizátor alkalmas nagy FFA-tartalmú alapanyagok előészterezésére, amely segítségével bővíthető a hagyományos biodízel üzemek alapanyagbázisa. Így nagyobb mennyiségű hulladék eredetű alapanyag feldolgozására lesz alkalmas az üzem, amelyeknek FFA-tartalma nagy konverzióval biodízel terméké alakítható. A hulladék alapon előállított biodízelek részaránya 2-szeres súllyal kerül elszámolásra a 2020-ig elérendő 10,0 e% biokomponens tartalom esetén, így ezek alkalmazása nagyban hozzájárul az Európai Unió irányelveinek teljesítéséhez.

BOBEK JANKA Vegyésszmérnöki MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

*Témavezető:
Rippelné Dr. Pethő Dóra
egyetemi adjunktus, PE MK*

Savas karakterű gázok kompetitív abszorpciója alkáli-lúgos közegben

Kulcsszavak: földgáz; biogáz; savas gáz; alkáli-lúgos abszorpció

Társadalmunk nagymértékben támaszkodik a földgázra. A földgáz használata legnagyobb mértékben lakossági felhasználás, de az ipar szükséglete és az elektromos áram termelésben is jelentős. A földgáz a nem megújuló energiaforrások közé tartozik, így számolnunk kell azzal, hogy a készletek idővel kimerülnek.

Az egyre szigorodó környezetvédelmi szabályzás és a nem megújuló energiaforrások pazarló használata miatt egyre nagyobb figyelem fordítódik a megújuló biogáz vizsgálatára, termelésére. A biogáz előnye a földgázzal szemben, hogy megújuló energiaforrás és biológiai hulladékból teremt értékes fűtőanyagot.

Mind a földgáz, mind a biogáz legnagyobb mennyiségben metánt tartalmaz, de mellette számos komponens detektálható (nitrogén, alkánok, nemesgázok, szén-dioxid, kén-hidrogén, stb.). A metánt kísérő vegyületek közül a kén-hidrogén és szén-dioxid több szempontból nem kívánatos vegyületek. A kén-hidrogén - és széndioxid mentesítésnek környezetvédelmi, egészségügyi, gazdasági és technológiai okai vannak.

A kén- hidrogén-mentesítésre számos széles körben alkalmazott technológia ismert.

Munkám során az alkáli-lúgos kén-hidrogénmentesítési technológiát használtam. Dolgozatomban bemutatásra kerül, hogy a nátrium-hidroxid koncentráció és a szén-dioxid mennyisége milyen hatással van az állandó kén-hidrogén tartalmú gáz tisztítási hatásfokára.

A gázkeverékek állandó kén-hidrogén és változó szén-dioxid koncentrációjúak voltak. Az adott gázkeverékeket állandó gázsebesség mellett különbözőkoncentrációjú NaOH oldaton buborékkoltattam keresztül.

KEDVES ENDRE-ZSOLT Szerves anyagok kémiája és technológiája, kőolaj- és szénkémia BSc, 8. félév Babes-Bolyai Kémia és Vegyészmérnöki kar	SASZET KATA Szerves anyagok kémiája és technológiája, kőolaj- és szénkémia BSc, 4. félév Babes-Bolyai Kémia és Vegyészmérnöki kar
--	---

Témavezetők:

Dr. Kovács Gábor

tudományos segédmunkatárs, BBTE

Dr. Csavdári Alexandra

egyetemi docens, BBTE

TiO₂ alapú nanokristályok hidrotermális szintézise és fotokatalitikus aktivitásának vizsgálata

Kulcsszavak: titán-dioxid; hidrotermális szintézis; kalcinálás; fotokatalitikus aktivitás; fenol

Kutatásunk során hidrotermális úton meghatározott morfológiájú anatáz TiO₂-ot állítottunk elő, felületaktív anyagokkal (tiokarbamid, SDS) befolyásolva az alakot. A mintákat végül hőkezelésnek vetettük alá. A kapott nanokristályokat különböző mérési módszerekkel jellemeztük (XRD, SEM, TEM), majd fotokatalizátorként alkalmaztuk szerves szennyezők (fenol, metilnarancs) lebontásához. A kapott eredmények alapján a morfológia, a kalcinálás és a fotokatalitikus aktivitás összefüggéseit vizsgáltuk.

Kolloid és makromolekuláris kémia

VARGA ANDRÁS MÁRK Vegyész MSc, 4. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Visy Csaba
professzor emeritus, SZTE TTIK
Dr. Janáky Csaba
egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK

Egydimenziós nanoszerkezetű poli(3-hexiltiofén)/CdS és poli(3-hexiltiofén)/Sb₂S₃ kompozitok előállítása és jellemzése

Kulcsszavak: Poli(3-hexiltiofén);napelem;CdS;Sb₂S₃;fotokatalitikus leválasztás

A jövőbeni növekvő energiatermelést és felhasználást érintő kihívások miatt egyre nagyobb az igény a megújuló, „zöld” energiaforrások – és különösen a napenergia – kiaknázására. A jelenleg elérhető technológiák széleskörű alkalmazását azonban korlátozza kis hatásfokuk, illetve az ehhez társuló viszonylag nagy előállítási költségük (hosszú megtérülési idő). A napenergia felhasználásában olcsó alternatívát jelenthetnek a vezető polimerekből és szervesetlen félvezetőkből képzett, szabályozott szerkezetű nanokompozitokon alapuló napelemek.

A kompozitok képzésének számos módja közül a fotokatalitikus leválasztás egy nagyon ígéretes eljárási mód mivel így a szervesetlen nanorészecskéket a vezető polimer saját fotokatalitikus aktivitását kihasználva, in situ módon, magán a polimeren hozzuk létre. Így a kísérleti körülmények változtatásával keletkező félvezető mennyiségét valamint annak méretét tudjuk változtatni, ezáltal a szervesetlen/szerves határfelület tulajdonságait szabályozva elősegíthetjük a hatékony töltésátvitelt.

Tudományos diákköri munkám során egydimenziós szerkezetű poli(3-hexiltiofén) nanoszálak felszínére fémkalkogenideket (CdS, Sb₂S₃) választottam le fotokatalitikus úton. A fémkalkogenid leválásának első lépése, hogy a poli(3-hexiltiofén) polimert megvilágítjuk megfelelő hullámhosszúságú fénnel, így gerjeszteni tudjuk. Gerjesztődés következtében elektronok lépnek a vegyértéksávból a vezetési sávba. A fotoelektronok az átmeneti fémiont vagy a S₈ molekulákat redukálják (atomos, illetve ionos reakcióút) és így lehetőség van arra, hogy a CdS vagy Sb₂S₃ leválhasson a polimeren.

A nanokompozitok fokozatos kialakulását UV-látható spektroszkópia segítségével követtük nyomon. Az így előállított kompozitokat elektrokémiai és fotoelektrokémiai eljárásokkal valamint Energia Diszperz Röntgen Spektroszkópiával (EDX) jellemeztük.

SZABÓ TÍMEA Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Fodor Csaba

tudományos munkatárs, MTA TTK AKI Polimer Kémiai Kutatócsoport

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Fáziskizárásos polimerizációval készült pórusos poli(2-hidroxietyl-metakrilát) hidrogélek mint hatóanyag hordozó mátrixok

Kulcsszavak: hidrogél; polimer; hatóanyag; leadás; PHEMA

Kutató munkám során poli(2-hidroxietyl-metakrilát) (PHEMA) alapú pórusos hidrogélek vizsgálatával foglalkoztam. A hidrogélek olyan háromdimenziós struktúrájú anyagok, melyek nagy mennyiségű víz megkötésére képesek, vagyis olyan diszperz rendszerek, melyekben a polimer alkotja a szilárd vázat, a folyadék szerepét pedig a víz tölti be. A PHEMA emellett a különleges tulajdonsága mellett rendelkezik további két fontos jellemzővel: biokompatibilis, illetve kiválóan alkalmazható hatóanyag szállító és leadó rendszerként.

Előállítottam pórusos és pórusokat nem tartalmazó PHEMA hidrogéleket különböző összetételben. Meghatároztam a hidrogélek polimer-oldószer térfogati frakció arányát, hogy képet kaphassak arról, hogy a polimer térháló milyen mennyiségben képes oldószer felvételére. A különböző összetételű hidrogél minták szerkezetét pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) vizsgáltam. A SEM felvételekből megállapítható, hogy alacsony monomer bemérési arányokat alkalmazva a szintézis során, kapcsolódó polimer gömbökből álló pórusos szerkezetű hidrogéleket kaphatunk. Növelve a bemérési arányokat a hidrogélek szerkezetében nagymértékű változás történik, a gömbökből álló szerkezet és a pórusosság fokozatos megszűnése figyelhető meg. A PHEMA pórusos hidrogélek duzzadási viselkedését tanulmányozva, meghatároztam a különböző összetételű térhálók duzzadási kinetikáját. A szerkezeti vizsgálatoknak megfelelően, azoknál az összetételű mintáknál figyelhető meg nagyobb mértékű duzzadás, melyeknél a monomer bemérési aránya alacsony. A különböző összetételű hidrogél minták hatóanyag leadó képességének tanulmányozása során, teofilin modell vegyületet alkalmaztam. A hatóanyag leadást UV-látható spektroszkópiával mértem. A vizsgálatok alapján kijelenthető, hogy a kapcsolódó polimer gömbökből álló pórusos hidrogélek nagyobb felülettel rendelkeznek, mint nem pórusos társaik. Ennek megfelelően nagyobb mennyiségű hatóanyag felvételére is leadására képesek.

Az eredmények alapján, a PHEMA pórusos hidrogélek sokoldalú, és nagyon jól alkalmazható anyagok. Egyetlen paraméterrel, még pedig a bemérési monomer arány változtatásával számunkra kedvezően befolyáshatóak tulajdonságaik. Jelentős szerepet tölthetnek be orvosi biológiai alkalmazások terén, mert szerkezetüket optimalizálva alkalmazhatók különféle hatóanyagok szállítására és leadására, sejteket hordozására, szövet és csontregenerációra, implantátumként, szövettenyésztésre, valamint különböző tapasztok formájában.

PÁSZTÓI BALÁZS Vegyész MSc, 4. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Kasza György

tudományos munkatárs, MTA TTK AKI Polimer Kémiai Kutatócsoport

Iván Béla

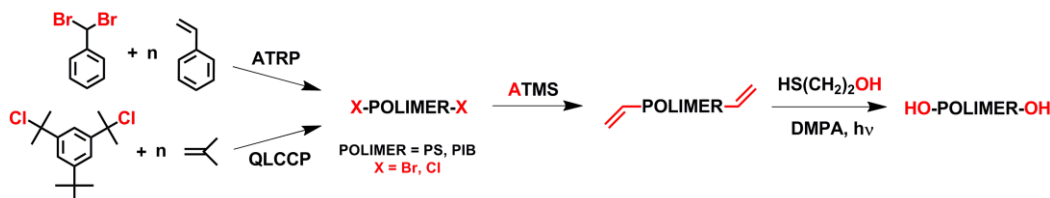
egyetemi magántanár, ELTE TTK

Funkciós polisztirol és poliizobutilén előállítása kvázielő polimerizációval és azt követő végecsoporthoz módosítással

Kulcsszavak: telekelikus; posztmodifikáció; funkcionizálás; click-reakció; kvázielő polimerizáció

A funkciós polimerek – melyek a főlánctól eltérő kémiai tulajdonságú reaktív csoportokat tartalmaznak – előállítási lehetőségeinek kutatása napjainkban kiemelkedő fontosságúvá vált. A tiol-én click-reakció egy egyszerű módja funkciós csoportok kialakításának, melyet ilyen típusú homotelekelikus polisztirol és poliizobutilén előállítására még nem alkalmaztak.

Tudományos diákköri munkám során megkísértem kvázielő polimerizációs technikákkal szűk molekulatömeg-eloszlású polisztirol és poliizobutilén szintézisét és vizsgáltam az így kapott halogén-telekelikus polimerek láncvégmódosításának lehetőségét, mely során allil- és hidroxil-végecsoporthoz kívántam kialakítani a makromolekulákon (1. ábra). A munkám során izolált termékeket $^1\text{H-NMR}$ spektroszkópiával és gélpermeációs kromatográfiával (GPC) analizáltam.



A polisztirol kvázielő atomátadásos gyökös polimerizációval (ATRP) történő szintéziséhez a,a-dibrom-toluol bifunkciós iniciátort és $\text{CuBr/N,N,N',N'',N'''}\text{-pentametil-dietilén-triamin}$ komplex katalizátor rendszerét alkalmaztam. A láncvégek allilálását karbokationos körülmények között végeztem el allil-trimetil-szilán (ATMS) reagenssel, melyet tiol-én click-reakcióban 2-merkapto-etanol és 2,2-dimetoxi-2-fenil-acetofenon (DMPA) fotoiniciátor jelenlétében reagáltattam. Eredményeim igazolták, hogy az egyes lépések lezajlottak és a várt szerkezetű és funkcionális allil- és hidroxil- telekelikus polisztirolok képződtek. Ezek alapján megkísértem az egyes lépések összevonásával egy „one-pot” típusú szintézis módszert kifejleszteni. A kapott analízis eredmények alapján kijelenthető, hogy a reaktánsok arányának helyes megválasztásával karbokationos mechanizmusú allilálás valamint az azt követő tiol-én click reakció is elvégezhető közvetlenül az ATRP polimerizációt követően, a köztitermékek tisztítása nélkül.

A poliizobutilént 5-terc-butyl-1,3-dikumul-klorid bifunkciós iniciátorral állítottam elő kvázielő karbokationos polimerizációval (QLCCP) mely során a láncvégek allilálását közvetlenül végeztem el. Az allil-telekelikus poliizobutiléneken szintén tiol-én click-reakcióval – a fentivel megegyező módon – hidroxil-végecsoporthoz alakítottam ki. Ezen vizsgálataim során összehasonlítottam a tiol-én click reakció hatékonyságát eltérő (foto- és termikus) iniciálás esetén és igazoltam, hogy a fotoiniciátor alkalmazásával hatékonyabb funkcionizálás érhető el.

DABÓCZI MÁTYÁS Vegyéssz mérnöki mesterszak MSc, 1. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Hórvölgyi Zoltán
egyetemi tanár, BME VBK*

Hatóanyag kiáramlás modellezése hibrid szilika-kitozán kettősrétegekből

Kulcsszavak: mezopórusos szilika; kitozánbevonat; hatóanyag-leadás; peremszög; ellipszometria.

A szabályozott hatóanyag-leadásra alkalmas rendszerek igen nagy tudományos figyelemnek örvendenek az elmúlt évtizedekben, köszönhetően a lehetőségnek, hogy segítségükkel hatékony és lokalizált hatóanyag koncentráció érhető el hosszú időre az emberi szervezetben.

Munkám során hibrid, kétrétegű hatóanyag-leadó modellrendszert vizsgáltam. A rendszer üveg hordozó felületén pórusos szilika vékonyréteget és ezen kitozán biopolimer bevonatot tartalmazott. A rétegeképzéséhez „dip-coating” technikát alkalmaztam. A szerves polimer réteget bizonyos esetekben ionosan (pentanátrium-tripolifoszfáttal), illetve kovalensen (glutáraldehiddel) térhálósítottam.

A hatóanyag-leadás modellezéséhez Rodamin 6G kationos színezéket alkalmaztam. Vizsgáltam, hogy milyen hatással van az inkubálás (a színezék pórusrendszerbe juttatása) paramétereinek változtatása az inkubálás hatékonyságára valamint, hogy milyen mechanizmusnak van a legnagyobb szerepe az inkubálás folyamatában.

A színezékkel inkubált és kitozán réteggel bevont rendszer hatóanyag-leadó tulajdonságait puffer oldatban (pH = 7,4) vizsgáltam, ezzel az emberi szervezetben való hatóanyag-leadást modellezve. Továbbá vizsgáltam a hatóanyag leadást különböző pH-kon: savas, semleges és lúgos közegben, hogy ezzel feltárjam a rendszer rezponzivitásában rejlő lehetőségeket.

A kioldás során lejátszódó folyamatok mélyebb megismerése végett peremszögmérést végeztem módosítatlan és térhálósított kitozán bevonatokon. A peremszög időfüggését vizsgáltam puffer oldattal, valamint a kioldási vizsgálatoknak megfelelően savas és lúgos közegekkel.

Végül in-situ spektroszkópiai ellipszometriával duzzadásvizsgálatot végeztem a különböző módon térhálósított polimer bevonatokon. Így a hatóanyag-leadás során a kitozán bevonatban végbemenő folyamatokról kaptam részletesebb képet.

Mindezen vizsgálatok eredményei nagymértékben elősegítik a vizsgált szilika-kitozán hibrid rendszer megismerését, a modellhatóanyag-leadás során végbemenő folyamatok és mechanizmusok megértését. A rendszer nagy potenciált mutat, és sok lehetőséget rejt a szabályozott hatóanyag-leadásban való alkalmazásra.

TÓTH TAMÁS Vegyész MSc, 2. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Osváth Zsófia

tud. segédmunkatárs, MTA TTK AKI Polimer Kémiai Kutatócsoport

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Hőmérséklet érzékeny intelligens hibrid kopolimerek és gélek előállítása és tulajdonságaik vizsgálata

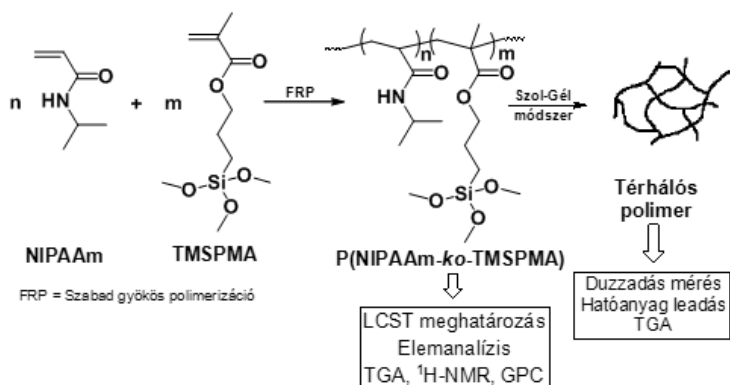
Kulcsszavak: *N-izopropil-akrilamid; 3-trimetoxiszilil-propil-metakrilát ; LCST; hidrogél; Szol-gél*

Az anyagtudományon belül intenzív kutatások folynak az intelligens anyagokkal és ezen anyagok tulajdonságainak vizsgálatával. A legtöbbet kutatott ilyen anyag a poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPAAm). Ez egy hőmérséklet érzékeny anyag, melynek sok felhasználási területe van, például gyógyszerhatóanyag leadás, műizom létrehozása stb.

A munkám során sikeresen állítottam elő hibrid kopolimereket N-izopropilakrilamid (NIPAAm) és 3-trimetoxiszilil-propil-metakrilát (TMSPMA) felhasználásával. Ezek szerkezetét ^1H -NMR spektroszkópiával, a tisztaságát pedig géelpermeációs kromatográfiával (GPC) vizsgáltam, míg az összetételüket pedig elemanalízis alapján határoztam meg. A kapott anyagok hőstabilitását termogravimetriával vizsgáltam. Szol-gél módszer segítségével a kopolimerekből hibrid géleket állítottam elő, melyeknek szintén vizsgáltam a hőstabilitási és duzzadási sajátságait, illetve teofilin modell vegyület segítségével tanulmányoztam a hatóanyag leadását is a géleknek.

Előállítottam még referencia kopolimereket és géleket is NIPAAm és N,N'-metilén-bisz-akrilamidból (MBAAm), hogy kiderítsem milyen elemösszetételnél képződik elágazásos polimer, illetve gél. Az így előállított kopolimerek szerkezetét ^1H -NMR spektroszkópiával, míg a gélek tulajdonságait duzzadás méréssel vizsgáltam.

A PNIPAAm rendelkezik alsó kritikus szételegyedési hőmérséklettel (LCST), ahol a polimer kicsapódik vizes oldatából. Az LCST értékét fényáteresztés méréssel határoztam meg. Azt találtam, hogy a különböző mérési paraméterek illetve a kopolimerek összetétele befolyásolja az LCST értékét.



KIRSCHWENG BALÁZS Vegyésmérnöki mesterképzési szak MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:

Dr. Földes Enikő

*professzor emeritus, Magyar Tudományos Akadémia - Természettudományi Kutatóközpont -
Anyag- és Környezetkémiai Intézet (MTA-TTK-AKI)*

Kurkumin feldolgozási stabilizáló hatékonyságának és hatásmechanizmusának tanulmányozása Phillips típusú polietilénben

Kulcsszavak: kurkumin; polietilén; feldolgozási stabilizálás;

A poliolefinok stabilizálására alkalmazott ipari szintetikus fenolos antioxidánsok reakciótermékeinek az emberi szervezetre gyakorolt tisztázatlan hatása miatt előtérbe került a természetes antioxidánsok stabilizátorokként való alkalmazásának lehetősége. A Curcuma longa fűszernövény, illetve a belőle kinyerhető kurkumin antioxidatív és egészségre kedvező hatása régóta ismert, pontos hatásmechanizmusa azonban máig nem tisztázott teljes mértékben. Korábbi kutatásaink során fény derült arra, hogy a kurkumin stabilizáló hatást fejt ki a polietilénre is, de a hagyományos ipari fenolos antioxidánsokétól eltérő hatásmechanizmussal rendelkezik.

Jelen munkánk során többszöri extrúzió átesett mintákon elvégzett vizsgálatokkal tanulmányoztuk a kurkumin koncentrációjának hatását a polietilén feldolgozási stabilitására. Phillips típusú polietilénben 5 – 1000 ppm kurkumint vizsgáltunk 1000 és 2000 ppm foszfonitos antioxidánssal társítva. A polimer funkciós csoportjait FT-IR spektroszkópiával határoztuk meg, a reológiai jellemzőket a folyásindexszel (MFI), a maradék termooxidatív stabilitást a 200 °C-on mért oxidációs indukciós idővel (OIT) és a színt a sárgasági indexszel (YI) jellemeztük.

Modellkísérleteket végeztünk a kurkumin reakciómechanizmusának feltárására. A kurkumint a polietilén feldolgozása során képződő gyöktípusokkal (szén-centrumú, oxi- és peroximodellgyökkel) és hidroperoxid modellvegyülettel reagáltattuk 200 °C-on, majd a képződő reakciótermékeket minőségi és mennyiségi analízisnek vetettük alá. Az analízishez UV-VIS, HPLC és HPLC-MS módszereket alkalmaztunk.

A kutatás során feltártuk a kurkumin hagyományos szintetikus fenolos antioxidánsokhoz képest eltérő viselkedésének okát a feldolgozási körülmények között, meghatároztuk az optimális hatékonyságú kurkumin/foszfonit összetételt és javaslatot tettünk egyiparilag alkalmazható receptúrára.

FÁBIÁN BEÁTA Vegyész MSc, 9. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Szabó Ákos

tud. mts., MTA TTK Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Polimer Kémiai Csoport

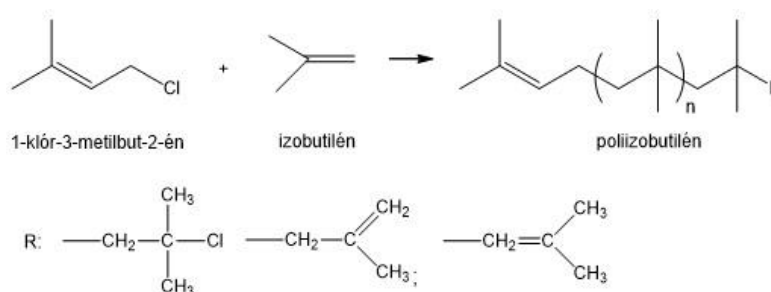
Láncvégen funkcionizált poliizobutilén előállítása

Kulcsszavak: karbokationos polimerizáció; poliizobutilén; 1-klór-3-metilbut-2-én; funkcionizálás; láncvégi kettős kötés

A XX. század közepén az emberiség új korszaka, a polimer korszak kezdődött meg. A mindennapi életünk során használt, fából és fémből készült tárgyakat felváltották a polimerből (műanyagból) készült termékek. Mára a gyógyászat, az építőipar nélkülözhetetlen alapanyagává váltak a polimerek. A poliizobutilén (PIB) egyike azon anyagoknak, amit az ipar széleskörűen alkalmaz, mint pl. motorhajtóanyag, építőipari szigetelő, gumí, orvosi implantátum.

Munkám során olyan iniciátort alkalmaztam izobutilén karbokationos polimerizációjában, amely segítségével kettős kötés építhető ki a PIB fejcsoportjában. Funkciós csoportok kialakításával megnövelhető a polimer gyakorlatban történő alkalmazhatósága. Különböző reakciókörülmények között vizsgáltam az 1-klór-3-metilbut-2-én iniciátor viselkedését, és tanulmányoztam Lewis-savak (TiCl_4 , BCl_3), adalékanyagok (DMA, TMEDA, DtBP) és oldószerek (hexán:diklór-metán elegy vagy benztotrifluorid) együttes hatását.

Műszeres vizsgálatok segítségével elemeztem a keletkező polimer szerkezetét. A gélpermeációs kromatográfiás (GPC) eredmények a poliizobutilén molekulatömegéről, polidiszperzitásáról nyújtottak információt, míg a mágneses magrezonancia spektroszkópia ($^1\text{H-NMR}$) a poliizobutilén láncvégeinek szerkezetéről adott tájékoztatást. Az eredmények alapján megállapítható, hogy a polimerizáció az általam alkalmazott reakciókörülményekben 1-klór-3-metilbut-2-én iniciátorral kis iniciátorhatékonyság mellett valósul meg. TiCl_4 koiniciátor és DtBP protoncsapda használata mellett sikerült fejcsoportbeli kettős kötést kialakítani, illetve β -proton elimináció lejátszódás hatására a növekvő láncvégeken is megjelent kettős kötés (1. ábra).



1. ábra: Poliizobutilén előállítása 1-klór-3-metilbut-2-én iniciátorral, és a polimerizáció során kialakuló láncvégi csoportok

FÓTY NIKOLETT Vegyésszmérnöki BSc, 4. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Dallos András
egyetemi docens, PE MK
Járvás Zsuzsa
tanszéki mérnök, PE MK

Mikrokapszulázásra alkalmas polimerek felületi tulajdonságainak vizsgálata inverz gázkromatográffal

Kulcsszavak: Adszorpciós szabadentalpia-változás; Adszorpciós entalpia-változás; Dorris-Gray módszer; Schultz módszer; Sav-bázis tulajdonságok

A hatóanyagok szállítására, tárolására, bizonyos körülmények közötti védelmére és kontrollált kibocsátására napjainkban egyre gyakrabban alkalmaznak mikrokapszulákat. A mikrokapszulázásra megfelelő polimer kiválasztásának egyik fontos szempontja a polimer és a hatóanyag molekulák közötti felületi kölcsönhatások erőssége és a polimer adszorpciós képessége.

A mikrokapszulákat alkotó polimerek felületi tulajdonságai számos technikával vizsgálhatók, melyek közül az inverz gázkromatográfiás módszer a legelterjedtebb megbízhatósága és hatékonysága miatt. Ennél a mérési módszernél ismert a vivőgáz és a szilárd fázis között megoszló anyag minősége és mennyisége, így a retenciós jellemzőkből az állófázisként alkalmazott polimerek felületi sajátságai kiszámíthatók.

Munkám során laboratóriumi kísérleteket végeztem hagyományos inverz gázkromatográfiás készülékkel. Két különböző polimer állófázison 20 különböző szerves vegyület retenciós jellemzőjét vizsgáltam meg a 60-150 °C közötti hőmérséklet tartományban. A méréseim során kapott kromatogramok adataiból megállapítottam a kromatográfiás csúcsok tömegközéppontjához tartozó valódi retenciós időket, illetve ezek alapján a fajlagos retenciós térfogatokat. Ezt követően extrapolációval meghatároztam az adszorbátumok végtelen híg koncentrációjára vonatkozó fajlagos retenciós térfogat és adszorpciós szabadentalpia-változás értékeit, és ezen adatok hőmérséklet-függése alapján kiszámítottam az adszorpciós entalpia-változást.

Második generációs inverz gázkromatográffal (felületi energia analizátor) meghatároztam a polimerek felületi energetikai tulajdonságait 60 °C-os mérési hőmérsékleten. Ezen mérési eredmények segítségével kiszámítottam a polimerekre jellemző felületi energia diszperziós komponensének értékeit a Dorris-Gray és Schultz módszerekkel, valamint meghatároztam a Gutmann összefüggés alkalmazásával a polimerek felületének Lewis kölcsönhatásokra jellemző sav- és bázisállandóit.

A mérési eredmények fontos információt jelentenek egyes hatóanyagok mikrokapszulázásának tervezése során. A polimer-hatóanyag kölcsönhatások erősségének ismeretében kívánt tulajdonságú és versenyképesebb termékek állíthatók elő.

FEKETE RICHÁRD Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Szabó Ákos

tudományos munkatárs, MTA TTK AKI Polimer Kémiai Kutatócsoport

PEGMA és DEAAm kopolimerjeinek előállítása és szerkezetük hatása intelligens termoreszponzív viselkedésükre

Kulcsszavak: polimer; LCST; ATRP; DEAAm; PEG

A polimerek a modern világ egyik leggyakrabban és legszélesebb körben alkalmazott anyagai. Nemcsak a mindennapi életünk során, hanem a legtöbb iparágban is kezdik átvenni a vezető szerepet (még azon esetekben is, ahol eddig természetes forrása volt az alapanyagoknak).

Munkám során feladatom olyan kopolimerek előállítása volt, amelyek vizes oldata rendelkezik alsó kritikus szételegyedési hőmérsékleti ponttal (LCST). Ehhez dietil-akrilamidot (DEAAm) és poli(etilén-glikol) (PEG) alapú makromonomereket használtam. Három különböző polimer sorozatot állítottam elő, melynek során DEAAm-ot 300 g/mol molekulatömegű poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakriláttal (PEGMEMA₃₀₀), di(etilén-glikol)-etil-éter-akriláttal (PEGEEA₁₈₈), illetve di(etilén-glikol)-metil-éter-metakriláttal (PEGMEMA₁₈₈) kopolimerizáltam ATRP mechanizmussal [1][2].

Ezután az elkészült kopolimereket tisztítottam, majd vizsgáltam, hogy a különböző PEG-(met)akrilát komonomer, valamint a különböző összetétel hogyan befolyásolja a kapott polimer vizes oldatának LCST értékét.

A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy a vizes oldatok LCST-je mindhárom PEG-(met)akrilát komonomer esetén más tendencia szerint változik az összetétellel. Míg a PEGMEMA₃₀₀ és az PEGEEA₁₈₈ komonomer esetében lineáris összefüggés figyelhető meg, addig a PEGMEMA₁₈₈ komonomer-tartalmú sorozatnál LCST-maximum észlelhető 50 m/m%-os összetétel környékén.

[1] Kato, M; Kamigato, M.; Sawamoto, M.; Higashimura, T. *Macromolecules* 1995, 28, 1721-1723

[2] Wang, J-S.; Matyjaszewski, K. *J. Am. Chem. Soc.* 1995, 117, 5614-5615

STUMPHAUSER TÍMEA Vegyész MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Fodor Csaba

tudományos munkatárs, MTA TTK AKI, Polimerkémiai Kutatócsoport

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Poli(N-vinil-imidazol) alapú amfifil kotérhálók előállítása és alapvető tulajdonságai

Kulcsszavak: polimer; amfifil kotérháló; tulajdonság; felhasználás

A hidrofil és hidrofób polimer láncokból felépülő amfifil kotérhálók fontos kutatási területet képviselnek, ugyanis különleges szerkezeti, termikus és duzzadási viselkedéssel rendelkeznek. Munkám során teljesen új, az irodalomban még nem közölt poli(N-vinil-imidazol) alapú amfifil kotérhálókat állítottam elő különböző kémiai szerkezetű és átlag molekulatömegű térhálósítószerrel felhasználásával, és vizsgáltam a kapott kotérhálók alapvető tulajdonságait.

A kotérhálókat makromonomer módszerrel állítottam elő, ahol poliizobutilén (PIB, számátlag molekulatömeg: 5000, 13000), poli(etilén-glikol) (PEG, számátlag molekulatömeg: 2000, 750) és poli(propilén-oxid) (PPO, számátlag molekulatömeg: 560) térhálósítószereket alkalmaztam. A kísérletek során öt sorozatot készítettem a mintákból, egy sorozaton belül csak a térhálósítószer és a PVIm arányát változtatva, hogy különböző összetételű kotérhálókat kapjak. Az el nem reagált vegyületek eltávolítása után a kotérhálók összetételét elemanalízissel állapítottam meg. A további vizsgálatokban a kapott új anyagok termikus, szerkezeti és duzzadási sajátságait vizsgáltam meg. A mérések kiértékelése során azt tapasztaltam, hogy az előállított kotérhálók nem azonosan viselkednek, ami a térhálósítószer minőségével és mennyiségével is kapcsolatba hozható volt. A termikus vizsgálatok (DSC) alapján egyáltalán nem, vagy adott sorozatok (PEG750 és PPO) esetében részben vagy teljesen elegyedő szerkezeteket sikerült előállítani. A PIB térhálósítószert tartalmazó sorozatok SAXS vizsgálata kimutatta, hogy nem elegyedő rendszerekben lehetőség van a fázisok nagyságának mérésére is. A duzzadási viselkedések vizsgálata során kiderült, hogy mind poláros, mind apoláros oldószerben duzzaszthatóak a kotérhálók, melyekre azonban erőteljes befolyással bír a térhálósítószer filicitása. A termikus mérések egyrészt a szerkezet megállapításában játszottak fontos szerepet, illetve megállapítottam, hogy a kotérhálók jó hőtűrési tulajdonságokkal rendelkeznek, és az összetevők befolyásolják egymás bomlási folyamatait.

Összegezve elmondható, hogy a PVIm alapú amfifil kotérháló sorozatok szintézise sikeres volt. Tulajdonságaikat, mint termikus és duzzadási viselkedésüket, valamint szerkezetüket az összetétel függvényében vizsgáltam. Igazoltam, hogy a térhálósítószer minősége hatással van a tulajdonságokra, illetve azok az összetétellel is változnak.

KORONKA DÁNIEL Vegyész MSc, 2. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Iván Béla
egyetemi magántanár, ELTE TTK
Szabó Ákos
tud. mts., ELTE TTK

Poli(poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilát-ko-N-vinilimidazol) kopolimerek előállítása és hőmérsékletérzékeny intelligens viselkedésük vizsgálata

Kulcsszavak: polimer; intelligens; fázisszeparáció; LCST; metakrilát

Poli(poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilát-ko-N-vinilimidazol) kopolimerek előállítása és hőmérsékletérzékeny intelligens viselkedésük vizsgálata

Kutatómunkám során arra fókuszáltam, hogy poli(etilén-glikol)-metil-éter-metakrilát (1. ábra) és N- vinilimidazol (2. ábra) alapú random kopolimereket állítsak elő és az azok által mutatott hőmérsékletérzékeny intelligens viselkedést vizsgáljam. Ezen anyagok hőmérséklet változtatására vizes oldatukból kicsapódnak egy, az adott anyagra jellemző hőmérséklettartományban az alsó kritikus szételegyedési hőmérsékleten (LCST-n). A munkám során előállított kopolimerek ilyen vizsgálatát még nem végezték el, így nekem állt módomban fényt deríteni arra, hogy az előállított random kopolimerek esetében a monomerarány, a PEGMA poli(etilén-glikol) oldalláncainak hossza és a közeg pH-ja miként befolyásolja az LCST-t.

Munkám első szakaszában az eltérő összetételű polimerek szintézisét, illetve ¹H-NMR spektroszkópiás analízisét végeztem el. Kutatómunkám második és egyben fő szakaszában a korábban előállított szisztematikus kopolimer-sorozatok vizes oldatai LCST-jének spektrofotometriás meghatározásával foglalkoztam. Az LCST méréseket desztillált vizes közegben, továbbá pH = 3,00, pH = 6,00, illetve pH = 10,00 pufferoldatokban is elvégeztem. Elmondható, hogy az általam elvégzett kísérletek arra mutatnak, hogy az adott anyagra jellemző hőmérsékleti tartományban bekövetkező fázisszeparációt (LCST-t) nagymértékben befolyásolja a vizsgált polimer láncba beépült különböző monomerek típusa és mennyisége, továbbá, a bázikus monomer egységek jelenléte miatt a mérés közegeként szolgáló oldat pH értéke. Az eredményeim alapján kapott összefüggések hozzájárulhatnak újszerű intelligens polimer anyagi rendszerek tervezéséhez.

VARRÓ NIKOLETT Vegyész MSc MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Hernádi Klára
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Németh Krisztián
doktorjelölt, SZTE TTIK

SiO₂-MgO / MWCNT nanokompozitok előállítása és vizsgálata polimer erősítéséhez

Kulcsszavak: szén nanocső; nanokompozit; polimer; elektronmikroszkópia; szakítóvizsgálat

A szén nanocsövek a jó mechanikai, elektromos és kémiai tulajdonságainak köszönhetően napjainkban egyre elterjedtebb az erősítőanyagként való felhasználásuk, például polimer mátrixú kompozitokban. A Szegedi Tudományegyetem Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszékén évek óta folynak szén nanocsövekkel és kompozitjaikkal kapcsolatos kutatások, melyek során az előállítási lehetőségek tökéletesítésével és szélesebb körű felhasználásuk tanulmányozásával foglalkoznak. Diákköri munkám során az utóbbival kapcsolatos kutatásokkal foglalkoztam. Fő célom az volt, hogy a szén nanocsövek felületét a műanyagiparban töltőanyagként használt talkumhoz hasonló összetételű szervetlen oxidréteggel vonjam be és polimer mátrixba keverjem.

Kísérleteim során a szén nanocsövek felületkezelése magnézium-acetát-tetrahidrát ($\text{Mg CH}_3\text{COO})_2 \times 4 \text{ H}_2\text{O}$) és tetraetil-ortoszilikát ($\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4$) prekursorok jelenlétében, szol-gél technikát alkalmazva történt. Oldószerként etanolt, a lúgos kémhatás beállításához ammónia oldatot használtam. Az oldószer elpárologtatása után a mintákat 400°C-on hőkezelttem.

Az elkészített nanokompozitokat transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM), röntgen diffraktométerrel illetve Raman spektroszkóppal vizsgáltuk.

A Tanszék támogatásával alkalmam nyílt a Kecskeméti Főiskola Gépipari és Automatizálási Műszaki Főiskolai Kar Műanyagtechnológia Tanszékén a felületkezelt szén nanocsöveket olvadékkeveréssel módszerrel polipropilén mátrixba keverni és az elkészített kompozitokat különböző vizsgálatoknak alávetni.

A polimermintákat pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) és Raman spektroszkóppal vizsgáltuk meg. A kompozitok mechanikai tulajdonságainak vizsgálatára szakítóvizsgálatot végeztünk.

