

XXXI. Országos Tudományos Diákköri Konferencia

KÉMIA ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ

Eszterházy Károly Főiskola Természettudományi Kar

Eger, 2013. április 4-6.



KÉMIAI ÉS VEGYIPARI
SZEKCIÓ

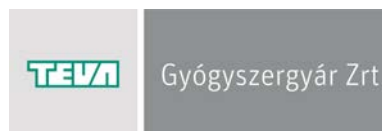


A XXXI. Országos Tudományos Diákköri Konferencia

Kémia és Vegyipari Szekciójának támogatói



EGERFOOD



XXXI. Országos Tudományos Diákköri Konferencia

Kémia és Vegyipari Szekció

Program és előadás kivonatok



Eger

2013

ISBN 978-963-08-6206-6

Konferencia szervező bizottsága

Dr. Jedlovszky Pál

ügyvezető elnök

Dr. Murányi Zoltán

ügyvezető titkár

B. Tóth Szabolcs

informatikai felelős

Komáromi Edina

hallgatói képviselő

Bartha Anita

hallgatói képviselő

Köszöntő

Az Országos Tudományos Diákköri Tanács döntése értelmében az egeri Eszterházy Károly Főiskola Természettudományi Kara kapta azt a megtisztelő feladatot, hogy házigazdája legyen a XXXI Országos Tudományos Diákköri Konferencia Kémiai és Vegyipari Szekciójának, a jövőbeni magyar kémikus generáció legkiválóbb képviselői országos seregszemléjének. A főiskola Kémiai, Borászati Kémiai és Borászati tanszéke és a konferencia szervezői nevében nagy örömmel köszöntjük a konferencia minden résztvevőjét: diákokat, témavezetőket, a zsűriben részt vevő kollégákat és minden kedves érdeklődőt.

Az Országos Tudományos Diákköri Konferenciák rendszere igazi hungarikum. A konferenciasorozathoz, amelyet kettő évenként a tudomány minden területét lefedő szekciókban rendeznek immáron több mint hatvan éve, nincs hasonló rendezvény más országokban. A diákköri konferenciákat sajátos kettősség jellemzi: egyszerre verseny ez, ahol a legkiválóbb, a tudományos kutatómunkába belekóstolt fiatal, egyetemista kollégák mérkőznek egymással, és konferencia is, melynek lényege a tudományos együttműködés, kooperáció és az egymásra való odafigyelés erősítése. A mostani konferencia szervezői is a versengés és együttműködés ezen sajátosság együttesét próbálják a következő napokban elősegíteni.

Különös öröm, hogy az Eszterházy Károly Főiskola "Eszterházy 250" nevű jubileumi tanévében (Eszterházy Károly püspök 250 éve kezdett hozzá az Egeri Egyetem megvalósításához) kerülhet sor az Országos Tudományos Diákköri Konferencia három szekciójának – köztük a Kémiai és Vegyipari Szekciónak – a lebonyolítására Egerben. Az Alkalmazott Tudományok Főiskolája címet most elnyerő intézményünk számára kiemelt fontosságú az oktatás, kutatás, illetve az eredmények disszemináció fejlesztése a természettudományok területén. Többek között ezért vállalkoztunk arra, hogy az Országos Tudományos Diákköri Tanács Kémiai és Vegyipari Szekciójának legkisebb, de dinamikusan fejlődő tagjaként első alkalommal Egerben szervezzük meg a konferenciát. Reméljük, hogy sikeres lesz a bemutatkozás mind a résztvevő hallgatók, mind pedig a szervezők részéről.

A fentiek jegyében kívánunk a konferencia minden résztvevőjének sikeres és eredményes tanácskozást, és mindemellett nagyon kellemes egeri napokat: élvezzék a város kínálta örömeit, a barokk utcákat, az egeri borokat és azt az atmoszférát, amit csak egy jó konferencia nyújthat.

Eger, 2013 március 11



Dr Jedlovszky Pál
egyetemi tanár
ügyvezető elnök



Dr Murányi Zoltán
főiskolai tanár
ügyvezető titkár

**A XXXI. Országos Tudományos Diákköri Konferencia
Kémia és Vegyipari Szekciójának fővédnöke**

Dr. Klinghammer István

felsőoktatásért felelős államtitkár

Védnökei

Habis László

Eger Megyei Jogú Város polgármestere

Dr. Hauser Zoltán

Eszterházy Károly Főiskola

rektor

A XXXI. Országos Tudományos Diákköri Tanács Kémia és Vegyipari szakmai bizottsága

Elnök

Kunsági-Máté Sándor

egyetemi docens

PTE, Pécs

Poszt elnök

Kathó Ágnes

tudományos főmunkatárs

DE, Debrecen

Pre elnök

Murányi Zoltán

főiskolai tanár

EKF, Eger

Intézményi képviselők *

Bálint Ágnes

egyetemi docens

SZIE, Gödöllő

Hórvölgyi Zoltán

egyetemi docens

BME, Budapest

Jakusch Tamás

egyetemi adjunktus

SZTE, Szeged

Jedlovszky-Hajdú Angéla

tudományos munkatárs

SOTE, Pro Scientia Aranyérmesek Társasága

Kalaus György

egyetemi tanár

BME, Budapest

Lakatos János

egyetemi docens

ME, Miskolc

Majdik Cornelia

egyetemi docens

Babes-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Ősz Katalin

egyetemi adjunktus

DE, Debrecen

Sarka Lajos

főiskolai docens

NYF, Nyíregyháza

Skodáné Földes Rita

egyetemi tanár

PE, Veszprém

Vass Gábor

egyetemi adjunktus

ELTE, Budapest

*Minden intézményt egy-egy hallgató is képvisel a Szakmai Bizottságban.