Eredményeimet tekintve kijelenthetjük, hogy a szén nanocsövek felületén részben, illetve teljesen sikerült szervetlen oxidréteget létrehozni. A SEM felvételek alátámasztják, hogy sikeres volt a felületkezelt szén nanocsövek polimer mintába való bekeverése. A szakítóvizsgálatok során megállapítottuk, hogy a polimer erősítése sikeres volt, hiszen a bekevert szén nanocsövek hatására a tiszta polipropilén mintához képest megnőtt a kompozitminták Young-modulusa.

Koordinációs kémia

SZABÓ GERGELY Kémia BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezetők:
 Dr. Tóth Imre
 egyetemi tanár, DE TTK
 Dr. Baranyai Zsolt
 tudományos munkatárs, DE TTK

A gallium-(III)-1,4,7,10-tetraazaciklododekán-1,4,7,10-tetraacetát komplex képződésének kinetikája etanol-víz elegyekben

Kulcsszavak: gallium; etanol; egyensúly; kinetika; komplex

Munkám során a DOTA ligandum oldategyensúlyi sajátosságait, illetve a GaDOTA komplex képződésének sebességét tanulmányoztam etanol-víz elegyekben pH-potenciometriás módszerrel illetve spektrofotometriásan indikátor módszer és ^1H -NMR spektroszkópia alkalmazásával.

A H_4DOTA ligandum különböző összetételű etanol-víz elegyekben meghatározott protonálódási állandói alapján megállapítható, hogy az etanol koncentrációjának növelésével a $\log K_1\text{H}$ és $\log K_2\text{H}$ értékek csökkennek, a $\log K_4\text{H}$ értékek nőnek, míg a $\log K_3\text{H}$ és $\log K_5\text{H}$ értékek kismértékben csökkennek. A gyűrű nitrogének protonálódásához rendelhető $\log K_1\text{H}$ és $\log K_2\text{H}$ értékek csökkenését az etanol kisebb öndisszociációs állandójával értelmezhető. A DOTA acetát csoportjának protonálódását jellemző $\log K_4\text{H}$ érték növekvő etanol koncentrációval bekövetkező növekedése a gyűrű nitrogének csökkenő bázicitása eredményezi. A DOTA oldategyensúlyi vizsgálataiból egyértelműen kiderül, hogy az etanol koncentrációja befolyásolja a donoratomok bázicitását, a ligandum protonálódási sajátosságait, amelyek hatással vannak a DOTA egyensúlyi sajátosságaira.

A Ga^{3+} -ion nagy stabilitási állandóval jellemezhető komplexet képez a DOTA ligandummal. A $\text{Ga}(\text{DOTA})$ képződése lassan, a $\text{Ln}(\text{DOTA})$ komplexekhez hasonlóan stabilis kétszer protonált $^*\text{Ga}(\text{H}_2\text{DOTA})$ köztitermék képződésén keresztül játszódik le. A $\text{Ga}(\text{DOTA})$ képződési reakcióinak sebességmeghatározó lépése a kétszer protonált $^*\text{Ga}(\text{H}_2\text{DOTA})$ köztitermék deprotonálódása és végtermékké történő átrendeződése. A kétszer protonált $^*\text{Ga}(\text{H}_2\text{DOTA})$ köztitermék deprotonálódására és végtermékké történő átrendeződésére jellemző k_f sebességi állandók lineárisan nőnek a $[\text{OH}^-]$ növekedésével a $\text{pH}=2,5 - 3,7$ tartományban. A $\text{Ga}(\text{DOTA})$ -komplex képződésére feltételezett reakció mechanizmus alapján a kétszer protonált $^*\text{Ga}(\text{H}_2\text{DOTA})$ köztitermék gyors protonálódási egyensúlyban átalakul monoprotonált $^*\text{Ga}(\text{HDOTA})$ köztitermékké, amely víz katalizált deprotonálódását követően rendeződik át végtermékké. A $^*\text{Ga}(\text{HDOTA})$ köztitermék protonálódási állandó értéke lényegesen kisebb, mint a $^*\text{Ln}(\text{HDOTA})$ köztitermékek protonálódási állandója, ami magyarázatul szolgálhat a $\text{Ga}(\text{DOTA})$ gyorsabb képződésére. A $^*\text{Ga}(\text{HDOTA})$ köztitermék protonálódási állandó értéke a DOTA ligandum $\log K_1\text{H}$ és $\log K_2\text{H}$ értékeihez hasonlóan csökken az etanol koncentrációjának növekedésével, ami adott H^+ koncentrációnál a $\text{Ga}(\text{DOTA})$ gyorsabb képződését eredményezi az etanol koncentrációjának növekedésével.

PÓSÁN ADRIENN Vegyészmérnök BSc, 7. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Várnagy Katalin
 egyetemi docens, DE TTK

A HisValGlyHis tetrapeptid Cu(II) és Ni(II) komplexének a vizsgálata

Kulcsszavak: oldategyensúly; CD-spektroszkópia; UV-látható spektroszkópia; pH-potenciometria

A réz és a nikkel valamennyi élő szervezet számára nélkülözhetetlen nyomelem. A réz a legnagyobb mennyiségben fehérjéhez kötötten fordul elő a szervezetben, míg a nikkel az ureáz nevű enzim aktív centrumában. Redoxireakcióik számos biológiai oxidációs folyamatban játszanak szerepet. Leggyakrabban +2-es oxidációs állapotban képeznek komplexeket. A hisztidin fontos kötési hely a nikkel(II) és a réz(II) számára is. A rendszerek központi ionja valamilyen átmenetifémion, amely koordinatív kötéssel kapcsolódik a ligandumként jelenlévő aminosavhoz, peptidhez, vagy azok származékához.

Munkám során a C-terminálisan védett HisValGlyHis tetrapeptid réz(II) és nikkel(II) komplexeit vizsgáltam. Először előállítottam a HisValGlyHis szekvenciájú aminosavat szilárd fázisú peptidszintézissel. Majd a peptid az oldategyensúlyi vizsgálatát végeztem el. A pH-potenciometriás vizsgálatok alapján SUPERQUAD és PSEQUAD programok segítségével meghatároztam a ligandumok koncentrációját, a protonálódási állandók értékeit és a keletkező komplexek stabilitási állandóit.

A pH-potenciometriás mérések alapján megállapítható, hogy a réz(II)-ion jelenlétében monokomplexek ($[\text{CuLH}]^{2+}$, $[\text{CuL}]^+$, $[\text{CuLH}_1]$, $[\text{CuLH}_2]^-$ és $[\text{CuLH}_3]^{2-}$) és egy biszkomplex ($[\text{CuL}_2]$); míg a nikkel esetében $[\text{NiLH}]^{2+}$, $[\text{NiL}]^+$, $[\text{NiL}_2]$, $[\text{NiLH}_1]$, $[\text{NiLH}_3]^{2-}$ komplexek keletkeznek. Az ML és ML_2 összetételű komplexekben a ligandum háromfogú koordinációja jön létre. A pH emelésével az amidnitrogén deprotonálódik. A nikkel(II)ion esetében pH 9 felett izomer szerkezeteket nem feltételezünk.

Az UV-látható fotometriás és CD-vizsgálatok alátámasztották a feltételezett szerkezetű komplexek jelenlétét.

PÓTA KRISTÓF Kémia BSc, 6. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Tircsó Gyula

egyetemi adjunktus, DE TTK

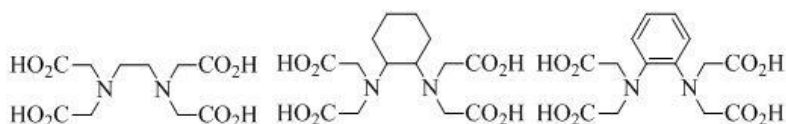
Dr. Kálmán Ferenc Krisztián

tudományos munkatárs, DE TTK

A $[\text{Mn}(\text{PhDTA})]^{2-}$ -komplex egyensúlyi, kinetikai és relaxációs tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: Mágneses Rezonanciás Képalkotás (MRI); kontrasztanyagok; paramágneses fémionok; biogén fémionok; komplexkémiail jellemzés

A Mn^{2+} -alapú kontrasztanyagok fejlesztése az elmúlt néhány évben jelentősen megélénkült, ami a Mn^{2+} -ion biogén voltának tudható be. A Mn^{2+} -ion komplexálására alkalmas komplexképzők megtervezése/előállítása tekintetében a merev nyíltláncú és az előredezett makrociklusos ligandumok egyaránt érdekesek lehetnek. Az EDTA komplexképző etiléndiamin „gerincét” orto-feniléndiaminnal helyettesítve egy, a CDTA komplexképzőnél is merevebb ligandumot állítottunk elő irodalmi adatok alapján (1. ábra) és vizsgáltuk a biogén fémionokkal képződő komplexeit, ill. a $[\text{Mn}(\text{PhDTA})]^{2-}$ -komplex egyensúlyi, kinetikai és relaxációs tulajdonságait. Az aromáscsoport elektronszívó hatásának eredményeként a PhDTA ligandum összbázicitása az EDTA-éhoz mérten jelentősen csökken, ami a vizsgált komplexek stabilitásának csökkenését eredményezi, ugyanakkor a $[\text{Mn}(\text{PhDTA})]^{2-}$ -komplex látszólagos stabilitása csak kis mértékben változik. A komplex relaxivitása is megegyezik a $[\text{Mn}(\text{CDTA})]^{2-}$ -komplekxre publikált értékkel ($\tau_{1p} = 3,6 \text{ mM}^{-1} \text{ s}^{-1}$) [1], de a Cu^{2+} kicserélő fémionnal végzett kinetikai vizsgálatok alapján a komplex fiziológiás pH-n ($\text{pH} = 7,4$) és 25°C -on 23,3 órás felezési idővel rendelkezik, ami közel a kétszerese a $[\text{Mn}(\text{CDTA})]^{2-}$ -komplex esetére megállapított értéknek. A termodinamikai, relaxációs és kinetikai paraméterek tekintetében a $[\text{Mn}(\text{PhDTA})]^{2-}$ -komplex jelentős előrelépést jelent a klinikai gyakorlatban is alkalmazható Mn^{2+} -alapú MRI kontrasztanyagok felé, de a ligandumok szerkezetét illetően további fejlesztésekre van még szükség.



1. ábra. A H_4EDTA , H_4CDTA és H_4PhDTA ligandumok szerkezete.

[1] F. K. Kálmán, Gy. Tircsó, Inorg. Chem., 2012, 51 (19), 10065.

MÉSZÁROS JÁNOS PÉTER Kémia BSc, 5. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Enyedy Éva Anna
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Dr. pharm. Dömötör Orsolya
tud. segéd munkatárs, SZTE TTIK

A RhCp* (N,N) kétfogú ligandumokkal képzett komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálata

Kulcsszavak: ródium; 2,2'-bipiridin; etilén-diamin; katalízis; rákellenes

A fémorganikus vegyületek a katalitikus reakciókban és a gyógyászatban, különösképp a rákellenes kutatásban is biztató eredményeket produkálnak. A $[\text{RhCp}^*(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ [pentametil-ciklopentadienil-ródium(III)] a nitrogén donoratomú ligandumokkal stabilis komplexeket képez, mely e két potenciális alkalmazási területen fontos tulajdonság.

A 2,2'-bipiridinnel (bpy) képzett komplexe, a $[\text{RhCp}^*(\text{bpy})]^{2+}$ vegyület, az irodalomban jól ismert, mint koenzimek in situ regenerálására képes anyag és hidrid-transzfer [1]. Rákellenes aktivitása a $[\text{RhCp}^*(\text{en})]^{2+}$ (en = etilén-diamin) komplexszel egyetemben alacsony ($\text{IC}_{50} > 100 \mu\text{M}$), azonban fenantrolinnal és nagyobb polipiridilekkel képzett komplexei már in vitro mérések esetén aktívnak bizonyultak [2]. Így e rákellenes komplexek modelljéül is szolgálhat a $[\text{RhCp}^*(\text{bpy})]^{2+}$ és a $[\text{RhCp}^*(\text{en})]^{2+}$.

Azonban – a $[\text{RhCp}^*(\text{bpy})]^{2+}$ széleskörű felhasználása ellenére – eddig kvantitatív mérések nem történtek az oldategyensúlyt megszabó állandók meghatározásának érdekében. Ezért vizsgáltuk a két komplex oldatbeli viselkedését kloridiont tartalmazó és klorid-mentes közegben pH-potenciometriás, UV-látható és ^1H NMR spektroszkópiás módszerek kombinációjával. Emellett a $[\text{RhCp}^*(\text{L})(\text{H}_2\text{O})]^{2+}$ komplexekben a víz kloridionra történő cseréjét is jellemeztük.

Tanulmányoztuk ezen komplexek humán szérum albuminnal való kölcsönhatását is kötőhely-markerek és aminosav oldallánc modellek bevonásával ^1H NMR, spektrofluorimetria, ESI-MS és ultraszűrési módszerekkel.

[1] F. Hollmann, B. Witholt, A. Schmid, J. Mol. Catal. B-Enzym. 19-20 (2003) 167-176.

[2] Y. Geldmacher, M. Oleszak, W. S. Sheldrick, Inorg. Chim. Acta 393 (2012) 84-102.

FARKAS EDIT vegyész MSc, 4. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Tóth Imre
egyetemi tanár, DE TTK

Az EGTA-BBA ligandum néhány fémionnal kialakuló komplexének koordinációs kémiai vizsgálata

Kulcsszavak: MRI, Ca-szelektív kontrasztanyag, relaxivitás, stabilitás, inertség

Munkám során megvizsgáltuk az EGTA-BBA ligandumot, amely modellvegyülete egy újonnan szintetizált, a Ca^{2+} -ionok in vivo MRI mérésére alkalmas ligandum Ca^{2+} -ion kötő fragmensének. Az egyensúlyi vizsgálatok során meghatároztuk a ligandum protonálódási állandóit és néhány fémionnal (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} , Gd^{3+}) képződő komplexének stabilitási és protonálódási állandóit.

Az EGTA-BBA protonálódási állandóit összehasonlítva EGTA ligandum protonálódási állandóival megállapítható, hogy acetátcsoportok amidcsoportokkal történő helyettesítésének következményeképp az EGTA-BBA protonálódási állandói kisebbek. A protonálódási állandók értékének csökkenése az EGTA-BBA ligandum összbázicitásának több mint 3 nagyságrendnyi csökkenését eredményezi az EGTA összbázicitásához képest.

A protonálódási állandók ismeretében vizsgáltuk az egyes fémionokkal kialakuló egyensúlyi rendszereket. A $[\text{Mg}(\text{EGTA-BBA})]$ -komplex stabilitási állandóját nem sikerült meghatározni, ami annak tulajdonítható, hogy a Mg^{2+} -ion nem, vagy csak igen kis stabilitású komplexet képez az EGTA-BBA ligandummal, ami jelentős eltérés az EGTA ligandumhoz képest. Ez a viselkedés az in vivo felhasználás szempontjából hasznos is, hiszen így a ligandum Ca^{2+} -ionnal szemben mutatott szelektivitása nagyobb, mint az EGTA ligandumé. A Cu^{2+} -, Zn^{2+} - és Gd^{3+} -ionokkal kialakuló komplexek esetében az ML komplexek mellett kétszerprotonált és kétmagvú részecskék képződését is sikerült kimutatni.

A $[\text{Gd}(\text{EGTA-BBA})]^+$ -komplexre kapott egyensúlyi adatok felhasználásával eloszlási diagramot szerkesztettünk annak kiderítése érdekében, hogy a $[\text{Gd}_2(\text{EG2A2M}^{\text{DO3A}})]^{2-}$ -komplexben, ahol a két Gd^{3+} -ion a DO3A fragmensekhez kell, hogy kötődjön, van-e lehetőség a Gd^{3+} -ion EGTA-BBA-hoz való „átvándorlására” egyensúlyi szempontból. Az eloszlási görbék alapján megállapítottuk, hogy pH=7,4-en a Gd^{3+} -ionok 100%-ban a makrociklusos DO3A fragmensekhez kötődnek.

Érdekes eredményre jutottunk ugyanakkor a $[\text{Gd}(\text{EGTA-BBA})]^+$ -komplex relaxivitása pH-függésének vizsgálatakor, mivel a $[\text{Gd}(\text{HL})]$ -komplex deprotonálódása gyakorlatilag nem befolyásolja a relaxitás értékét. Ezek alapján a komplex protonálódása (a $[\text{Gd}(\text{HEGTA-BBA})]^{2+}$ -komplex képződése során) olyan donoratomon játszódik le, amelyik nem koordinálódik a Gd^{3+} -ionhoz. Ennek a tapasztalnak a megerősítésére további vizsgálatokat tervezünk.

DOKONPIL VANESSZA

Anyagmérnök BSc.

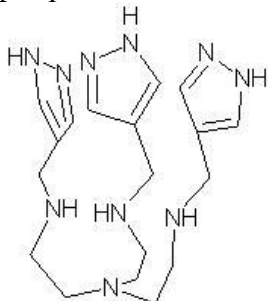
BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:**Dr. Gajda Tamás**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Matyuska Ferenc**PhD hallgató, SZTE TTIK***Egy pirazol-gyűrűkkel szubsztituált TREN-származék átmenetifém komplexeinek vizsgálata***Kulcsszavak: tripodális ligandum; átmenetifém-komplexek; pH-potenciometria; UV-látható spektrofotometria*

Az enzimek vizsgálata bonyolult és nehéz, de működésüknek megértése fontos. A metalloenzimeket modellezhetjük kis molekulatömegű tripodális ligandumok fémkomplexeivel is a könnyebb vizsgálat érdekében. Ezek a ligandumok viszonylag merev szerkezet kialakítására képesek, ami hasonlatos a metatalloenzimek aktív centrumára, valamint polidentát sajátságuk révén képesek lehetnek több fémion számára is kötőhelyet kialakítani. Ilyen polidentát tripodális ligandumok lehetnek a TREN (trisz-2-aminoetilamin) N-szubsztituált származékai. Jelen munkámban egy új TREN-származékot, a három pirazol gyűrűt tartalmazó trisz[N-(1H-pirazolil-4-metil)-2-aminoetil]amin (továbbiakban 4'-TPZAA, 1. ábra) előállítását és Mn(II), Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II) és Zn(II)-ionokkal alkotott komplexeinek oldategyensúlyi viselkedését vizsgáltam pH-potenciometria és UV-látható spektrofotometria segítségével.



A ligandum MHL, ML és $MH_{-1}L$ összetételű komplexeket képez a kobalt(II)-, nikkel(II)-, réz(II)- és cink(II)-ionokkal ($\log K(ML) = 8,90; 9,61; 15,84; 10,64$ rendre), ami nagy hasonlóságot mutat a TREN és a kutatócsoportban korábban vizsgált trisz[N-(piridil-3-metil)-2-aminoetil]amin (3'-TPAA) viselkedésével. A komplexek stabilitása és a Cu(II) és Co(II) tartalmú részecskék jellegzetes látható spektruma 4N-es, trigonális bipiramisos szerkezetre utal, így a pirazol nitrogének nem vesznek részt a koordinációban. Többmagvú komplex képződését csak réz(II) jelenlétében tapasztaltuk. A $[Cu(II)]:[L]=1:1$ arányú mintánál igen alacsony pH-n (~3-4) kék színű csapadék jelent meg, ami visszاسzorítható a ligandumfelesleg alkalmazásával. A csapadék semmilyen közönséges oldószerben nem volt oldható, ami pirazolat-hidakkal összekötött polimer szerkezetre utal. Hasonló jelenséget tapasztaltunk pH 7 körül vas(II) jelenlétében is.

A 4'-TPZAA komplexeit összehasonlítva a TREN hasonló komplexeivel megállapíthatjuk, hogy előbbi bázicitással korrigált stabilitási állandói mintegy két nagyságrenddel nagyobbak. Ennek oka feltehetően a gyűrűk közötti π -stacking vagy vízen keresztüli H-hidas stabilizáló kölcsönhatás lehet.

HORVÁTH ÉVA Kémia BSc, 7. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Czibulya Zsuzsanna
tudományos munkatárs, PTE TTK

**Felső peremen karboxil-csoportot tartalmazó kavitand származék - kávésav
kölsönhatásának tanulmányozása**

Kulcsszavak: 'gazda-vendég' komplexképződés; fluoreszcencia spektroszkópia; spektrofotometria; termodinamikai paraméterek

A kavitandok üregekkel rendelkező, vendégmolekulák befogadására képes gazdamolekulák; melyek ígéretesnek mutatkoznak gázszenzorként, fluoreszcens nanoreaktorként vagy akár molekuláris kapszulaként való alkalmazásra.¹ Az általunk vizsgált vendég molekula, a kávésav egy gyakori gyógyhatású készítményekben is használatos polifenol.² Mivel a kávésav számos mezőgazdasági termékben (pl. gyümölcsök, borok,^{3,4} kávé) is fellelhető antioxidáns, fontos, hogy minél érzékenyebb és szelektívebb eszközök álljanak rendelkezésre e vegyületek monitorozására. A lehetséges szenzorkémiai alkalmazások érdekében a kavitand és kávésav molekulák kölcsönhatását UV/Vis- és fluoreszcencia spektroszkópia segítségével tanulmányoztuk elektrokémiai szenzorok készítésekor elterjedten használatos oldószerkelegyekben. Az abszorpciós spektrumok hőmérsékletfüggését vizsgálva, a Hyperquad programcsomaggal meghatározott egyensúlyi állandók értékeiből a van't Hoff egyelet alapján meghatározott termodinamikai paraméterek^{5,6} 1:2 sztöchiometriájú komplex kialakulását valószínűsítik, melyet a Job módszerrel végzett méréseink is megerősítettek. Kimutattuk, hogy a komplexképződési folyamat entrópia vezérelt, ez összhangban van azzal, hogy a Job görbék nagyon kis hőmérsékletfüggés mutatnak. A fluorimetriás mérések során mind a kávésav dimerizáció, mind pedig az 1:2 sztöchiometriájú komplexek kialakulása megerősítést nyert, továbbá a nagyobb érzékenysége miatt a fluoreszcenciás módszerrel az 1:1 sztöchiometriájú komplexek jelenlétét is sikerült kimutatni. A termodinamikai paramétereket a spektrofotometriás méréseknél alkalmazott módszerekkel határoztuk meg. Eredményeink alapján elmondható, hogy az 1:2 sztöchiometriájú kavitand : kávésav komplex kialakulása valószínűbbnek mutatkozik az 1:1 sztöchiometriájú komplex kialakulásánál, valamint, hogy mind a kávésav dimerizációja mind az 1:2 komplexképződés folyamata entrópia vezérelt. Az, hogy a komplexképződést a kávésav dimerek kialakulása megelőzi-e, vagy a kávésav molekulák egyesével kapcsolódnak-e a kavitandhoz, további vizsgálatokat igényel. A koordináció helyére vonatkozóan szintén folynak kísérletek.

¹Zs. Csók et al., Tetrahedron, 2012, 68, 2657-2661

²E. M. Marinova et al., Food Chemistry, 2009, 114, 1498–1502

³Zs. Czibulya et al., Food Research International, 2012, 45 , 272-276

⁴Zs. Czibulya et al., Journal of Food Science, 2012, 77, 880-885

⁵M. Poór et al., Journal of Luminescence, 2014, 135, 276–280

⁶M. Poór et al., Food Chemistry, 2015, 172,149

LUKÁCS MÁRTON Vegyész MSc, 1. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Várnagy Katalin
egyetemi docens, DE TTK*

Kadmium(II)-peptid rendszerek oldategyensúlyi vizsgálata

Kulcsszavak: pH potenciometria; UV-VIS; karboxilcsoport; koordináció, NMR

A vizsgálatok során kíváncsiak voltunk arra, hogy a különböző peptidek oldalláncában található tiol- és karboxilcsoportok milyen hatással vannak a peptidek kadmium megkötő képességére. A terminálisan védett tetrapeptid esetén elsődleges cél volt a szintézis megvalósítása, majd csak ezt követően terveztük a fémkötő képesség vizsgálatát.

Az aszparaginsavat/glutaminsavat tartalmazó peptidek vizsgálatainak eredményei rámutattak arra, hogy a kialakuló kölcsönhatás a Cd(II)-ion és a vizsgált ligandumok között kicsi, és az amidnitrogén atomok deprotonálódása sem indukálódik a fémion jelenlétében. A kölcsönhatás erőssége a vizsgált ligandumok [CdA] komplexei esetén az Asp-Ala < Asp₂ < Glu₂ ~ Asp-Glu < Asp₃ < Asp₄ irányban nő. Azaz a karboxilcsoportok számának növekedése a fémion koordinációs szférájában növeli a kialakuló komplexek stabilitását. Általában [CdAH] komplex alakul, amelyben az aminos csoport protonált formában van jelen. A pH emelésével azonban ez a csoport deprotonálódik, és részt vesz a koordinációban. A pH további emelésével [CdAH₁] komplex megjelenésére is van lehetőség, amely egy vegyes hidroxó komplex. A titrálások során minden esetben Cd(OH)₂ csapadék vált le. A kadmium(II)ion koordinációs viszonyait más fémionokkal összehasonlítva elmondható, hogy a kialakított Lewis sav-bázis kölcsönhatások a peptidekkel a következő sorrendben csökkenek: Cu(II) > Ni(II) > Zn(II) ~ Co(II) > Cd(II).

A ciszteint tartalmazó peptidek közül az Ac-Cys-Ser-Ser-Cys-NH₂ peptidet automata peptidszintetizáló készülékkel próbáltuk szintetizálni, de egy olyan anyagot kaptunk, amely körülbelül ~20%-ban tartalmazott olyan molekulákat, amelyek szekvenciájában még megtalálható volt az a tercbutil védőcsoport.

A glicil-cisztein ligandumot és Cd(II)-ionokat különböző mennyiségben tartalmazó rendszerek titrálása során minden esetben egy fehér csapadék leválását tapasztaltuk. Ez feltételezhetően nem Cd(OH)₂, hanem egy kétszeresen protonált semleges részecske. A kialakuló [CdA₂]²⁻ részecskében (S,O) koordináció kialakulását feltételezzük. A komplexképződésben az aminos csoportok nem vesznek részt.

A Cd(II)-ion glicil-ciszteinnel kialakított [CdA₂H₂] komplexének vizsgálata alapján sikerült igazolnunk, hogy a komplex valóban a vizsgált ligandumot tartalmazta.

A tetrapeptid vizsgálata során egyik esetben sem vált le csapadék, a fémiont a ligandum a teljes pH-tartományon oldatban tudta tartani, és a kadmium(II)ionnal kialakult kölcsönhatás nagyobb, mint a Zn(II)-ion esetén.

FÖLDES DÁVID GÁBOR Vegyész MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:

Kováts Éva

tud. főmts., MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

Kubánvázas építőelemeket tartalmazó fémorganikus vázszerkezetek

Kulcsszavak: koordinációs polimerek; másodlagos építőelem; cink; kubán-1,4-dikarbonsav; röntgendiffrakció

A fémorganikus vázszerkezetek pórusos szerkezetüknek köszönhetően a jelenleg ismert legnagyobb fajlagos felülettel és legkisebb sűrűséggel rendelkező kristályos vegyületek. A cink- és karboxilát-alapú fémorganikus vázszerkezeteket vizsgáltuk, amelyek csomópontjain merev, fém-oxigén-szén klasztereket, közöttük az éleken pedig szerves összekötőelemeket tartalmazó koordinációs polimerek. A csomóponton elhelyezkedő, merev, fémtartalmú klasztereket másodlagos építőelemeknek nevezik [1].

Irodalmi szintézisekből kiindulva optimalizáltuk különböző tereftálsav-alapú fémorganikus vázszerkezeteket előállítását. Sikeresen előállítottuk a lapátkerékszerű, $\text{Zn}_2(\text{CO}_2)_4$ másodlagos építőelemeket tartalmazó MOF-1-et és MOF-2-t, illetve a köbös MOF-5-öt. Az egyik legismertebb és legfontosabb fémorganikus vázszerkezet a köbös kristályszerkezetű MOF-5, amely a csomópontokon található $\text{Zn}_4\text{O}(\text{CO}_2)_6$ klaszterekből és az éleken közöttük lévő szerves összekötőelemekből épül föl. A másodlagos építőelemek közepén egy oxigénatom helyezkedik el, melyet tetraéderesen négy cink vesz közbe. A tetraéder éleinél egy-egy karboxiláthíd köti össze a négyes koordinációjú cinkeket [1].

A tereftálsavhoz hasonló méretű, ám attól eltérő tulajdonságú és stabilitású kubán-1,4-dikarbonsavat felhasználva négy új kristályszerkezetű anyagot előállítottunk, különböző kísérleti körülmények mellett. Az anyagok szerkezetét egykristálydiffrakció segítségével vizsgáltuk.

Az egyik új szerkezet több szerkezetileg azonos és független, egymásba ágyazódó makromolekulából áll, melyek egymagvú, tetraéderes szimmetriájú $\text{Zn}(\text{CO}_2)_4$ másodlagos építőelemeket tartalmaznak.

Előállítottunk egy lapátkerékszerű, kétmagvú $\text{Zn}_2(\text{CO}_2)_4$ másodlagos építőelemeket tartalmazó sík polimerekből álló szerkezetet is, melyben a cinkatomok ötös koordinációjúak. A síkok közötti távolságot a cinkatomokhoz koordináló oldószer-molekulák befolyásolják.

A legmagasabb szimmetriájú új szerkezet a MOF-5 kubántartalmú analógja, melynek csomópontjain négmagvú, hatos csatlakozású $\text{Zn}_4\text{O}(\text{CO}_2)_6$ másodlagos építőelemek vannak.

Sikerült előállítanunk egy igen érdekes, kettősréteg jellegű szerkezetet. Ebben a szerkezetben egy igen ritka másodlagos építőelem található a csomópontokon, a négy cinkatomot tartalmazó, hetes csatlakozású $\text{Zn}_4\text{O}(\text{CO}_2)_7$. Ebben a másodlagos építőelemben két négyes és két ötös koordinációjú cink található, amely hét irányú elágazást tesz lehetővé.

[1] H. Li, M. Eddaoudi, M. O'Keeffe, O.M. Yaghi, Nature, 402, 276-279 (1999)

ZIEGENHEIM SZILVESZTER Vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Pálinkó István
egyetemi docens, SZTE TTIK
Varga Gábor
PhD hallgató, SZTE TTIK

Nikkel és mangán aminosav komplexek kiépítése réteges kettős hidroxidokban

Kulcsszavak: réteges kettős hidroxid; interkaláció; fém-aminosav komplexek

Kísérleteink során kalcium-alumínium (Ca_2Al) réteges kettős hidroxidok (LDH-k) rétegei között igyekeztünk nikkel (Ni(II)- és Mn(II)-aminosav komplexeket kiépíteni.

A kísérletekhez felhasznált LDH-kat együttes lecsapás módszerével állítottuk elő. A komplexek kiépítéséhez a rétegek között kétféle módszert alkalmaztunk. Az első módszer alkalmazásakor először a kiválasztott aminosavakat (prolint és valint) építettük be a rétegek köze, majd a sikeresen interkalált LDH-k rétegei között igyekeztünk kialakítani a komplexeket. A másik módszer során először létrehoztuk a fém-aminosav komplexeket, majd ezeket a közvetlenül interkaláltuk a rétegek közé. Az interkalálás módszere mindkét esetben direkt a anioncsere volt.

A munka során szisztematikusan változtattuk azokat a kísérleti körülményeket, melyek alapvetően befolyásolhatták az aminosavak és a komplexek interkalálásának hatékonyságát. Az optimalizálás során a minél magasabb beépülési arány elérését tartottuk szem előtt. Ennek mérésére végeztünk kísérletet.

A mintákban az LDH-k kiépülését röntgendiffraktometriával (XRD) és pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM) követtük, míg az aminosavak és a komplexek beépülését infravörös (IR) spektroszkópiával, illetve SEM készülékhez kapcsolt energiadiszperzív röntgenanalizátorral (SEM-EDX) vizsgáltuk.

A szerkezetvizsgálati módszerek eredményei szerint az aminosavak és a fém-aminosav komplexek interkalálása eredményes volt. Az így létrehozott mintákat a későbbiekben heterogén katalitikus eljárásokban szeretnénk katalizátorként alkalmazni.

MOLNÁR ENIKŐ Vegyész MSc, 7. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Tircsó Gyula
 egyetemi adjunktus, DE TTK

Pikolinátcsoportot tartalmazó makrociklusos ligandumok Mn(II)-komplexei: egyensúly és bomlási kinetika

Kulcsszavak: relaxometria; pH-metria; koordinációs kémia; stabilitási állandó

A dolgozat készítése során három pikolinátcsoportot tartalmazó makrociklusos ligandum (tempa, dompa, nompá) Mn(II)-komplexeinek egyensúlyi és kinetikai vizsgálatát végeztünk el. A mérések során meghatároztuk a ligandumok protonálódási állandóit és a Mn(II)-komplexek stabilitási állandóit. A kapott stabilitási állandó, ill. a pMn értékek azt mutatják, hogy a Mn(II)-ion komplexálására a dompa ligandum a legalkalmasabb. A relaxometriás méréseink ugyanakkor azt mutatták, hogy csak a nompá komplex tartalmaz a belső koordinációs szférájában koordinált vízmolekulát (a komplex relaxációs hatását eredményező paraméter), amit a komplexek röntgenszerkezetei is alátámasztottak.

A bomlási kinetikai vizsgálatok azt mutatták, hogy sem a $[\text{Mn}(\text{dompa})]^+$, sem pedig a $[\text{Mn}(\text{nompá})]^+$ -komplexek bomláskinetikája nem függ a kicserélő fémion koncentrációjától, és a bomlásra jellemző sebességet csak a spontán és a savkatalizált úton történő sebességi együttható értéke szabja meg. A kapott értékek alapján számított felezési idők meglehetősen kis értéknek adódtak (mintegy két nagyságrenddel kisebb felezési időket kaptunk, mint a korábban vizsgált Mn(II)-komplexek esetében tapasztalták), ezért ezen komplexek in vivo alkalmazására nem javasolhatók.

TIMÁR ZITA Vegyész MSc, 1. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Pálinkó István
egyetemi docens, SZTE TTIK
Csendes Zita
tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK
Varga Gábor
PhD hallgató, SZTE TTIK

Redoxi-aktív katalizátorok szintézise, szerkezetvizsgálata és felhasználása

Kulcsszavak: SOD enzim; immobilizált komplexek; infravörös spektroszkópia; EXAFS; ciklohexén oxidációja

Az enzimek a természet leghatékonyabb katalizátorai, szelektivitásuk és aktivitásuk kiemelkedő, viszont hátrányuk az, hogy csak a szervezetben fennálló körülmények között működőképesek, így ipari és laboratóriumi alkalmazásuk korlátozott. További problémát jelent az is, hogy az enzimek homogén katalizátorok, ezért a reakcióelegyből való visszanyerésük nehézkes.

Célom olyan katalizátorok előállítása volt, melyek tulajdonságai az enzimekéhez hasonló, viszont változatosabb reakciókörülmények között is működőképesek. Ennek elérése érdekében a Cu,Zn-tartalmú szuperoxid dizmutáz (SOD) enzim aktív centrumának funkcionális modelljeit immobilizáltam kovalens kötással, klórpropil-vezet szilikagélen és Merrifield gyantán, illetve interkaláltam kalcium-alumínium réteges kettős hidroxid (Ca₂Al-LDH) rétegei közé.

A felületi komplexek előállítása során ligandumként C-védett hisztidint, tirozint, ciszteint, cisztint használtam. LDH-k esetében ugyanezeket az aminosavakat használtam fel anélkül, hogy a megfelelő funkciós csoportokat védtem volna. Az aminosavak felületre kötése N-alkilezéshez hasonló folyamattal történt. Az aminosav felületre való rögzítése után a Cu(II)-só 2-propanolos oldatának hozzáadásával létrehoztam a rögzített fémion–aminosav komplexet. Ezt nevezzük ligandumban szegény felületi komplexnek. Utolsó lépésben a reakcióelegyhez újabb C-védett aminosav hozzáadásával ligandumban gazdag környezetet biztosítva lehetőséget adtam a felületi komplex átrendeződésére.

Az interkalált LDH-k szintetizálásának első lépéseként az együttes lecsapás módszerével állítottam elő Ca₂Al-LDH-t, majd az LDH rétegei közé direkt anion-cserével bejuttattam az aminosav komplexeket vagy egy lépésben, vagy először a megfelelő aminosavat, majd a fémiont vittem be a rétegek közé.

Az előállított komplexek lehetséges szerkezetét röntgenabszorpciós, távoli és közép infravörös spektroszkópiával, illetve röntgendiffrakció módszerével határoztam meg. A katalizátorokat felhasználtam a ciklohexén oxidációjában, melynek során a reakciót gázkromatográffal követtem.

A hordozón rögzített, illetve az LDH-ban interkalált SOD enzimutánzó Cu(II)–aminosav komplexek előállítása minden esetben sikeres volt. A legtöbb immobilizált komplex katalizálta a ciklohexén oxidációját, nagy epoxidszelektivitást mutatva.

KISS MELITTA PATRÍCIA Vegyész MSc. MSc, 3. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Horváth Ottó

egyetemi tanár, PE MK

Dr. Valicsek Zsolt

egyetemi adjunktus, PE MK

Vízoldható szamárium(III)-porfirinek képződésének reakciókinetikai vizsgálata

Kulcsszavak: síkon-kívüli fém-porfirin; lantanoida fémionok; oligomerizáció; komplexképződési kinetika; spektrofotometria

A porfirint az „élet színanyagának” is nevezik, mivel az egyik legerősebb fényelnyeléssel rendelkező vegyület. Négy pirrolgyűrű alkotja, melyeket metilidin-hidak kötnek össze, így kialakul egy síkban konjugált kötésrendszert tartalmazó váz. Ennek üregébe fémion koordinálódhat. Ha a fémion sugara 70-90 pm határérték felett van, nem fér bele a porfirin koordinációs üregébe, hanem annak síkja felett helyezkedik el, síkon kívüli (out-of-plane=OOP vagy sitting atop=SAT) komplexek keletkeznek. Így erősebben kötődik az egyik átló mentén elhelyezkedő két nitrogénatomhoz, míg a másik átló mentiek a felület ellentétes oldalán támadhatóbbá válnak az sp^3 hibridizációs jellegük felerősödése miatt, így bonyolultabb szendvicsszerkezetek kialakulására van lehetőség. Az általam vizsgált szamárium(III)ion ionsugara 8-as koordinációs számnál 107,9 pm, ezáltal alkalmas a SAT porfirin komplexek tulajdonságainak vizsgálatára. A komplexek képződése spektrofotometriásan követhető. Nagyméretű fémion esetében, amilyen a szamárium(III) is, az atompályák magasabb energiájúak, a porfirin LUMO pályájának energiáját csökkentik, vöröseltolódás tapasztalható. A fémion porfirinbe épülése lassú a stabil akvakomplexnek a disszociációja miatt, vagyis a porfirin-komplex képződése fémion-kontrollált.

Munkám során többféle ionerősség-szabályzó iont használtam, melyek különböző koordinációs képességgel rendelkeznek. Az acetátió axiálisan, a fémionhoz erősen kötődve gátolta egy további porfirin megkötődését, így kizárólag monoporfirin-komplex keletkezett. Klorid-koncentrációtól függően biszporfirin is kialakult, de csak kisebb koncentráció-értékeknél. Az egyáltalán nem koordinálódó perklorátió mellett döntően biszporfirin-komplex képződött. Az egyensúly teljes leírására a ZITA nevű kinetikai program használatával tudtam sebességi állandókat számolni.

A szamárium(III)ionok oligomerek formájában vannak jelen az oldatban, és a porfirin-komplex képződéséhez ezen oligomerek elődisszociációjára is szükség van. Sebességi és konszekutív stabilitási állandókat számoltam szamárium(III)-tetramereket feltételezve az oligomerizációs folyamatban.

Vizsgáltam az ionerősség, ionos és nem-ionos, axiálisan koordinálódó ligandumok és a hőmérséklet hatását is a reakcióra. Alacsonyabb hőmérsékleten azt tapasztaltam, hogy a szamárium(III)ion nem a porfirin üregéhez koordinálódott, hanem az oldalláncon levő szulfonáto-csoporthoz Pearson-féle keménységének köszönhetően.

Környezeti kémia

LOVÁK VIVIEN kémia BSc, 9. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:
 Salma Imre
 egyetemi tanár, ELTE TTK

A korom aeroszol és jelentősége Budapesten

Kulcsszavak: PM_{2,5}-ös frakció, elemi szén, szerves szén, RT-OC/EC, TEOM

A tudományos diákköri munkám fő célja a korom részecskék koncentrációjának és tulajdonságainak meghatározása a budapesti PM_{2,5}-mérettartományú aeroszolban. Folyamatos méréseket végeztem az ELTE Kémia Intézetében a Budapest Kutató és Oktató Platformon (BpART) 2014. február 25. és március 11. között két hétig. A szerves szén (OC) és elemi szén (EC) mennyiségét mértem valós idejű RT-OC/EC analizátorral termikus-optikai transzmissziós módszert felhasználva. Az EUSAAR2 hőmérsékleti protokollt alkalmaztam az OC és az EC szétválasztására. Megállapítottam, hogy a PM_{2,5}-méretfrakció tömegkoncentrációja 8,4–55 µg/m³ között változott 26 µg/m³ medián értékkel. Az adatokat összehasonlítottam 2002. április-május között, Budapest belvárosának egyik utcakanyonjában kapott adattal (8,4–55 µg/m³) [1], ami nagymértékű egyezést eredményezett. Az OC és az EC koncentrációjának mediánja rendre 4,1 µg/m³ és 2,1 µg/m³ volt. Az adatok kisebbek voltak 1,6 tényezővel az említett tavaszi időszakhoz képest, ami összefügg az enyhe téli időszakokkal és a mérési helyszínek (belvárosi, nyílt térség, illetve utcakanyon) jellege közötti különbséggel. A következőekben a koncentráció arányokat vizsgáltam meg. Elsőként az OC és az EC hányadosát, aminek átlagosa és szórása (54±12)% volt. Ez az arány a másodlagos szerves aeroszol járulékra enged következtetni. Az elemi szén járuléka a PM_{2,5}-tömegkoncentrációjához (8,9±2,5)% volt. Szintén a 2002-es tavaszi adatokhoz nyúltam vissza, ahol az EC tömegjáruléka a PM_{2,5}-tömeghez (14±6)% volt [2]. A mi eredményeink kisebbeknek bizonyultak, bár így is viszonylag nagyok más, európai városokhoz képest. A szerves anyag tartalmát az OC koncentrációból számoltam, melyhez a városi, oxidatívabb levegőkörnyezetre jellemző, 1,6-os konverziós faktort használtam. A 2002-ben mért OM/PM arány a PM_{2,5}-tartományban (43±9)% [2]. Ez az érték szerves anyag járulékát adja meg. Az általam mért érték lényegesen kisebbnek bizonyult (26±5)%. A különbséghez a légköri folyamatok mellett az eltérő helyszín és alkalmazott hőmérsékleti protokoll is hozzájárul. További terveim között a kapott analitikai és származtatott eredmények részletesebb kiértékelése és értelmezése szerepel.

- [1] Salma, I., Maenhaut, W., Weidinger, T., Pinto, J.: J. Aerosol. Sci. 35S1 153–154, 2004a.
 [2] Salma, I., Chi, X., Maenhaut, W.: Atmos. Environ., 38 27–36, 2004b.

ALEXANDREA Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Szarka Györgyi

tud. mts., MTA TTK AKI Polimer Kémiai Csoport

Iván Béla

tudományos osztályvezető, egyetemi magántanár, MTA TTK AKI Polimer Kémiai Csoport

A kurkumin, mint természetes alapú antioxidáns hatása a PVC degradációjára

Kulcsszavak: polimer; élelmiszer-csomagolás; adalékanyag; stabilizálás; környezetbarát

A poli(vinil-klorid) a világon a harmadik legnagyobb mennyiségben gyártott polimer, annak dacára, hogy gyenge termikus és termooxidatív stabilitással rendelkezik. Így feldolgozásánál kiemelkedő szerep jut az adalékanyagoknak. Céлом egy természetes, környezetbarát antioxidáns, a kurkumin PVC degradációra gyakorolt hatásának vizsgálata volt annak érdekében, hogy az iparban használatos szintetikus adalékok helyett a környezetre ártalmatlan alternatívát találjak. Oldat fázisú kísérleteket hajtottam végre annak céljából, hogy az egyéni reakciókat vizsgálhassam, és az esetleges keresztműködési folyamatokat megelőzzem.

Kísérleti eredményeim összegzéseként elmondható, hogy a PVC oldott állapotú, antioxidánsokat tartalmazó minták 1,2,4-triklórbenzolban, vagyis inert oldószerben történő termooxidatív degradációja során a kurkumin mind a hidrogén-klorid elimináció, mind a molekulatömeg-változás szempontjából ugyanolyan hatékonynak bizonyult, mint az iparban használatos szintetikus antioxidánsok, és jelentős mértékben csökkentette a degradáció során kilépő HCl mennyiségét.

A dioktil-ftalátban (DOP) végzett kísérletsorozatban a kurkumin termooxidatív körülmények között szintén ugyanúgy viselkedik, mint a szintetikus antioxidánsok, vagyis rövid ideig stabilitást fejt ki a vizsgált polimerre, azonban az indukciós periódust követően hatékonysága jelentős mértékben csökken.

Az irodalomban a kurkumin szabadgyök-fogó csoportjainak számáról és minőségéről megoszlik a vélemény. Kísérleteim egyértelműen bizonyítják, hogy a kurkumin három antioxidáns csoport tartalmaz.

Eredményeim egyértelműen arra utalnak, hogy hatékonyság tekintetében a kurkumin összemérhető az iparban alkalmazott, szintetikus antioxidánsokkal, és mint környezetbarát adalék alkalmazható a PVC esetében.

HAMPEL BOGLÁRKA Kémia BSc, 4. félév Babeş Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Kovács Gábor
tudományos segédmunkatárs, BBTE
Dr. Bolla Csaba
egyetemi adjunktus, BBTE

Arany-platina-TiO₂ kompozit fotokatalizátorok aktivitásának és hidrogénfejlesztő képességének vizsgálata

Kulcsszavak: hidrogén; UV fény; fotokatalizátor

A hidrogén tág felhasználási spektrumának köszönhetően (élelmiszeripar, tüzelőanyagok, üzemanyagok előállítása) az egyik legismertebb kémiai elem.

UV fény hatására hidrogén fejleszthető fotokatalizátorokkal vízből szerves segédkomponens jelenlétében (oxálsav).

Kutatásaink során Au-Pt-TiO₂ kompozit fotokatalizátorokat állítottunk elő. Figyelembe vettük az Au és Pt leválasztási sorrendjét, miközben impregnálás és in situ módszereket alkalmaztunk. Ezeknek az anyagoknak vizsgáltuk a hidrogénfejlesztő képességét a fennebb elmített módszerrel, ugyanakkor tanulmányoztuk a fotokatalitikus aktivitásukat oxálsavra ugyancsak UV fény jelenlétében.

Végül az előállított kompozitoknak a szerkezeti tulajdonságait tártuk fel SEM, TEM, XRD segítségével.

NÁFRÁDI MÁTÉ Környezettan BSc, 7. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Kozmér Zsuzsanna
PhD hallgató, SZTE TTIK
Dombi András
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Alapi Tünde
egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK

Gyöktranszfer anyagok koncentrációváltoztatásának hatása a fenol VUV-fotolízisére N₂O jelenlétében

Kulcsszavak: fenol; VUV; gyöktranszfer; N₂O; H₂O₂

A vizek bizonyos szerves szennyezői (pl. gyógyszerek, peszticidek és bomlástermékeik) a jelenleg használt víztisztítási technológiákkal nehezen vagy egyáltalán nem lebonthatóak, ezért szükséges új, kiegészítő technológiák kifejlesztése. Ilyen lehetséges módszerek a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások. Ezek közül én a vákuum-ultraibolya fotolízist tanulmányoztam a fenol, mint modellmolekula segítségével. Ennek során egy 172 nm-es hullámhosszon sugárzó Xe excimer lámpával homolitikusan bontottam a vizet ($\text{H}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \bullet\text{H}$ és $\bullet\text{OH}$), és az így keletkezett primer gyökök a fenollal és a hozzáadott gyöktranszfer anyagokkal történő reakcióit vizsgáltam.

A kísérleteim során 10-4 mol dm⁻³ koncentrációjú fenololdatot sugároztam be VUV-fotonokkal oldott dinitrogén-oxid jelenlétében. A dinitrogén-oxid hatására a $\bullet\text{H}$ és eaq- átalakul $\bullet\text{OH}$ -ké. A $\bullet\text{OH}$ csapdázására 0,5000; 0,0500; 0,0010 és 0,0001 mol dm⁻³ koncentrációjú terc-butanolt, hangyasavat vagy nátrium-formiátot használtam felváltva. A keletkező gyökök mennyiségére és minőségére a fenol bomlási sebességének folyadékkromatográfiás elválasztással való nyomon követése, illetve a keletkező H₂O₂ – CuII-dimetilfenantrolin redukcióján alapuló módszerrel – spektrofotometriás mérése alapján következtettem. A fenol bomlásának sebessége és a keletkező H₂O₂ koncentrációja arányos a keletkező gyökök mennyiségével.

N₂O jelenlétében a fenol bomlásáért elsősorban a $\bullet\text{OH}$ -ök felelősek, mivel a N₂O elreagál a keletkező $\bullet\text{H}$ -al és az esetlegesen keletkező dehidratált elektronokkal, meggátolva a rekombinációjukat, és további $\bullet\text{OH}$ -t képez, így növelve a bontás hatékonyságát. A hozzáadott további gyöktranszfer anyagok gátolják a bontás hatékonyságát, segítségükkel vizsgálhatjuk a különböző típusú szennyezők (pl. alkoholok, szerves savak, lúgok) lehetséges hatásait egy víztisztítási eljárásban.

A t-BuOH a fenol bomlását elsősorban a $\bullet\text{OH}$ -ök mennyiségének csökkentésével gátolta, kevésbé reaktív gyököket képezve velük. A hangyasav és a Na-formiát hasonlóképp csökkentik a $\bullet\text{OH}$ -ök koncentrációját, azonban jóval hatékonyabban gátolják a fenol bomlását és a H₂O₂ képződését, mint a terc-butanol, illetve jelentősen befolyásolják a rendszer pH-ját. A Na-formiát a keletkező NaOH miatt igen magas pH-t okoz, és gyakorlatilag elhasználja valamennyi keletkező $\bullet\text{OH}$ -t, ezért nagy feleslegben a rendszerhez adva teljesen képes leblokkolni a fenol bomlását, illetve a H₂O₂ képződését.

MOLNÁR ÁKOS MÁTÉ Kémia BSc, 7. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:
Prof. Dr. M. Nagy Noémi
egyetemi tanár, DE TTK
Prof. Dr. Kónya József
egyetemi tanár, DE TTK

Ionok migrációja vas(III)-ionokkal módosított bentonitban

Kulcsszavak: agyagásvány; radioaktív; izotóp; aktivitás

Kloridion (^{36}Cl), jodidion (^{131}I) és céziumion (^{137}Cs) migrációját vizsgáltuk, radioaktív nyomjelzés segítségével. A migrációs kísérletekhez vas(III)-ionnal módosított bentonitot használtunk. A bentonitnak fontos szerepe van a természetes földtani és a mesterséges mérnöki gátaknál, mint záró réteg a hulladék és a környezet között. A migrációs együtthatók értékeiből következtettünk arra, hogy milyen változások játszódnak le a pórusrendszerben, ha a bentonit eredeti kationjait vas(III)-ionokra cseréljük ki. A vas(III)-ionok semlegesítik a rétegtöltést, a céziumionok nem juthatnak be a rétegeközi térbe, a szorpció nem csökkenti lényegesen mozgásuk sebességét. A vas(III)-ionokkal történő módosítás következtében valamennyi vizsgált ion, töltéstől függetlenül, a szabad pórusvízben, valamint az elektromos kettősrétegben lévő vízben mozog.

FODOR SZILVIA Kémia BSc, 6. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Kovács Gábor
tudományos segédmunkatárs, BBTE
Dr. Bolla Csaba
egyetemi adjunktus, BBTE

Kereskedelmi TiO₂-ok módosítása Pt nanokockákkal/nanögömbökkel: a Pt nanorészecske alakjának hatása szennyezők fotokatalitikus bontására, illetve a H₂ fejlesztésére

Kulcsszavak: platina nanorészecskék, fotokatalízis, hidrogén fejlesztés, szerves szennyezők

Napjainkban fokozott figyelmet fordítanak a környezetszennyezés folyamatának a megfordítására, melyben jelentős szerepet tölthet be a fotokatalízis, mint ígéretes megoldás. Kutatásaink során különböző alakú Pt nanorészecskékkel módosított TiO₂-t állítottunk elő, melyeket szerves szennyezők bontására, valamint H₂ fejlesztésre alkalmaztunk. Ezen anyagok, szerkezetét/morfológiáját különböző módszerekkel sikeresen felderítettük (XRD, HRTEM, DRS).

TÓTH ZSEJKE-RÉKA Kémia BSc, 6. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Kovács Gábor
tudományos kutató, BBTE
Dr. Bolla Csaba
egyetemi adjunktus, BBTE

Különböző alakú arany nanorészecskék hatása kereskedelmi fotokatalizátorok aktivitására

Kulcsszavak: Arany nanorészecskék; fotokatalízis; modell szennyezők; hidrogén fejlesztés

A növényvédő szerek és gyógyszerek iparágának kiemelkedő problémát jelent a fenol és származékainak lebontása. Más lehetőségek mellett kifejlesztették a fotokatalízis módszerét, mely nagyban befolyásolja mind anyagi, mind pedig környezetvédelmi szempontból ezek lebontását. Kutatásaim során a már szakirodalomban is ismert kereskedelmi P25, TiO₂-ra helyeztem különböző alakú arany nanorészecskéket. Mindezeket vizsgáltuk szerkezetileg és morfológiaileg (XRD, TEM, DRS), majd pedig fotokatalizátorként használtam fel fenol és oxálsav bontására. Ezen katalizátoroknak H₂ fejlesztő képességüket is megvizsgáltam.

KONKOLY BENJÁMIN Környezettan BSc, 8. félév Eszterházy Károly Főiskola Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Forgó Péter
 Főiskolai tanár, EKF TTK

Különböző szerkezetű növényvédő szerek Fenton-reakció által végbemenő oxidációjának során keletkező bomlástermékek azonosítása

Kulcsszavak: peszticid; Fenton-reakció; oxidáció; bomlástermék; GC-MS

Napjainkban az ipari méretű mezőgazdálkodás megvalósíthatatlan lenne növényvédő szerek használata nélkül. Vegyszeres kezelés hiányában a kultúrnövények 20-40 %-a károsodna. A peszticidek gazdasági előnyeik mellett számos negatív környezeti- és élettani hatással is bírnak. Nagy problémát jelent, hogy a növényvédő szereket fejlesztő cégek csak az alapvegyületek környezeti- és élettani hatások vizsgálatait végzik el. A környezeti hatások következtében végbemenő átalakulási folyamatok során keletkező bomlástermékeket már nem vizsgálják, pedig ezek is jelentős hatásokkal bírnak. Ezek ismeretében elmondható, hogy a növényvédő szerek degradációjára irányuló vizsgálatok elengedhetetlenek.

Vizsgálatainkba négy különböző kémiai szerkezetű növényvédő szert vontunk be (acetoklór, EPTC, molinát, klórpírifosz). Kutatásaink során célunk volt annak megállapítása, hogy ezek a peszticidek ellenállnak-e az őket ért oxidációs hatásoknak, valamint eltérő oxidációs körülmények hatására az alapvegyületek milyen mértékben bomlanak le. Az oxidációs folyamatok tanulmányozása, modellezése nehézségekbe ütközik a megfelelő környezeti viszonyokhoz hasonló kísérleti rendszerek hiányában. A környezetben lejátszódó oxidációs folyamatok modellezésére a Fenton-reakció alkalmazható, továbbá ez a viszonylag enyhe oxidációs eljárás módot ad az átalakulás részlépéseinek értelmezésére is.

A kísérletek során 100 ppm-es peszticid törzsoldatokat készítettünk 1:1 arányban desztillált vízből és acetonitrilből, amihez 278 mg vas(II)-szulfát heptahidrátot, 1 ml 25 %-os kénsavoldatot a pH érték beállítására (pH=3,5) és eltérő mennyiségben 30 %-os hidrogén-peroxidot adtunk. A reakció leállítására 0,5 ml 1 mólos nátrium-hidroxid oldatot használtunk.

A Fenton-reakcióban képződött oxidációs bomlástermékeket azonosítottuk, egymáshoz és a kiindulási peszticidhez mutatott arányaikat meghatároztuk. A képződött bomlástermékek azonosítását GC/MS technikával végeztük. Az azonosított bomlástermékek alapján feltételezett bomlási mechanizmusra tettünk javaslatot.

FARSANG EVELIN Vegyész MSc, 4. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Záray Gyula
Egyetemi tanár, ELTE TTK
Dobosy Péter
PhD hallgató, ELTE TTK

Oxidációs eljárás kidolgozása talajvizek szerves mikroszennyezőinek eltávolítására

Kulcsszavak: triklór-etilén; talajvíz; ferrát; GC-MS

A ferrát a vasat hatos oxidációs állapotban tartalmazó vegyület, amely rendkívül nagy elektronszívó kapacitással rendelkezik. Oldatfázisban lévő szerves molekulák esetében megtámadja az elektronokban gazdag szubsztitúciós csoportokat és ezáltal inaktíválja a biológiailag aktív molekulákat. Vízelkezelésben való felhasználását tekintve egyaránt alkalmazható biológiailag tisztított szennyvizek kezelésére, ezen belül gyógyszer- és kozmetikai szerek maradványainak eltávolítására, valamint szerves oldószerekkel szennyezett talajvizek tisztítására. Egyéb oxidálószerekkel szemben különleges jelentőséggel bír a használata során keletkező vas(III)-hidroxid vagy vas-oxi-hidroxid csapadék, amely nagy fajlagos felülete révén lehetővé teszi egyéb szennyezőanyagok adszorpcióját, így módon a folyadékfázisból való eltávolítását.

Kísérleti munkám során triklór-etilénnel (TCE) adalékolt desztillált vízzel végeztem kísérleteket headspace technikát alkalmazó gázkromatográf-tömegspektrométer (HS/GC-MS) rendszerrel. Tanulmányoztam a pH és az oxidálószer koncentráció változtatásának hatását a TCE eltávolítására. Vizsgálataim során szilárd fázisú mikroextrakciós (SPME) mintaelőkészítést követően GC-MS technikával mértem a folyadékfázisban maradt TCE koncentrációját. Igazoltam, hogy a HS és SPME módszerrel nyert eredmények gyakorlatilag azonosnak tekinthetők, és 100 ppb TCE koncentrációjú oldat esetén 92%-os eltávolítási hatásfokot lehet elérni 50 ppm ferrát adagolásával. Bomlástermékként mind a gáz-, mind a folyadékfázisban csak kloroform volt detektálható.

Környezeti talajvíz minta vizsgálatával megállapítottam, hogy az abban kimutatható TCE, vinil-klorid, 1,1-diklór-etilén (DCE), 1,2-cisz-DCE, 1,2-transz-DCE és benzol szennyezők esetében 7-es pH-nál rendre 42, 87, 54, 75, 72 és 17 %-os eltávolítás érhető el 50 ppm ferrát koncentráció alkalmazásával.

VARGA REGINA Biomérnök BSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Kárpáti Árpád
egyetemi docens, PE MK*

Tejipari szennyvizek biológiai tisztíthatóságának vizsgálata

Kulcsszavak: biofilm; eleveniszap; KOI

A vízszennyezés-vízfelhasználás tekintetében a tejfeldolgozás az egyik legszennyezőbb élelmiszeripari terület. Egy liter tej előállítása során mintegy 6-10 liter szennyvíz keletkezik. A tejipari szennyvizek magas oldott és lebegőanyag tartalommal rendelkezhetnek, nagy koncentrációban tartalmaznak zsírokat, fehérjéket és szén-hidrátokat. Ezekből az összetevőkből eredően a tejfeldolgozás szennyvizei magas szerves anyag tartalmúak, amely igen nagy KOI-t eredményez.

A vizsgált szennyvíz egy hazai tejfeldolgozó üzemből származó szennyvíz volt. A keletkező kevert szennyvizet az üzem területén fizikai-kémiai módszerrel előkezelik a közsatornába történő bebocsátást megelőzően, egyedi határértékeknek megfelelően. Az előkezelt szennyvíz KOI-ja ennek megfelelően 500-2500 mg/l közötti koncentrációkat mutatott. Az össz-szerves anyag tartalom a szennyvíz lebegőanyag tartalmával arányosan változott, az oldott KOI ugyanakkor viszonylag állandó volt. Ammónium-nitrogén koncentrációja 3-10 mg/l között volt, foszfortartalma a vegyszeres előkezelés hatására csaknem teljes mennyiségében eltávolításra került.

Vizsgálataimat egy eleveniszapos és egy biofilmes SBR reaktorban végeztem. Az eleveniszapos kísérleti reaktort kommunális szennyvíztisztítóból származó eleveniszappal oltottam be, illetve a tölteteken kommunális szennyvízzel alakítottam ki a biofilm réteget. A tisztítás során a különféle mikroorganizmus csoportoknak kedvezve oxikus és anoxikus körülményeket egyaránt alkalmaztam, hozzávetőlegesen 75-25 %-os arányban. Az anoxikus ciklus javítja az iszap ülepedését, illetőleg magasabb nitrogén tartalmú szennyvíz esetén (nem megfelelő előkezelésnél) a denitrifikáción keresztül elősegíti a teljes nitrogén eltávolítást. A levegőztetés során az oldott oxigén koncentrációját mindkét rendszernél 2 mg/l-ben limitáltam. Az eleveniszapos reaktort 3-5 g/l-es eleveniszap koncentrációval működtettem, ezzel szemben a töltetes reaktorban törekedtem az 1 g/l alatti iszapkoncentráció biztosításra.

Az eleveniszapos rendszerrel a terhelést folyamatosan növeltem, így idővel az iszapterhelés 1500-2000 mg KOI/ g iszap körülire emelkedett. A magas tisztítási hatékonyságot mutatja, hogy a terheléstől függetlenül, az elfolyó tisztított vízben jórészt 50 mg/l alatti (homogén) KOI-t mértem. A biofilmes rendszer terhelését is folyamatosan növelve ugyan valamelyest változó, de hatékony szerves anyag eltávolítást tapasztaltam.

HEGEDŰS PÉTER Környezetmérnöki MSc, 2. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Horváth Krisztián
egyetemi adjunktus, PE MK
Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet
egyetemi docens, PE MK

Triton X-100 fotokatalitikus degradációja

Kulcsszavak: : nemionos felületaktív anyag; nagyhatékonyságú oxidációs eljárások; UHPLC

A technológiai fejlődés következtében a tenzidek, vagy más néven felületaktív anyagok felhasználása egyre növekszik, mind ipari szinten, mind otthon a háztartásokban. Az ipar számos területén alkalmazott Triton X-100 oktilfenol-polietoxilát típusú nemionos felületaktív anyag, hagyományos szennyvíztisztítókból való kezelése nem kivitelezhető, mivel a vegyület anaerob és anoxikus körülmények között alig, de aerob körülmények között is csak részlegesen bontható mikrobiológiai úton. A tenzid lebontásához új módszerek alkalmazása szükséges.

A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közé tartozó heterogén fotokatalízis alkalmazásakor UV fénnel történő besugárzás hatására a félvezető katalizátor felületén képződő nagy reaktivitású gyökök gyorsan és hatékonyan reakcióba lépnek a felületen adszorbeált szennyező anyagokkal. Az eljárással a szerves vegyületek széles köre lebontható ártalmatlan vagy kevésbé környezetterhelő vegyületté. A módszer hátránya, hogy hatásfoka alacsony. A hatékonyság különböző reagensek, pl. hidrogén-peroxid, ózon, vagy kálium-peroxo-diszulfát adagolásával növelhető.

Kutatómunkám célja, hogy a biológiailag nehezen bontható anyag mineralizációjára megfelelő eljárást dolgozzunk ki.

Munkám során a modellvegyület heterogén fotokatalitikus bonthatóságát vizsgáltam különböző körülmények között.

Meghatároztam a nemionos tenzid bontásának optimális körülményeit, javaslatot tettünk a degradáció első lépéseire.

A degradációs folyamatokat a reakcióelegy szerves széntartalmának mérésével, és a spektrális változások rögzítésével követtem nyomon. A szubsztrát aktuális koncentrációját ultranagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás (UHPLC) módszerrel határoztam meg.

GERNER ZSÓFIA Kémia BSc, 7. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Peles-Lemli Beáta
 egyetemi adjunktus, PTE TTK

Zearalenon fluoreszcenciájának változása a mikrokörnyezet függvényében

Kulcsszavak: HSA; szerves oldószer; β -ciklodextrin származék

A toxinok élő szervezet által termelt, egyszerű bioszintetikus reakciók útján képződő kisméretű molekulák, melyek mérgező tulajdonsággal bírnak. A toxinok egyik alcsoportját a mikotoxinok képezik, ezek penészgombák szekunder anyagcseretermékei, termelődésüket a gombákat érő környezeti hatások által előidézett élettani stresszhelyzet indítja be. A mikotoxinok megjelenési formái változatosak lehetnek. Habár több száz mikotoxint tartanak számon, közülük csupán 15-20 bír gyakorlati jelentőséggel. A különböző penészgombafajok megjelenését, terjedését főként az éghajlat befolyásolja. Hazánkban más mérsékelt övben elhelyezkedő országokhoz hasonlóan a *Fusarium* gombafajok elterjedése dominál, melyek elsősorban kukoricán fordulnak elő, paradús légköri körülmények között. A legújabb adatok szerint azonban a különböző penészgombafajok által termelt toxinok világszerte kimutathatóak az élelmiszerekben, a terjedés lehetséges okát többek között a globális élelmiszer- és gabonakereskedelem adja.

Jelen munka keretein belül a zearalenon – más néven F-2 toxin – tulajdonságait vizsgáltuk. A zearalenon xenoösztrogén sajátosságú mikotoxin. Már korábban felismerték, hogy haszonállatokban szaporodásbiológiai problémákat idéz elő. A zearalenon feltételezhetően egyéb patológiás hatásokkal is rendelkezik: májkárosító, haematotoxikus, immunotoxikus és genotoxikus hatásairól is beszámol a szakirodalom. A zearalenon hazánkban – a mérsékelt éghajlatú országokhoz hasonlóan – egészségügyi és gazdasági problémát jelent, így szükség van a mindennapokban alkalmazható, nagy érzékenységgű analitikai eljárások kifejlesztésére. A zearalenont munkánk során több eltérő karakterű oldószerben, különböző pH-jú oldatokban és egyéb molekulák jelenlétében vizsgáltuk. Eredményeinket a későbbiekben fluoreszcenciás analitikai módszerek érzékenyítésére szeretnénk felhasználni. Jövőbeni célunk olyan szabványos technikák kidolgozása, melyek alacsony koncentráció tartományban is nagy érzékenységgel rendelkeznek, megbízhatóak és jól reprodukálhatók. Továbbá tanulmányozni kívántuk a zearalenon toxikológiai tulajdonságait potenciálisan befolyásoló kölcsönhatásokat, mivel ezen interakciók pontosabb megértése közelebb vihet minket ahhoz, hogy hatékony prevenció/detoxikációs stratégiákat lehessen kidolgozni. Mivel a fehérjékkel történő interakciók jelentős mértékben befolyásolhatják a zearalenon szervezetbeni viselkedését, jelen munkánkban a zearalenon humán szérum albuminnal történő kölcsönhatását is megvizsgáltuk.

Reakciókinetika és katalízis 1

ÁDÁM ANNA ADÉL Kémia BSc, 6. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Pálinkó István
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Ádok Mónika
tudományos mkts., SZTE TTIK

A 2-ciklohexén-1-on epoxidációja réteges kettős hidroxid katalizátorok alkalmazásával

Kulcsszavak: α,β -telítetlen ketonok epoxidációja; réteges kettős hidroxidok; szerkezet meghatározás; reakciókörülmények optimalizálása

A réteges kettős hidroxidok (LDH-k) réteges szerkezetű, a természetben is előforduló, anyagok. Alapszerkezetüket brucitszerű, oktaéderes rétegek képezik, amely rétegek közötti terét anionok és vízmolekulák töltik ki. Szintézisük gazdaságos, így gyakran állítják elő az iparban. A legáltalánosabban használt előállítási eljárás az együttes lecsapás módszere. Szerkezeti tulajdonságaiknak köszönhetően számos területen használják: pl. orvos- és gyógyszer-tudomány, víztisztítás, katalitikus folyamatokban heterogén katalizátorként.

Dolgozatom célja, olyan LDH-k előállítása, amelyek heterogén katalizátorként alkalmazhatóak epoxidációs folyamatban. A szakirodalomban számos publikáció jelent meg ehhez hasonló kísérletekkel. Az esetek többségében kalcinált formájú LDH-kat alkalmaztak heterogén katalizátorként, kísérleteimben azonban kalcinátlan réteges kettős hidroxidokkal foglalkoztam, mely tudományos újdonságnak tekinthető.

Az LDH-k szintézisét együttes lecsapás módszerével végeztem, majd az előállított mintákat röntgendiffraktometrián és mikroszkópiai módszerekkel vizsgáltam. A diffraktogramok, valamint a SEM és TEM felvételek egyaránt bizonyították, hogy a szintézis sikeres volt, réteges kettős hidroxid minden esetben kialakult.

Összehasonlító kísérletet végeztem az elkészített minták, kalcinátlan LDH és TiO_2 katalitikus képességét vizsgálva. A kísérleti adatokból világosan látszik, hogy katalizátor nélkül szinte nem is játszódik le a reakció, míg a legtöbb katalizátor, így a kalcinált $\text{Ca}_3\text{Fe-LDH}$ jelenlétében kis konverzióval. A legaktívabb katalizátor a kis stabilitású $\text{Ca}_2\text{Fe-LDH}$ volt, de további kísérleteimben a jóval nagyobb stabilitású, bár kevésbé aktív $\text{Ca}_3\text{Fe-LDH}$ -t alkalmaztam.

A választott folyamat a 2-ciklohexén-1-on epoxidációja volt, melyet a reakcióidő-, a hőmérséklet- és az oldószer függvényében vizsgáltam.

Megállapítottam, hogy a reakcióidő növelésével a konverziós érték is növekedett, 24 óra elteltével elérte a 64%-ot. A legkedvezőbb reakcióhőmérséklet a 313 K volt, de kényelmi és gazdaságossági okokból méréseim többségét 298K-en végeztem. Általában metanolt használtam oldószerként, bár a későbbiekben azt találtam, hogy a formamid előnyösebb, valószínűleg delamináló hatása miatt, ekkor a katalitikus centrumok hozzáférhetősége jelentősen megnő.

SZOLNOKI CSENGE TAMARA Kémia BSc, 6. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Kathó Ágnes
tudományos főmunkatárs, DE TTK
Dr. Udvardy Antal
tudományos munkatárs, DE TTK

A foszfaurotropin reakciói acetiléndikarbonsavval és alkilhalogenidekkel

Kulcsszavak: zöld kémia; foszfin; alkilezés; acetiléndikarbonsav; golyós malom

A vizes közegű katalízisben gyakran használt 1,3,5-trizaza-7-foszfaadamantán (pta) N- és P-alkil származékait vízben vagy oldószermentes körülmények között alakítottam ki.

Az acetiléndikarbonsav és két ekvivalens 1,3,5-trizaza-7-foszfaadamantán (pta) vizes oldatát szobahőmérsékleten 24 óráig keverve egy szimmetrikus szerkezetű adduktum képződik. A foszfóniumsó összetételét elemanalízissel és ESI-MS vizsgálatokkal, oldatbeli szerkezetét multinukleáris (^{13}C -, ^{31}P -) NMR-mérésekkel, szilárd fázisú molekulaszervezetét pedig egykristály röntgendiffrakciós módszerrel határoztuk meg. A kristályban nagyszámú vízmolekula helyezkedik el, köztük és az adamantánváz, valamint a karboxilát csoportok között kiterjedt hidrogénkötés-hálózatok alakultak ki.

N-alkilezett pta-származékokat -az irodalmi 50-70% kitermeléshez képest- kitűnő 90 % feletti hozammal állítottam elő oldószermentes közegben a pta és alkil-halogenidek (metil-jodid, benzil-klorid, 1-brómbután, 1,4-dibrómbután) reakcióiban. Ugyancsak szilárd fázisú reakcióban nyertem P-alkilezett termékeket: a 1,3,5-triaza-7-(1,2-karboxiletil)-foszfaadamantán és 1,3,5-triaza-7-(2,3-dikarboxil-propil)-foszfaadamantán képződött a pta és maleinsavanhidrid, illetve itakonsav reakcióiban.

A metil-jodidot 1,3,5-triaza-7-(2-karboxiletil)-foszfaadamantánnal reagáltatva N-metilezett spirofoszforánt állítottam elő. Összetételét elemanalízissel és ESI-MS vizsgálatokkal, oldatbeli szerkezetét multinukleáris (^{13}C -, ^{31}P -) NMR-mérésekkel, szilárd fázisú molekulaszervezetét pedig egykristály röntgendiffrakciós módszerrel határoztuk meg.

NAGY PETRA Kémia BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Skodáné Dr. Földes Rita
 Egyetemi tanár, PE MK

Aminokarbonilezés piridínium-tartalmú ionfolyadékkal módosított heterogén katalizátorokkal

Kulcsszavak: piridínium; heterogén katalízis; ionfolyadék; palládium; aminokarbonilezés

A különböző átmenetifém-komplexek által katalizált karbonilezési és kapcsolási reakciók egyre szélesebb körben jelennek meg a szintetikus szerves kémiában. Jó hozamot és kitűnő szelektivitást biztosítanak, homogén és heterogén fázisban egyaránt lejátszódhatnak.

A homogén katalízis megnehezíti a termék hatékony elkülönítését és a katalizátor újbóli felhasználását. Erre megoldást jelenthet a katalizátor szilárd hordozóhoz rögzítése, ami történhet fizikai adszorpcióval és kovalens kötéssel is.

Tudományos diákköri munkám során az aminokarbonilezési reakciókat piridínium kationt tartalmazó ionfolyadékok által stabilizált palládium tartalmú katalizátorokkal vizsgáltam.

Az ionfolyadékot, 1-butil-4-metil-piridínium-kloridot fizikai adszorpcióval rögzítettem a szilikagél felületén. A reakció során bekövetkező lemosódását IR spektroszkópiával, illetve C,H,N elemzéssel vizsgáltam.

Az előállított katalizátort jódbenzol és morfolin modellreakciójában tanulmányoztam. Meghatároztam az optimális oldószert, szén-monoxid nyomást és reakcióidőt. Megfigyeltem azt is, hogy a katalizátor a kettős karbonilezett termékre mutat szelektivitást. A hozamok megállapítása és a termékek szerkezetének tisztázása GC, illetve GC-MS alapján történt.

A higanymérgezéses vizsgálatok bebizonyították, hogy a palládium a reakció során nanorészecskék és komplexek formájában egyaránt jelen van a rendszerben.

A katalizátor palládium tartalmát, és reakció során történő palládium lemosódását ICP-AES módszerrel állapítottam meg.

GERGELY MÁTÉ Vegyész MSc, 4. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Kollár László
 egyetemi tanár, PTE TTK

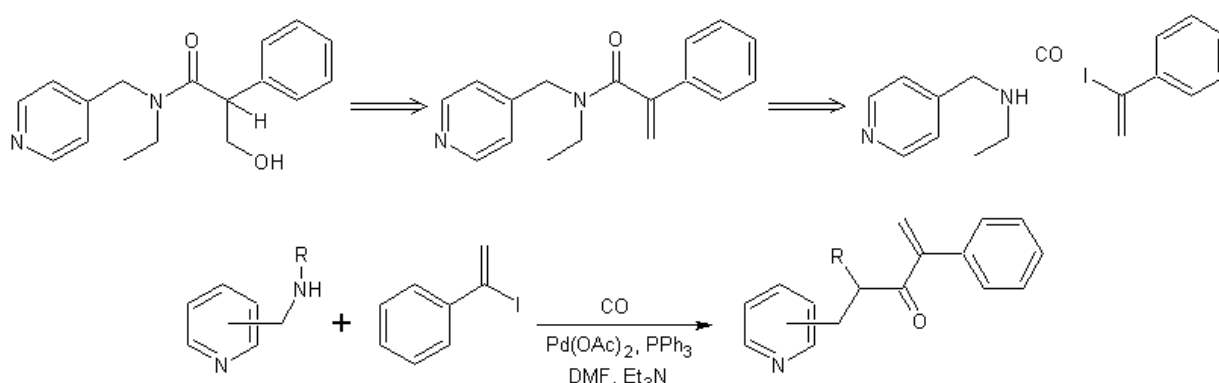
Biológiai fontosságú pikolilamid intermedierek szintézise aminokarbonilezés mint kulcsreakció felhasználásával

Kulcsszavak: pikolil-amin; jódkén; jódaromás; karbonsav-amid; palládium

A szakirodalomban számos névvel jelölt reakcióval is találkozhatunk az amidszintézis témakörén belül [1,2]. Ez annak a ténynek is köszönhető, hogy a karbonsav-amidok az élő szervezet kulcsfontosságú vegyületei, az amid-csoport biológiai jelentősége is közismert.