Tartalomjegyzék

Konferencia szervező bizottsága	1
Köszöntő	2
A XXXI. Országos Tudományos Diákköri Konferencia Kémia és Vegyipari Szekciójának fővédnöke	3
A XXXI. Országos Tudományos Diákköri Tanács Kémia és Vegyipari szakmai bizottsága	4
Tagozatok időbeosztása	10
<i>Anyagtudományi és szerves kémiai tagozat</i>	12
<i>Biokémia I tagozat</i>	14
<i>Biokémia II tagozat</i>	15
<i>Elméleti kémia és kémiai informatika tagozat</i>	16
<i>Élelmiszerkémia és biotechnológia tagozat</i>	17
<i>Fizikai kémiatagozat</i>	19
<i>Kémiai technológia tagozat</i>	21
<i>Kolloid-, felület-, és makromolekuláris kémia tagozat</i>	22
<i>Koordinációs kémia tagozat</i>	23
<i>Környezetkémia és környezettechnológia tagozat</i>	25
<i>Reakciókinetika és katalízis tagozat</i>	27
<i>Szerves kémia I tagozat</i>	29
<i>Szerves kémia II tagozat</i>	31
<i>Szerves kémia III tagozat</i>	32
Analitikai kémia tagozat	34
Anyagtudományi és szerves kémiai tagozat	50
Biokémia I. tagozat	67
Biokémia II tagozat	- 82 -
Elméleti kémia és Kémiai Informatika tagozat	- 96 -
Élelmiszerkémia és biotechnológia tagozat	- 112 -
Fizikai kémia tagozat	- 128 -
Kémiai technológia tagozat	- 144 -
Kolloid-, felület-, és makromolekuláris kémia tagozat	- 158 -
Koordinációs kémia tagozat	- 170 -
Környezetkémia és környezettechnológia tagozat	- 186 -
Reakciókinetika és katalízis tagozat	- 202 -
Szerves kémia I tagozat	- 218 -
Szerves kémia II tagozat	- 234 -
Szerves kémia III tagozat	- 250 -

Előadók névsora

- 266 -

Témavezetők és konzulensek névsora

- 274 -

XXXI OTDK Kémiai és Vegyipari Szekció programja**2013 április 4, csütörtök**

09.00-12.00	Regisztráció	<i>EKF Gyakorló Iskola</i>
10.00-10.50	Zsűrielnökök és a Szakmai Bizottság ülése	<i>EKF Gyakorló Iskola</i>
11.00-12.00	Megnyitó	<i>EKF Gyakorló Iskola</i>
12.00-13.30	Ebéd	<i>EKF TTK menza</i>
13.30-18.00	Tagozati ülések	<i>EKF TTK C és D épület</i>
	Analitikai kémia	C121
	Biokémia I	C124
	Elméleti kémia és kémiai informatika	C106
	Koordinációs kémia	C208
	Szerves kémia I	D117
19.00-	Fogadás	<i>Hotel Flóra</i>

2013 április 5, péntek

08.30-13.00	Tagozati ülések	<i>EKF TTK C és D épület</i>
	Biokémia II	C124
	Kémiai technológia	C106
	Környezetkémia és környezettechnológia	C121
	Reakciókinetika és katalízis	C208
	Szerves kémia II	D117
12.30-14.00	Ebéd	<i>EKF TTK menza</i>
13.30-18.00	Tagozati ülések	<i>EKF TTK C és D épület</i>
	Anyagtudomány és szervetlen kémia	C106
	Élelmiszerkémia és biotechnológia	C124
	Fizikai kémia	C208
	Kolloid- felület- és makromolekuláris kémia	C121
	Szerves kémia III	D117
18.00-19.30	Zsűrielnökök és a Szakmai Bizottság ülése	<i>EKF TTK kari tárgyaló</i>
20.00-21.00	Jazzkoncert (Jazz Faces)	<i>EKF Gyakorló Iskola</i>
21.00-	Buli (a konferencián résztvevő hallgatóknak)	<i>EKF Gyakorló Iskola</i>
21.00-	Vacsora (zsűritagoknak és a SZB tagjainak)	<i>Hotel Flóra</i>

2013 április 6, szombat

11.00-12.00	A konferencia zárása, eredményhirdetés	<i>EKF Líceum</i>
-------------	--	-------------------

Tagozatok időbeosztása

XXXI. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekció

ANALITIKAI KÉMIA TAGOZAT

április 4, C121

Elnök: **Pokol György** (BME)

Kristóf János (PE)

Forgó Péter (EKF)