A zöldkémia korát élve a szelektív homogénkatalitikus reakciók jelentősége nagymértékben megnövekedett az elmúlt évtizedekben, így nem meglepő, hogy a szakirodalomban számos átmenetifém-katalizált reakciót is találhatunk [3,4].

Jónéhány olyan farmakológiai fontosságú származékot ismerünk (Picotamide, Tropicamide), amelyek N-pikolil-karbonsavamid szerkezeti részletet tartalmaznak. Ezen vegyületeknél lehetőség nyílik új, átmenetifém-katalizált reakciókat alkalmazó szintézis-stratégiák kidolgozására.



A fenti ábrán látható Tropicamide retroszintetikus bontása alapján tudományos diákköri munkám során N-pikolil-amid intermedierek szintézisével foglalkoztam homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakcióban.

Biológiai fontosságú N-pikolil-szubsztituált tercier amidok szintézisét valósítottam meg α -jódsztirol pikolil-csoportot tartalmazó aminokkal végzett nagyszelektivitású palládium-katalizált aminokarbonilezési reakciójában.

- [1] K. W. Blesel, B. C. Rudy, B. Z. Senkowski, Profiles of Drug Substances, Excipients and Related Methodology in Tropicamide (Vol. 3), K. Florey (Eds.), Academic Press, New York, 1974, pp. 565-580.
 [2] J. S. Yadav, B. V. Subba Reddy, U. V. Subba Reddy, K. Praneeth, Tetrahedron Lett., 2008, 49, 4742.
 [3] A. J. A. Watson, A. C. Maxwell, J. M. J. Williams, Org. Lett., 2009, 11, 2667.
 [4] E. Müller, G. Péczely, R. Skoda-Földes, E. Takács, G. Kokotos, E. Bellis, L. Kollár, Tetrahedron, 2005, 61, 797.

KOVÁCS HENRIETTA Kémia BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Czégéni Csilla
tudományos segédmunkatárs, DE TTK
Dr. Joó Ferenc
egyetemi tanár, DE TTK

Katalitikus hidrodehalogénezés szilárd hordozón rögzített palládium katalizátorokkal H-Cube reaktorban

Kulcsszavak: hidrodeklórozás; heterogén katalízis; katalizátor immobilizálás; anioncserélő gyanta; folyamatos áramlású reaktor

Számos ipari művelet során keletkeznek halogéntartalmú szerves vegyületek, melyek nem megfelelő kezeléssel, a környezetbe kikerülve károsítják az élővilágot. Környezetkárosító hatásuk miatt ezeket a vegyületeket ártalmatlanítani, esetleg újrahasznosítani kell. Számos kutatócsoport foglalkozik ezeknek a vegyületeknek kevésbé káros formává alakításával. Ez lehetséges redukzív, oxidatív, hidrolitikus és egyéb módszerekkel. Ezek közül az egyik leggyakrabban alkalmazott módszer a redukzív út. A redukálószer általában hidrogéngáz. A reakció legtöbbször valamilyen heterogén katalizátor felületén megy végbe.

Kutatásom során klórbenzol és orto-, meta- ill. para-klóracetofenon hidrodehalogénezését vizsgáltam a ThalesNanoZrt. által gyártott folyamatos áramlású hidrogénező mikroreaktorban, az H-Cube[®]-ban. A reakciókhoz különböző palládium tartalmú heterogén katalizátorokat alkalmaztam: a kereskedelmi forgalomban kapható 10% Pd/C katalizátort és a kutatócsoportban anioncserélő gyantára rögzített 4,3% palládium tartalmú katalizátorokat (Pd@RELISORB QA 405/EB, Pd@DIAION HPA 25, Pd@DIAION PA308/L, Pd@DIAION WA21J, Pd@DOWEX 1x8). Megvizsgáltam a dehalogénezési reakciók hőmérséklet-, nyomás-, áramlási sebesség-, és koncentrációfüggését.

DERZSI NÓRA JUDIT Vegyész MSc, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Czégéni Csilla
tudományos segédmunkatárs, DE TTK
Dr. Joó Ferenc
egyetemi tanár, DE TTK

Nitrilek hidratálása Rh(I)-N-heterociklusos karbén komplexekkel

Kulcsszavak: benzonitril; homogén katalízis; víz addíció; IMes; ¹³C NMR

Tudományos Diákköri munkám során a nitrilek katalitikus hidratálását tanulmányoztam. A reakciókörülmények optimalizálására a benzonitrilt választottam. Előállítottam a katalízishez szükséges Rh(I)-NHC-komplexekeket: [RhCl(COD)(IMes)], [Rh(OH)(COD)(IMes)], [RhCl(COD)(IPr)], [Rh(OH)(COD)(IPr)].

Az előállított NHC komplexek szerkezetét és tisztaságát ¹³C NMR mérésekkel ellenőriztem, katalitikus aktivitását vizsgáltam és összehasonlítottam. A négy komplex katalitikus aktivitását megvizsgáltam 80°C-on 1 mol% katalizátor és 1 mol% bázis jelenlétében, illetve 5 mol% katalizátor jelenlétében reflux hőmérsékleten. A mért adatokból arra a következtetésre jutottam, hogy egy ekvivalens bázis jelenlétében tapasztalható a legnagyobb átalakulás. Egy óra elteltével reflux hőmérsékleten majdnem 100%-os konverziót kaptam mind a négy komplex esetén. Összehasonlítottam olyan para helyzetben szubsztituált aromás nitrilek reaktivitását, melyek elektronszívó, és elektronszállító csoportokat tartalmaznak. Méréseim alapján az aktivitásukban nem volt nagy különbség, legkisebb aktivitást akkor tapasztaltam mikor a ciano csoport nem közvetlenül az aromás gyűrűhöz kapcsolódik.

NAGYHÁZI BRIGITTA Vegyész MSc, 1. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Joó Ferenc
egyetemi tanár, DE TTK
Gombos Réka
egyetemi tanársegéd, DE TTK

Palládium-szulfoszalán komplex katalitikus aktivitásának vizsgálata fahéjaldehid és szójalecitin hidrogénezési reakcióiban

Kulcsszavak: modellvegyület; redukció; katalízis; C=C kötés; liposzóma

Munkám során a Pd-szulfoszalán komplex aktivitását vizsgáltam hidrogénezési reakciókban. A hidrogénező aktivitás vizsgálatához szubsztrátnak a fahéjaldehidet és a szójalecitint választottam. A nyomás-, hőmérsékletértékek, a reakcióidő, továbbá a katalizátor mennyiségének növelésével konverziónövekedést tapasztaltam. A ~ 100 % konverziót a fahéjaldehid esetében már 1 bar nyomáson, 80 °C-on, 2 óra reakcióidő alatt, 1000 : 1 szubsztrát : katalizátor arány mellett sikerült elérni.

Fahéjaldehid vizsgálata esetében minden hőmérséklet-, nyomás- és időfüggés arra utal, hogy a 3-fenil-1-propanal a kedvezményezett termék, ugyanakkor a körülményektől függően a fahéjalkohol és a 3-fenil-1-propanol is megjelenhet a reakcióelegyben. A kapott eredmények alapján levonható az a következtetés, hogy a Pd-szulfoszalán komplex nagyobb mértékben redukálja a C=C kötést, de a reakcióelegyekben a C=O kötés telítésével kialakuló vegyületek (3-fenil-1-propanol, fahéjalkohol) is kimutathatók voltak. Továbbá elmondható, hogy a Pd-szulfoszalán komplex enyhe körülmények között is aktívnek bizonyult. Emiatt lipidek hidrogénezésére is alkalmasnak találtam.

Szójalecitinből készített liposzóma oldat hidrogénezését Pd-szulfoszalán katalizátorral alacsony hőmérsékleten (30, 37 °C), különböző nyomásokon (1; 3; 5; 7 bar), valamint különböző reakcióidő mellett (1-4, 20 óra) hajtottam végre. A metil-észterre alakítást követően gázkromatográfiás módszerrel határoztam meg a kezdeti, valamint a hidrogénezés utáni mintában a zsírsavak egymáshoz viszonyított arányát. Elmondható, hogy a linolénsav (18:3) sok reakcióelegyben teljes mértékben hidrogéneződött, továbbá a kétszeresen telítetlen linolsav mennyisége is csökkent, ugyanakkor a sztearinsav és olajsav mennyisége növekedett. Ezen adatok alapján elmondható, hogy a Pd-szulfoszalán komplex a liposzóma hidrogénezésére alkalmasnak bizonyult, azaz a sejtek számára tolerálható körülmények között ($T < 40\text{ °C}$, $p = 1\text{--}7\text{ bar}$) képes szelektíven hidrogénezni a C=C kötést a modellvegyületben. Hidrogénező aktivitását tekintve a 11-12 % telítettséget, ami még a sejtek számára tolerálható és életképességüket nem csökkenti, 30 °C-on sikerült elérni.

Mivel valamennyi esetben a C=C kötés hidrogénezése játszódott le nagyobb mértékben, ebből adódóan későbbiekben a komplex alkalmas lehet sejtmembránok hidrogénezésére is. További céljaim között szerepel a katalizátor működési mechanizmusának felderítése, amiről ezekből az adatokból még nem lehet pontos leírást adni.

MIKLE GÁBOR Vegyész MSc, 4. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Kollár László
egyetemi tanár, PTE TTK

Szteroid és binaftil szerkezeti egységet tartalmazó karbonsavamidok szintézise aminokarbonilezési reakcióban

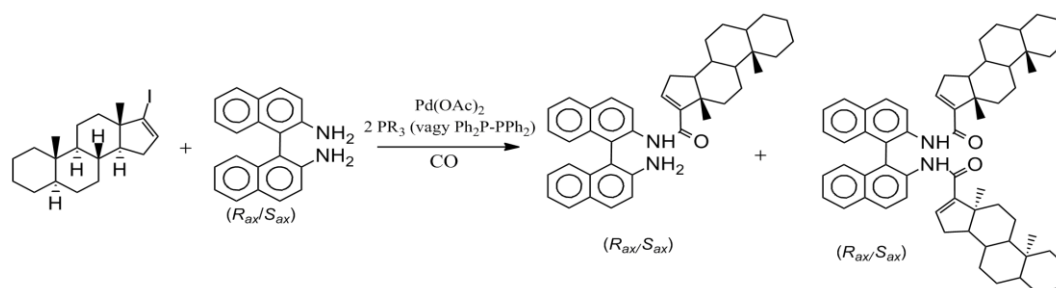
Kulcsszavak: Jódalkén; Homogén katalízis; Diasztereoselektív; Szén-monoxid; Palládium

A szteroidok a szintetikus kémia fontos alapkövei, melyeket nagy mennyiségben használ fel a gyógyszeripar hormonális készítmények hatóanyagainak előállítása során. Számos sztereogén centrumot tartalmaznak, ennél fogva a sztereokémiai jellegű alap kutatásokban is széles körben alkalmazott modellvegyületek.

A különböző alapvázak átalakításában – így az általam felhasznált androsztán-származékok esetében is – a hagyományos reakciók mellett a homogénkatalitikus reakciók is előnyösen alkalmazhatók [1-2].

Az alapvázak új funkciós csoportjainak kiépítése is leegyszerűsödött. Az általam is alkalmazott aminokarbonilezési reakcióval a karbonsavamidok szintézisére új utak nyíltak meg. Karbonsav-kloridok helyett jó távozó csoportot tartalmazó telítetlen vegyületekből egy lépésben előállítható a kívánt karbonsavamid [3]. A homogénkatalitikus reakciók előnyösen alkalmazhatók szteroidok funkcionálisálására is [4].

TDK munkámban egy alap kutatási szempontból jelentős alapkérdéssel foglalkoztam. Azt vizsgáltam, hogy szteroid–binaftil konjugátumok előállítása esetén megfigyelhető-e valamilyen mértékű diasztereoselektivitás a centrális kiralitáselemeket tartalmazó, enantiomer-tiszta szteroid és az axiális kiralitáselemet tartalmazó, racém diamino-binaftil aminokarbonilezési reakciójában.



A fenti szteroid–binaftil konjugátumok szintézisének és nagyműszeres analitikai vizsgálatának kidolgozása szilárd alapot biztosít egyrészt további, lehetséges 5 α -reduktáz inhibitor hatású, karbonsavamid funkciós csoportot tartalmazó szteroidok szintéziséhez, másrészt az aminokarbonilezési reakciók mechanizmusának alaposabb feltárásához.

- [1] Skoda-Földes, R.; Kollár, L. Curr. Org. Chem. 2002, 12, 1097.
- [2] Brennfürher, A.; Neumann, H.; Beller, M. Angew. Chem. Int. Ed. 2009, 48, 4114.
- [3] Kuik, Á.; Skoda-Földes, R.; Balogh, J.; Kollár, L. J. Organomet. Chem. 2005, 690, 3237-3242.
- [4] Skoda-Földes, R.; Kollár, L. Chem. Rev. 2003, 103, 4095-4130.

BUNDA SZILVIA Kémia BSc, 7. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Joó Ferenc
egyetemi tanár, DE TTK
Dr. Udvardy Antal
tudományos munkatárs, DE TTK

Új Pd-szalán katalizátorok alkalmazása vizes közegű Suzuki-kapcsolásban

Kulcsszavak: katalízis;boronsav;Miyaura;halogén;dPhHSS

Munkám során négy vízzeloldható szalán-típusú ligandumot és azok Pd-vegyületeit állítottam elő. Ezek közül két ligandum és Pd-komplexeik az irodalomban még nem ismertek. A vegyületeket NMR spektroszkópiával és ESI-MS spektrometriával jellemeztem, továbbá egy ligandum (dPhHSS) szerkezetét egykristály röntgendiffrakcióval is meghatároztam. Jódbenzol és fenilboronsav reakcióját választottam modellként. Tanulmányoztam a különböző bázisok hatását a reakcióra. Cs₂CO₃ alkalmazása mellett értem el a legmagasabb konverziót, így ezen bázis alkalmazásával végeztem a további reakciókat. Vizsgáltam a bázis mennyiségének hatását is a kapcsolásra. Azt tapasztaltam, hogy $1/1=[\text{szubsztrátum}]/[\text{bázis}]$ arány használata a megfelelő, mivel a Cs₂CO₃ mennyiségének további növelése már nem okoz további konverzió növekedést. Fázistranszfer-katalizátor hozzáadásával a konverzió tovább nőtt. Az így elért óránkénti katalitikus ciklusszám értéke 23520 h⁻¹-nek adódott 50/1=[SDS]/[katalizátor] aránynál. Vízrel elegyedő szerves oldószer alkalmazása csökkentette a konverziót. A reakció akár 40 °C hőmérsékleten is kivitelezhető. A Pd-katalizátor mennyiségének csökkenésével a konverzió is csökkent, azonban a TOF maximum görbe alapján változott. A legnagyobb értékét 25000/1=[szubsztrátum]/[katalizátor] aránynál értem el, mely 28000 h⁻¹-nek adódott. A Suzuki-kapcsolás időfüggésének vizsgálata azt mutatta, 80 °C hőmérsékleten az átalakulás 90 perc alatt közel teljes. A vízzeloldható katalizátor előnyeit kihasználva, több egymást követő reakcióban alkalmaztam ugyanazt a katalizátor oldatot. Habár a katalizátor aktivitása jelentős csökkenést mutatott a ciklusok során, azonban akár négy egymást követő reakcióban is felhasználható maradt. Összehasonlítottam az előállított Pd-szalán típusú katalizátorok aktivitását, melyek közül a legaktívabbnak a [Pd(dPhHSS)] komplex bizonyult. Optimalizált reakciókörülmények között ezzel a katalizátorral 40000 h⁻¹ TOF értéket értem el. Az előállított Pd-katalizátorok felhasználhatósági körének vizsgálatára számos boronsav-származék és aril-halogenid reakcióját is elvégeztem. Az általam kidolgozott, szerves oldószer használatát nélkülöző eljárást sikeresen alkalmaztam Suzuki-kapcsolási reakciók termékeinek kinyerésére. Eredményeim alapján elmondható, hogy az előállított Pd-szulfoszalán komplexek kiemelkedően aktív és sokoldalú katalizátorai a vizes közegű Suzuki kapcsolási reakciónak.

PAPP MÁTÉ Vegyész MSc MSc, 3. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Skodáné Dr. Földes Rita
 egyetemi tanár, PE MK

Újrahasználható palládium-katalizátorok alkalmazása aminokarbonilezési reakcióban

Kulcsszavak: aminokarbonilezés; ionfolyadék; palládium; amid; foszfán

A palládium katalizált kapcsolási és karbonilezési reakciókat manapság egyre szélesebb körben alkalmazzák szerves szintézisekben. Az aminokarbonilezési reakció során egy aril-halogenidet reagáltatunk egy aminnal szén-monoxid atmoszféra alatt, palládium katalizátor jelenlétében. A reakció során amid, illetve ketoamid típusú vegyületek keletkeznek. Gyakorlati szempontból mindkettő nagy jelentőséggel bír: az amid funkciós csoport számos biológiai aktivitással rendelkező vegyületben megtalálható, egyes ketoamidok pedig gyógyászati szempontból lehetnek fontosak.

A legtöbb esetben ezeket a reakciókat homogénkatalitikus körülmények között viszik véghez, azonban a termékek elválasztása és a katalizátor recirkulációja könnyebben megvalósítható, ha az ionfolyadékot szilárd hordozóhoz rögzítjük, és erre visszük fel a katalizátort. Az utóbbi pár évben egyre több olyan közlemény jelent meg, amelyben hordozóhoz kötött katalizátorokat alkalmaztak az aminokarbonilezési reakciók kivitelezésére.

A korábbiakban olyan hordozóhoz kötött ionfolyadék katalizátorokat vizsgáltunk, amelyekkel szelektíven lehet kettős karbonilezett termékeket előállítani. Ezt a kutatást folytatva megállapítottam, hogy a reakciókörülmények megfelelő megválasztásával a szelektivitás a monokarbonilezés, vagyis az amid termék keletkezésének irányába eltolható.

Az ionfolyadék megkötődését szilárd fázisú NMR vizsgálattal igazoltam. A katalizátorokat jódbenzol és morfolin karbonilezési reakciójában, CO-nyomás alatt, bázis jelenlétében teszteltem, oldószer hozzáadása nélkül. Vizsgáltam a katalizátor szerkezetének a reakció szelektivitására gyakorolt hatását, és a reakció hőmérséklet- és nyomásfüggését. Meghatároztam a palládium kioldódását a reakciók során. Megállapítottam, hogy optimális körülmények között a katalizátor többször felhasználható jelentős aktivitás-csökkenés nélkül. A reakciót többféle amin jelenlétében elvégeztem, és megállapítottam az amin szerkezetének a reakció szelektivitására gyakorolt hatását.

A hozamok megállapítása és a termékek szerkezetének tisztázása GC, illetve GC-MS alapján történt.

FORGÁCS VIKTÓRIA Kémia BSc, 8. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Horváth Henrietta
 tudományos munkatárs, DE TTK

Vízoldható foszfin tartalmú Ru(II)-komplexek alkalmazása környezeti szennyezők felszámolására

Kulcsszavak: redukatív hidrodehalogénezés; Ru(II)-komplexek; halogénezett szénhidrogének

Összefoglalásként megállapítható, hogy $[\text{RuCl}_2(\text{p-cimol})(\text{pta})]$ komplex katalitikusan aktívnak bizonyult mind az alifás, mind az aromás halogénezett szénhidrogének redukatív hidrodehalogénezési reakciói során. A legideálisabbnak bizonyult reakciókörülmények 1 mmol szubsztrát; 0,01 mmol $[\text{RuCl}_2(\text{p-cimol})(\text{pta})]$ komplex; 1 ekv. pta; 2 mmol Na-formiát; 1 mL H_2O ; 2 h; 80°C ; valamint 10 bar H_2 . Ezen körülmények mellett a kloroform esetében 27,4 %-os, míg a szén-tetrakloridnál 52,7%-os konverziót értem el.

Az aromás szubsztrátok alkalmazásánál a redukatív hidrodehalogénezésen túl hidrogénezés is lejátszódott, melynek eredményeként ciklohexil-származékok és ciklohexán képződött, valamint ezek gyűrűfelnnyílása során hexán is keletkezett. A benzol- és ciklohexil-halogenidek esetében a dehalogénezés hosszabb, 19 órás reakcióidők alatt ment végbe nagyobb mértékben. Legjobb szubsztrátnak a bróm tartalmú származékok bizonyultak, mivel a klórt vagy a jódot tartalmazó vegyületek dehalogénezésénél kisebb konverziókat kaptam.

Vizes közegben más Ru(II)-komplexekkel összehasonlítva, mint például $[\text{RuCl}_2(\text{bmim})(\text{p-cimol})]$ és $[\text{RuCl}_2(\text{p-cimol})(\text{mtpms})]$ az általam alkalmazott katalizátor hatékonyabbnak mutatkozott. Azonban az utóbb említett komplexszel végzett kísérletek során tapasztalt szerves fázisba való átoldódás miatt, a szén-tetraklorid esetében a reakciót szerves közegben, metanolban is kipróbáltam, melynek eredményeként 76,0%-os konverziót mértem.

Reakciókinetika és katalízis 2

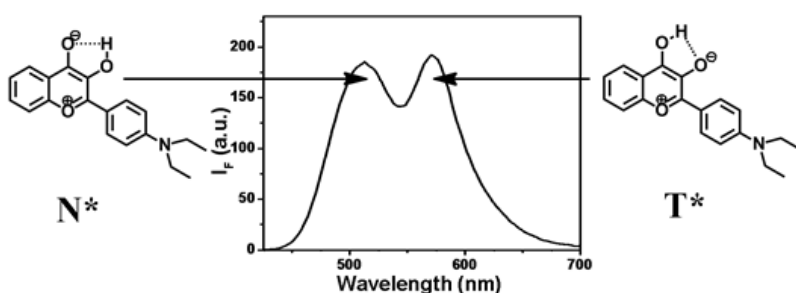
SZAKÁCS ZOLTÁN vegyészmérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Kubinyi Miklós
 egyetemi tanár, BME VBK

A 4'-dietilamino-3-hidroxi flavon fotokémiai tulajdonságai

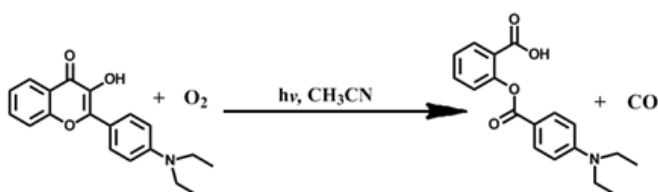
Kulcsszavak: fotolízis; reakció mechanizmus; ESIPT; fluoreszcens szenzor

A 3-hidroxi flavon több származékát fluoreszcens jelzőanyagként használják biomolekuláris kölcsönhatások vizsgálatában. Emissziós spektrumukban két sáv jelenik meg: az egyik a 'normál' (N*), a másik a tautomer (T*) forma gerjesztett állapotához tartozik. A T* forma az N*-ból gerjesztett állapotú proton átmenet (excited state intramolecular proton transfer = ESIPT) során jön létre. A proton transzfer mértéke érzékeny a lokális környezetre, ezáltal a két emissziós sáv intenzitásarányából következtethetünk a mikrokörnyezet megváltozására. A 3-hidroxi flavon alapú szenzorok gyakori alkalmazása indokoltá teszi fotostabilitásuk vizsgálatát is.



Kutatómunkám során optikai spektroszkópiai kísérletekkel és kvantumkémiai számításokkal tanulmányoztam a 4'-dietilamino-3-hidroxi flavonban lejátszódó ESIPT folyamatot és a festék tartós UV besugárzás hatására bekövetkező átalakulását. A kutatások kiterjedtek a fémkomplexekben kötött festék reakcióinak vizsgálatára is, melyek közül a Mg^{2+} és a Ca^{2+} komplexet tanulmányoztam részletesebben.

Az irodalom szerint a 3-hidroxi flavon alapvegyület fotolízise során gyűrűátrendeződés játszódik le, a két vegyértékű fém ionokkal képzett komplexeinek esetén viszont egy oxidációs folyamatot észleltek, mely során egy O_2 beépül a molekulába és egy CO távozik. A vizsgált, dietilamino csoporttal szubsztituált vegyület esetén az utóbbi reakciót figyeltük meg fémionok távollétében is, tehát a szubsztituens megváltoztatta a fotokémiai reakció jellegét.



SZABÓ MÁRIA vegyész MSc, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Fábíán István
tanszékvezető egyetemi tanár, DE TTK*

A glicin-klóramin bomláskinetikája lúgos közegben

Kulcsszavak: klóramin; kinetika

Munkánk során erősen lúgos közegben vizsgáltuk a glicin-monoklóramin bomlásának kinetikáját és mechanizmusát.

A spektrofotometriás kísérletek során azt tapasztaltuk, hogy amíg a MCG abszorpciós maximumán monoton csökken az abszorbancia, addig kisebb hullámhosszakon előbb nő majd csökken az abszorbancia. Ez összetett kinetikai jelenségre utal.

A kinetikai görbéket elemezve kisebb hullámhosszakon közttermék megjelenését figyelhetjük meg. A kinetikai görbék -két konszekutív elsőrendű folyamatot feltételezve- jól illeszthetők két exponenciális függvény összegével. Az illesztéssel kapott sebességi együtthatók az alkalmazott glicin-feleslegtől függetlenek, ám a végső abszorbancia jelentősen függ a reaktánsok koncentrációarányától. Ez arra utal, hogy a sebességmeghatározó lépések után egy glicinfeleslegtől függő gyors reakció is lejátszódik.

NMR vizsgálatokkal detektáltuk a reakcióban résztvevő anyagfajtaikat, valamint a jelek intenzitásának változását is követtük az idő függvényében. Sikertült meghatároznunk az intermedierek és termékek szerkezetét, majd a reakció mechanizmusát is fel tudtuk állítani.

Független kísérletekkel igazoltuk és alátámasztottuk, hogy a folyamat végterméke az N-formilglicin.

KOVÁCS BENJÁMIN Vegyész MSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:
Tarczay György
egyetemi docens, ELTE TTK
Varga Tamás
PhD hallgató, ELTE TTK

A glicin UV-fotolízisének vizsgálata

Kulcsszavak: csillagközi felhő; mátrixizolációs technika; kvantumhatásfok; fotobomlási út; fotobomlási mechanizmus

A csillagközi objektumokban azonosított aminosavaknak kitüntetett szerepe van az élet eredetének kutatása céljából. Csillagközi felhőkben eddig nem sikerült meggyőző bizonyítékot találni a jelenlétükre, ezért a glicin fotokémiai stabilitását a csillagközi felhőkben uralkodó paraméterekhez hasonló körülmények között vizsgáltam. Ennek megvalósítására a mátrixizolációs technika megfelelő módszernek mutatkozott.

A világűrben a részecskéket különféle sugárzások érik. Az UV-sugárzás hatásának modellezésére a leválasztott mintákat többféle hullámhosszú (213,5–235 nm) monokromatikus UV-fénnyel sugároztam be. Az általam alkalmazott hullámhosszakon a glicin UV-fotolízisét eddig nem tanulmányozták.

A vizsgált spektrumtartományban megállapítható, hogy minél kisebb a besugárzó fény hullámhossza, annál kisebb a glicin fotokémiai stabilitása. Ezt a kiszámított fotobomlásra vonatkozó kvantumhatásfok-értékek is megerősítették. A kvantumhatásfok-értékek segítségével megbecsülhető, hogy a világűrben keletkező glicin élettartamát az UV-sugárzás általam vizsgált komponensei milyen mértékben csökkentik.

A glicin irodalomban fellelhető bomlási útjait (dekarboxileződés, amino-ketén képződése) a bomlási termékek azonosításával megerősítettem, ugyanis a két bomlási út fő termékeit az összes hullámhosszon való besugárzás esetén detektáltam. Megfigyelhető volt, hogy az amino-ketén képződése csak kisebb hullámhosszak esetén válik jelentőssé. A bomlási termékek egyértelműbb azonosításához a glicin mellett egy deuterált származék (N,N,O-glicin-d3) fotolízisét is elvégeztem, amely bomlástermékei szintén detektálhatóak voltak.

A glicin fotolízise során végbemenő folyamatokat az OPTIMA nevű mechanizmusoptimaláló szoftverrel vizsgáltam. UV-besugárzás hatására a glicin konformerei gerjesztődnek, majd nemcsak fotobomlást szenvednek, hanem egymásba is alakulnak. A célom az volt, hogy a három azonosítható konformer fotobomlására, illetve a konformerek egymásba való alakulására jellemző sebességi állandókat meghatározzam. Az alkalmazott modellünkben a konformerek eltérő UV-abszorpcióját elhanyagoltam, tehát a gerjesztési folyamatokat beolvasztottam a többi folyamatba. A kapott eredmények szerint a konformer-átalakulások sebessége összemérhető a fotobomlási reakciók sebességével. Az eredmények pontosítása végett a jövőben a gerjesztési folyamatokat is külön figyelembe fogom venni, ezért a minták besugárzását többféle hullámhosszon, többféle lézerteljesítmény mellett fogom elvégezni.

HOMOLYA ÁGNES Kémia-matematika osztatlan tanár szak Osztatlan, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Lente Gábor
egyetemi docens, DE TTK*

A hisztidin fotokémiai reakciója és oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal

Kulcsszavak: kinetika; aminosav; fotokémiai bomlás; diódasoros spektrofotométer; oxon

Az értekezésben bemutatott munka során spektrofotometriás módszerrel vizsgáltuk a hisztidin savas közegben lezajló fotokémiai reakcióját és oxidációját peroxomonoszulfát-ionnal.

Megállapítottuk, hogy az oxidációs reakció gyengén lúgos közegben megy végbe peroxomonoszulfát-ion jelenlétében, amihez a megfelelő kémhatást bórapufferrel biztosítottuk. Kinetikai vizsgálatokat végeztünk az oxonkoncentráció megváltoztatásával. A mérési eredmények azt mutatják, hogy a reakció sebessége nemlineárisan növekszik az oxonkoncentráció növelésének hatására. Sikerült meghatároznunk egy tapasztalati sebességi összefüggést az oxon koncentrációja és a kezdeti sebesség között, ami azt mutatja, hogy a hisztidin oxidációja egy többlépéses, összetett folyamat.

A mérések során azt tapasztalatuk, hogy savas hisztidinoldatokban a diódasoros spektrofotométer fénye fotoreakciót vált ki. Ez egyértelműen az imidazol-oldallánc következménye: az imidazol hasonló körülmények között szintén fotokémiai reakcióban vesz részt, míg a maradék 19 természetes aminosav nem mutat hasonló reaktivitást. Vizsgáltuk a fotokémiai reakció térfogatfüggését, amiből megállapítottuk, hogy a reakció sebessége a várakozásoknak megfelelően csökken az egységnyi térfogatra eső fotonszám csökkenésével. A megvilágítási időszakokba sötét periódusokat illesztve bizonyítottuk, hogy a reakció sebessége egyenesen arányos a megvilágítás mértékével, valamint a reakció sebessége a vizsgált körülmények között nem függ a kénsav koncentrációjától.

¹H-NMR mérésekkel igazoltuk mindkét reakció esetén a termékek képződését, azonban még további vizsgálatok szükségesek ahhoz, hogy azonosíthassuk a termékeket.

SAMU VIKTOR Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:
Turányi Tamás
egyetemi tanár, ELTE TTK
Varga Tamás
PhD hallgató, ELTE TTK

Etán pirolízis- és oxidációs modelljének optimalizációja nagynyomású lökeshullámcső-kísérletek alapján

Kulcsszavak: égéskémia; sebességi együttható; paraméterbecslés; hibabecslés

Etán nagy nyomáson lezajló égési folyamatait mindezidáig kevesen kutatták, holott fontos köztitermék tüzelőanyagok oxidációja és pirolízise során. Amennyiben bonyolultabb tüzelőanyagok égését szeretnénk szimulálni, úgy elkerülhetetlen, hogy előbb egy alkalmas mechanizmust készítsünk etán égési folyamatainak leírására is.

Tranter és munkatársai [1] etán pirolízisét és oxidációját vizsgálták széles hőmérséklet- és nyomástartományokon. A nagynyomású lökeshullám-csőben 829–1491 K és 5–1000 bar körülmények között végzett kísérleteik során végtermékek koncentrációit mérték. Céljuk egy nagy nyomáson is jól működő etán pirolízis- és oxidációs modell megalkotása volt a mért adatok felhasználásával, de az általuk készített mechanizmus nem írta le kellően jól a mért eredményeket.

Munkám során az általuk mért adatsorok újraértékelését végeztem el az ELTE Kémiai Intézet Reakciókinetikai Laboratórium által kidolgozott optimalizációs módszer segítségével [2]. Kiindulási modellként a Healy és munkatársai által készített NUIG C5 v49 [3] modellt használtam. Lokális érzékenységanalízis segítségével meghatároztam azt a kilenc reakciót, amelyek legnagyobb mértékben befolyásolják a szimulált végtermék-koncentrációkat a mérések körülményeinél. A kiválasztott reakciókra a szakirodalomban fellelhető közvetlen mérések és elméleti számítások alapján meghatároztam azok hőmérsékletfüggő bizonytalansági tartományait. Az optimalizálást a Reakciókinetikai Laboratórium által fejlesztett Optima programmal végeztem, amelyhez a Tranter és munkatársai által mért adatsorokat, illetve szakirodalomból gyűjtött sebességi együttható-méréseket használtam fel.

Az optimalizációval kapott mechanizmus lényegesen jobban írta le a lökeshullámcső-kísérletek eredményeit a Tranter és munkatársai által alkotott modellnél. A $C_2H_6 + H = C_2H_5 + H_2$ és $C_2H_4 + OH = C_2H_3 + H_2O$ reakciók sebességi együtthatóit sokkal pontosabban tudtam meghatározni, mint ahogy az a szakirodalomban korábban ismert volt. A kilenc kiválasztott reakcióból összesen hat esetében észlelhető javulás a kiindulási bizonytalanságokhoz képest a teljes hőmérséklettartományra. A többi reakció közül a szakirodalomban érdemben nem szereplő $C_2H_3 + O_2 = CH_2CHO + O$ és $C_2H_2 + O_2 = HCCO + OH$ reakciók sebességi együtthatóit határoztam meg az 1200–1500 K hőmérséklettartományban.

- [1] R.S. Tranter et al., Int. J. Chem. Kinet. 37, 306–331 (2005)
 [2] T. Turányi et al., Int. J. Chem. Kinet. 44, 284–302 (2012)
 [3] D. Healy et al., Energ. Fuel 24, 1521–1528 (2010)

SZABOLCSI ROLAND ZSOLT vegyészmérnök BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Horváth Henrietta
tudományos főmunkatárs, DE TTK*

Irídium(I)-komplexek szerepe a formiát alapú hidrogéntárolásban

Kulcsszavak: zöld kémia; homogén katalízis; bikarbonát redukció; megújuló energiaforrás;

Jövőnk legígéretesebb energiahordozója a hidrogén. Tárolására és szállítására azonban jelenleg nincs megfelelően kidolgozott eljárás. Dolgozatomban ennek a problémának a megoldására tettem javaslatot.

Kísérleteim során sikeresen alkalmaztam különböző vízdoldható irídium(I)-N-heterociklusos karbén (bmim, emim)-tercier foszfin (mtppps-Na, mtppts-Na₃) vegyes ligandumú komplexeket a formiát katalitikus bontásában. Tanulmányoztam és meghatároztam a vizsgált komplexek katalitikus aktivitását, a reakció hőmérsékletfüggését, és ezek alapján kiválasztottam az [IrCl(cod)(emim)] + 2 mtppps-Na rendszert, amivel részletesebben vizsgáltam a formiát bontás / bikarbonát redukció katalitikus ciklust, mint lehetséges hidrogéntároló módszert.

Méréseket végeztünk atmoszférikus gázbürettában, nagy térfogatú gázbürettában, nyomásálló üvegreaktorban, valamint zafír NMR-csőben. A tapasztalatok azt mutatták, hogy az [IrCl(cod)(emim)] + 2 mtppps rendszer hatékonyan katalizálja mind a formiát bomlását, mind pedig a bikarbonát redukcióját ugyanazon körülmények között.

Összességében tehát a kutatásom megmutatta, hogy az [IrCl(cod)(emim)] + 2 mtppps rendszer alkalmas katalizátor a formiát/bikarbonát hidrogéntároló ciklus zárt rendszerben történő megvalósításához, ami fontos lépés/hozzájárulás lehet az úgynevezett hidrogéngazdaság térnyeréséhez.

BOGDÁNDI VIRÁG Vegyész MSc, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Lente Gábor
 egyetemi docens, DE TTK

Izoniazid reakciója szervesetlen oxidálószerrel

Kulcsszavak: izoniazid; autokatalízis; permanganátion; hipoklorit ion; oxidáció

Jelen tudományos diákköri dolgozat tárgya az izoniazid és különböző szervesetlen oxidálószer között végbemenő reakció. Az izoniazid a tuberkulózis megelőzésében és kezelésében használt első számú antibiotikum. Lebontása az élő szervezetben oxidáció valamint hidrolízis által történhet. Kísérleteim során az izoniazidot permanganátionnal illetve hipoklorit ionnal oxidáltam savas valamint bázikus közegben.

Első lépésben a végbemenő reakciók sztöchiometriáját határoztam meg. Az izoniazid oxidációja két reakcióúton játszódhat le. Egyik esetben a hidrazinsoport oxidációjával izonikotinsav, míg a másik esetben izonikotinamid keletkezik. A permanganátionos oxidáció esetén az izonikotinsavat eredményező folyamat dominál, míg a hipoklorit ionos oxidáció során egy bonyolultabb sztöchiometriával kell számolnunk.

A kinetikai mérésekhez szükség volt az optimális hullámhossz meghatározására. A reakcióelegy teljes spektrumát felvéve ez a hullámhossz a permanganátionos oxidáció esetén 537 nm-nek, míg a hipoklorit ionos folyamatnál 320 nm-nek adódott. A további kinetikai méréseket ezeken a meghatározott hullámhosszakon folytattam.

A permanganátionos oxidáció tanulmányozásakor az izoniazidot nagy feleslegben alkalmaztam, azonban a várt elsőrendű reakció elméletét két okból is el kellett vetnem. Figyelembe véve az autokatalitikus hatású Mn^{2+} -ionok keletkezését, feltételeztem az autokatalízist. Ezt alátámasztja az autokatalitikus sebességi egyenlet meglepően jó illeszkedése a kinetikai görbére. A kezdeti sebességek lineáris függést mutatnak a Mn^{2+} -ionok koncentrációjával, így nagy valószínűség szerint a folyamat jellemezhető az elsőrendű autokatalízis sebességi egyenletével.

Oxidálószerként hipoklorit iont alkalmazva a kezdeti sebességek lineáris függést mutatnak az oxidálószer koncentrációjával, míg izoniazid esetében a már tapasztalt nemlineáris összefüggést figyeltük meg. Továbbá bizonyítottuk, hogy a klorid ionok a folyamatra nem gyakorolnak hatást, ennek kloridiontartalmú NaOCl esetében lenne jelentősége.

A kezdeti sebességre kapott értékek mindkét reakció esetén csökkennek a kénsav/nátrium-hidroxid koncentrációjának növekedésével, ezt a jelenséget részben értelmezheti az izoniazid sav-bázis egyensúlya.

KONTOS JÁNOS Vegyészmérnök MSc, 4. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Tóth László Richárd
egyetemi tanársegéd, PE MK
Dr. Varga Tamás
egyetemi adjunktus, PE MK

Reakciórendszerek struktúrájának meghatározására szolgáló eszköz fejlesztése

Kulcsszavak: struktúra identifikáció, genetikus algoritmus, reakció rendszer, legkisebb négyzetek módszere

A több különböző kémia reakcióból felépülő, ún. kémia reakció rendszerek (KRR) nagy számban fordulnak elő a vegyiparban. Igen nagy problémát jelent, hogy a különálló reakciók hatását csak együttesen - a többi reakcióval együtt - tudjuk vizsgálni. Egy olyan eszköz, mely pusztán matematikai összefüggések segítségével képes jó közelítést adni a KRR-t alkotó reakciók minőségéről, nagy érdeklődésre tarthat számot az ipar számos területén.

Munkám során egy olyan eszközt fejlesztettem, mely képes az egyes komponensek koncentrációi változásainak, illetve a komponensek moláris tömegeinek felhasználásával meghatározni a lejátszódó reakciórendszer struktúráját. A feladat megoldásának első lépéseként létrehoztam az ún. elemi reakciókat generáló algoritmust. Az elemi reakciókat a komponensek moláris tömege alapján lehetséges kombinációs reakciók alkotják. A KRR struktúra identifikálásának lényege, hogy az elemi reakciók halmazát szűkítve kapjam meg a lehetséges kémiai reakciók halmazát. A KRR struktúrája mellett, meg kellett határoznom az egyes reakciókhoz tartozó reakciósebességi állandókat is, mivel ezek jelentősen befolyásolják a kialakuló koncentráció profilt. A KRR lehetséges reakcióinak kiválasztásának érdekében, elsőként egy szélsőérték feladatot fogalmaztam meg. Az eljárás lényege, hogy az egyes elemi reakcióhoz egzisztencia változókat rendeltem. A keresési változókként az egyes elemi reakciók egzisztenciaváltozóit, illetve a reakciókhoz tartozó reakció sebességi állandókat választottam. Célfüggvényként a létrehozott modell által számított és a mérési adatokból származó koncentrációk, idő szerinti deriváltjainak arányainak négyzetes eltérését minimalizáltam.

Az így létrehozott eljárás sok esetben nem ad megfelelő felvilágosítást a KRR-t alkotó reakcióról, ezért következőként egy kvázi analitikus megoldást dolgoztam ki. A módszer lényege, hogy a reakciók koncentráció változását pusztán lineáris algebrai műveletek segítségével számítani lehet. A létrehozott összefüggést átrendezve, majd a legkisebb négyzetek módszerét felhasználva, megkaphatjuk a KRR-t alkotó reakciókat, illetve a hozzájuk tartozó reakciósebességi változók értékét.

Az elkészült eszköz validálására, egy reakció generátort hoztam létre, mely képes tetszőleges tulajdonságú (sztöchiometria, reakció típusa, stb.) reakciókat tartalmazó KRR koncentráció profiljának előállítására.

SILAI ELISABETA ILEANA Műszaki és Környezetvédelmi szak BA, 8. félév Babeş - Bolyai Vegyészmérnöki kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. ing. Graziella Turdean
egyetemi docens, BBTE*

**Szerkezet, elektrokémiai tulajdonság és antioxidáns kapacitás közötti összefüggések vizsgálata
katekolaminok esetében**

Kulcsszavak: ciklikus voltammetria; négyszöghullám voltammetria; katekolaminok; antioxidáns

Izoprenalin, adrenalin, levonordefrin, noradrenalin, dopamin, d-dopa és karbidopa redox folyamatait vizsgáltuk ciklikus és négyszöghullám voltammetria segítségével. A szerves vegyületek oxidációs folyamatainak elektrokémiai vizsgálata által megérthetjük ezen vegyületek metabolizmusát az élő szervezetekben. A katekolaminok grafit elektródán történő redox reakciói kvázi reverzibilis diffúzió által kontrolált folyamatok. Megállapíthatjuk hogy az oxidációs potenciál és az antioxidáns hatékonyság fordítottan arányos; az oxidációs potenciál csökkenése az antioxidáns hatékonyság növekedését idézi elő, a következő sorrendben: norepinefrin < levonordefrin < epinefrin < izoprenalin vagy carbidopa < d-DOPA < dopamin. Mindkét sorozatot az –OH és –NH₂ csoportok para – alkil szubsztituenseinek helye meghatározó szerepet tölt be.

PIKÓ ISTVÁN Kémia BSc BSc, 6. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Horváth Krisztián
egyetemi adjunktus, PE MK
Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet
egyetemi adjunktus, PE MK

Szerves szennyezők mineralizációja nagyhatékonyságú oxidációs eljárások kombinálásával

Kulcsszavak: 1-naftalin-szulfonát; heterogén fotokatalízis; ózon; K₂S₂O₈

A szennyvizek kezelésére, tisztítására különböző biológiai, fizikai-kémiai módszerek alkalmazhatók. Egyes esetekben azonban a hagyományos technológiák nem elegendőek, s így új, hatékony eljárások szükségesek a biológiailag nehezen eltávolítható szennyezők lebontásához. A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közös vonása, hogy fotolízissel vagy kémiai úton nagy reakciókészségű gyököket állítanak elő. A vízben oldott szerves vagy szervetlen molekulák és a gyökök reakciója elvezethet a szennyezők teljes lebomlásához.

A heterogén fotokatalízis az elmúlt évszázad végén vált intenzív kutatási területté. A félvezető katalizátornak kémiaiilag és biológiailag inertnek, fotokatalitikusan aktívnek, könnyen gyárthatónak és nem utolsó sorban olcsónak kell lenni. A félvezetők közül leginkább a TiO₂ az, amely megfelel a fenti követelményeknek, ezért széleskörűen alkalmazzák.

A laboratóriumi kísérletekben ezzel az eljárással a különböző szerves vegyülettípusok egyszerű szervetlen végtermékké lebonthatóknak bizonyultak, azonban a fotokatalitikus oxidáció hatékonysága viszonylag kicsi. Ahhoz, hogy a heterogén fotokatalízis a gyakorlati életben használható legyen, növelni kell a fotooxidáció hatékonyságát. Ennek egyik lehetséges módja, hogy a fotokatalitikus módszert más eljárásokkal kombináljuk, pl. oxidálószerrel adagolunk a szuszpenzióhoz.

Modellvegyületként az 1-naftalin-szulfonátot választottuk, kutató munkám során a felületaktív anyag fotokémiai bonthatóságát vizsgáltam különböző kísérleti körülmények között.

Kísérleti eredményeim alapján megállapítottam, hogy a fotooxidáció és a mineralizáció hatásfoka növelhető a heterogén fotokatalízis és különböző oxidálószerek (kálium-peroxo-diszulfát, illetve ózon) együttes alkalmazásakor.

KINKA ANIKÓ környezetmérnök BSc, 8. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Hernádi Klára
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Fejes Dóra
doktorjelölt, SZTE TTIK

Tiofén jelenlétében CCVD szintézissel előállított szén nano-és mikrotekercsek vizsgálata

Kulcsszavak: szén nanotechnológia; katalitikus kémiai gőzleválasztás; nikkel; tiofén;

A XXI. századi anyagtudományban a legnagyobb figyelmet a nano- és mikrotechnológiai kutatások kapják. A nano, illetve mikroméretű struktúrák előállítása, tanulmányozása és alkalmazása számos tudomány- és iparág közötti kapcsolat alapja úgy, mint az elektronikai ipar, az orvostudományok, vagy akár a gyógyszeripar. Megannyi anyag közül is talán az egyik legsokoldalúbban alkalmazható a szén.

Széntartalmú vegyületek katalitikus kémiai gőzfázisú bontásával (CCVD-Catalytic Chemical Vapour Deposition) szén nanostruktúrák is szintetizálhatóak. Az eljárás megismeréséhez fontos tudni, hogy a szintézis egyes paramétereinek módosításával, mint szénforrás, reakcióhőmérséklet, alkalmazott katalizátor, a reakció időtartama-nagymértékben befolyásolja, hogy milyen szerkezetű terméket kapunk. A korábbiakban tanulmányozott szénszálak előállításáért végzett CCVD szintézisek során bebizonyosodott, hogy a forrásgázokban található szennyezések az átmenetifém katalizátorokra már egészen kis mennyiségben számottevően kihatnak. Szénforrásként az iparban is széles körben alkalmazott szénhidrogéneket használnak, melyek tartalmazhatnak szennyeződésként kenet, ami rendkívül hatékony katalizátorméreg. A kén mennyiségét megfelelő keretek között tartva különleges szénstruktúrák kialakulása lehetséges.

Diákköri munkám során olyan CCVD módszert alkalmaztam, ahol az acetilén vagy etilén szénforrás mellett szennyezőként tiofén bevezetésére is sor került. Katalizátor prekursoraként nikkel (II)- oxid nanorészecskékből készített szuszpenziót használtam, amelyet szilíciumlap hordozó felületére vittem fel. A reakcióhőmérséklet, a forrásgázok áramlási sebességének változtatása, és a bevitt tiofén mennyiségének függvényében vizsgáltuk a szénlerakódásban előforduló struktúrákat. A kén ugyanis képes a katalizátor aktivitását módosítani, a felületen képzett bevonatának köszönhetően, ezáltal befolyásolva a szénforrás bontását. A kapott szénlerakódások nano-, és mikroszálakat, valamint, –véltetően a tiofén jelenlétének köszönhetően–szálakból formálódó tekercseket tartalmaztak.

Szerves kémia 1

NAGY ADRIENN Vegyész MSc, 3. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
Zsoldosné Mády Virág
tudományos főmunkatárs, ELTE-MTA Fehérjemodellező Kutatócsoport
Pintér István
kutatóprofesszor, ELTE TTK

3-amino-3-dezoxi-D-ribofurán-uronsav származékok szintézise

Kulcsszavak: Foldamer; szintézis; cukoraminosav; Staudinger reakció; furanozil-uronsav

Az utóbbi másfél évtizedben a foldamerek, mint biomimetikus molekulák előtérbe kerültek a biokémiai és biológiai kutatásokban. Mivel a fehérjékkel analóg térszerkezet kialakítására képesek, így hasonló biológiai funkció ellátására lehetnek alkalmasak.

Munkám fő célja a foldamerekbe beépíthető 3-amino-3-dezoxi-1,2-O-izopropilidén- α -D-ribofurán-uronsav szintézisének optimalizálása, valamint az előállított vegyület peptidkötéseket tartalmazó illetve peptidomimetikumok szintézisére alkalmas származékokká alakítása volt.

Ismert furánóz-származékokon keresztül előállítottam a transz β -ribofurán-uronsav kulcsintermedierjét, a 3-azido-származékot. Ebből két reakcióúton állítottam elő új vegyületként a 3-acetamido-3-dezoxi-1,2-O-izopropilidén- α -D-ribofurán-uronsavat. A két út eltérése, hogy az egyiknél először alakítottam ki a karboxilcsoportot, majd utána az aminocsoportot. A másik reakcióút során a két csoport kialakításának sorrendjét megfordítottam. Sikerült előállítanom célvegyületként az új 3-amino-3-dezoxi-1,2-O-izopropilidén- α -D-ribofurán-uronsav-metilamidot és a 3-acetamido-3-dezoxi-1,2-O-izopropilidén- α -D-ribofurán-uronsav-metilamidot, egyrészt a 3-azido-ribofurán-uronsavon, másrészt a 3-acetamido-ribofurán-uronsavon keresztül.

PATAKI ZOLTÁN GERGŐ

biomérnök

BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

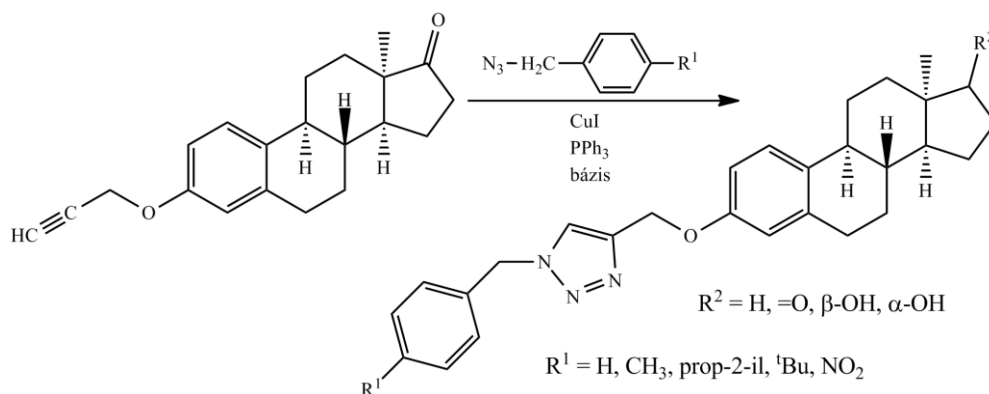
Témavezető:

Dr. Mernyák Erzsébet

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Antitumor hatású triazolok szintézise a 13 α -ösztрон sorban*Kulcsszavak: ösztрон, dipoláris cikloaddíció, antitumor, enzim inhibitor, szelektív*

A természetes ösztрон az élővilágban gyakran előforduló, számos élettani szerepet betöltő hormon. E vegyület egylépéses epimerizációval előállított izomere, a 13 α -ösztрон hormonálisan inaktív vegyület [1]. Az elmúlt időszak kutatásai során felfedezték, hogy egyes 13 α -ösztрон származékok antitumor aktivitással rendelkeznek [2]. Munkánk során terminális alkin funkciót tartalmazó 13 α -ösztрон származékokat szintetizáltunk, amelyeket szubsztituált benzilazidokkal reagáltattunk. Az azid-alkin „click” reakciók révén nyert vegyületeink eredményesen gátolták több reproduktív humán tumorsejvonal proliferációját. Az aktív származékok szerkezetének célzott módosításával és a céltermékek MTT-módszerrel történő hatástani vizsgálatainak eredményeivel összevetve, szerkezet-hatás összefüggést állapítottunk meg.



1.ábra Triazol szintézis „click” reakcióval

[1] Schönecker, B., Lange, C., Kötteritzsch, M., Günther, W., Weston, Anders, E., Görls, H., Conformational design for 13 α -steroids, J. Org. Chem., 65, 5487–5497 (2000).

[2] Berényi, A., Minorics, R., Iványi, Z., Ocsovszki, I., Ducza, E., Thole, M., Messinger, Wölfling, J., Mótyán, G., Mernyák, E., Frank, E., Schneider, G., Zupkó, I., Synthesis and investigation of the anticancer effects of estrone-16-oxime ethers in vitro, Steroids, 78, 69–78 (2013).

HIRSCH EDIT Gyógyszervegyész-mérnök MSc MSc, 1. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

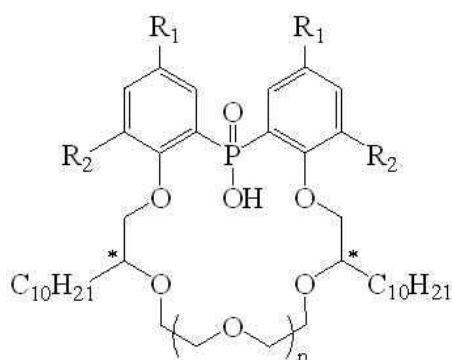
Témavezetők:
Dr. Huszthy Péter
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Tóth Tünde
egyetemi adjunktus, BME VBK

Diarilfoszfinsav egységet tartalmazó, lipofil, királis koronaéterek szintézise és szelektív transzportképességük vizsgálata

Kulcsszavak: *deprotonálható koronaéterek; fémiontranszport; aminok transzportja*

Tudományos diákköri kutatómunkám során az irodalomban eddig ismeretlen lipofil, diarilfoszfinsav egységet tartalmazó, könnyen deprotonálható, királis makrociklusok szintézisének kidolgozása és a velük végzett transzportfolyamatok vizsgálata volt a célom.

A savanyú protont tartalmazó koronaéterek alkalmazhatók pH-gradiens által létrehozott transzportfolyamatokban, mely során egy ligandum szelektíven transzportál ionokat egy vizes adófázis – lipofil szerves folyadékmembrán – vizes szedőfázis rendszerben. A megfelelő lipofilitás érdekében a koronaétereken decilcsoportokat alakítottam ki. A transzportfolyamat során a komplexképzés függhet a makrociklus pKa értékétől, így ennek változtatására terc-butil- és nitrocsopottokkal módosítottam az aromás gyűrűket (1. ábra).



- (R,R)*-**1**: $n=1$, $R_1=H$, $R_2=H$
(S,S)-**1**: $n=1$, $R_1=H$, $R_2=H$
(R,R)-**2**: $n=2$, $R_1=H$, $R_2=H$
(R,R)-**3**: $n=1$, $R_1=tBu$, $R_2=H$
(R,R)-**4**: $n=1$, $R_1=tBu$, $R_2=NO_2$

1. ábra

Munkám során vizsgáltam a makrociklus gyűrűméretének hatását fémionokkal végzett transzportfolyamatokban. Az általam előállított, királis, deprotonálható koronaéterek alkalmazhatók királis, protonált, primer aminok enantiomerszelektív transzportjára. Ezt a folyamatot 1-feniletil-aminnal végzett transzportban optimalizáltam a hőmérséklet, a szerves folyadékmembrán minőségének, illetve az adó- és szedőfázis koncentrációjának és minőségének változtatásával.

SENTES ZSOMBOR-ISTVÁN Vegyésszmérnöki BSc, 6. félév Babes-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyésszmérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Lovász Tamás

egyetemi adjunktus, BBTE

drd. Richard Nohl

doktorandus, Friedrich Schiller Jénai Egyetem Szerves és Biokémia kar

Dr. Hans-Dieter Arndt

egyetemi professzor, Friedrich Schiller Jénai Egyetem Szerves és Biokémia kar

Dihidropiridinek szintézise többkomponensű reakció alkalmazásával

Kulcsszavak: Notch sejtjelzés, β -keto-észter, β -keto-amid,

A Notch szignalizációs rendszer egy fontos sejtek közötti kommunikációs csatorna, aminek jelentős szerepe van a sejtek differenciálódásában és homeosztázisának megőrzésében. Ennek a fontos sejtjelző rendszernek a befolyásolására egy ígéretes molekulatípus a dihidropiridinek csoportja. Az 1,4-dihidropiridinek csoportjába tartozó NifedipineTM illetve NitrendipineTM kereskedelmileg kapható, magas vérnyomás csökkentésére alkalmas gyógyszerek, amelyek Ca^{+2} csatorna blokkoló hatással rendelkeznek.

Kutatásunk során különböző 1,4-dihidropiridinek szintézisét vizsgáltuk: aldehid, dimedon, β -keto észter és amin Hantzsch típusú, többkomponensű reakciója révén. A β -keto-észter és az aromás aldehid változtatásával, ammónium acetát jelenlétében különböző szubsztituensekkel rendelkező dihidropiridineket állítottunk elő, amelyek várhatóan biológiai aktivitást mutatnak.

Kutatásunk a 2013-as Erasmus Mobility program keretében valósult meg.

ÖRKÉNYI RÓBERT

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:

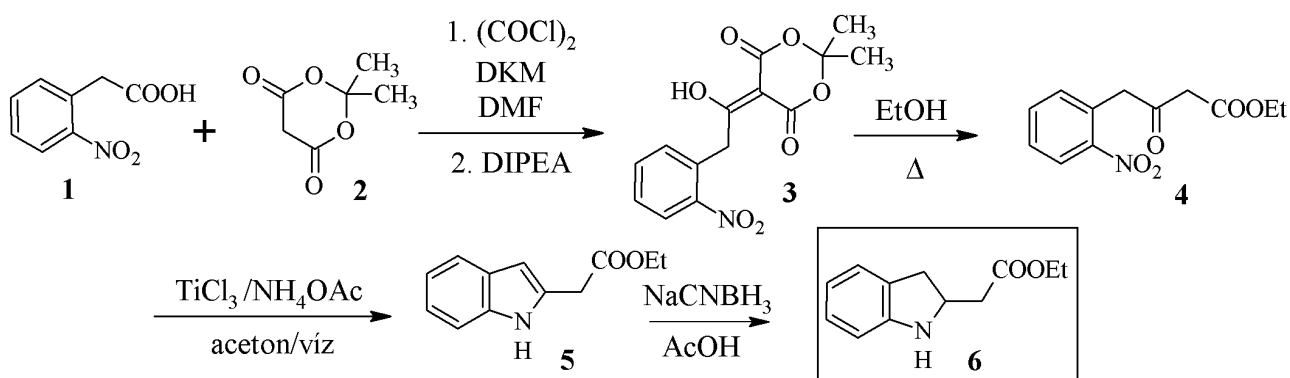
Dr. Éles János

laborvezető, Richter Gedeon Nyrt., Gyógyszerkémiai Kutatólaboratórium III.

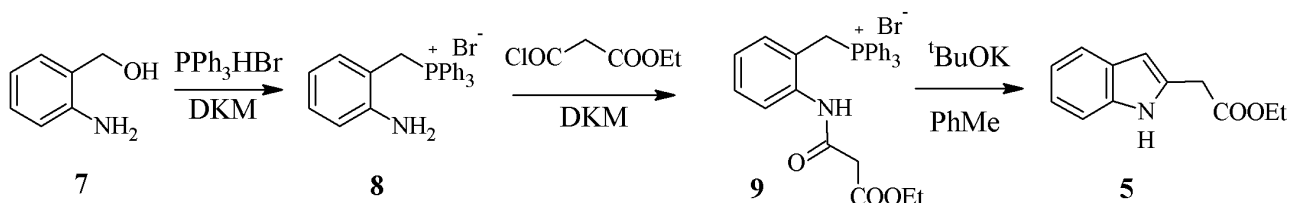
Etil-2-(2,3-dihidro-1H-indol-2-il)acetát szintéziseinek vizsgálata

Kulcsszavak: indol-származékok; gyógyszerkémiai szintézis; optimalás; H-Cube; katalitikus hidrogénezés

Tudományos diákköri munkámat a Richter Gedeon Nyrt. Gyógyszerkémiai Kutató Laboratórium III.-ban végzem. Feladatként az etil 2-(2,3-dihidro-1H-indol-2-il)acetát (6) szintézisének vizsgálatát valamint nagyobb mennyiségben történő előállítását kaptam. Elsőként a kutatócsoport által korábban megvalósított szintézis utat reprodukáltam:



Ezt követően 5 intermedier 4 vegyületből történő előállítását többféle reagens alkalmazásával is megvizsgáltam, valamint alternatív útként egy intramolekuláris Wittig-reakcióval is előállítottam:



Továbbá célul tűztük ki 4 vegyület atmoszférikus nyomású konszekutív katalitikus hidrogénezésével 6 indolin-származék előállítását, mellyel kiküszöbölhető a korábban alkalmazott drága, vegyszeres redukció. Ehhez az H-Cube® folyamatos áramú katalitikus hidrogénező reaktort használtuk. Sikertült olyan reakcióparamétereket találni az optimalás során, mellyel több, mint 70%-os termeléssel ezen reakció megvalósítható.

TÓTH EDINA BRIGITTA Kémia BSc, 9. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:
Novák Zoltán
egyetemi adjunktus, ELTE TTK
Sinai Ádám
doktorandusz, ELTE TTK

Heterogén Cu/Fe katalizátor alkalmazása benzoxazinok szintézisében

Kulcsszavak: réz; heterociklusok; vas; biarilok; kapcsolás

Napjainkban a szerves kémiai kutatások egyik legfontosabb irányvonalát az új gyűrűzárási reakciók kidolgozása képezi. A heterociklusos molekulák változatos szintézisét és funkcionálisítását széles körben kutatatják a szerves kémia különböző területein. A gyűrűzárási reakciók segítségével különféle heterociklusos vegyületek állíthatók elő, amelyek közül számos vegyület gyógyszerhatóanyagként, illetve növényvédő szerként kerül felhasználásra.

Munkám során benzoxazinok előállításának lehetőségeit vizsgáltam heterogén rézkatalizátor felhasználásával. A laboratóriumunkban korábban már számos reakcióban hatékonynak bizonyult Cu/Fe katalizátor alkalmazhatóságát vizsgáltam benzoxazinok szintézisére oxidatív gyűrűzárási reakcióban.

A vizsgálatokhoz elsőként a kiindulási anyagok szintézisét valósítottam meg, ahol egy jól ismert palládiumkatalizált kapcsolási reakció segítségével 2-(ariletinil)-anilideket állítottam elő. Ezt követően az oxidatív gyűrűzárási reakcióban kapcsolópartnerként jelen lévő jodóniumsók szintézisét végeztem, egy az irodalomban már jól ismert előállítási reakciót alkalmazva.

A gyűrűzárási reakciókhoz szükséges kiindulási anyagok szintézisét követően, különféle elektronküldő, illetve elektronszívó csoportokkal szubsztituált benzoxazin származékokat állítottam elő, vizsgáltam a különböző funkciós csoportok hatását a reakció lefolyására.

Kísérleti eredmények alapján megállapítottam, hogy a korábban már számos reakcióban sikeresen alkalmazott Cu/Fe katalizátor alkalmas benzoxazinok etinilanilidek és diaril-jodóniumsók oxidatív gyűrűzárással történő előállításának katalizálására. Munkám során a kiindulási anyagok szintézise után a reakciónak a körülményeit optimalizáltam, továbbá vizsgáltam a kiindulási anyagokon lévő különböző funkciós csoportok hatását a reakcióra. A kísérleti eredmények alapján levonható az következtetés, hogy a kiindulási anyagokban jelenlévő elektronszívó csoportok lassabb reakciót eredményeznek, illetve a termékek kisebb termeléssel izolálhatóak ezekben az esetekben. Az elektronküldő csoportokkal rendelkező szubsztituensek esetében a reakció hasonlóan viselkedett, mint a szubsztituenseket nem tartalmazó kiindulási anyagokkal. A szubsztituensek hatása jelentősebb abban az esetben, ha a szubsztituensek a jodóniumsón helyezkednek el. Az irodalmi előzmények alapján javaslatot tettünk a reakció mechanizmusára, aminek igazolása további kutatások tárgyát képezi.

ENDRE GÁBOR Vegyész MSc, 2. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Kotschy András

DSc Divízió-igazgató, Servier Gyógyászati és Vegytani Intézet Rákkutatási Osztály

Dr. Vasas Attila

kutató, Servier Gyógyászati és Vegytani Intézet Rákkutatási Osztály

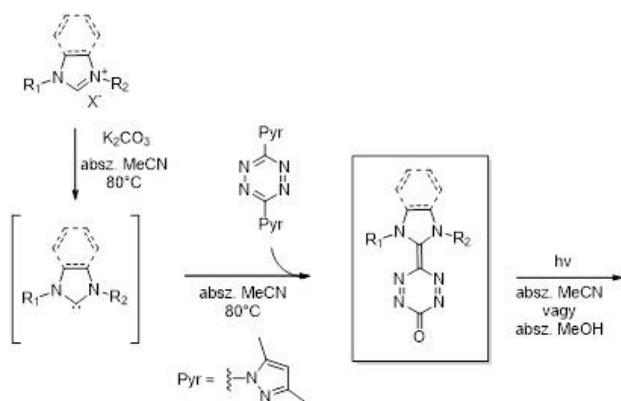
Kinoidális tetrazinok szintézise és fotokémiai bomlásuk vizsgálata

Kulcsszavak: karbén; kinoidális tetrazin; fotoreakció;

Munkánk kezdeti lépésében a kinoidális tetrazinok szintéziséhez szükséges karbénprekursor sók négy lépésű szintézisét, majd a kinoidális tetrazinok elkészítését hajtottuk végre. Az így nyert 6 lila színű, kinoidális tetrazint fotokémiai reakcióknak, fotokémiai bontásnak vetettük alá.

A fotokémiai bontásokat kétféle oldószerben, a dipoláros, aprotikus acetonitrilben, és a nukleofil jellegekkel rendelkező metanolban hajtottuk végre. A reakciókat minden esetben a lila oldat elszíntelenedéséig, illetve halványsárga szín megjelenéséig folytattuk. Az acetonitrilben végrehajtott reakciók esetén a mintavételezés percenként történt, míg metanolban a bomlás lassabban játszódott le, így 2-5 percenként történt mintavétel. A reakciók követése minden esetben HPLC-MS és NMR technikákkal történt.

Ezek után a reakcióban keletkezett termékek tisztítása és izolálása következett. A tisztítási lépések preparatív HPLC-n, illetve normál fázisú flash kromatográfon zajlottak, míg a termékek szerkezetigazolására HPLC-MS, HR-MS, NMR és röntgenkristallográfiás technikákat alkalmaztunk.



1. Ábra Tetrazinok szintézise, majd fénnyel történő bontásuk

SEBŐ ANNA Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezető:
Kele Péter
tud. főmts., MTA, TTK

Nem-természetes luciferinszármazékok szintézise

Kulcsszavak: biolumineszcencia; jelölőanyagok; kumarin; benzofurán; szentjánosbogár

A biolumineszcencia egy széles körben tanulmányozott jelenség. Olyan folyamat melynek során egy biokémiai reakcióban fénykibocsátás történik. A reakcióban résztvevő vegyületeket gyűjtőnéven luciferinek és luciferázok. A laboratóriumban legtöbbször használt és tanulmányozott biolumineszcens vegyület az észak-amerikai szentjánosbogár luciferin.

A munkám során az észak-amerikai szentjánosbogár luciferinhez hasonló vegyületeket terveztem és állítottam elő. Két esetben a vegyület biolumineszcenciáját vizsgáltam. A vegyületek az irodalomban eddig megtalálhatóakkal szemben nem vörös irányba eltolódva emittálnak fényt, a natív luciferinhez képest, hanem a kék irányban. Ellenkező irányú, a kék tartomány felé történő eltolódásra csak igen kevés példa található a szakirodalomban annak ellenére, hogy többszörös jelölési módszereknél a látható fény spektrumának teljes lefedése lenne kívánatos.

HERGERT TAMÁS Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 9. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Faigl Ferenc

egyetemi tanár, BME VBK

Dr. Mátravölgyi Béla

tudományos munkatárs, BME VBK

Deák Szilvia

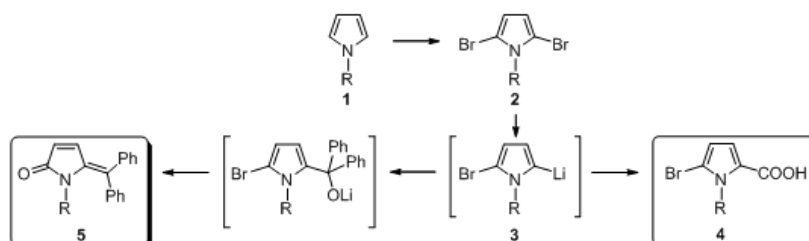
PhD. hallgató, BME VBK

N-szubsztituált, halogéntartalmú pirrolok fémorganikus reakcióinak vizsgálata

Kulcsszavak: 1-arilpirrol; fémorganikus; brómozás; laktám; n-butil-lítium

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő kutatócsoportban az elmúlt években több igen jelentős sikert értek el az 1-arilpirrolok kémiáját vizsgáló kutatások során. Többek között eredményes szintéziseket dolgoztak ki a gyűrűk szelektív szubsztituálására fémorganikus úton, enantiomertiszta formában állítottak elő több atropizomer származékot diasztereomer sóképzéses rezolválással, valamint enantioszelektív átalakítások hatékony megvalósítását eredményező bifunkciós katalizátorligandumokat és organokatalizátorokat szintetizáltak. Az új, 1-arilpirrol alapvázú ligandumok, illetve organokatalizátorok azonban csak soklépéses preparatív munka után tesztelhetők az adott aszimmetrikus modellreakciókban. A reakcióutak lerövidítésével szintézisük olcsóbbá válhat, mely a vegyületek szélesebb körű alkalmazhatóságának is lehetőséget adhat.

Brómtartalmú aromás vegyületekből fémorganikus reakcióval változatos funkciókat alakíthatunk ki, többek között a kutatócsoport által előállított katalizátorligandumoknál alapvető fontosságú difenilmetanol molekuláriszt. Kutatómunkám célja 1-arilpirrolok (1) brómozásának vizsgálata, szelektív, többszörös halogénezést eredményező körülmények kidolgozása volt. A továbbiakban a 2 vegyületben lévő halogénatomok butil-lítiumos halogén-fém cseréjével több funkciócsoport kialakítását is elvégeztük. Így sikerrel állítottunk elő karbonsav- származékokat (4) a pirrolgyűrű lítiálási lépését követően. A lítiált pirrol-származékok (3) benzofenonos reakciójával azonban nem a várt terméket, hanem egy igen meglepő átalakulás során képződő konjugált rendszert tartalmazó γ -laktámot (5) izoláltunk, melyből több származékot is sikerrel előállítottunk.



VÖRÖS PATRIK Kémia BSc, 8. félév Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Bognár Balázs
egyetemi adjunktus, PTE ÁOK*

Paramágneses kávéssav származékok szintézise és antioxidáns vizsgálata

Kulcsszavak: Nitroxid kémia; CAPE; ABTS gyök kation; Fenton-reakció

Bevezető

A természetes antioxidánsoknak nagy szerepük van a szervezetben az ROS és az RNS szükséges koncentrációjának fenntartásában. A természetben számos antioxidáns molekula fordul elő, ide tartoznak a kávéssav típusú vegyületek, azonban a nitroxidok is képesek antioxidáns rendszerekkel egyelektronos redoxi reakciókban részt venni.

Diákkörösként célul tűztem ki olyan antioxidáns hatású, nitroxid funkciós csoportot hordozó kávéssav származékok szintézisét, melyek meghaladják a trolox antioxidáns aktivitását.

Tervezés

A szintéziseknél egy kifejezetten hatékony antioxidáns, a kávéssav-fenetil-észteren (CAPE) 5- és 6-tagú nitroxiddal 3-féle módosítást végeztem. A változtatások a katekol gyűrűt, a fenetil csoportot és az α,β -telítetlen-észter kettős kötését érintették és azt vártam, hogy az előállított származékok jobb antioxidáns hatást mutassanak, mint az alapvegyület.

Szintézisek

A munkám során számos klasszikus szintetikus eljárást hajtottam végre (Észteresítés, észter szintézis karbonsav-kloridból, litiálás, Dakin-oxidáció), Horner-Wadworth-Emmons reakció, sav és lúg érzékeny védőcsoportok használata, Pd-katalizált reakció (Suzuki-kapcsolás).

Analitikai vizsgálatok

A vegyületek szerkezetazonosítását spektroszkópián (1H NMR, MS) és elemanalízis vizsgálattal támasztottam alá.

A szintetizált vegyületeknek az antioxidáns tulajdonságát 2 módszerrel vizsgáltam:

1. Spektrofotometrián ABTS gyökkation redukcióján keresztül, meghatározva a Trolox Ekvivalens Antioxidáns Kapacitás (TEAC) értéket.
2. ESR spektroszkópián a Fenton-reakció gátlását vizsgáltam DMPO-OH addukt képződésének inhibícióján keresztül, meghatározva a szabadgyökfogó képességet.

Eredmények

A szintézisek eredményeként 7 db új, paramágneses kávéssav analogont sikerült előállítanom.

Az előállított vegyületek a Fenton-reakciót a troloxnál hatékonyabban gátolták. A származékok közül kiemelhető kettő nitroxid (19,20), melyek az ABTS módszer esetén is hatékonyak bizonyultak (TEAC>1,17). Ezek után megállapítottam, hogy az antioxidáns hatásért a katekol gyűrű és a nitroxid funkciós csoport feltehetően szinergisztikus hatása, illetve az aromás gyűrű és az akrilát szén-szén kettős kötése között kialakuló konjugáció felelős.

RÁDAI ZITA

Vegyészmérnöki

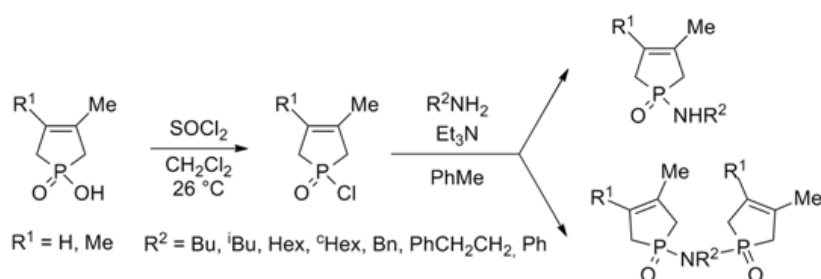
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem

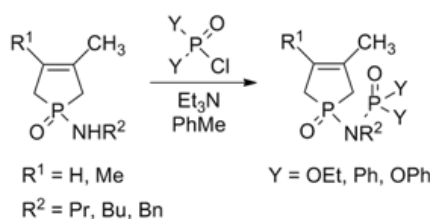
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:**Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK***Primer aminok kétszeres foszforilezésének vizsgálata***Kulcsszavak: P-heterociklusok; 1-alkilamino-3-foszfolén-1-oxidok; "foszfimidek"; NMR-spektroszkópia; finomhangolás*

Kutatócsoportunkban korábban már foglalkoztak primer aminok egyszeres, illetve kétszeres foszforilezésével. Foszfinsav-kloridokat primer aminokkal reagáltatva a reagensek molarányától és adagolási sorrendjétől függően mono- és biszfoszfolén-amidokat állítottak elő.



Ebbe a munkába bekapcsolódva célul tűztük ki különféle származékok, így egyszeresen, illetve kétszeresen foszforilezett amidok, illetve imid-típusú vegyületek szintézisét. Munkám során kétlépéses eljárást dolgoztunk ki primer aminok foszforilezésére, melynek során először a mono-amidot állítottuk elő, amit aztán különféle savkloridokkal reagáltattunk. Ennek következtében lehetőség nyílt vegyes származékok előállítására.



Különböző mono-amidokat foszfinsav-kloridokkal foszforilezve tíz új, az irodalomban eddig nem ismert vegyes származékot állítottunk elő, melyeket ^{31}P , ^{13}C és ^1H NMR ill. HR-MS módszerekkel jellemeztünk. A második acilezési lépést karbonsav-kloridokkal is megkíséreltük végrehajtani.