- 13.30 **Farkas Attila** (BME)
Ismeretlen összetételű gyógyszerkészítmények Raman-térképezése és az adatok kemometriai elemzése
- 13.45 **Farkas István** (BME)
Transzmissziós Raman spektrometria alkalmazása a gyógyszeriparban
- 14.00 **Filotás Dániel** (PTE)
A kén-hidrogén elektrokémiai detektálása
- 14.15 **Harangi Sándor** (DE)
Minta előkészítési módszerfejlesztés üledékek és közetek elemanalitikai vizsgálatához
- 14.30 **Kindner Ildikó** (PTE)
p-nitro-fenol - formaldehid gyanta alkalmazása optikai szén-dioxid érzékelőben
- 14.45 **Kozmér Zsuzsanna** (SZTE)
Vizes oldatok Hg(II)-ion koncentrációjának meghatározására alkalmazható fluoreszcencián alapuló módszer kidolgozása
- 15.00 **Lehóczki Tímea** (DE)
A kémiai aktinometria alkalmazása diódasoros spektrofotométer, mint fotoreaktor kalibrálására
- 15.15 **Lőrincz Áron** (BME)
Gyógyszerhatóanyag polimorfia vizsgálata Raman- és IR spektroszkópiával
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Metzinger Anikó** (SZTE)
LIBS spektrumok nyomelemanalitikai információinak felhasználása minták diszkriminációjára
- 16.15 **Rác Anita** (DE)
Középkori pénzermék röntgenfluoreszcenciás elemösszetétel vizsgálata és az adatok statisztikai elemzése

- 16.30 **Simon József** (PTE)
Kétdimenziós korreláció alkalmazása a kromatográfiában
- 16.45 **Tasi Ágost Gyula** (SZTE)
Aluminát és glükonát közötti kondenzációs komplexképződési reakció Bayer-típusú oldatokban
- 17.00 **Terejánszky Péter** (BME)
Nanopipetta-alapú érzékelők nanorészecskék számlálására
- 17.15 **Tieger Eszter** (BME)
Gyógyszerjelölt molekula polimorfijának vizsgálata off-line és in-line Raman-, valamint IR spektroszkópiával
- 17.30 **Üveges Zsuzsanna** (ELTE)
A MEPS eljárás alkalmazása klórozott peszticidek és fenolok együttes GC-MS áttekintő vizsgálatában

ANYAGTUDOMÁNYI ÉS SZERVETLEN KÉMIAI TAGOZAT

április 5, C106

Elnök: **László Krisztina** (BME)

Hannus István (SZTE)

Kunsági-Máté Sándor (PTE)

- 13.30 **Capári Dániel** (PE)
Műanyag kompozitok termikus tulajdonságainak vizsgálata kalorimetriával
- 13.45 **Fórizs Balázs** (BME)
Nanométerű WO₃ gáz szenzorok: a WO₃ összetételének és kristályszerkezetének hatása a gázérzékelésre
- 14.00 **Havasi Viktor** (SZTE)
Holmiummal ko-aktivált stroncium-aluminátok szintézise és fotolumineszcens tulajdonságainak vizsgálata
- 14.15 **Kalmár Szabolcs** (BME)
Háromkomponensű PP/faliszt/elasztomer kompozitok deformációs mechanizmusa és ütésállósága
- 14.30 **Kecenovic Egon** (SZTE)
A kén hatásának vizsgálata a CCVD szintézissel előállított szén nanostruktúrák szerkezetére
- 14.45 **Kirschweng Balázs** (BME)
A kurkumin feldolgozási stabilizáló hatása Phillips típusú polietilénben
- 15.00 **Kugyela Nándor** (SZTE)
Titán-dioxid nanoszálak fotoérzékenyítése CdSe kvantum dotokkal
- 15.15 **Molnár Tímea** (PE)
Szén nanocső és kapcsoló ágens alkalmazásának vizsgálata poli(etilén-tereftalát) polimerben
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Muráth Szabolcs** (SZTE)
Szubsztituált akrilátionok [2+2] topotaktikus fotodimerizációjának vizsgálata réteges kettős hidroxidban
- 16.15 **Papp Ibolya Zita** (SZTE)
Többfalú szén nanocsövekkel módosított cellulóz-nitrát membránok előállítása és vizsgálata
- 16.30 **Péter Nóra** (SZTE)
Ón-dioxid - titán-dioxid / többfalú szén nanocső kompozitok előállítása és fotokatalitikus vizsgálata
- 16.45 **Szabados Márton** (SZTE)
Poliakrilátionok interkalálása réteges kettős hidroxidba és a kapott hibrid széleskörű jellemzése

17.00 **Szluka Nikoletta** (PE)

Biológiailag lebomló töltőanyagot tartalmazó PP kompozitok előállítása és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata

17.15 **Tóth Viktor** (SZTE)

A szárítás módjának hatása a Ca_2Al -réteges kettős hidroxid (Ca_2Al -LDH) szerkezetére, valamint a glükonát- és oxalátionok szerkezetmódosító hatásának jellemzése

17.30 **Vörös Tamás** (ELTE)

[H, C, N, Se] izomerek vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával

BIOKÉMIA I TAGOZAT

április 4, C124

Elnök: **Erdődi Ferenc** (DE)**Deák Veronika** (BME)**Dombi György** (SZTE)