Eddigi munkából két nemzetközi folyóirattal készült [1, 2].

[1] Kiss, N. Z.; Rádai, Z.; Mucsi, Z.; Keglevich, G. *Heteroatom Chem*, 2014, nyomdában

[2] Kiss, N. Z.; Mucsi, Z.; Rádai, Z.; Böttger, É. V.; Keglevich, G. *Phosphorus, Sulfur, Silicon*, 2014, nyomdában

MIHÁLYDEÁKPÁL ZSOLT Korszerű Folyamatmérnöki BSc, 8. félév Bábes-Bólyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Gál Emese
egyetemi tanársegéd, BBTE*

Új porfirinszármazékok előállítása

Kulcsszavak: porfirin, fotodinamikus terápia, Adler-Longo reakció, szerkezetvizsgálat

A porfirinek szerkezetileg olyan makrociklusok, amelyek négy metin-híddal összekapcsolt pirolgyűrűből állnak. Megtalálhatók az élő szervezetekben, ahol fémkomplexeik fontos szerepet töltenek be: az oxigén szállításában, az elektronok átadásban, a fotoszintézis folyamatában, ugyanakkor oxidációs reakciók katalizátorai.

Egyik jelentős tulajdonságuk az, hogy fémkomplexeik katalizálják a dioxigén bontását fény hatására. E tulajdonság alkalmazására lett a rák gyógyítására használt fotodinamikus terápiában (PDT), ahol a lokalizált rákos sejteket fotoszenzibilizátorok segítségével lehet elpusztítani.

Kutatásaim során különböző, AB3 illetve transz-A2B2 típusú porfirin származékokat állítottam elő Adler-Longo módszerrel; pirol, para-szubsztituált benzaldehid valamint formil-fenotiazin származékok savas közegben történő reakciójával. Az így kapott új porfirineket NMR, MS, IR és UV-VIS módszerekkel vizsgáltam. Ezek a makrociklusok fizikai tulajdonságaik alapján hatékonyak lehetnek a PDT-ban.

Szerves kémia 2

KOVÁCS DÁNIEL Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Molnár-Tóth Judit

kutató, Servier Gyógyászati Vegytani Kutatóintézet

Dr. Mucsi Zoltán

vezető kutató, Servier Gyógyászati Vegytani Kutatóintézet

2-Heteroaril-benzaldehydekből képezhető azometin-ilidek 1,7-elektrociklizációs reakciói

Kulcsszavak: 2-Heteroaril-benzaldehyde; azometin-ilidek; 1,7-elektrociklizáció; benzazepin származékok, kvantumkémiiai számítások

TDK munkám során – melyet a Servier Gyógyszerkutató Intézetben készítettem el – újszerű kinolin, izokinolin és naftalinváz heterociklusok szintézisét valósítottam meg 1,7-elektrociklizációs reakciók segítségével. Az 1,7-elektrociklizációs gyűrűzárások, melyek gyakran szelektív és hatékony utat kínálnak héttagú gyűrűs rendszerek előállítására, kiváló szintetikus potenciállal rendelkeznek a gyógyászati szempontból fontos célpontot jelentő benzazepinek szintézisében.

Az Intézetben korábban már vizsgálták az indolváz elektrociklizációs reakcióit. Az indolil-benzaldehyde és N-szubsztituált- α -aminosavak reakciója során 1,7-elektrociklizációs reakció mellett 1,5-elektrociklizációval képződő termék képződését is megfigyeltek. E munka folytatásaként érdekesnek bizonyult ugyanezen reakciót megvizsgálni kinolin, izokinolin és naftalinvázak esetében is. Feladatom a Suzuki-reakcióval előállítható kinolil-, izokinolil- és naftilbenzaldehydekből N-szubsztituált- α -aminosavakkal dekarboxilatív kondenzáció útján in situ keletkező $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ -telítetlen, N-szubsztituált, nem stabilizált azometin-ilidek 1,7-elektrociklizációs gyűrűzárásainak vizsgálata és az egyes aldehidek elektrociklizációs reakcióban mutatott reaktivitásának feltérképezése volt.

Kutatómunkám eredményeként számos új, az irodalomban eddig le nem írt anellált benzazepin származékot állítottam elő. Meghatároztam a kinolin, izokinolin és naftalinvázak 1,7-elektrociklizációs reakcióban mutatott aktív pozícióit, melyeket kvantumkémiiai számításokkal alá is támasztottam.

KUNFI ATTILA vegyész MSc, 3. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Bucsi Imre
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Berkesi Ottó
egyetemi docens, SZTE TTIK

A Beckmann-átrendeződés optimalizálása és mechanizmusának felderítése

Kulcsszavak: benzofenon-oxim; propiofenon-oxim; ionos folyadékok; Deloxan; rezgési spektroszkópiák

A szerves vegyipar érdeklődése az új, környezetbarát katalizátorok és technológiák iránt folyamatosan növekszik, azonban jelenleg is találhatunk olyan nagyipari eljárásokat, melyek nem felelnek meg a fenntartható fejlődés normatíváinak. Ilyen a Beckmann-átrendeződés, mely a Nylon-6 elnevezésű poliamid szintézisének fő lépése. A folyamatban ciklohexanon-oximból kaprolaktám keletkezik, katalizátorként tömény kénsavat használnak. Évente több millió tonna Nylon-6-ot állítanak elő, az eljárásban viszont rendkívül nagy mennyiségű kénsav fogy, és kaprolaktám tonnánként 4 – 5 tonna melléktermék keletkezik.

Munkánk során a Beckmann-átrendeződés optimalizálásához vizsgáltuk a vele kompetitív deoximációt is. Kísérleteinkben modell vegyületként benzofenon-oximot használtunk, katalizátorként heteropolisavakat (PW, SiW, PMo, SiMo), hagyományos Lewis-savakat (AlBr₃, AlCl₃, FeCl₃), fém-triflátokat (In-, Eu-triflát), montmorillonitokat (K10, KSF), valamint savas műgyantákat (Nafion-H, Dowex, Deloxan, Amberlyst) is alkalmaztunk hagyományos oldószerekben, illetve ionos folyadékokban. Kísérleteket végeztünk mikrohullámú aktiválás mellett is.

Eredményeink alapján az első generációs ionos folyadékokat túlságosan érzékeny, drága közegnek találtuk. A heteropolisavak ígéretes katalizátoroknak bizonyultak, de a legjobb eredményeket savas műgyantákkal érték el. Nagyfokú aktivitást és szelektivitást mutatott a Beckmann-átrendeződésben a Deloxan szulfonsavas műgyanta klórbenzolban és toluolban, valamint deoximáció esetén a Dowex gyanta diglimben és celloszolvbán. A Deloxannal klórbenzolban hagyományos melegítéssel teljes konverzió és szelektivitás érhető el az amidképződés irányában, míg mikrohullámú aktiválás mellett a ketonképződés mutat hasonlóan kimagasló értékeket.

Regisztráltuk az előállított oximok és amidok IR és Raman spektrumait. A Gaussian 09 program segítségével, TPSSh sűrűségfüggvény-módszerrel, megkerestük a propiofenon-oxim, az N-fenil-propánamid, és az N-etil-benzamid stabilabb konformereit, valamint előállítottuk számított spektrumaikat. A propiofenon-oxim esetén bizonyítottuk, hogy a Beckmann-átrendeződés regioszelektíven, az oximcsoporttal anti helyzetű szubsztituens vándorlásával valósul meg, és ezek alapján értelmeztük az átrendeződés mechanizmusát.

PÁLHÁZI BALÁZS biomérnök BSc, 5. félév Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	
--	--

*Témavezető:
Dr. Mernyák Erzsébet
Tudományos munkatárs, SZTE TTIK*

Antitumor hatású ösztron-heterodimerek szintézise

Kulcsszavak: antiproliferatív; konjugáció; triazol-gyűrű; szeko-alkin; azidoalkohol

A szelektív hatású tumorellenes szerek kifejlesztése napjaink gyógyszerkutatásának egyik legfontosabb területe. A biológiailag aktív, természetes eredetű vegyületek konjugátumai gyakran jelentős antiproliferatív hatással rendelkeznek [1], így egyes szteroid dimerek is [2]. Munkánk célja olyan 13 α -ösztron heterodimerek szintézise volt, amelyek bioaktív monomerekből épülnek fel, és feltehetően aktívabbak monomereiknél.

[1] Tietze, L.F., Bell, H.P., Chandrasekhar, S., Natural product hybrids as new leads for drug discovery, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 42, 3996–4028 (2003).

[2] Jurasek, M., Dzubak, P., Sedlak, D., Dvorakova, H., Hajduch, M., Bartunek, P., Drasar, P., Preparation, preliminary screening of new types of steroid conjugates and their activities on steroid receptors, *Steroids*, 78, 356–361 (2013).

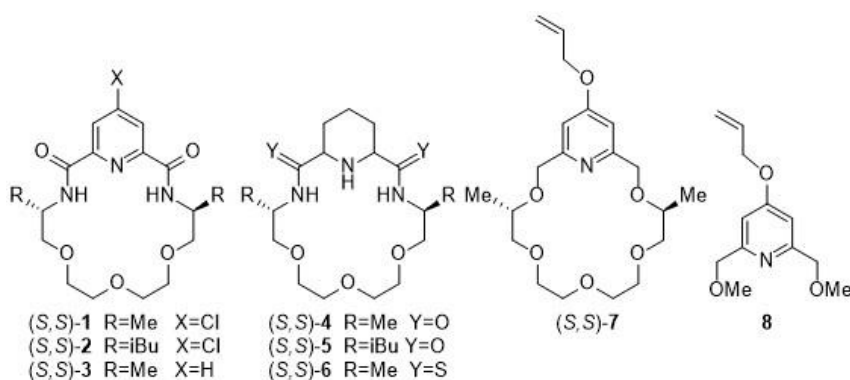
ROJIK ESZTER Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 1. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Huszthy Péter
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Kupai József
MTA posztdoktor, BME VBK

Enantiomertiszta piridino-, illetve piperidino-18-korona-6-éterek szintézise és alkalmazása

Kulcsszavak: organokatalízis; molekuláris lenyomatú polimerek; enantiomer-felismerés; aszimmetrikus szintézisek; szabályozott hatóanyag-leadás

Tudományos diákköri munkám során a kereskedelemből könnyen beszerezhető és viszonylag olcsó alapanyagokból kiindulva olyan piridinszármazékokat szintetizáltam, melyeket a megfelelő királis diaminoval reagáltatva optikailag aktív piridino-18-korona-6-éter típusú makrociklusokat [(S,S)-1–(S,S)-3] nyertem (1. ábra). Ezeket a makrociklusokat piperidino-koronaéter-származékokká [(S,S)-4–(S,S)-6] alakítottam, melyek aszimmetrikus Michael-reakciókban organokatalizátorként alkalmazhatók. A piridingyűrű négyes helyzetében lévő klóratomnak, illetve a kiralitáscentrumokon lévő alkilcsoportoknak az enantioszelektivitásra gyakorolt hatását fogom tanulmányozni. További munkám során enantiomertiszta 4-alliloxipiridino-18-korona-6-éter [(S,S)-7], illetve 2,6-bisz(metoximetil)piridin-származék (8) szintézisét valósítottam meg, melyeket terminális kettős kötésüknek köszönhetően molekuláris lenyomatú polimerek monomerjeként tudtam felhasználni (1. ábra).



1. ábra

A dolgozat megírását az OTKA (nyilvántartási szám: PD-108462, K-81127) anyagi támogatása tette lehetővé.

HERBAY RÉKA Vegyésmérnök BSc, 7. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK*

Foszfolén-oxidok deoxigénezése foszfónium-só intermedieren keresztül

Kulcsszavak: foszfin-oxid, P-heterociklus, redukció, foszfin-borán-komplex, katalizátor prekursor

A szerves foszforvegyületek közül a foszfinok kiemelt jelentőségűek. Elég csak arra gondolni, hogy a foszfinok átmenetifém-komplexeit elerjedten alkalmazzák katalizátorként számos szerves kémiai reakcióban.

A foszfinok előállításának egyik legelterjedtebb módszere a megfelelő foszfin-oxidok deoxigénezése, amelyet általában szilánokkal végeznek. A szilánok azonban nem tesznek minden szempontból eleget a zöldkémiai követelményeknek, így manapság egyre inkább előtérbe került a deoxigénezési reakciók kutatása, kiterjesztése.

A TDK munkám során 3-foszfolén-oxidok deoxigénezését és borán komplex képzését valósítottuk meg szilánok alkalmazása nélkül. A reakció során a 3-foszfolén-oxidokat reagáltattuk oxalilkloriddal. Az így előállított foszfónium-sókat, amit lítium-borohidriddel redukáltuk és alakítottuk a megfelelő foszfolén-borán komplexszé.

DEMETER FRUzsina Vegyész MSc, 1. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Borbás Anikó

tanszékvezető egyetemi docens, DE GYTK

Dr. Herczeg Mihály

tudományos munkatárs, DE GYTK

Kemoszelektív gyűrűnyitási reakciók vizsgálata kétféle dioxán acetált tartalmazó glikozidokon

Kulcsszavak: kemoselektív; gyűrűnyitás; acetál; redukció

A sejtfelszíni oligoszacharidok kulcsszerepet játszanak különböző biológiai folyamatokban. Ezek tanulmányozására nagy tisztaságú, és pontosan ismert szerkezetű oligoszacharidok szükségesek, melyek csak szintetikus úton állíthatók elő megfelelő mennyiségben és tisztaságban. A monoszacharidok nagyon hasonló reaktivitású hidroxilcsoportjai miatt az oligoszacharidok szintézise csak úgy lehet sikeres, ha gondosan megtervezett védőcsoport-stratégiát alkalmazunk. Ezért a szintetikus oligoszacharid-kémia állandóan igényli új védőcsoportok bevezetését, és a már meglévő védőcsoportok teljesítőképességének és korlátainak tanulmányozását. Kutatómunkám során célul tűztük ki hexopiranozidokon 4,6-O-acetálok redukatív gyűrűnyitásának tanulmányozását 2,3-O-butándiacetál védőcsoport jelenlétében. Külön-külön mindkét védőcsoportot elterjedten használják a szénhidrátkémiában, azonban együttes alkalmazásukat és szelektív átalakításukat eddig nem tanulmányozták. Első lépésben 1,4-dioxán típusú butándiacetál gyűrűt képeztünk a metil- és feniltio-aglikonokat tartalmazó glüko- és galaktopiranozidokon, majd az 1,3-dioxán-típusú arilmetilén-acetált alakítottuk ki. Megállapítottuk, hogy a 4,6-acetálképzés hozamára hatással van az arilmetilén-védőcsoport típusa, a hozamok a következő sorrendben csökkentek: naftilmetilén-acetál > benzilidén-acetál > p-metoxi-benzilidén-acetál. A teljesen védett monoszacharidokon a 4,6-acetálok redukatív gyűrűnyitását különböző hidrid-donor / Lewis-sav reagens-kombinációval végeztük el. A LiAlH_4 / AlCl_3 és a $\text{Me}_3\text{N} \cdot \text{BH}_3$ / AlCl_3 reagensekkel végzett gyűrűnyitások teljes kemoselektivitással mentek végbe. A LiAlH_4 -es reakciók 100 %-os regioszelektivitással adták a 4-O-éter származékokat. A $\text{Me}_3\text{N} \cdot \text{BH}_3$ -os redukció esetén főtermékként 6-O-éterek képződtek, de a regioszelektivitás mértéke függött a 4,6-acetál típusától. Sem a két acetál védőcsoport kialakítására, sem a gyűrűnyitási reakciókra nem volt hatással az anomer-konfiguráció. A 4,6-arilmetilén-acetálok redukcióját Et_3SiH / $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ reagenssel is megkíséreltük, ekkor azonban a 2,3-butándiacetál is redukciót szenvedett, így ez a reagens-kombináció nem alkalmas a 4,6-O-acetálok kemoselektív nyitására butándiacetál jelenlétében. Az általunk kifejlesztett módszerrel egyszerűen állíthatók elő stabil védőcsoporttal rendelkező, ugyanakkor változatosan továbbalakítható monoszacharidok, melyek felhasználhatók oligoszacharid szintézisekben glikozil donorként és akceptorként egyaránt.

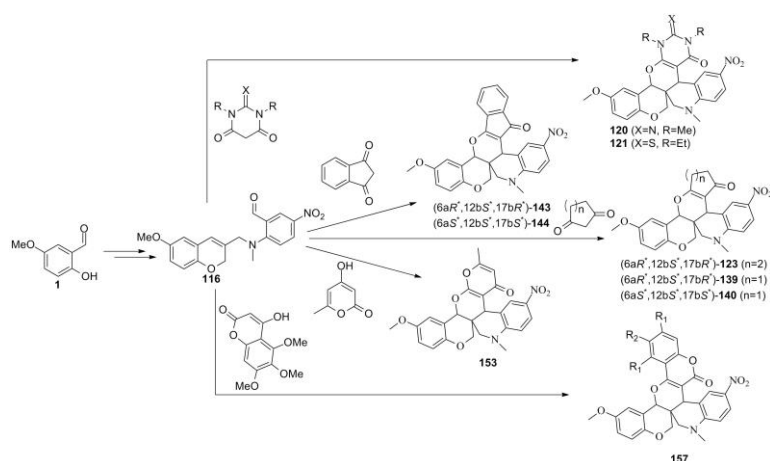
KIRÁLY SÁNDOR BALÁZS Vegyész MSc, 3. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
--	--

Témavezető:
Dr. Kurtán Tibor
egyetemi docens, DE TTK

Knoevenagel-hetero-Diels-Alder reakciók kondenzált heterociklusok előállítására

Kulcsszavak: domino reakció; hetero Diel-Alder; O,N-heterociklusok

Tudományos diákköri munkám célkitűzése kromán és tetrahidrokinolin egységet tartalmazó kondenzált hexa- és heptaciklusok előállítása volt domino reakcióban.



Ennek során az alábbi eredményeket értem el:

1. 5-Metoxisalicilaldehidből kiindulva 3 lépésben 50%-os összhozammal állítottam elő az akirális (2H)-kromén származékot, ami kiindulási anyagul használtam Knoevenagel-hetero Diels-Alder domino reakciókhoz 1,3-dikarbonil származékokkal.
2. Gyűrűs 1,3-dikarbonil származékokkal reagáltatva a 116 származékot 11 új gyűrűrendszert tartalmazó kondenzált O,N heterociklust állítottam elő Knoevenagel-hetero Diels-Alder domino reakciókban.
3. A hetero Diels-Alder reakció diasztereoselektivitását NMR mérésekkel (NOESY és teljes jelhozzárendelés 2D-NMR technikákkal), királis HPLC, HPLC-ECD vizsgálatokkal és TDDFT-ECD számolással vizsgáltam, ami lehetővé tette a diasztereomer relatív konfigurációjának és az elválasztott enantiomerek abszolút konfigurációjának meghatározását.
4. A cikloaddíciós lépésben 3 új kiralitáscentrum jön létre diasztereoselektíven. 7 kovalens amin típusú és 4 nem kovalens TADDOL típusú királis nem racém organokatalizátort vizsgáltunk enantioszelektív organokatalitikus reakciókban. Számottevő enantioszelektivitást nem sikerült elérni, de L-prolinnal a diasztereoselektivitás megváltozott.
5. Colorectalis adenocarcinoma humán sejtvonalon vizsgáltuk az előállított vegyületek sejtosztódást gátló hatását, és a 123 származék 10 μM körüli IC_{50} értéket mutatott az előzetes vizsgálatok alapján.

BOTYÁNSZKI ADRIENN Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Bakó Péter
egyetemi magántanár, BME VBK
Dr. Rapi Zsolt
tudományos munkatárs, BME VBK

Monoszacharid alapú királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként

Kulcsszavak: királis; koronaéter; enantioszelektív; fázistranszfer; monoszacharid

A szénhidrátokból felépülő királis koronaéterek képesek aszimmetrikus indukciót kiváltani bizonyos fázistranszfer reakciókban, ahol egy fém kation is szerepet játszik a reakció mechanizmusában. Kísérleteim célja volt α -D-glükopiranozidból és α -D-galaktopiranozidból felépülő királis koronaéterek szintézise (több lépéses reakciók), melyek a gyűrű nitrogénatomján különböző szubsztituenseket tartalmaznak (lariát éterek). Részletesen foglalkoztam azon glükóz alapú királis lariát éter szintézisével, mely „oldal-karja” piridin végcsoportot tartalmaz. A szintetizált makrociklusokat királis fázistranszfer katalizátorként alkalmaztam folyadék-folyadék, szilárd-folyadék kétfázisú aszimmetrikus reakciókban, mint például Darzens-kondenzációkban, Michael-addíciókban, epoxidációkban, stb és vizsgáltam az enantioszelektivitás mértékét. Különösen jó eredményeket értem el a 2-klór-1-indanon szubsztituált benzaldehidekkel illetve más aromás aldehidekkel történő Darzens-kondenzációjában egy glükóz-alapú koronaéter jelenlétében (85 ee%). Az enantiomer felesleget optikai forgatással, NMR-spektroszkópiával határoztuk meg. Az eredmények értékelésével szerkezet-hatás összefüggéseket próbáltam megállapítani a cukor-alapú koronaéterek vonatkozásában.

DEMETER TAMÁS ISTVÁN gyógyszerész Osztatlan, 11. félév Debreceni Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Borbás Anikó

tanszékegyetemi docens, DE GYTK

Dr. Csávás Magdolna

egyetemi tanársegéd, DE GYTK

Multivalens, önszerveződő mannobiozidok szintézise

Kulcsszavak: HIV; Ferrier átrendezés; Tio-click, Azid-alkin cikloaddíció

Az AIDS betegség elleni küzdelem során az elmúlt évtizedek kutatásainak köszönhetően felderítették a HIV vírus működési mechanizmusát. A vírus felületén található gp-120 glikoprotein multivalens oligomannozid struktúrája felelős a vírus és gazdasejt közötti kötődés kialakulásáért. Transzinfekciót megakadályozó terápia vezérvegyületének és HIV-ellenes vakcinafejlesztés kiindulási szerkezetének tekinthetőek olyan oligomannozid struktúrák, melyek a kívánt α -(1-2) interglikozidos kötésű mannozid egységeket tartalmazzák. Célunk HIV-ellenes, multivalens szénhidrátligandumok előállítása volt, amelyek vezérmolekulaként szolgálhatnak HIV-fertőzést megakadályozó gyógyszer kifejlesztésére. E célból olyan amfifil glikokonjugátumok előállítását terveztük, melyekben az aktív szénhidrát rész egy hídmolekulán keresztül kovalensen kapcsolódik hexadekanol illetve fullerén-pirrolidin származékokhoz. Ez olyan önszerveződésre képes szerkezetet eredményez, mely multivalens hatás kialakítását teszi lehetővé. A hidrofíl és lipofil molekulák összekapcsolását azid-alkin click reakcióval terveztük. Az azid-csoportot a szénhidráthoz kötött hídmolekulán, az alkin partnerként szolgáló propargil-csoportot pedig a hexadekanolon, illetve a funkcionáliszt fullerén származékokon kívántuk kialakítani. Bioaktív részként az enzimatisz hidrolízisnek ellenálló, tio-kötésű mannobiozid szintézisét terveztük tio-click reakció felhasználásával. A szintézis során tri-O-acetil-D-glükálon Ferrier átrendezeit vittünk végbe tozil csoporttal ellátott tetraetilén-glikol (TEG) származékkal. Ezzel párhuzamosan D-mannózból 1-tiomannóz peracetát származékot állítottunk elő. A továbbiakban a diszacharid-képzés fotokatalizált gyökös mechanizmusú, úgynevezett tiol-én addícióval történt. Az önszerveződésre képes amfifil molekulák előállításához azid-funkcióval láttuk el a bioaktív, poláris cukoregységeket és propargil-csoporttal funkcionáliszt hexadekanolt és fullerén származékot állítottunk elő. A bioaktív szénhidrát rész és a lipofil egységek összekapcsolása következett azid-alkin click reakcióval. Elsőként a hexadecil-cukor konjugátumot állítottuk elő, majd pedig a fullerén származékot. Az előállított glikokonjugátumok aggregációját dinamikus fényszórás fotometriával határoztuk meg. A vizsgálat szerint származékaink HIV-méretű, kb. 100 nm átmérőjű aggregátumokat képeznek vizes közegben. Folyamatban van a vegyületek mannóz-kötő bakteriális lektinekhez történő kötődésének vizsgálata is.

ZSOLNAI DÁNIEL

Kémia

BSc, 8. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

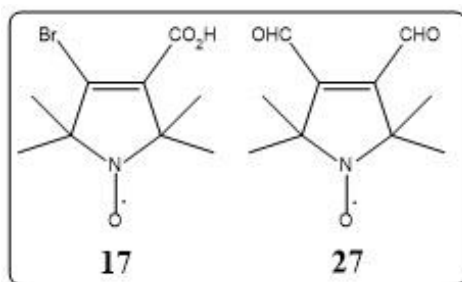
*Témavezető:
Dr. Kálai Tamás
egyetemi tanár, PTE ÁOK*

Paramágneses policiklusos vegyületek szintézise

Kulcsszavak: szénciklus; heterociklus; nitroxid; szabad gyök; szelén

A Pécsi Tudományegyetem Általános Orvostudományi Karának Szerves és Gyógyszerkémiai Intézetében már az 1970-es évek óta foglalkoznak stabilis szabad gyököt tartalmazó vegyületek szintézisével és vizsgálatával. A stabilis nitroxid szabad gyököket először a biofizikai kutatásokban (EPR spektroszkópia), mint spinjelölő molekulákat alkalmazták. Manapság már széles körben használják egyéb területeken, mint például új antioxidáns vegyületek szintézisére, polimerizációs inhibitorokként, ferromágneses anyagok építőköveiként, illetve a szerves kémiai szintézisekben. A nitroxidok ko-oxidánsként, valamint az analitikai kémiában spincsapdaként, illetve redox indikátorként történő alkalmazása is elterjedőben van. Az elmúlt évtizedekben egyre nagyobb érdeklődés mutatkozott a heterociklusokhoz kapcsolt, illetve kondenzált stabilis nitroxid szabadgyökös vegyületek szintézise és alkalmazása iránt. Az ÁOK Szerves és Gyógyszerkémiai intézetében is számos közlemény, szakdolgozat, PhD értekezés látott napvilágot e témában.

Munkám célja olyan új szintézismódszerek keresése volt, amellyel a nitroxidokkal kondenzált heterociklusok és karbociklusok körét tovább bővíthetjük. Ennek célja részben a nitroxid funkciós csoport jelenlétében abszolválható további reakciók, eljárások keresése, részben pedig új spinjelölő és antioxidáns vegyületek szintéziséhez használható építőkövek előállítása volt. Tudományos diákköri hallgatóként, az öt- és hattagú tetrahidropirano[3,4-c]pirrol, pirrolo[3,4-d][1,2]szelenazol és a már ismert izoindolin vázat tartalmazó stabilis szabadgyökös vegyületek szintézise volt a feladatom. Ezen feladatok megvalósításához ebben az esetben a 17 karbonsav, és a 27 dialdehid voltak az elsődleges kiindulási anyagaim.



CSÁSZÁR ZSÓFIA Vegyész MSc, 3. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Bakos József

Professor Emeritus, PE MK

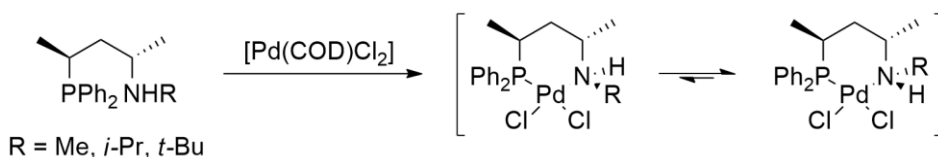
Dr. Farkas Gergely

tudományos segédmunkatárs, PE MK

Sztereogén nitrogénatommal rendelkező foszfin-amin ligandumok koordinációs és katalitikus tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: *P,N-ligandumok; pentán-2,4-diil váz; sztereoszelektív koordináció; aszimmetrikus katalízis; palládium-katalizált allil-helyzetű szubsztitúció*

Az átmenetifém-katalizált aszimmetrikus szintézisek körében előtérbe került a királis, kelátképző heterodonor ligandumok alkalmazása. Ezen vegyületek között különleges helyet foglalnak el a foszfin-amin (P,N) típusú katalizátor-módosító ligandumok egyedülálló sztereo-elektronikus tulajdonságuknak köszönhetően. Általánosan elfogadott az, hogy az átmenetifém-komplex által nyújtott enantioszelektivitás növelhető, ha az optikailag tiszta ligandum sztereogén donoratommal rendelkezik.



Munkám során sztereogén nitrogénatommal rendelkező, királis foszfin-amin típusú ligandumokat állítottam elő.¹ Tanulmányoztam a ligandumok koordinációs tulajdonságait röntgendiffrakciós, spektroszkópiai és kvantumkémiai módszerekkel, továbbá vizsgáltam a vegyületeket Pd-katalizált aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban.

A vizsgálatok során bizonyítottam, hogy a koordináció során a nitrogénatom sztereoszelektíven kapcsolódik a központi atomhoz. A koordináció sztereoszelektivitása jelentős mértékben függ a nitrogénhez kapcsolódó szubsztituens minőségétől: az *i*-Pr- és *t*-Bu-csoportot tartalmazó ligandum teljes sztereoszelektivitással koordinálódik, a nagy térkitöltésű N-szubsztituenseket axiális pozícióba kényszerítve a hattagú kelátgyűrűben. A ligandumokkal módosított katalizátor-komplexek segítségével kiváló aktivitást és enantioszelektivitást (96% ee) értem el, mely feltehetően a sztereoszelektív komplexképződés következménye.

¹(a) Farkas, G.; Császár, Zs.; Balogh, Sz.; Tóth, I.; Bakos, J. *Tetrahedron Lett.* 2014, 55, 4120-4122.
 (b) Balogh, Sz.; Farkas, G.; Madarász, J.; Szöllősy, Á.; Kovács, J.; Darvas, F.; Üрге, L.; Bakos, J. *Green Chem.* 2012, 14, 1146-1151.

Szerves kémia 3

CSERESNYÉS DÓRA vegyéssz mérnök BSc, 8. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezető:
Dr. Kónya Krisztina
egyetemi adjunktus, DE TTK

5-Hidroxi-6-jód-7-metoxiflavon Sonogashira-reakciói

Kulcsszavak: Sonogashira-reakció; keresztkapcsolás; 5-hidroxi-6-jód-7-metoxiflavon; gyűrűzáródás; terminális alkin

Munkám célja az 5-hidroxi-6-jód-7-metoxiflavon Sonogashira-reakcióinak vizsgálata volt. Sikerült előállítanunk az 5-hidroxi-6-jód-7-metoxiflavon keresztkapcsolt vegyületeit a következő terminális alkinekkel: etinil-trimetilszilán, fenilacetilén, 4-terc-butilfenilacetilén, 3-fenilprop-1-in és 2-metilbut-3-in-2-ol.

Az etinil-trimetilszilánnal elvégzett reakciók során a következő körülményt dolgoztunk ki: 3,5 ekvivalens alkin, 10 mol % $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$, 10 mol % CuI, trietil-amin bázis, reflux hőmérséklet és 6 óra. A $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ és PPh_3 katalizátorok együttes alkalmazásával végzett reakcióban ennél lényegesen alacsonyabb hozamot tudtunk elérni.

A fenilacetilénnel történő kapcsolásoknál kedvező körülménynek a 2 ekvivalens alkin, 15 mol % $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$, 20 mol % CuI, trietil-amin, reflux hőmérséklet és 3 órás reakcióidő bizonyult. Az etinil-trimetilszilánnal alkalmazott körülmények alacsonyabb hozamokat eredményeztek. A reakciók során intramolekuláris gyűrűzáródást és Glaser-termék keletkezését figyeltünk meg.

A 4-terc-butilfenilacetilénnel végzett kapcsolási reakciók körülményei megegyeznek az előbb említettekkel, viszont itt már elég volt 2 óra a reakció lejátszódásához. Ebben az esetben is a gyűrűzárt terméket és a Glaser-terméket is izoláltuk.

3-Fenilprop-1-in reakciójában az etinil-trimetilszilánnal megegyező körülmények (3,5 ekvivalens alkin, 10 mol % $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2$, 10 mol % CuI, trietil-amin bázis, reflux hőmérséklet) és 5 óra volt szükséges az átalakuláshoz. Itt is a gyűrűzárt terméket és Glaser-terméket szintetizáltunk.

Az 5-hidroxi-6-jód-7-metoxiflavon és a 3-metil-but-2-in-2-ol kapcsolásakor a korábbi módszerek mindegyikével csak alacsony hozamokat értünk el és a korábbi reakciókkal összehangban a furo[2,3-f]kromenon gyűrűzárt származékot kaptuk.

JORDÁN SÁNDOR kémia BSc, 5. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

*Témavezető:
Dr. Patonay Tamás
tanszékvezető egyetemi tanár, DE TTK*

6,7-dibrómflavon előállítása, Suzuki- és Heck-reakciói

Kulcsszavak: keresztkapcsolás; palládium katalízis; regioszelektivitás; alkenilezés; arilezés

Kutatómunkám célja a 6,7-dibrómflavon (1) előállítása és Suzuki-, illetve Heck-reakcióinak tanulmányozása volt. Munkám során egyszerű, jó hozamú szintézist dolgoztam ki a 6,7-dibrómflavon előállítására. Kutatásom során vizsgáltam a 6,7-dibrómflavon keresztkapcsolási reakcióit is, melyeket korábban ezen a szubsztráton még nem vizsgáltak és így huszonöt új, kapcsolt terméket állítottam elő. Az elért eredményekkel egyértelmű igazolást nyert a flavon 7-es helyzetének kiemelt reaktivitása a 6-os helyzettel szemben.

A 6,7-dibrómflavon Suzuki-reakciói esetében kidolgoztam egy módszert, mellyel közepes-jó hozammal szintetizálhatók, regioszelektíven 7-es helyzetben kapcsolt egyetlen aril egységet tartalmazó termékek. Különböző arilboronsavakkal kapcsolva számos, bisz-terméket állítottam elő és kidolgoztam egy módszert, mellyel „egy üst”-módszerrel, közepes-jó hozammal állíthatók elő 6-os és 7-es helyzetben különböző aromás csoportokkal szubsztituált termékek.

A 6,7-dibrómflavon Heck-reakcióinak tanulmányozása során megkezdtem a regioszelektív, 7-es helyzetre történő kapcsolások és a bisz-termékek előállítására szolgáló körülmények optimalását és három új vegyületet is előállítottam a 6,7-dibrómflavon Heck-reakcióival. Kimutattam, hogy Suzuki- és Heck-reakció egymás utáni alkalmazásával 7-es helyzetben arilezett, 6-os helyzetben alkenilezett termék állítható elő.

URBÁN BÉLA vegyész MSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
Skodáné Dr. Földes Rita
egyetemi tanár, PE MK

Atmoszférikus nyomáson lejátszódó aminokarbonilezési reakciók rögzített palládium katalizátor jelenlétében

Kulcsszavak: palládium; heterogén katalizátor; atmoszférikus nyomás, aminokarbonilezés

A palládium katalizált karbonilezési és kapcsolási reakciók széles körben elterjedtek, mivel szelektívek és enyhe reakciókörülmények között is lejátszódnak. A reakciók homogén és heterogén fázisban egyaránt kivitelezhetők.

A homogén fázisban történő katalízis hátránya, hogy a reakcióelegytől a katalizátor nehezen választható el és a katalizátor többszöri felhasználására sincs lehetőség. Erre megoldást jelenthet, ha a katalizátort valamilyen szilárd hordozó felületéhez rögzítik. Egy lehetséges eljárás a SILP (supported ionic liquid phase) technika, ahol a katalizátort a hordozó felületére vitt ionfolyadék stabilizálja.

Tudományos diákköri munkám során feladatom atmoszférikus nyomáson történő aminokarbonilezési reakciók vizsgálata volt, SILP technikával készült palládium-tartalmú katalizátorral.

Tanulmányoztam az ionfolyadék rögzítésének körülményeit, az oldószerek és a hőmérséklet befolyásoló szerepét a megkötődésre. A 3-klórpropil-trietoxiszilán és az 1-metil-imidazol megkötődését szilárd fázisú NMR vizsgálattal ellenőriztem.

A katalizátorokat kezdetben jódbenzol és anilin modellreakciójával vizsgáltam. A kísérletek elvégzése után kiválasztottam a legjobb katalizátort és az optimális reakciókörülményeket. Ezután bizonyítottam, hogy a katalizátor egyéb aril-jodidok, illetve anilinszármazékok karbonilezési reakcióiban is alkalmazható. A katalizátor palládium-tartalmát, és a reakció során történő palládium lemosódását ICP-AES módszerrel állapítottam meg.

A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program” (az Európai Unió és Magyarország támogatásával) és a TÁMOP-4.2.3-12/1/KONV-2012-0026 azonosító számú projektkeretében (a Magyar Állam és az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával) valósult meg.

MIHÁLY RÉKA Kémia szak BA, 6. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Lovász Tamás
 adjunktus, BBTE

Betti-bázisok előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: aminonaftol; racém elegy; rezolválás; foszfinezés; katalizátor

A múlt század elején írta le Mario Betti olasz vegyész az első aminonaftol szintézisét. A Betti által előállított 1-(α -aminobenzil)- β -naftolhoz hasonló vegyületeket felfedezőjük tiszteletére Betti-bázisoknak nevezték el. [1,2]

A Betti bázisok olyan aminonaftolok melyek egy elektron-gazdag aromás vegyületből pl. az α - vagy β -naftolból, egy aromás aldehidből és egy amin-komponensből: ammóniából vagy valamilyen amin származékából keletkeznek.

A királis aminonaftolok fémkomplexei sztereospecifikus reakciókban hatékony katalizátorok. Alkalmazták Suzuki-[3], Mizoroki-Heck reakciókban [4], illetve királis ligandumként is a dietil-cink és aldehidek enantioszelektív addíciós reakcióiban [5,6].

Kutatásaim során különböző Betti-bázisok előállítását vizsgáltam. A reakciókat β -naftol felhasználásával végeztem, karbonil-komponensként benzaldehidet vagy 10-metil-10H-fenotiazin-3-karbaldehidet, míg amin-komponensként különböző aminokat használtam: dimetil-amin, dietil-amin, diizopropil-amin, piperidin, 2-amino-piridin, 2-amino-3,5-difenil-pirimidin. Kipróbáltam az előállított királis aminonaftol származékok racém elegyeinek rezolválását L(+)-borkósav alkalmazásával, illetve a naftol részlet hidroxil csoportjának difenilfoszfin csoportra cserélését $\text{NiCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ katalizátor felhasználásával.