- 13.30 **Bacsó András** (ELTE)
A Mycobacterium tuberculosis IPMDH enzim vizsgálatának első lépései
- 13.45 **Bali Krisztina** (SZTE)
Rákellenes Ga(III)-komplexek kölcsönhatása vérszérum-fehérjékkel
- 14.00 **Balogh Ria Katalin** (SZTE)
A CueR fémszabályzó fehérje és variánsainak előállítása, valamint kölcsönhatása "szoft" fémionokkal
- 14.15 **Batki Júlia** (ELTE)
Az uracil-tartalmú DNS sorsa ecetmuslicában
- 14.30 **Bednár András** (PE)
A szénsav-anhidráz enzim kinyerése és vizsgálata
- 14.45 **Bendes Ábris Ádám** (BME)
Virális gének expressziós szabályozásában résztvevő fehérje komplexek szerkezeti és funkcionális analízise Staphylococcus aureus-ban
- 15.00 **Bruszel Bella** (SZTE)
Antitumor Ru(II)-cimol-piridinkarbonsav komplexek oldategyensúlyi vizsgálata és kölcsönhatásuk humán szérum albuminnal
- 15.15 **Csipak Brigitta** (SZTE)
Cinkujj fehérjék tervezése, előállítása és tulajdonságaik vizsgálat
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Dancs Ágnes** (SZTE)
A humán ZnT3 fehérje lehetséges fémkötő helyeinek azonosítása
- 16.15 **Dudás Erika** (ELTE)
Rendezetlen fehérjefragmensek NMR spektroszkópiai vizsgálata: másodlagos kémiai eltolódások és translációs diffúzió
- 16.30 **Hámornik Gábor Bence** (BME)
Másodlagosan keletkező glutamát kimutatása és hatása in vitro neurotoxicitási tesztekben
- 16.45 **Kecskeméti Ádám** (DE)
Tripszin immobilizálása polidimetilsziloxán felületen fehérjék on-line bontásához

BIOKÉMIA II TAGOZAT

április 5, C124

Elnök: **Závodszy Péter** (MTA TTK)**Kardos József** (ELTE)**Kiss Attila** (EKF)

- 08.30 **Kiss Mariann** (DE)
A szuperoxid-dizmutáz enzimet modellező peptidek réz(II)- és nikkel(II)komplexei
- 08.45 **Kiss-Szemán Anna** (ELTE)
*„Nyitott az újra, méretszelekció másképp”, avagy a *Pyrococcus Horicoshii* acilaminoacil-peptidáz vizsgálata*
- 09.00 **Kovács Bertalan** (ELTE)
Béta-redők stabilitásvizsgálata párkorrelációk statisztikai és kvantumkémiai modellezésével
- 09.15 **Krekuska Hajnalka** (SZTE)
A DNS kölcsönhatása potenciális gyógyszermolekulákkal, valamint azok réz(II) és cink(II) komplexeivel
- 09.30 **Lovász Krisztina** (BME)
A hasadó élesztő G_1 -fázisú méretkontrolljának vizsgálata matematikai modellezéssel
- 09.45 **Müller Judit** (BME)
Új in vitro kémiai modell a foszfolipidózis előrejelzésére a gyógyszerkutatás korai fázisában
- 10.00 **Orgován Zoltán** (ELTE)
Egy oligopeptidáz méretszelektivitásának, szubsztrátkötésének és katalitikus mechanizmusának tanulmányozása röntgendiffrakcióval és in silico módszerekkel
- 10.15 **Pálfy Gyula** (ELTE)
Egy rendezetlen miozin fragmens, a homodimer S100A4 fehérje, illetve az egymással alkotott 'átkaroló' komplex NMR-spektroszkópiai jellemzése
- 10.30 Szünet
- 11.00 **Raics Mária** (DE)
Aszparaginsavat és hisztidint egyaránt tartalmazó hexapeptid átmenetifém-komplexei
- 11.15 **Schilli Gabriella Krisztina** (SZTE)
Az N-ColE7 metallonukleáz mutánsainak sejtmérgező sajátása
- 11.30 **Takács Gergely** (DE)
Két hisztidint tartalmazó tetrapeptid réz(II)-komplexeinek vizsgálata
- 11.45 **Zsótér Soma** (ELTE)
Uracil detektálása a DNS-ben fluoreszcensen jelölt UNG fehérjével

ELMÉLETI KÉMIA ÉS KÉMIAI INFORMATIKA TAGOZAT

április 4, C106

Elnök: **Pálinkás Gábor** (MTA TTK)

Lendvay György (PE)

Viskolcz Béla (SZTE)

- 13.30 **Árendás Péter** (ELTE)
Gráfelméleti módszerek a spektroszkópiában
- 13.45 **Benda Zsuzsanna** (ELTE)
 β -Oxoészterek ciklizációs reakciójának vizsgálata
- 14.00 **Berta Dénes, Kovács Ádám** (ELTE)
Organokatalitikus reakció mechanizmusának vizsgálata elméleti kémiai módszerekkel
- 14.15 **Fehér Péter** (DE)
A fahéjaldehid szelektív C=C hidrogénezésének vizsgálata $Ru^{II}(PPh_3)_3$ katalizálta folyamatban DFT módszerrel
- 14.30 **Földes Tamás** (ELTE)
Prolin-alapú organokatalizátor működésének elméleti vizsgálata
- 14.45 **Gyevi-Nagy László** (SZTE)
Szilánok konformációs flexibilitásának vizsgálata
- 15.00 **Mezei Pál Dániel** (BME)
Sűrűségfüggvények delokalizációs és diszperziós hibája: Hogyan teszteljük és javítsuk?
- 15.15 **Papp Dóra** (ELTE)
Amiloid szerkezetek stabilitása fehérjékben
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Papp Tamara** (PTE)
Platinakatalizált hidroformilezés regio- és enantioszelektivitásának meghatározása kvantumkémiai számítások segítségével
- 16.15 **Pós Eszter Sarolta** (ELTE)
Az adenin molekula elektrongerjesztéseinek kísérleti és elméleti vizsgálata
- 16.30 **Táborosi Attila** (PE)
Montmorillonit nanokompozitok vizsgálata számítós kémiai módszerekkel
- 16.45 **Tóbiás Roland József** (SZTE)
Az elsőrendű reakciók matematikai modellezése
- 17.00 **Tóth Zsuzsanna** (ELTE)
Alsó korlát formulák alkalmazása a sajátérték probléma közelítő megoldására
- 17.15 **Tóth Zsuzsanna** (ELTE)
Gerjesztési energia számítása molekulafragmensen