Irodalom:

1. M. Betti, Org. Synt. 1, 1941, 381-383
2. C. Cardellicchio, M. Annunziata, M. Capozzi, Tetrahedron: Asymm., 2010, 21, 507-517
3. A. R. Chaudhary, A. V. Bedekar, App. Org. Chem., 2012, 26, 430-437
4. R. Anju, V. Ashutosh, Synth. Com., 2012, 42, 1778-1785
5. J. Lu, X. Xu, C. Wang, J. He, Tetrahedron Lett., 2002, 43, 8367-8369
6. N. Hosoda, H. Ito, T. Takimoto, M. Asami, Bull. Chem. Soc. Jpn., 2012, 85, 1014-1022

NEMES EVELIN vegyésmérnök BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Farkas Gergely

tudományos segédmunkatárs, PE MK

Dr. Bakos József

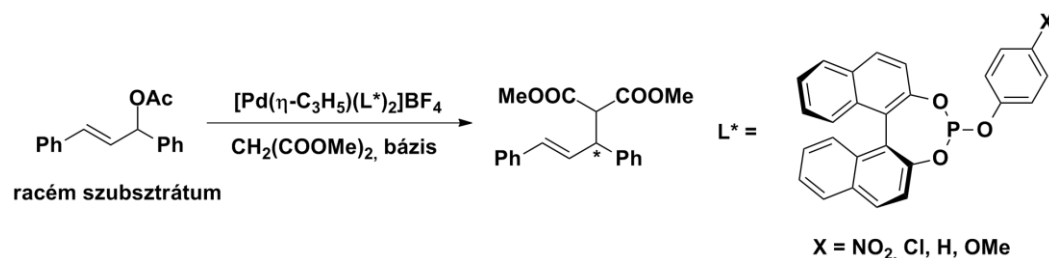
Professor Emeritus, PE MK

Biológiailag aktív vegyületek királis építőelemeinek szintézise aszimmetrikus allilezéssel

Kulcsszavak: aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúció; palládium-katalizált reakció; foszfit ligandumok; ligandum-kombinációs módszer

Az aszimmetrikus szintézis a zöld kémia fontos területe, hiszen a finomkémiai eljárásokban minden sikeres szelektív lépéssel felelhető a szintézisben felhasznált anyag mennyisége. Az aszimmetrikus katalitikus reakciók további előnye, hogy a királis információt kis mennyiségű katalizátor képes átadni nagy mennyiségű terméknek. A királis katalizátor lehet például optikailag aktív ligandumot tartalmazó átmenetifém-komplex.

Az aszimmetrikus katalitikus allil-helyzetű szubsztitúció szén-szén és szén-heteroatom kötés enantioszelektív kialakítására alkalmas eljárás.¹ Munkám során axiális kiralitású binaftil-vázzal rendelkező egyfogú foszfit ligandumokat állítottam elő, majd elkészítettem ezek $[\text{Pd}(\eta\text{-C}_3\text{H}_5)(\text{L}^*)_2]\text{BF}_4$ összetételű komplexeit. Palládium-katalizált aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakcióban vizsgáltam a katalizátormódosító ligandum elektronikus tulajdonságainak hatását a reakció aktivitására és enantioszelektivitására.



1. ábra: Palládium-katalizált aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúció

Tanulmányoztam továbbá a ligandum-kombinációs módszer alkalmazhatóságát a vizsgált katalitikus reakcióban.² Különböző egyfogú katalizátormódosító ligandumok 1:1 molarányú, egyidejű alkalmazásával igen jó aktivitással és szelektivitással sikerült előállítani a katalitikus reakció termékét.

A ligandumok elektronikus tulajdonságainak jellemzésére ródium-karbonil és szelénszármazékokat is előállítottam, melyek IR- és NMR-spektroszkópiai elemzésével egyértelmű összefüggést állapítottam meg a vegyületek szerkezete és a foszforatom donorsajátsága között.

¹Trost, B. M. J. Org. Chem. 2004, 69, 5813-5837. ²Gennari, C.; Piarulli, U. Chem. Rev. 2003, 103, 3071-3100.

STAYER PÉTER DÁVID Kémia BSc, 5. félév Pannon Egyetem Mérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:
Dr. Bakos József
professzor emeritus, PE MK
Balogh Szabolcs
egyetemi tanársegéd, PE MK

Enantioszelektív Roche észter előállítás Ródium-katalizált aszimmetrikus hidrogénezéssel

Kulcsszavak: foszfán-foszforamidit, enantioszelektivitás, aszimmetrikus szintézis

A Roche észter (3-hidroxi-2-metil-propánsav-metilészter) számos biológiailag aktív vegyület szintézisének építőköve.¹ Az enantiomerikusan tiszta forma egyik egyszerű és gazdaságos előállítási módja a 2-(hidroximetil)-2-propénsav-metilészter aszimmetrikus hidrogénezése. A kutatás témája a folyamat tökéletesítése. Katalizátorként a kutatócsoportunkban korábban kifejlesztett királis foszfán-foszforamidit ligandummal módosított ródium komplexet alkalmaztam, amely rendszer más prokirális tesztsubstrátumokra szelektívnek bizonyult.² Célom minél nagyobb enantiomerikus hozam (ee) és aktivitás elérése volt. Az ideális reakciókörülmények megállapítására a prekursor komplex, az oldószer, a hőmérséklet és a nyomás hatását vizsgáltam. Szakirodalmi viszonylatban kiemelkedő 98,6 % ee-t értem el etanol oldószerben, 20 bar nyomáson és szobahőmérsékleten.

A későbbiekben a reakciókörülmények további optimalizálását és több, a ligandum szterikus és elektronikus tulajdonságait befolyásoló különböző szubsztituensekkel módosított foszfán-foszforamidit analóg tesztelését tervezem. A katalizátorrendszer heterogenizált változatát az H-CubeTM folyamatos áramlásos hidrogénező reaktorban is tervezem kipróbálni.

¹ Y. Shin, J.-H. Fournier, Y. Fukui, A. Brückner, D. Curran *Angew. Chem. Int. Ed.* 2004, 35, 4634.

² (a) Sz. Balogh, G. Farkas, J. Madarász, Á. Szöllősy, J. Kovács, F. Darvas, L. Üрге, J. Bakos *Green Chem.* 2012, 14, 1146. (b) Sz. Balogh, G. Farkas, Á. Szöllősy, F. Darvas, L. Üрге, J. Bakos *Tetrahedron: Asymmetry* 2013, 24, 66.

DORNER NORBERT Korszerű eljárások a kémiai szintézisben BSc, 6. félév Babes-Bolyai Tudományegyetem Kémia és Vegyészmérnöki	
---	--

Témavezetők:
 Dr. Gál Emese
 egyetemi tanársegéd, BBTE
 Dr. Lovász Tamás
 egyetemi adjunktus, BBTE

Fentotiazinil-halogenidek szintézise és ezek Ullmann aminálása mikrohullámú reaktorban

Kulcsszavak: Buckwald-Hartwig rakció, kén és nitrogén tartalmú kondenzált aromás vegyületek, brómozás, szerkezet analízis

Fentotiazinil-halogenidek szintézise és ezek Ullmann aminálása mikrohullámú reaktorban

Összefoglaló:

A fentotiazin egy heteroaromás vegyület, amely a tiazinok osztályába sorolható, amelyben két fenil gyűrű egy kén és egy nitrogén atomon keresztül kapcsolódik össze.

A fentotiazin egyes származékai biológiai aktivitással rendelkeznek mint antihisztamin [1], neuroleptikus [2], gyulladáscsökkentő [3], vagy akár antioxidánsok [4], a gyógyászatban két területen alkalmazzák: antipszichotikumként [6] és szisztémás antihisztaminokként [5].

A fentotiazin halogénezése jól megválasztott reakció körülmények között, különböző pozícióban halogénezett származékot eredményez. A fentotiazin brómozása során sikeresen előállítottuk az 1-es, 3-as és 3,7-es pozícióban brómozott származékokat [8].

A fentotiazinil-halogenidekből kiindulva két féle módszert használtunk az aminok előállítására: Ullman- és Buchwald-Hartwig féle mikrohullámú aminálást. A palládium-katalizált aminálás nagyon jó módszer a 2-amino fentotiazin származékok előállítására, míg Cu₂O katalizissal az 1-amino, 3-amino és 3,7-diamino fentotiazinok állíthatók elő nagyon jó kitermeléssel [9].

Az aminok kiindulási anyagként szolgálnak amidok illetve szulfamidok előállításához.

Irodalom:

- [1] B. N. Halpern, R. Ducrot, C. R. Seances Soc. Biol. Ses. Fil. 1946 140 361
- [2] D. E. Pearson in R. C. E. Elderfield (ed.): Heterocyclic Compounds, 1967 vol. 6, Wiley, New York, p. 624 ff.
- [3] D. S. Folse, Agric. Exp. Stn. Tech. Bull. Kansas 115 1961 p. 216 ff.
- [4] Murphy, C. M., Rainer, H., and Smith, N. L.: Anal. Chem. 1950 42, 2479
- [5] Burger, A.: Medicinal Chemistry, 1951 Vol. I, p. 456. Interscience Publishers, Inc., New York
- [6] R. R. Gupta (ed.): Bioactive Molecules, 1988 vol. 4, Elsevier, Amsterdam, pp. 705 – 774.
- G. Jones, N. Robert, Tumori 71 no. 6, 563 – 569; Chem. Abstr. 1985 108, 68 140 z. D. Farge, M. Messer, Bull. Soc. Chim. Fr. 1969, 4395 – 4402.
- [7] N. Levantis, M. Chen, C. Sotirion-Levantis, Tetrahedron, 1997, 53(29), 10083-10092
- Hsin- hung lin, Cheng- chung chang, 2009 , Dyes and Pigments 83 (2009) 230–236 [79] C. Bodea, M. Terdic, I. A. Silberg, Ann. Chem., 1964, 673, 113-120
- [8] C. Bodea, I. A. Silberg, Advan. Heterocycl. Chem., 1968, 9, 325-475
- [9] L. I. Găină, L. N. Mătarângă-Popa, E. Gal, P. Boar, P. Lönnecke, E. Hey-Hawkins, C. Bischin, R. Silaghi-Dumitrescu, I. Lupan, C. Cristea, L. Silaghi-Dumitrescu, Eur. J. O. C. 2013, 24, 5500-5508

KORCSMÁROS DÓRA

Vegyésszámőrök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető:

Dr. Kónya Krisztina

egyetemi adjunktus, DE TTK

Flavonboronsav származékok előállítása és Suzuki-keresztkapcsolási reakcióinak tanulmányozása

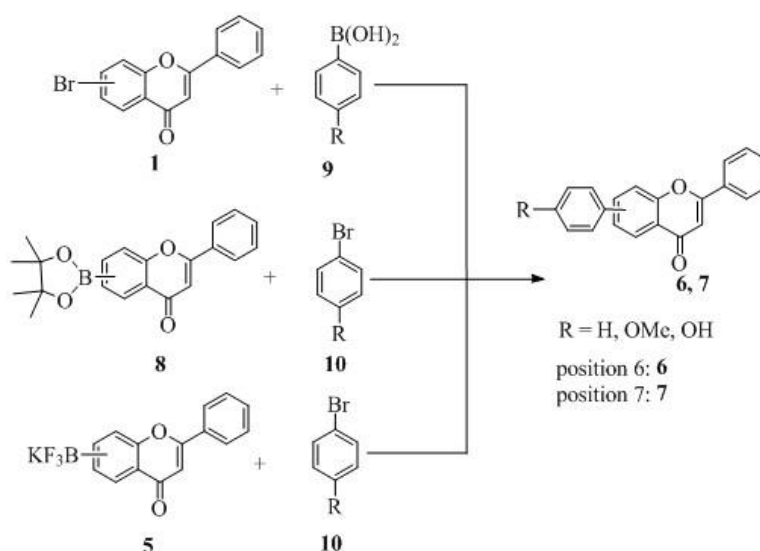
Kulcsszavak: keresztkapcsolás; B-C kötés kialakítása; palládium katalízis; flavonilboronsav-pinakolát; trifluoroborát-só

Dolgozatom céljából tűztem ki különböző típusú organoborán származékok előállítását haloflavonokból, illetve ezen vegyületek Suzuki-keresztkapcsolási reakcióinak a vizsgálatát.

Munkám során több szintézisútvonalat megvizsgáltam, amelyekkel boronsavakat vagy boronsav-származékokat lehet előállítani.

Brómflavonokat (1) bisz(pinakolato)diboránnal (2) sikeresen tudtam kapcsolni, így előállítottam a 6-flavonilboronsav-pinakolátot (3) és a 7-flavonilboronsav-pinakolátot (4). Ezeket a vegyületeket továbbalakítottam a megfelelő trifluoroborát-sókká (5a,b), ezzel növelve ezeknek a reagenseknek a stabilitását.

Dolgozatom elkészítése során vizsgáltam a különböző típusú organoborán reagensek Suzuki-kapcsolási reakcióit. Kapcsolásaimhoz felhasználtam boronsavakat, boronsav-észtereket és trifluoroborát-sókat. Három különböző szintézis útvonalon Suzuki-reakcióval állítottam elő a célvegyületeimet (6a-c, 7a-c). A Suzuki-keresztkapcsolási reakcióim változó hozammal, de kivétel nélkül végbementek, és ezzel igazoltam azt, hogy az általam előállított flavonilboronsav-észterek illetve trifluoroborát-flavonok alkalmasak Suzuki-keresztkapcsolási reakciók kivitelezésére.



1. ábra 6- és 7-helyzetben arilezett flavonoidok előállítása Suzuki-reakcióval

Munkám során az irodalomban még nem ismert öt vegyületet sikerült előállítanom.

ZWILLINGER MÁRTON Kémia BSc, 5. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:
 Novák Zoltán
 egyetemi adjunktus, ELTE TTK
 Kovács Szabolcs
 tudományos munkatárs, ELTE TTK

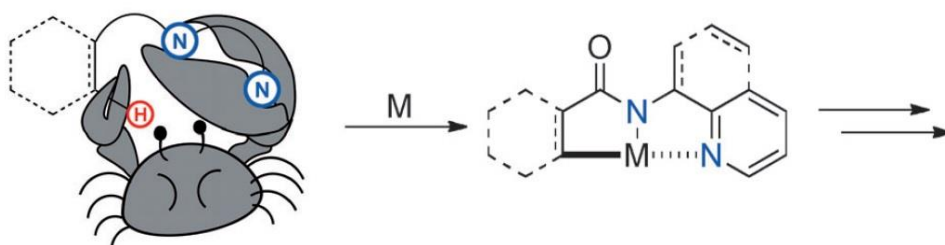
Kétfogú N-donor ligandumok által irányított C-H aktiválási reakciók vizsgálata

Kulcsszavak: palládium-katalizált; direkt arilezés; monoarilezés; regioszelektivitás; katalitikus

Az utóbbi néhány évtizedben a szintetikus szerves kémia fontos eszközévé váltak a szén-szén kötés kialakítására alkalmas katalitikus C-H aktiválási reakciók.

Tudományos diákköri munkám során a regioszelektivitás és hatékonyság javítására szolgáló kétfogú N-donor ligandumok alkalmazhatóságát vizsgáltam katalitikus C-H aktiváláson keresztül lejátszódó direkt arilezési reakciókban.

Kutatómunkánk eredményeképpen egy optimált, szelektív monoarilezésre alkalmas palládium-katalizált C-H aktiválási reakciót mutatunk be, melynek szintetikus alkalmazhatósága a reagensek és szubsztrátumok széles körében kiválóan bizonyult. Munkánk során a reakcióban használható irányító csoportok körét is sikerült kibővítenünk, amely újabb kutatásoknak nyit teret.



PÁLINKÁS NOÉMI

vegyész

MSc, 3. félév

Pécsi Tudományegyetem

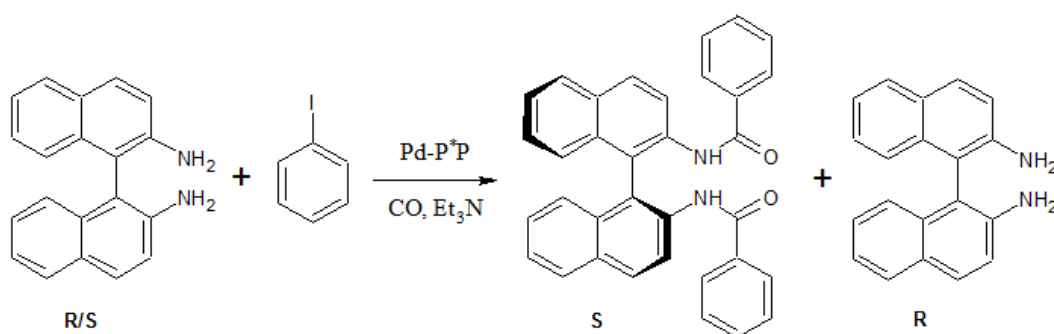
Természettudományi Kar

*Témavezetők:**Dr. Kollár László**egyetemi tanár, PTE TTK**Dr. Kégl Tamás**tudományos főmunkatárs, PTE TTK***Kinetikus reszolválás axiális kiralitás-elemet tartalmazó modellvegyületek
aminokarbonilezési reakcióiban***Kulcsszavak: homogén-katalízis; binaftil-váz; amin; palládium; ligandum*

Az aril/alkenil-halogenidek/triflátok palládium-katalizált aminokarbonilezése fontos szerepet tölt be az aromás karbonsavszármazékok szintézisében. Elsősorban a nagy szelektivitás, az enyhe körülmények és a jó konverzió teszi ezen reakciókat a szerves (fémorganikus) kémiai szintézisek jelentős eszközévé.

A dolgozat alapvető célja binaftil-vázak szintézise 1,1'-binaftil-2,2'-diaminból kiindulva jód-alkén (1-jód-ciklohexén), illetve jód-aromások (jódbenzol, 1,8-dijód-naftalin) felhasználásával. Vizsgáltam a kinetikus reszolválás lehetőségét enantiomerikusan tiszta kétfogú foszfin ligandumok jelenlétében, az axiális kiralitás-elemet tartalmazó 1,1'-binaftil-2,2'-dikarbonsavamidok esetén. További szintéziseket végeztem a fent említett modellvegyületből kiindulva diazónium-só előállítására, melyből homogénkatalitikus átalakításra van lehetőség.

Kvantumkémiai módszerekkel vizsgáltuk az aminokarbonilezési reakció mechanizmusát. A részletes elemzés során tanulmányoztuk a katalitikus ciklusban szereplő intermedierek számított szerkezetét, az aktív palládium-katalizátorokat, illetve a kemoselektivitást meghatározó lépést.



LASÁNYI DÁNIEL Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

Témavezetők:
 Novák Zoltán
 egyetemi adjunktus, ELTE TTK
 Tolnai Gergely László
 tud. segédmunkatárs, ELTE TTK

Trimetilszilil-acetilének deszililezése katalitikus mennyiségű hexafluorokovasav alkalmazásával diarilacetilének szintézisében

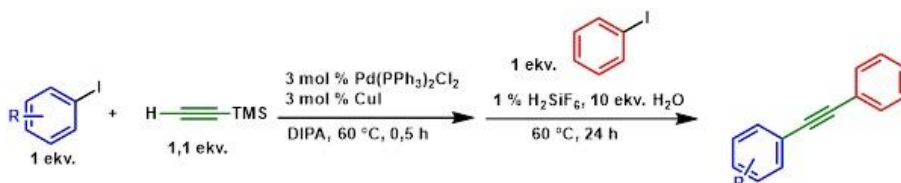
Kulcsszavak: Hexafluorokovasav; deszililezés; katalitikus; diarilacetilének; trimetilszilil-acetilének

Az acetilének fontos reagensek a szerves szintézisekben, a gyógyszerkémiaiában valamint az anyagtudományban. Számos kutatás az acetilének kémiájában a diarilacetilének felé fordul. A kiterjedt konjugáció miatt alkalmazhatóak ezek a vegyületek szerves vezető polimerekben, valamint fényt emittáló kemilumineszcens fluorofórokként. A diarilacetilének széles körben alkalmazott építőelemei a különböző karba-, és heterociklusos vegyületeknek.

Diarilacetilének előállítása leggyakrabban keresztkapcsolási reakciókkal történik. Ez a szintézisút egy egyoldalon védett acetilénből indul ki, melyet kapcsolnak a megfelelő aromás halogeniddel, majd a védőcsoportot eltávolítják. Az így kialakított új terminális acetilén már alkalmas egy újabb kapcsolásra. Az acetilének kémiájában leggyakrabban alkalmazott védőcsoportok a trialkilszilil típusú védőcsoportok. Az irodalomban leírt módszerek száma trimetilszilil csoport eltávolítására acetilénről szűkös. Még kevesebb olyan módszer áll rendelkezésünkre, melyben katalitikus mennyiségű reagenst alkalmazva távolíthatjuk el a védőcsoportot.

Előkísérletek és irodalmi analógiák alapján a hexafluorokovasav a szilil-acetilének védőcsoportjának eltávolítására felhasználható ígéretes vegyületnek látszott. A vizsgálatok előre jelezték, hogy a hexafluorokovasav már katalitikus mennyiségben is alkalmas lehet a védőcsoport hasítására. Olyan kísérleti körülmények között vizsgáltam a reakciót, melynek során a deszililezés után a kapcsolás is lehetséges volt, így lehetőséget adva egy hasznos szintetikus módszer kifejlesztésére.

A reakciókörülmények pontos megválasztásához számos kísérletet végeztünk el melyek során változtattuk az alkalmazott hexafluorokovasav vagy ammónium sóinak a mennyiségét a lehető legkisebb, immár katalitikus mennyiség eléréséig. A precízen megválasztott körülmények között számos nemszimmetrikus diarilacetilént állítottunk elő preparatív méretben.



A kutatás során elért eredményeket, tudományos diákköri dolgozatban mutatjuk be.

HOMOLYA LEVENTE Vegyész MSc MSc, 1. félév Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	
---	--

Témavezetők:

Dr. Joó Ferenc

egyetemi tanár, DE TTK

Dr. Udvardy Antal

tudományos munkatárs, DE TTK

Dr. Voronova Krisztina

külső konzulens, University of the Pacific

Új, vízoldható Pd-katalizátorok alkalmazása Sonogashira-kapcsolásban

Kulcsszavak: Sonogashira-kapcsolás; homogén katalízis; Pd-szalán; aril-halogenid; terminális acetilén

Munkám során három vízoldható szalán típusú ligandumot és azok Pd-komplexeit szintetizáltam és jellemeztem.

A Sonogashira-kapcsolás vizsgálatára jódbenzol és fenilacetilén reakcióját választottam. Oldószerként vizet alkalmaztam, a szubsztrátumok és a szerves bázis képezték a szerves fázist. A modellreakciók kivitelezése során a [Pd(BuHSS)] komplexet használtam.

Tanulmányoztam a különböző szerves és szervetlen bázisok hatását az átalakulás mértékére. A legmagasabb konverzióértéket trietil-amin bázis hozzáadásával értem el. A reakció időfüggésének vizsgálata során azt tapasztaltam, hogy fél óra reakcióidőig a konverzió értéke gyorsan nő, majd ezután lelassul. Ennek okát keresve tanulmányoztam a szubsztrátum/bázis arány reakcióra gyakorolt hatását. Azt tapasztaltam, hogy 1/4 aránynál a reakció már 1 óra alatt is közel teljes mértékben lejátszódik.

A katalizátor mennyiségének hatását is vizsgáltam a konverzióértékekre. Azt tapasztaltam, hogy a Pd-komplex arányának csökkenésével a konverzió is csökkent. Azonban az óránkénti katalitikus ciklusszám (TOF) maximum görbe alapján változott. A legmagasabb TOF értéket $3000/1 =$ szubsztrátum/katalizátor aránynál értem el 30 perc alatt, melynek értéke 1596 h^{-1} . A reakció időfüggését is tanulmányoztam, mely alapján elmondható, hogy 4 óra alatt a kapcsolás majdnem teljesen lejátszódik.

Optimalizált reakciókörülmények között vizsgáltam az általam előállított komplexek aktivitását. Elmondható, hogy a [Pd(HSS)] aktivitása kevéssel elmarad a [Pd(BuHSS)] és a [Pd(CyHSS)] aktivitásától.

A komplexek felhasználhatóságának felderítése céljából vizsgáltam különböző elektronküldő és elektronszívó szubsztituenseket tartalmazó aril-halogenidek és terminális acetilének kapcsolását.

A [Pd(BuHSS)]-t két anioncserélő gyantára rögzítettem, majd aktivitását fenilacetilén és jódbenzol reakciójában vizsgáltam. Az elvégzett kísérletek alapján elmondható, hogy a katalizátor leoldódik az ioncserélőről a reakciók során.

Szol-gél módszer segítségével heterogenizáltam a [Pd(BuHSS)] komplexet. Az így kapott katalizátorral próbareakciókat végeztem, melynek eredményeiből megállapítható, hogy nem történt jelentős mértékű leoldódás.

Eredményeim alapján elmondható, hogy az előállított Pd-szulfoszalán komplexek hatékonyak vizes közegű Sonogashira kapcsolási reakciókban. A kiemelkedő aktivitást foszfín- és rézmentes körülmények között értem el, hozzáadott fázistranszfer katalizátor nélkül.

Szerves kémia 4

HEGEDÜS KRISTÓF Kémia alapszak BSc, 9. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
--	--

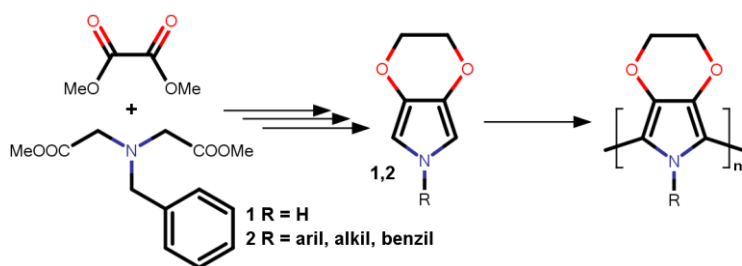
Témavezető:
 Durkó Gábor
 egyetemi tanársegéd, ELTE TTK

3,4-etiléndioxi-pirrol és származékainak előállítása

Kulcsszavak: 3,4-etiléndioxi-pirrol; vezető polimerek; pirrol; EDOP; PEDOP

A 3,4-etiléndioxi-tiofén és a belőle készített poli-3,4-etiléndioxi-tiofén, illetve szubsztituált származékainak számos, már az iparban is használt alkalmazása ismert. Azonban a hozzá szerkezetileg és elektrokémiai tulajdonságaiban igen hasonló 3,4-etiléndioxi-pirrolt (1) és N-szubsztituált (2) származékait nehezebb előállításuk és hozzáférhetőségük miatt kevésbé kiterjedten vizsgálták.

Kutatómunkám elsődleges célja az irodalomban 3,4-etiléndioxi-pirrol (1) előállítására ismertetett több lépéses szintézisutak optimalizálása, továbbá annak vizsgálata, hogy egyéb szintézismódszerekkel elő lehet-e állítani 3,4-etiléndioxi-pirrolt vagy annak N-szubsztituált származékait (2) (1. ábra).



1. ábra

A szakirodalomban található eljárásokat több ponton optimalizáltam, sikeresen méretnöveltem. 3,4-etiléndioxi-pirrol előállítására alkalmazott hat lépéses szintézis kitermelését 48%-ra javítottam.

Megállapítottam, hogy 2,5-dikarboximetil-3,4-etiléndioxi-pirrol nátriummal képzett sójának N-funkcionalizálása csak láncvégi halogénatomot tartalmazó reagensekkel lehetséges. Kísérleteket tettem 3,4-etiléndioxi-pirrol előállítására Barton-Zard pirrolszintézissel és N-benzil-3,4-etiléndioxi-szukcinimid redukciójával.

Elektrokémiai vizsgálatok céljára előállítottam a szakirodalom által még nem leírt N-szubsztituált-3,4-etiléndioxi-pirrol származékokat.

PÜNKÖSTI ZOLTÁN PÉTER

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

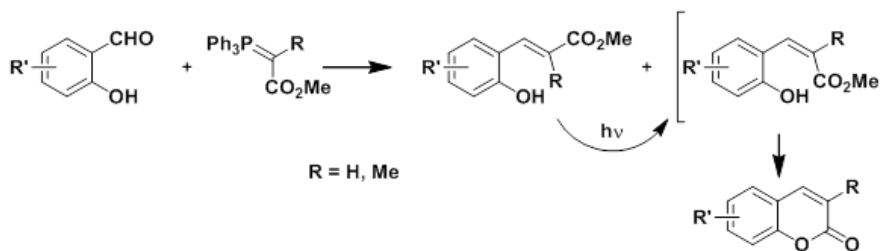
*Témavezetők:**Herner Andás**tudományos munkatárs, MTA TTK, SzKI**Kele Péter**tudományos főmunkatárs, MTA TTK, SzKI***3-szubsztituált kumarinszármazékok előállítása fotoizomerizációs reakcióban***Kulcsszavak: kumarin; szalicilaldehid; Wittig-reakció; fahéjsav észter; fotociklizáció*

Munkám során 3-szubsztituált kumarinszármazékok egyszerű, enyhe körülmények közt történő előállítására kerestem megoldást, amelyhez érzékeny csoportokat tartalmazó szalicilaldehidekből is kiindulhatunk.

Tíz különböző szalicilaldehid és két ilid Wittig-reakcióinak kombinációjából sikeresen alakítottam ki a fahéjsztereket, amelyeket aztán UV-fénnyel végrehajtott geometriai izomerizációs reakcióval alakítottam át a kívánt 3-szubsztituált kumarinokká. (1. ábra)

A kidolgozott módszert különböző vegyületekre teszteltem: a szalicilaldehidek szubsztituensei között szerepelt védett aminocsoport, halogének és elektronküldő csoportok. A reagens ilidek összetételével befolyásoltam a hármasszubsztituens helyére kerülő csoportot.

A dolgozathoz kiderül, hogy a módszer általánosan felhasználható változatos szubsztituensek mellett, a termékek jó termeléssel nyerhetők ki.



1. ábra: A reakciósorozat sematikus ábrája

BEGE MIKLÓS Gyógyszerész Osztatlan, 9. félév Debreceni Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Borbás Anikó
 tanszékvezető egyetemi docens, DE GYTK

5'-helyzetben szubsztituált uridin-szulfidszármazékok szintézise

Kulcsszavak: uridinszármazék; tioladdíció; peptid-nukleinsav; védőcsoportok; nukleinsavszármazék

A nukleozidok és származékaik a természetben változatos biológiai funkciókat töltenek be: részt vesznek a jelátviteli folyamatokban, a sejt energiatermelésében és különböző enzimatisz átalakításokban, bizonyos mikroorganizmusok által termelt nukleozid származékok (uridil-peptidek) pedig antibakteriális hatásúak. A nukleotidokból felépülő nukleinsavak a genetikai információ tárolásában, hordozásában, valamint különböző szabályozási és katalitikus folyamatokban vesznek részt.

A szintetikus nukleozid származékokat széles körben használják gyógyászati célokra daganatellenes szerként (pl. fludarabin, citarabin), antibiotikumként, vírusellenes szerként (zidovudin), vagy antimikotikumként (5-fluorocitozin).

A peptid-nukleinsavak olyan vegyületek, amelyekben cukor-foszfát gerinc helyett egy polipeptid vázhoz kapcsolódnak a bázisok. Ezen származékok a természetes nukleinsavaknál jobb tulajdonságokkal (pl. nagyobb stabilitás) rendelkeznek. Legfontosabb felhasználási területük a géncsökkentő terápia lehet, melynek célja egy fehérje által okozott betegség gyógyítása a fehérjét kódoló gén működésének szelektív gátlásával.

A kutatás célja egyrészt 5' helyzetben módosított uridinszármazékok, másrészt cisztein-uridin konjugátumok és később ezekből új típusú peptid-nukleinsavak előállítása volt tioladdícióval. A megfelelő telítetlen uridinszármazékok előállítása után több tioladdíciót is végrehajtottunk különböző tiolokkal többféle védőcsoportot (acetyl ill. izopropilidén) tartalmazó uridin-4'exometilén származékokon. Az irodalmi adatok alapján várt teljes sztereoszelektivitás nem valósult meg, az addíciós reakciók minden esetben sztereoizomer keveréket eredményeztek. Ettől függetlenül az így előállított új vegyületek biológiai hatásainak vizsgálata rendkívül érdekes eredményeket hozhat, ezért több származék antivirális hatásának vizsgálata is folyamatban van.

Távlati célunk elérésére, azaz a cisztein alapú peptid-nukleinsavak szintézisére azonban a tioladdíció a sztereoszelektivitás hiánya miatt nem volt alkalmas, ezért ennek a végrehajtásához egy másik szintetikus kémiai módszer, a bázisindukálta nukleofil szubsztitúció mellett döntöttünk. Ezzel a módszerrel sikerült is a védett ciszteinil-uridint előállítani, majd a megfelelő védőcsoportok hasítása után dimerizálni. Jövőbeni terveink között szerepel más nukleozidokra is kiterjeszteni a fenti módszert, így változatos szekvenciájú cisztein-nukleinsavakat előállítani, melyek potenciális géncsökkentő ágensek.

MOLNÁR ÉVA ANDREA Szerves anyagok kémiája és technológiája, kőolaj- és szénkémia BA, 8. félév Babeş-Bolyai Tudományegyetem Kémia- és Vegyészmérnöki Kar	
---	--

Témavezetők:
Dr. Lovász Tamás
adjunktus, BBTE
Dr. Gál Emese
egyetemi tanársegéd, BBTE

AB-típusú fenotiazin alapú porfirinek előállítása és fotokémiai brómozása

Kulcsszavak: fotoszenzibilizátor; PDT; Soret sáv; NBS; fenotiazinil-porfirin

A porfirinek olyan heteroaromás vegyületek, melyek fontos szerepet töltenek be a természetben és az emberi szervezetben egyaránt. Szerkezetüket tekintve négy pirrol egységből épülnek fel, melyek metin hidakon keresztül kapcsolódnak össze, így alakul ki a 20 C atomból álló porfirin-váz.

A porfirin származékok széles körben alkalmazhatóak a különböző tudományágakban, felhasználhatóak napcellák készítésére, félvezetők gyártására, fotoszintézis modellezésére, nemlineáris optikai tulajdonságokkal rendelkező nanoanyagok előállítására [1], valamint fotodinamikus terápia (PDT) során fotoszenzibilizátorként [2] a rákos sejtek pusztítására.

A porfirin és fenotiazin származékok speciális foto- és elektrokémiai tulajdonságai közötti hasonlóságok lehetővé teszik ezek együttes tanulmányozását fotoszenzibilizátorként a fotodinamikus folyamatokban [3]. A fenotiazinil-porfirinek esetében a kiterjesztett lineáris π -konjugáció a Soret sáv batokróom eltolódását eredményezi, aminek következtében a fotoszenzibilizátorok hatékonyabbá válnak a PDT során [4].

A kutatómunka során célunk mezo pozícióban szubsztituált fenotiazinil-porfirinek előállítása és fotokémiai brómozása volt, annak érdekében, hogy a kapott termékek Soret sávja batokróom eltolódást mutasson. A vegyes fenotiazinil-porfirineket Adler-Longo [5] módszerrel állítottuk elő, 10-metil-10H-fenotiazin-3-karbaldehyd, 4(alkil-oxi)-benzaldehyd és pirrol, propionsav jelenlétében történő kondenzációjával. Az oszlopkromatográfiás módszerrel elválasztott termékek fotokémiai brómozás UV lámpa segítségével történt, szobahőmérsékleten, brómozó ágensként N-bróm-szukcinimidet (NBS) alkalmaztunk. Az előállított vegyületek szerkezetét NMR és tömegspektroszkópiás módszerrel igazoltuk, az optikai tulajdonságokat pedig UV-Vis spektroszkópiával vizsgáltuk.

Irodalom

- [1] S. Tokui, H. Awane, H. Yorimitsu, Chemistry-A European Journal, 2013, 19, 64–68
- [2] D. Mitton, R. Ackroyd, Photodiagnosis and Photodynamic Therapy, 2008, 5, 103–111
- [3] Z. Diwu, J.W.Lown, Pharmacology & Therapeutics, 1994, 63, 1-35
- [4] E. Gal, B. Brem, I. Pereteanu, L. Gaina, T. Lovasz, M. Perde-Schrepler, C. Cristea, L. Silaghi-Dumitrescu, Dyes and Pigments, 2013, 99, 144–153
- [5] A. D. Adler, F. R. Longo, J. D. Finarelli, J. Goldmacher, J. Assour, L. J. Korsakoff, The Journal of Organic Chemistry, 1967, 32, 476

VARRÓ GÁBOR Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 4. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
---	--

Témavezető:
 Dr. Kádas István
 címzetes egyetemi docens, BME VBK

A *Zephyranthes candida* rákellenes alkaloidjának vanillinból kiinduló sztereoszelektív totálszintézise

Kulcsszavak: citosztatikus; teljes szintézis; növényi hatóanyag

Az elmúlt két évtizedben a fehér esőliliomnak (*Zephyranthes candida*) - az amarilliszfélék családjának, a Dél-Amerika szubtrópusi La Plata régiójában őshonos képviselője - leveléből, szárából, virágából, hagymájából, és terméséből több biológiailag aktív hatóanyagot izoláltak a kutatók, közülük a transz-dihidro-narciklazin bizonyult legjelentősebbnek.

A transz-dihidro-narciklazinról azóta kiderült, hogy az amarilliszfélék citosztatikus alkaloidjai közül az amerikai National Cancer Institute minősítése szerint a legerősebb rákellenes hatású alkaloid.

Az Amaryllidaceae alkaloidok citosztatikus képviselői a laktám vázat tartalmazó fenantridon alkaloidok közé tartoznak, amelyek sztereokémiai komplexitásuk, és jelentős biológiai aktivitásuk miatt érdekes, és kihívást jelentő célnak bizonyultak a szintetikus vegyészek számára. Ezért az elmúlt két évtizedben világszerte jelentős számú totálszintézist dolgoztak ki az előállításukra.

A nagy számú, irodalomban publikált totálszintézis túlnyomó többsége a korábban legerősebb rákellenes hatásúnak tartott narciklazin és pankratisztatin alkaloidok előállítását valósította meg, és meglepő módon az azóta legerősebb hatásúnak bizonyult transz-dihidro-narciklazin szintézise kevés figyelmet kapott.

Ezt felismerve a BME Szerves Kémia és Technológia tanszékén intenzív kutatás indult a transz-dihidro-narciklazin racionális totálszintézisének kidolgozására, kitűzve célul, hogy ellentétben az irodalomban leírt soklépéses, bonyolult szintézis megoldásokat alkalmazó előállítási módszerekkel, kevesebb szintézislépést, és könnyen kivitelezhető lépéseket alkalmazó szintézist dolgozzanak ki.