ÉLELMISZERKÉMIA ÉS BIOTECHNOLÓGIA TAGOZAT

április 5, C124

Elnök: **Biacs Péter** (EKF)**Abrankó László** (BCE)**Tömösközi Sándor** (BME)

- 13.30 **Ecsedi Anita Beatrix** (BME)
D-vitamin meghatározása füstölt szalonnából HPLC-MS-MS módszerrel
- 13.45 **Gál István** (EKF)
Fusarium illetve Aspergillus fajok által termelt toxinok degradációjának analitikai vizsgálata mûgyomorban
- 14.00 **Gubicza Krisztina** (BME)
Mezőgazdasági melléktermékek enzimes hidrolízise és a folyamat kinetikai modellje
- 14.15 **Lankó Jácinta** (PE)
Termikusan előkezelt anaerob mikrobakonzorcium alkalmazása biohidrogén előállítására
- 14.30 **Márkus Mária** (BME)
Felületmódosított szilikagél hordozók előállítása és vizsgálata szakaszos és folyamatos reaktorban felhasználható lipázok rögzítésére
- 14.45 **Molnár Zsófia** (EKF)
Mikotoxinok és metabolitjaik felhalmozódásának vizsgálata a házityúk (Gallus gallus domesticus) szervezetében
- 15.00 **Nagy Flóra** (BME)
Termer szol-gél rendszerekbe rögzített lipázok szisztematikus optimalizálása és felhasználhatósága
- 15.15 **Németh Anasztázia** (EKF)
Kiemelt jelentőségű gyógynövények, köztük a bugás macskamenta (Nepeta pannonica Linné) kivonatainak vizsgálata borászati alkalmazásokhoz
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Németh Gabriella** (PE)
Klimatikus változásokhoz alkalmazkodó kukorica hibridek bioetanol hozamának vizsgálata
- 16.15 **Pokorny Gábor** (EKF)
Jelentősebb mikotoxinok hőtranszformációjának vizsgálata élelmiszerekben eltérő térfogatnövelő szerek hatására
- 16.30 **Szabó Sándor** (EKF)
Ózon hatásának vizsgálata mikotoxinok bomlására
- 16.45 **Sztrenácsik Klaudia** (BME)
A fűrészpálma (Serenoa repens) kivonatok hatóanyagainak vizsgálata
- 17.00 **Tobak Teodóra** (BME)
Új gyógyszer technológiai eljárások fejlesztése probiotikumok szilárd formulálására és stabilizálására

17.15 **Vincze Ottília** (EKF)

Eltérő laktóz átalakítási módszerek továbbfejlesztése és optimalizálása

17.30 **Zsóka Péter** (BME)

Antivirális hatóanyag-tartalmú gyógyszerkészítmény fejlesztése és biofarmáciai vizsgálata

FIZIKAI KÉMIATAGOZAT

április 5, C208

Elnök: **Joó Ferenc** (DE)**Jancsó Gábor** (ELTE)**Szalai István** (PE)

- 13.30 **Bazsó Fanni Laura** (ELTE)
A poli(3,4-etiléndioxitifén) elektrokémiai degradációjának vizsgálata
- 13.45 **Bohner Bíborka** (SZTE)
Áramlásvezérelt mintázatképződés kalciumtartalmú csapadékokban
- 14.00 **Ditrói Tamás** (DE)
Stopped-flow készülék kalibrációjának fejlesztése
- 14.15 **Kánnár Dániel** (PTE)
Külső elektromos tér hatása Li^+ , Na^+ és K^+ -ionok grafén felületen történő adszorpciójára és diffúziójára
- 14.30 **Kaviczki Ákos** (PE)
Membrántranszport vizsgálata molekuláris szimulációkkal
- 14.45 **Király Anna** (SZTE)
Mélyhőmérsékletű kváziizotermális dielektromos spektrumok mérésének új és egyszerű módszere - rövid szénláncú alkil-karbonátok vizsgálata
- 15.00 **Kiricsfalusi Nikoletta, Lövei Alida** (DE)
Dopamin és norepinefrin oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal
- 15.15 **Koczor Bálint** (ELTE)
PIC mikrokontroller vezérlésű, gyors analóg-digitál konverter szilárd NMR spektrumok szélessávú detektálására
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Kontos János** (PE)
Többkomponensű rendszerek párolgásának modellezése
- 16.15 **Kormányos Attila** (SZTE)
Lakkáz-enzim rögzítése vezető polimer mátrixban magnetit nanorészecskék segítségével
- 16.30 **Kovács Róbert** (PE)
Szelektív iontranszport számítása póruson keresztül a Nernst-Planck egyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációval
- 16.45 **Kozmér Zsuzsanna** (SZTE)
A reaktív köztitermékek szerepe fenol vizes oldatának vákuum-ultraibolya fotolízisében és gamma radiolízisében
- 17.00 **Kunsági-Máté Éva** (BME)
Új, xantphos típusú ligandummal rendelkező arany(I) komplexek lumineszcenciájának vizsgálata