Egyetemi tanulmányaim során ebbe a kutatásba kapcsolódtam be, és a BSc szakdolgozatomat is ebből a témából készítettem. Ezt követően MSc hallgatóként folytattam a kutatást, és a korábban általam metilgallátból kidolgozott szintézisutat megváltoztattam. Most vanillinból kiindulva valósítottam meg a szintézist, amely sokkal olcsóbb alapanyag, mint a metilgallát.

A célvegyület teljes szintézisét vanillinból kiindulva 18 viszonylag egyszerű lépésben valósítottam meg, egyetlen lépésben sem volt szükséges extrém reakciókörülmények, és túlságosan költséges reagensek alkalmazása. Ezenkívül a lépéseket úgy sikerült kivitelezni, hogy mindössze 2 lépésben vált szükségessé oszlopkromatográfiás tisztítás alkalmazása. A szintézis intermedierei az irodalomban eddig le nem írt új vegyületek, amelyek szerkezetét és sztereokémiáját IR és NMR spektroszkópiával igazoltam.

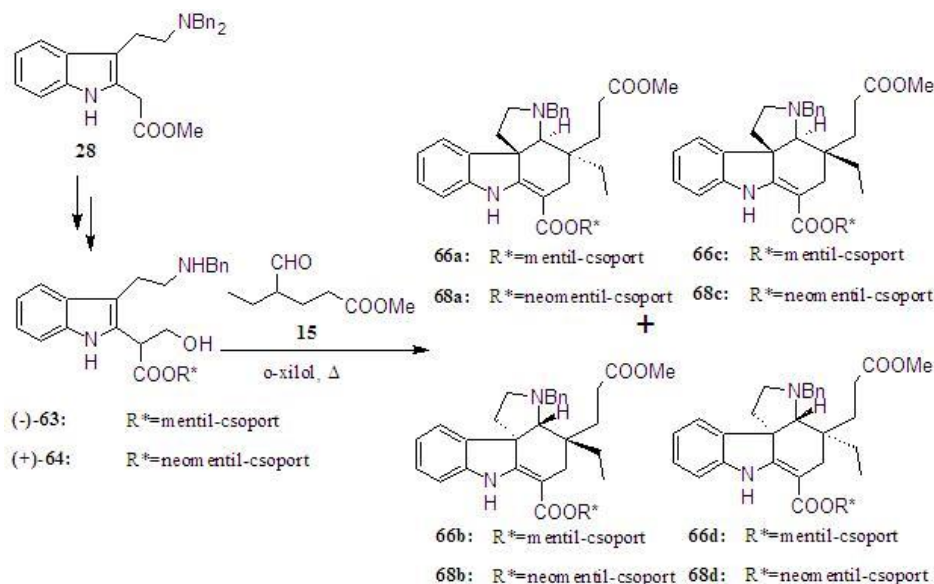
FARKAS TAMÁSGyógyszervegyész-mérnöki
MSc, 4. félévBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:

Dr. Kalaus György
professzor emeritusz, BME VBK**Kísérletek az aszpidoszpermánváz enantioszelektív felépítésére***Kulcsszavak: szerves; szintetikus; alkaloid; enantioszelektív; terpén*

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő alkaloidkémiai kutatócsoportban az 1990-es évek eleje óta foglalkoznak aszpidoszpermán- és pseudoaszpidoszpermánváz alkaloidok előállításával. Konvergens szintézisük szubsztrátjaként olyan triptamin-származékot alkalmaznak, mely megfelelően kiépített aldehidekkel vagy aldehid-ekvivalensekkel reagáltatva az említett alkaloidok D-szeko képviselőit szolgáltatja. Dolgozatom tárgya az említett szintézisstratégia módosítása úgy, hogy az enantioszelektív szintézis megvalósítására is alkalmas legyen.

Munkám során a 28-ból előállítottam a racém molekulákat eredményező szintézissor kulcsintermedierjéből levezethető (-)-63-mat és a (+)-64-et, melyeket a 15 aldehiddel reagáltattam és eljutottam a 66a-d illetve a 68a-d diasztereomerekhez. Az NMR-spektroszkópiás vizsgálatok alapján mind a négy diasztereomerelegy esetében 1:1 aránytól eltérő diasztereomerarányt állapítottunk meg.



EÖRDÖG ÁDÁM Kémia BSc, 7. félév Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar	
---	--

Témavezetők:

Kele Péter

tudományos főmunkatárs, MTA Természettudományi Kutatóközpont

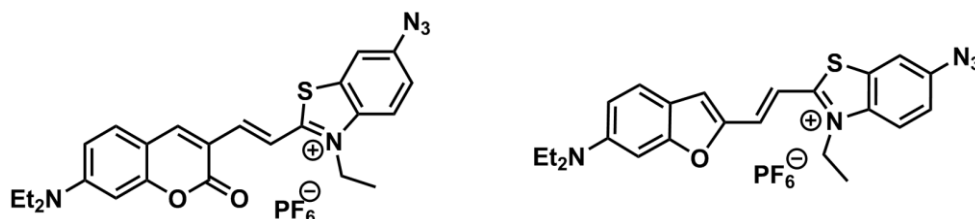
Herner Andás

tudományos munkatárs, MTA Természettudományi Kutatóközpont

NIR tartományban emittáló fluoreszcens jelölővegyületek szintézise és vizsgálata

Kulcsszavak: fluoreszcens jelölés; fluoreszcens mikroszkópia; bioortogonális kapcsolás; mega-Stokes-eltolódás; polimetin-fluorofór

A biológiai mintákról történő képalkotás a természettudományos megfigyelés fontos eszköze. E technológiák között különös jelentőséggel bír a fluoreszcens képalkotás, aminek súlyát jól mutatják a közelmúltban (2008., 2014.) odaítélt Nobel díjak. A fluoreszcens képalkotásnak alapeleme a jelölés, ami döntően meghatározza a mintából nyerhető információt, mára pedig számos stratégia alakult ki ennek megvalósítására. Az elterjedt technikák közül a kovalensen kapcsolható, kismolekulás szintetikus fluoreszcens jelzővegyületek használata nyújtja a legszélesebb alkalmazhatóságot és ez jár a vizsgált rendszer legkisebb perturbációjával. Ugyanakkor ezen megoldás esetén kihívást jelent a jelölő fiziológiai körülmények közötti kapcsolása megfelelő szelektivitás mellett. A jelzővegyületek egy ideális esete a kapcsolás szempontjából, ha rendelkezik ún. bioortogonális reakcióra alkalmas funkciós csoporttal. A fluoreszcens jelzővegyületek spektrális tulajdonságai döntően meghatározzák a képalkotás felbontását, kontrasztját, a behatolási mélységet, és a módszer érzékenységét. A fluorofóroknak egy ideális esete lenne, a fotofizikai jellemzőit tekintve, ha a jelzővegyület NIR tartományú emisszióval, nagy Stokes-eltolódással és nagy fényességgel rendelkezne, valamint fluorogén tulajdonságot mutatna. Munkám során olyan vegyületek szintézisére tettem kísérletet melyek az fent említett összes kedvező tulajdonsággal bírnak. A jelzővegyületek tervezésekor a csoportunk által korábban előállított kedvező tulajdonságokkal bíró vegyületekből indultam ki [1,2]. E közötti molekulák fejlesztése volt a célom, melynek során az emissziós és abszorpciós hullámhosszakat a vörös tartomány felé kívántam eltolni, illetve a vízzoldékonyságot igyekeztem javítani (1. ábra). Az előállított célvegyületeket modellreakcióban teszteltem, vizsgáltam továbbá fotofizikai tulajdonságaikat. A mérések alapján bebizonyítottam, hogy a fent felsorolt tulajdonságok közül többet sikerült megvalósítani, így fluoreszcens képalkotáshoz alkalmas jelzővegyületeket állítottam elő.



1. ábra. A két azid-tartalmú jelzővegyület

[1]A. Herner, I. Nikić, M. Kállay, E. A. Lemke, P. Kele, Org. Biomol. Chem., 2013, 11, 3297.

[2]A. Herner, G. E. Girona, I. Nikić, M. Kállay, E. A. Lemke, P. Kele, Bioconjugate Chem., 2014, 25, 1370.

SZUROCZKI PÉTER

Vegyész

MSc, 3. félév

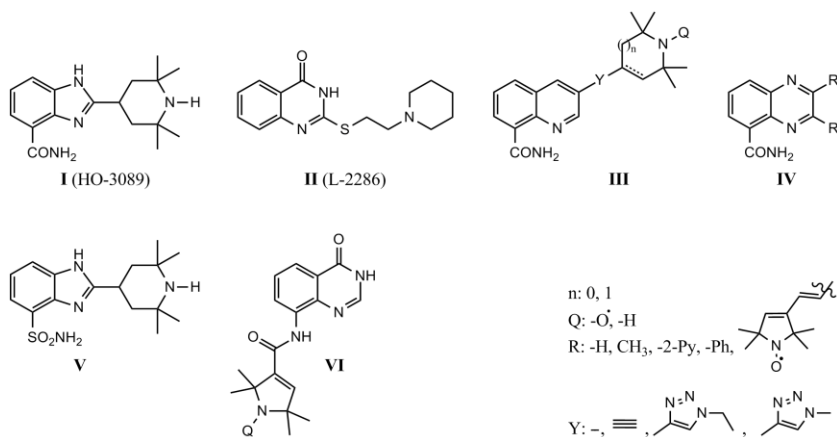
Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:**Dr. Kálai Tamás**egyetemi tanár, PTE ÁOK**Kégl Tímea**tudományos segédmunkatárs, PTE TTK***Nitroxidokkal és elővegyületeikkel módosított PARP inhibitorok szintézise és vizsgálata****Kulcsszavak:** *N-heterociklus;gyűrűzárás;palládium-katalizált;réz-katalizált;paramágneses*

A poli(ADP-ribóz) polimeráz-1 (PARP-1) valamennyi eukarióta sejtben megtalálható többfunkciós enzim, melyet a DNS száltörése aktivál. Az enzim nikotinsavamid-adenin-dinukleotid (NAD⁺) hasításával képződő ADP-ribóz egységeket kapcsol a DNS-hez kötött fehérjékhez (hisztonok, topoizomerázok, DNS polimeráz, DNS ligáz és maga a PARP-1). Nagyfokú DNS károsodás esetén az enzim túlműködése a sejt NAD⁺ és ATP készleteinek gyors feléléséhez vezet, melynek eredménye nekrotikus sejthalál lehet.

Az utóbbi évtizedben számos PARP-inhibítort szintetizáltak, amelyek már klinikai tesztelés alatt állnak.¹ Intézetünkben olyan új benzimidazol- (I) és kinazolin-vázas (II) PARP-1 inhibitorokat fejlesztettek ki, melyeket nitroxidokkal és elővegyületeikkel módosítottak megnövelve azok hatékonyságát.^{2,3} Dolgozatomban új kinolin- (III)⁴, kinoxalin- (IV), benzimidazol-szulfonamid- (V) és kinazolinon-származékok (VI)⁵ szintézisét, valamint a szerkezet-hatás összefüggéseiket és a dokkolásos modellszámításokat mutatom be.



1. Steffen, J. D.; Brody, J. R.; Armen, R. S.; Pascal, J. M. *Frontiers in Oncol.* 2013, 3, Article 301.
2. Bartha, É.; Kiss, Gy.; Kalman, E.; Kulcsár, Gy.; Kálai, T.; Hideg, K.; Habon, T. Sümegi, B.; Tóth, K.; Halmosi, R. J. *Cardiovasc. Pharm.* 2008, 52, 253.
3. Kálai, T.; Balog, M.; Szabó, A.; Gulyás, G.; Jekő, J.; Sümegi, B.; Hideg, K. J. *Med. Chem.* 2009, 52, 1619.
4. Lord, A-M.; Mahon, M. F.; Lloyd, M. D.; Threadgill, M. D. J. *Med. Chem.* 2009, 52, 868.
5. Kulkarni, S. S.; Singh, S.; Shah, J. R.; Low, W-K; Talele, T. T. *Eur. J. Med. Chem.* 2012, 50, 264

KOÓS KATALIN vegyésmérnök MSc, 3. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Mucsi Zoltán

vezető kutató, Servier Gyógyszerkutató Intézet

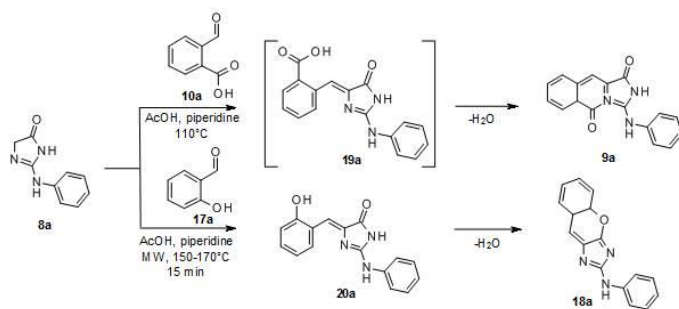
Dr. Nyerges Miklós

hit to lead igazgató, Servier Gyógyszerkutató Intézet

Új, kondenzált Leucettine alkaloid analógok szintézise

Kulcsszavak: alkaloidok; aromás szerkezet; kondenzált gyűrűrendszer; heterociklusok; új vegyületcsaládok

TDK dolgozatomban egy tengeri moszatból (*Leucetta Microraphis*) izolált alkaloid új, kondenzáltvázas analógjainak előállításával foglalkoztam. A munka alapját az irodalomból ismert Leucettamine B alkaloid képezte, ami több kinázon mikromólos inhibitor aktivitást mutatott. A rennes-i egyetem munkatársai az alkaloid molekula lépésről-lépésre történő módosításával eljutottak egy hatékony molekuláig, ami bekerült a Servier felfedező kutatásába. A szintetikus munka során érdekes mellékreakciókra figyeltek fel, amikor a szintézisben intermedierként használt 8a-as vegyülettel Knoevenagel-addíciót orto helyzetben szubsztituált 10a és 17a aldehidekkel végeztek. Ezek a reakciók új, a 3-aminoimidazo[1,5-b]izokinolin-1,5-dion 9a és N-fenilkromeno[2,3-d]imidazol-2-amin-származékok 18a vegyületcsaládokhoz vezettek.



27. ábra. Az új heterociklusok (9a, 18a) szerkezete és előállítása

Munkám célja az volt, hogy a két új vegyületcsalád tagjait megsokszorozzam. Vizsgáltam továbbá, hogy a gyűrűzárás mely esetekben játszódik le és melyekben nem. Ennek érdekében számos ponton variáltam a két gyűrűrendszert. A vizsgálódás eredményeképpen elmondhatjuk, hogy a

gyűrűzárt termékeknél egy új, intramolekuláris H-kötés alakul ki, amely erős szerkezeti stabilitást jelent. A kialakuló heterociklus antiaromás határszerkezettel is rendelkezik, bár ennek súlyát az aromás izokinolin alegység csökkenti. Összességében kijelenthető, hogy maga a gyűrű kialakulása sem elektronikusan, sem pedig szterikusan nem kedvező, sőt inkább kedvezőtlen folyamat.

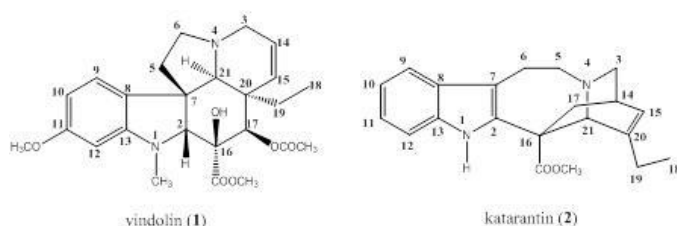
A másik, N-fenilkromeno[2,3-d]imidazol-2-amin-származékok gyűrűrendszer (18a) számos tagját előállítottam a kiindulási szalicilaldehid szubsztituenseinek változtatásával, valamint az oxo-vegyületek mellett sikerült tio-származékot is azonosítanunk. Kémiai számolásokkal arra jutottunk, hogy a reakció gyűrűzárási lépése erősen endoterm folyamat, ezért a gyűrűzárás nem kedvezményezett. Néhány vegyület kedvező fluoreszcenciás spektrumot mutatott, amelyek a vegyületcsalád további potenciális alkalmazási területeit vetítik előre, ilyen terület lehet például a biotechnológia.

KEGLEVICH ANDRÁS Gyógyszervegyész-mérnök MSc, 2. félév Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	
--	--

Témavezető:
 Dr. Hazai László
 egyetemi magántanár, BME VBK

Új, várhatóan biológiailag aktív vindolinszármazékok szintézise

Kulcsszavak: daganatellenes, gyógyszer, vinblasztin, vinkrisztin, alkaloid-származékok



Az indolvázis alkaloidok jelentős képviselői a Vinca alkaloidok sorába tartozó vindolin (1) és katarantin (2), melyeket korábban a Madagaszkáron őshonos *Catharantus roseus*-ból izoláltak. Ezek a vegyületek a kiemelkedően citosztatikus hatású dimer alkaloidok, a gyógyszerként is forgalomban lévő vinkrisztin és vinblasztin komponensei, melyeket eredményesen alkalmaznak a rákos megbetegedések elleni terápiában, ezek közül is elsősorban a leukémia, a Hodgkin limfóma, illetve a nem-Hodgkin limfóma esetén.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén elkészített TDK dolgozatom kapcsán feladatomban olyan új vindolin- és katarantinszármazékok előállítása volt, melyekkel a kutatócsoport még nem foglalkozott, és várhatóan daganatellenes hatást mutatnak.

Saját munkám során először több reakciólépésen keresztül sikeresen előállítottuk a 14,15-ciklopropanovindolin (D)-triptofánnal kapcsolt származékát. A kapott vegyület hordozópeptidhez köthető, és mivel így képes közvetlenül a sejtbe jutni, csökkenthetőek a káros mellékhatások.

Ezt követően halogéntartalmú katarantin- és a vindolinszármazékokat terveztünk előállítani. A katarantin fluorozása során két különböző módszerrel (Select Fluor és xenon-difluorid reagenssokkal) is ugyanahhoz a vegyülethez jutottunk, ám a fluoratom a várt 10-es helyzet helyett mindkét esetben a 7-es helyzetű hídfő szénatomra épült be. Hasonlóképpen a vindolin fluorozása során a fluor a 8-as helyzetű hídfő szénatomhoz kapcsolódott. A vegyületet biológiai vizsgálatra küldtük, ahol különböző rákos sejtvonalakon tesztelik.

Ezek után difluor- és diklórkarbénezési reakciókkal kezdtünk el foglalkozni. A vindolin difluorkarbénezése során nem a várt termék keletkezett, hanem egy olyan érdekes vindolinszármazék, amely a 16-os helyzetben difluormetil-éter-csoportot tartalmazott. A diklórkarbénezési reakció során pedig a várt termék helyett az irodalomban is ismert 10-formilvindolinhoz jutottunk. Végül a vinblasztin és a vinkrisztin esetében is megpróbáltuk megvalósítani a diklórkarbénezést. A vinblasztinnál kétféle módszerrel is a várttól eltérő terméket kaptunk: mindkét esetben egy gyűrűfelnyílt oxiránszármazékhoz jutottunk. A vinkrisztin esetében csak az egyik módszerrel sikerült tisztán előállítani a vinblasztinnál tapasztalt gyűrűfelnyílt oxiránszármazék vinkrisztin-analogonját.

VARGA ESZTER Gyógyszerész Osztatlan, 7. félév Debreceni Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar	
--	--

Témavezetők:

Dr. Borbás Anikó

tanszékvezető egyetemi docens, DE GYTK

Dr. Herczeg Mihály

tudományos munkatárs, DE GYTK

Véralvadásgátló hatású pentaszacharid-szulfonsav származék szintézise

Kulcsszavak: heparin; véralvadásgátló; pentaszacharid; szulfonsav; glikozilezés

A heparin a szulfatált glükózaminoglikánok csoportjába tartozó heteropoliszacharid, antikoaguláns hatása régóta ismert. A gyógyászatban véralvadásgátlóként az 1940-es évek óta alkalmazzák. Hatását az antitrombinhoz kötődve fejt ki, ezáltal blokkolja a trombint és a Xa faktort a véralvási kaszkádban. Az 1980-as évek elején fedezték fel, hogy az antitrombin aktiválását egy egyedi pentaszacharid okozza. Ezután számos kutatás indult olyan szintetikus pentaszacharid analógok szintetizálására, melyekkel a heparin mellékhatásai (vérzés, trombocytopenia, osteoporosis) kiküszöbölhetőek, és hosszabb ideig tartó biológiai aktivitással rendelkeznek. Az egyik ilyen hatásosnak bizonyuló szintetikus pentaszacharid analóg az 1987-ben szintetizált fondaparinux volt, előnye a nagyobb hatékonyság mellett a napi dózis jelentős csökkenthetősége volt. Később olyan analógok kerültek előtérbe, melyek szintézise egyszerűbb, ilyen volt a teljesen O-szulfatált és O-metilezett származék, a nagy biológiai aktivitással bíró idraparinux.

Kutatócsoportunk új típusú antikoagulánsok kifejlesztését tűzte ki céljául, melyekben a pentaszacharid farmakofór szulfátészter-csoportjait bioiszter metánszulfonsav-csoporttal helyettesítjük, ezáltal a biológiai környezetben való stabilitás növelhető. Az elmúlt években a pentaszacharid-diszulfonsav és a pentaszacharid-triszulfonsav szintézise sikeresen megtörtént. A diszulfonsav-származék az idraparinuxnál is jóval nagyobb anti-Xa aktivitást mutatott a biológiai vizsgálatok során. Ennek a nagy hatékonyságú származéknak az előállításából kiindulva újabb szulfonsav-analógok szintézisét terveztük. Jelenleg olyan pentaszacharid szintézésén dolgozom, mely egy metánszulfonsav-csoportot tartalmaz a pentaszacharid középső glükóz egységén. A védett pentaszacharid szintézise sikeresen megtörtént, [2+3] blokk szintézissel, megfelelő triszacharid akceptor és diszacharid donor egység glikozilezési reakciójával. Az átalakítási folyamat azonban további 8, pentaszacharid szinten már igen bonyolult lépést igényel, ezen átalakítási reakciósor végén jutunk a céltermékhez.

Az átalakítási reakciósort sikerült befejeznünk, a célterméket előállítottuk, így a továbbiakban tervezzük ezen származék anti-Xa aktivitásának mérését, a szerkezet-hatás összefüggések részletes vizsgálatát. Továbbá tervezzük ennek a származéknak az újragyártását, hogy nagyobb mennyiségben rendelkezésünkre állhasson további vizsgálatokhoz.

Névmutató, résztvevő hallgatók

Ádám Anna Adél	198	Dokonpil Vanessza.....	175
Alexy Andrea.....	185	Domokos András.....	69
Bálint Júlia.....	20	Dorner Norbert	254
Bálint Sára	101	Dörgő Gyula Ádám	15
Balogh Ria Katalin	80	Drávavölgyi Gábor	134
Baranyi Bernadett	135	Dúzs Brigitta.....	125
Barta Máté Gábor	73	Dürvanger Zsolt.....	87
Bata Henrik.....	149	Endre Gábor	228
Bege Miklós.....	265	Eördög Ádám	269
Béke Ferenc	262	Erdei Judit Zsuzsa	96
Benda Zsuzsanna	106	Esső Katalin.....	86
Benedek Dóra	150	Fábián Balázs	114
Bobek Janka.....	152	Fábián Beáta	162
Bogdán Fanny.....	66	Farkas Edit.....	174
Bogdándi Virág.....	216	Farkas Tamás.....	268
Borbás Enikő	131	Farsang Evelin.....	192
Boros Krisztina	127	Fehér Bence.....	45
Borsos Péter	94	Fekete Richárd.....	164
Borza Beáta.....	52	Fertig Dávid.....	104
Botyánszki Adrienn	243	Filotás Dániel	126
Broda Balázs.....	128	Fodor Szilvia	189
Buchholcz Balázs.....	30	Forgács Viktória	208
Bunda Szilvia.....	206	Fóty Nikolett.....	163
Bús Csaba	34	Földes Dávid Gábor.....	178
Czakó Éva.....	74	Frank Tamara	79
Czimer Barna.....	146	Gazsó Zita.....	55
Czobor Ádám.....	83	Gerencsér Fruzsina	25
Császár Zsófia.....	246	Gergely Máté.....	201
Cseresnyés Dóra	248	Gerner Zsófia.....	195
Dabóczi Mátyás	159	Gorgosilits Kata Krisztina	72
Dargó Gergő	13	Gönczi Barbara	28
Dávid Barnabás.....	75	Gubó Richárd	21
Demeter Fruzsina.....	241	György Csilla	42
Demeter Tamás István	244	Hajdinák Péter	83
Dénes Nóra	111	Hampel Boglárka.....	186
Derdák Diána	121	Hancsákné Dudás Csilla.....	22
Derzsi Nóra Judit	203	Hegedüs Kristóf.....	263
Dobrotka Paula	85	Hegedüs Péter.....	194

Herbay Réka	240	Kram Nassima Dorottya	74
Herczegh Tünde Csilla	118	Kunfi Attila.....	237
Hergert Tamás	230	Lasányi Dániel.....	258
Hirsch Edit.....	224	Laskai Aliz	97
Hockstock Áron.....	151	Laskay Krisztina.....	98
Homolya Ágnes	213	László István.....	39
Homolya Levente.....	259	Légrády Bonifác	120
Horváth Bernadett.....	142	Lóka Máté.....	59
Horváth Éva.....	176	Lóránt Bálint.....	59
Hovanyec Henrietta	56	Lovák Vivien	184
Hursán Dorottya.....	38	Lovász Krisztina.....	64
Huszenicza Gyöngyi.....	95	Lukács Márton.....	177
Illés Emese.....	6	Lukács Norbert	122
Jordán Sándor	249	Marsai Ádám	124
Kalmár Szabolcs	41	Mátéffy Kornél	11
Kálmista Ildikó	14	Mészáros Brigitta	27
Kánnár Dániel.....	112	Mészáros Csilla	65
Kárpáti Levente	46	Mészáros János Péter.....	173
Kató Zoltán	145	Mészáros Rebeka Ildikó	32
Katona Richárd.....	110	Mező Emerencia.....	23
Kecsenovity Egon.....	29	Mihály Réka	251
Kecskeméti Ádám.....	17	Mihálydeákpál Zsolt.....	233
Kedves Endre-Zsolt	153	Mikle Gábor	205
Keglevich András	272	Mikula Gergő János.....	31
Kinka Anikó.....	220	Molnár Ákos Máté.....	188
Király Sándor Balázs	242	Molnár Dóra	60
Kirschweng Balázs	161	Molnár Enikő.....	180
Kis-Jakab Kálmán.....	139	Molnár Éva Andrea	266
Kiss Gabriella Ilona	90	Molnár Milán.....	100
Kiss Kata.....	61	Molnár Tímea	37, 144
Kiss Krisztina.....	68	Náfrádi Máté.....	187
Kiss Melitta Patrícia	182	Nagy Flóra.....	53
Kiss Virág.....	116	Nagy Adrienn	222
Kocsi Viktória.....	66	Nagy Brigitta	16
Koltai András.....	71	Nagy Dávid Illés.....	132
Koncz Benedek Árpád.....	119	Nagy Imre	99
Konkoly Benjámín.....	191	Nagy Petra	200
Kontos János.....	108, 217	Nagyházi Brigitta	204
Koók László.....	57	Nász Boglárka	67
Koós Katalin.....	271	Nemes Evelin	252
Korcsmáros Dóra.....	255	Németh Ádám.....	88
Koronka Dániel.....	166	Nyuli Gábor Tamás	73
Kovács Benjámín.....	212	Orlovits Katalin	52
Kovács Dániel.....	236	Ozsváth András	93
Kovács Henrietta	202	Örkényi Róbert	226
Kovács Noémi	123	Pálházi Balázs.....	238
Kovács Sándor Lajos	117	Pálinkás Hajnalka Laura.....	78
Kovács Teodóra.....	33	Pálinkás Noémi.....	257
Kovács Tibor	109	Palya Dóra	10
Kozsup Máté.....	91	Papp Anita	130
Kőhegyi Bianka Kitti.....	84	Papp Máté.....	207
Kőrösi Márton.....	133	Papp Tamara.....	107

Parádi Vanda.....	151	Szakács Zoltán.....	210
Pásztói Balázs.....	158	Székely István.....	137
Pataki Zoltán Gergő.....	223	Szepesi Miklós	143
Péter Szandra	8	Szolnoki Csenge Tamara.....	199
Pikó István	219	Szöke Árpád Ferenc	43
Pogonyi Andrea	26	Szuroczki Péter.....	270
Pósán Adrienn.....	171	Takács Gergely.....	92
Póta Kristóf.....	172	Telkes Lőrinc.....	138
Pünkösti Zoltán Péter.....	264	Tihanyi Gergely.....	81
Rádai Zita.....	232	Timár Zita.....	181
Rendes Kata	9	Tomasek Szabina.....	136
Rieder Norbert	113	Tóth Edina Brigitta.....	227
Rojik Eszter	239	Tóth Orsolya.....	147
Salekovics Alexandra	58	Tóth Tamás.....	160
Samu Viktor.....	214	Tóth Zsejke-Réka	190
Sári Gréta	36	Tóth Zsuzsanna.....	105
Saszet Kata.....	153	Uhlár Zsófia.....	7
Sebő Anna.....	229	Urbán Béla.....	250
Sentes Zsombor-István	225	Vadas Dániel	40
Silai Elisabeta Ileana.....	218	Varga András Márk	156
Simon Ábel.....	148	Varga Bence	47
Simon László Ferenc	12	Varga Eszter	273
Sipos Evelin.....	44	Varga Regina.....	193
Stayer Péter Dávid.....	253	Varga Tamás.....	24
Stumphauser Tímea	165	Varga Zsófia	50
Südy Ágnes.....	82	Várhelyi Melinda.....	51
Szabó Éva	70	Varró Gábor.....	267
Szabó Gergely.....	170	Varró Nikolett.....	167
Szabó Kármén.....	54	Vörös Patrik.....	231
Szabó Mária.....	211	Ziegenheim Szilveszter	179
Szabó Tímea	157	Zwillinger Márton	256
Szabolcsi Roland Zsolt	215	Zsolnai Dániel	245

Névmutató, témavezetők

Alapi Tünde	187	Dr. Csontos István	149
Baji Zsófia	31	Dr. Dallos András	15, 25, 27, 108, 113, 163
Bakonyi Péter	52, 66	Dr. Eke Zsuzsanna	10
Balogh Szabolcs	253	Dr. Éles János	226
Bélafiné Dr. Bakó Katalin	57	Dr. Enyedő Éva Anna	90, 173
Berki Péter	26	Dr. Fábián István	211
Bocsi Róbert	72	Dr. Faigl Ferenc	230
Boros Zoltán	6	Dr. Farkas Gergely	246, 252
Capári Dániel	15	Dr. Forgó Péter	67, 191
Császár Attila	111	Dr. Földes Enikő	161
Dancs Ágnes	94	Dr. Gajda Tamás	94, 175
Deák Szilvia	230	Dr. Gál Emese	233, 254, 266
Dobosy Péter	192	Dr. Galbács Gábor	14
Dombi András	187	Dr. Gáspár Attila	17
Dr. Horváth Ottó	182	Dr. Gergely Szilveszter	70
Dr. Ádok Mónika	22, 32, 198	Dr. Gócza Elen	82
Dr. B. Tóth Szabolcs	56	Dr. Gresits Iván	150
Dr. Bakó Péter	243	Dr. Grün Alajos	132
Dr. Bakos József	246, 252, 253	Dr. Gyémánt Gyöngyi	54
Dr. Balogh György Tibor	9, 13, 69, 75, 86, 122, 131	Dr. Gyurcsányi E. Róbert	12
Dr. Baranyai Zsolt	170	Dr. Gyurcsik Béla	80
Dr. Barta Zsolt	55	Dr. Hancsók Jenő	130, 136, 143, 147
Dr. Benkő Tamás	145	Dr. Hans-Dieter Arndt	225
Dr. Berkesi Ottó	237	Dr. Haspel Henrik	24, 30
Dr. Berkó András	21	Dr. Hazai László	272
Dr. Boda Dezső	104	Dr. Herczeg Mihály	241, 273
Dr. Bognár Balázs	231	Dr. Hernádi Klára	26, 29, 167, 220
Dr. Bolla Csaba	186, 189, 190	Dr. Horváth Dezső	118
Dr. Borbás Anikó	241, 244, 265, 273	Dr. Horváth Henrietta	208, 215
Dr. Bucsi Imre	237	Dr. Horváth Krisztián	194, 219
Dr. Buglyó Péter	91, 93, 99	Dr. Hórvölgyi Zoltán	159
Dr. Cormoș Ana-Maria	148	Dr. Huszthy Péter	224, 239
Dr. Czégény Csilla	202, 203	Dr. ing. Barabás Réka	20
Dr. Czibulya Zsuzsanna	176	Dr. ing. Graziella Turdean	218
Dr. Csávás Magdolna	244	Dr. ing. Paizs Csaba	51
Dr. Csavdári Alexandra	137, 153	Dr. Inzelt György	128
Dr. Csiszár Emilia	28, 61	Dr. Jakusch Tamás	98
		Dr. Janáky Csaba	38, 156

Dr. Jancsó Attila	80, 101	Dr. Pukánszky Béla	46
Dr. Járvás Gábor	108	Dr. Rapi Zsolt	243
Dr. Jedlovsky Pál	114	Dr. Renner Károly	28, 41
Dr. Joó Ferenc	202, 203, 204, 206, 259	Dr. Riethmüller Eszter	69
Dr. Juhász László	262	Dr. Schusztér Gábor	118
Dr. Kádas István	267	Dr. Sipiczki Mátyás	65
Dr. Kaizer József	100	Dr. Sipos Pál	32
Dr. Kálai Tamás	245, 270	Dr. Sveiczér Ákos	64, 65
Dr. Kalaus György	268	Dr. Szabó Gabriella	43
Dr. Kálmán Ferenc Krisztián	172	Dr. Szalai István	125
Dr. Kárpáti Árpád	193	Dr. Szarka András	83
Dr. Kathó Ágnes	199	Dr. Székely Edit	50, 133
Dr. Katona Gabriel	20	Dr. Szilágyi András Ferenc	36
Dr. Kégl Tamás	107, 257	Dr. Szilágyi Imre Miklós	31, 33
Dr. Keglevich György	132, 232, 240	Dr. Szőri Milán	114
Dr. Kilár Anikó	8	Dr. Tardy Gábor Márk	59
Dr. Kollár László	201, 205, 257	Dr. Tircsó Gyula	172, 180
Dr. Kónya Krisztina	248	Dr. Tóth Imre	170, 174
Dr. Kónya Krisztina	255	Dr. Tóth Tünde	224
Dr. Kónya Zoltán	24, 30	Dr. Udvardy Antal	199, 206, 259
Dr. Kotschy András	228	Dr. Valicsek Zsolt	182
Dr. Kovács András	146	Dr. Varga Csilla	25, 37, 139, 144
Dr. Kovács Gábor	137, 153, 186, 189, 190	Dr. Varga Tamás	217
Dr. Kovács Tamás	79	Dr. Várnagy Katalin	92, 95, 96, 97, 171, 177
Dr. Kristóf Tamás	110	Dr. Vasas Attila	228
Dr. Kubinyi Miklós	210	Dr. Vértessy G. Beáta	78, 81, 84, 85
Dr. Kukovecz Ákos	142	Dr. Visy Csaba	38, 156
Dr. Kupai József	239	Dr. Voronova Krisztina	259
Dr. Kurtán Tibor	109, 242	Dr. Záray Gyula	192
Dr. Lente Gábor	213, 216	Dr. Zrínyi Miklós	39, 44
Dr. Lovász Tamás	225, 251, 254, 266	drd. ing. Varga Andrea	51
Dr. Lukács István	33	drd. Richard Nohl	225
Dr. Mándi Attila	109	Durkó Gábor	263
Dr. Marosi György ...	16, 40, 131, 134, 135, 138	Fehér Csaba	55
Dr. Matisz Gergely	23	Fejes Dóra	220
Dr. Mátravölgyi Béla	230	Fodor Csaba	157, 165
Dr. Mernyák Erzsébet	223, 238	Furtenbacher Tibor	111
Dr. Mészáros Katalin	11	Gombos Réka	204
Dr. Molnár-Tóth Judit	236	Hári József	46
Dr. Mucsi Zoltán	236, 271	Ható Zoltán	110
Dr. Nagy Géza	126	Hegedüs Rózsa	88
Dr. Nagy Miklós	117	Herner Andás	264, 269
Dr. Nagy Zsombor Kristóf	131	Horváth Anna	65
Dr. Nemestóthy Nándor	58, 73	Iván Béla	42, 47, 157, 158, 160,
Dr. Nguyen Duc Quang	86		162, 164, 165, 166, 185
Dr. Nyerges Miklós	271	Járvás Zsuzsa	25, 27, 163
Dr. Ősz Katalin	116	Józsa Éva	116
Dr. Pálínkó István	22, 34, 179, 181, 198	Juriga Dávid	39, 44
Dr. Patonay Tamás	249	Karancsiné Menyhárd Dóra	87
Dr. Peles-Lemli Beáta	23, 121, 195	Kasza György	42, 158
Dr. pharm. Dömötör Orsolya	90, 173	Kégl Tímea	270
Dr. Poppe László	6, 53	Kele Péter	229, 264, 269

Kontos János	113	Salma Imre	184
Kovács Szabolcs	256	Schlosser Gitta	7
Kováts Éva	178	Sinai Ádám	227
Kozmér Zsuzsanna	187	Skodáné Dr. Földes Rita	200, 207, 250
Lakk-Bogáth Dóra	100	Szabados Ágnes	105
Lluís Blancafort	106	Szabados Márton	34
Magyar Anna	7	Szabó Ákos	47, 162, 164, 166
Matyuska Ferenc	175	Szabó Judit Eszter	85
Mező Gábor	68, 74, 88	Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet	194, 219
Müller Judit	86	Szalay Péter	106, 112
Nagy László	142	Szarka Györgyi	185
Nagyné Dr. Zengő Livia	126	Tarczay György	119, 120, 212
Németh Krisztián	167	Tolnai Gergely László	258
Neuróhr Katalin	124, 127	Tóth Csaba	151
Novák Márton	10	Tóth László Richárd	217
Novák Zoltán	227, 256, 258	Turányi Tamás	214
Osváth Zsófia	160	Varga Gábor	179, 181
Pászli István	44	Varga Imre	45
Perczel András	71	Varga Tamás	212, 214
Péter László	124, 127	Vass Elemér	120
Pintér István	222	Vesztergom Soma	123
Prof. Dr. Kónya József	188	Weiser Diána	53
Prof. Dr. M. Nagy Noémi	188	Zalai Dénes	60
Rábai József	39	Zsélyné Ujvári Mária	123
Rippelné Dr. Pethő Dóra	72, 152	Zsoldosné Mády Virág	222