17.15 **Najbauer Eszter Éva** (ELTE)

A cisztein konformációs eloszlásának vizsgálata IR lézerbesugárzással kombinált mátrixizolációs technikával

17.30 **Pállai Zoltán** (SZTE)

SnO₂/MWCNT nanokompozitok kontrollált előállítása és vizsgálata

KÉMIAI TECHNOLÓGIA TAGOZAT*április 5, C106*Elnök: **Gubicza László (PE)****Kukovecz Ákos (SZTE)****Csiszár Emília (BME)**

- 08.30 **Babos Katalin (PE)**
Bioparaffinok izomerizációja
- 08.45 **Balogh Attila (BME)**
Olvadék alapú elektrosztatikus szálképzés alkalmazása a gyógyszer technológiában
- 09.00 **Cseh Borbárla, Sági Dániel (PE)**
Biokomponens tartalmú dízelgázolaj előállítása
- 09.15 **Danics Nóra (PE)**
Desztillációs üzem rugalmasságának vizsgálata
- 09.30 **Dezső György, Nagy Dániel (PE)**
Agresszív anionok adszorpciójának vizsgálata magnetittel borított ipari ausztenites korrózióálló acélfelületen in-situ radioizotópos nyomjelzéstechnikával
- 09.45 **Fónagy Orsolya (PE)**
Benzolszulfonsav mineralizációja nagyhatékonyságú oxidációs eljárások kombinálásával
- 10.00 **Földesi Marcella (ELTE)**
Fluoros ruténium tartalmú katalizátorok előállítása és alkalmazása transzfer-hidrogénezési reakciókban
- 10.15 **Földesi Tamás (BME)**
Amidok előállítása és a Bischler-Napieralski gyűrűzárás megvalósítása mikrohullámú körülmények között
- 10.30 Szünet
- 11.00 **Varga Dániel (BME)**
Cisz-permetrinsav diasztereomer sóképzésen alapuló resolválása szuperkritikus szén-dioxidban
- 11.15 **Ludányi András (PE)**
Hulladék zsiradékok motorhajtóanyag célú hidrogénezése
- 11.30 **Rétfalvi Nóra (ELTE)**
Szerves vegyipari alapanyagok cukorcirok alapú előállítása
- 11.45 **Török Judit (SZTE)**
Mg, Al, Cu és Ni tartalmú keverénoxid katalizátorok alkalmazása hidrodeklórozási reakciókban
- 12.00 **Lőrincz László (BME)**
Diasztereomersók kristályosítása szuperkritikus antiszolvens technológiával

KOLLOID-, FELÜLET-, ÉS MAKROMOLEKULÁRIS KÉMIA TAGOZAT

április 5, C121

Elnök: **Zrínyi Miklós** (SE)

Sinkó Katalin (ELTE)

Tombácz Etelka (SZTE)

- 13.30 **Berki Péter** (SZTE)
In₂O₃-MWCNT nanokompozitok előállítása és vizsgálata
- 13.45 **Dabóczi Mátyás** (BME)
Szabályozott hatóanyag-leadásra alkalmas pórusos szilika alapú modellrendszer fejlesztése
- 14.00 **Dobrádi Anita** (ELTE)
Gyógyszerhordozó nanorészecskék előállítása és vizsgálata
- 14.15 **Érsek Gábor** (ELTE)
Polianilin tartalmú összefonódó térhálók előállítása és vizsgálata
- 14.30 **Fülöp Gergő** (BME)
Arany nanostruktúrák létrehozása irányított önszerveződéssel
- 14.45 **Hegyesi Nóra** (BME)
Poliaszparaginsav alapú gélek valódi térhálósítási fokának meghatározása
- 15.00 **Holczér Eszter** (BME)
PDMS alapú mikrofluidikai rendszerek felületmódosítása tenzidekkel
- 15.15 **Samu Gergely Ferenc** (SZTE)
Termoelektromos tulajdonságú szénnanocsőszőnyeg/vezető polimer kompozit előállítása és jellemzése
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Solti Katalin** (BME)
Poliaszparaginsav-l-poli(N-izopropilakrilamid) kotérhálós hidrogél szintézise és tulajdonságainak vizsgálata
- 16.15 **Szilágyi Barnabás Áron** (BME)
Enzímérzékeny aminosav alapú hidrogélek szintézise és vizsgálata
- 16.30 **Ungor Ditta Anita** (SZTE)
Poli(3-hexil-tiofén)/arany nanokompozit előállítása, jellemzése

KOORDINÁCIÓS KÉMIA TAGOZAT

április 4, C208

Elnök: **Kollár László** (PTE)

Enyedy Éva Anna (SZTE)

Sóvágó Imre (DE)

- 13.30 **Bihari Zsolt** (DE)
A $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})(H_2O)_3]^{2+}$ kölcsönhatása 1-metil-imidazollal és N-acetil-hisztaminnal
- 13.45 **Borsos Katalin, Tóth Eszter** (SZTE)
pH-függő koordinációs szféra fluktuáció a réz(II) - 5-fluor-szalicilsav - 2,6-bisz-hidroxi-metilpiridin terner rendszerben
- 14.00 **Csire Gizella** (DE)
Cu(II)-bisz(imidazolil)-származékok redoxi sajátosságainak és SOD aktivitásának vizsgálata
- 14.15 **Fodor Melinda Anna** (PE)
Vízoldható mangán- és kobalt-porfirin komplexek fotokémiai és fotofizikai vizsgálata
- 14.30 **Garda Zoltán** (DE)
 Mn^{2+} -komplexek kinetikai inertségének hangolása a ligandumok szerkezetének módosításával
- 14.45 **Hancsákné Dudás Csilla** (SZTE)
A Ca(II)-ion komplexálódása cukorszármazékokkal
- 15.00 **Hüse Dániel** (DE)
A $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})(H_2O)_3]^{2+}$ kölcsönhatása hidroxikarbonsavakkal és kéntartalmú analógjaikkal
- 15.15 **Kutus Bence** (SZTE)
Erősen lúgos oldatokban képződő kalcium-heptagliukonát komplexek összetétele és egyensúlyai
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Lengyel Attila** (ELTE)
Vas(II)-dioxim komplex vegyületek Mössbauer-vizsgálata
- 16.15 **Lihi Norbert** (DE)
[O,N]-donorcsoportú ligandumok, mint potenciális vasmegkötők
- 16.30 **Nagy Gábor** (DE)
 $[Os(\eta^6\text{-}p\text{-cym})(O,O)_2]^{n+}$ komplexek előállítása és tanulmányozása különféle ligandumok esetén
- 16.45 **Parajdi-Losonczy Péter László** (DE)
A $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})(H_2O)_3]^{2+}$ kölcsönhatása α -alaninhidroxámsavval
- 17.00 **Patalenszki János** (DE)
A $[(\eta^6\text{-}p\text{-cimol})Ru(H_2O)_3]^{2+}$ kölcsönhatása kéntartalmú kis biomolekulákkal

17.15 **Szekeres Levente István** (SZTE)

Tiolcsoportokat tartalmazó vegyületek kölcsönhatása arzénessavval

17.30 **Szilvási Dániel Szilvió** (PE)

Meridionális ligandumok hatása karboxilátoréz(II) komplexek szupramolekuláris és redox tulajdonságaira

KÖRNYEZETKÉMIA ÉS KÖRNYEZETTECHNOLÓGIA TAGOZAT*április 5, C121*Elnök: **Záray Gyula (ELTE)****Gelencsér András (PE)****Kéki Sándor (DE)**

- 08.30 **Dobosy Péter (ELTE)**
Biofilm kolonizáció vizsgálata műszál alapú hordozókon
- 08.45 **Király András (BME)**
Nanoszűrés alkalmazhatósága termálvizek keménységének csökkentésére
- 09.00 **Konkoly Benjámín (EKF)**
Eltérő típusú peszticidek oxidáció hatására végbemenő degradációjának vizsgálata, a feltételezett mechanizmusok feltárása
- 09.15 **Lukács Diána (PE)**
Gadolínium-vegyületek környezeti és egészségügyi jelentősége, kromatográfiás analízise
- 09.30 **Mátéffy Kornél (KDOSZ)**
A felszíni vizeket szennyező hidrofób anyagok eltávolítása különböző polimerek alkalmazásával
- 09.45 **Megyeri Gábor (PE)**
Ionos folyadékok a mezőgazdasági hulladékok hasznosításában: úton az egylépéses előkezelés és cellulóz hidrolízis felé
- 10.00 **Merényi Anna (PE)**
Különböző foszforformák vizsgálata talajban és üledékben
- 10.15 **Mészár Etelka Zsuzsanna (ELTE)**
Aromás szénhidrogének jégen történő adszorpciójának vizsgálata számítógépes Monte Carlo szimulációval
- 10.30 Szünet
- 11.00 **Németh Zoltán (ELTE)**
Légköri nukleáció városi környezetekben
- 11.15 **Sági Gyuri (ELTE)**
Szulfametoxazol bontása ionizáló sugárzás hatására
- 11.30 **Schöffner Mónika (PE)**
Néhány szénhidrogén koncentráció-eloszlásának tanulmányozása Veszprém város levegőjében
- 11.45 **Szeremi Zsolt Róbert (PE)**
Műszaki gumihulladék újrahasznosítása
- 12.00 **Szluka Nikoletta (PE)**
Biológiailag lebomló töltőanyag alkalmazása hulladék polietilénben

12.15 **Szunyog Györgyi (DE)**

Szennyvíztisztító telepek tisztítási hatásfokának összehasonlítása különböző kémiai paraméterek vizsgálata alapján

12.30 **Tóth Balázs (PE)**

Hulladék gumiőrlemény néhány újrahasznosítási lehetősége

REAKCIÓKINETIKA ÉS KATALÍZIS TAGOZAT

április 5, C208

Elnök: **Nagy Géza** (PTE)**Gáspár Vilmos** (DE)**Szepes László** (ELTE)

- 08.30 **Bagi Nárcisz Mária** (PE)
Tiofenol katalitikus oxidációja dioxigénnel
- 08.45 **Bajusz Dávid** (DE)
Kémiai reakciók az Os(VI)-Os(VIII)-perjodátion-formiátion rendszerben
- 09.00 **Balogh Ágnes, Csimbók Ervin** (DE)
Az 1-metil-triptofán és a triptofánamid oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal
- 09.15 **Baranyi Attila** (DE)
Kationok hatása a $[RuCl_2(mtpms)_2]_2$ -komplex katalizált formiát bontásában
- 09.30 **Bogáth Dániel** (PE)
 N_3 és N_3O donor ligandumok átmenetifém-komplexeinek katalitikus hatása hidrogén-peroxiddal végzett reakciókban
- 09.45 **Bogdándi Virág** (DE)
Az izoniazid és a permanganát közötti reakció
- 10.00 **Gergely Máté** (PTE)
Palládium-katalizált aminokarbonilezési reakciók pikolilaminok jelenlétében
- 10.15 **Homolya Levente** (DE)
Új, vízoldható Pd-szalán komplexek előállítása és katalitikus alkalmazása
- 10.30 Szünet
- 11.00 **Kiss Melitta Patrícia** (PE)
Szamárium(III) ion és vízoldható, anionos porfirin reakciójának kinetikai vizsgálata
- 11.15 **Papp Máté** (PE)
Hordozóhoz kötött palládium katalizátorok vizsgálata aminokarbonilezési reakciókban
- 11.30 **Petri Balázs** (BME)
A levulinsav-etilészter és OH-gyök elemi reakciójának vizsgálata direkt kinetikai módszer alkalmazásával
- 11.45 **Rauscher Evelin** (PTE)
A tiosulfát-perjodát reakció összetett kinetikája
- 12.00 **Susánszki Anikó** (SZTE)
Etanol átalakításának vizsgálata különböző nanostrukturált TiO_2 hordozós Rh katalizátorokon

12.15 **Tóbiás Eszter** (DE)

Szulfonált SIMes Rh(I)-N-heterociklusos karbén komplexeinek alkalmazása allil-alkoholok redox izomerizációjának katalízisében

12.30 **Varga Tamás** (ELTE)

Etil-jodid pirolízis modelljének vizsgálata

SZERVES KÉMIA I TAGOZAT

április 4, D117

Elnök: **Molnár Árpád** (SZTE)**Hell Zoltán** (BME)**Skodáné Földes Rita** (PE)

- 13.30 **Ábrahám Janka** (BME)
Galanthamin intermedierek és származékok szintézise
- 13.45 **Baji Ádám** (SZTE)
1a-triazolil-5a-androsztán származékok előállítása intermolekuláris Cu(I)-katalizált cikloaddícióval
- 14.00 **Bodnár Brigitta** (SZTE)
Újszerű spiro-pirazolinek előállítása és szerkezetvizsgálata
- 14.15 **Bojtár Márton** (BME)
Fluoreszcens nukleozid-polifoszfát receptorok szintézise és vizsgálata
- 14.30 **Császár Zsófia** (PE)
Kelátképző hibrid foszfán-foszfát ligandumok katalitikus vizsgálata aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban
- 14.45 **Csókás Dániel** (ELTE)
Új típusú, planáris- és centrális kiralitással rendelkező, ferrocénnel kondenzált heterociklusos organokatalizátorok kifejlesztése
- 15.00 **Faragó Zsolt** (DE)
2-szubsztituált 2H-kromének előállítása és átalakításuk pterokarpánokká
- 15.15 **Fazekas Eszter** (BME)
Bisz(>P(O)CH₂)-aminok szintézise kétszeres Kabachnik-Fields reakcióval; A termékek NMR tulajdonságai és felhasználásuk kétfogú P-ligandként
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Feczku Gyula** (DE)
Oxigén-tartalmú heterociklusok előállítása domino reakcióval
- 16.15 **Gőz Viktória** (ELTE)
Amino-piranozil-karbonsav prekursorok szintézise gyűrűs és nyíltláncú monoszacharidokon keresztül
- 16.30 **Greccsó Nóra** (SZTE)
Izoxazolin gyűrűvel kondenzált 2-aminociklopentán karbonsav analógok sztereoizomerjeinek elválasztása ligandumcserés királis állófázison
- 16.45 **Gyenese Judit** (BME)
Halogénnel helyettesített vindolin-származékok reakciói
- 17.00 **Hadházi Ádám** (DE)
Benzil-típusú védőcsoportok szelektív eltávolíthatóságának vizsgálata szénhidrátokon

Versenyen kívüli előadás:

17.15 **Ivana Kuzminac** (SZTE)

Synthesis of potential antitumor steroid derivatives

SZERVES KÉMIA II TAGOZAT*április 5, D117*Elnök: **Pálinkó István** (SZTE)**Csutorás Csaba** (EKF)**Uray Katalin** (ELTE)

- 08.30 **Ilkei Viktor** (BME)
A (-)-bannucin és a (-)-5'-epibannucin első szintézise. A szén-szén kötés egyszerű kialakítása
- 08.45 **Kálmán Noémi** (DE)
Kísérletek dihidrokalkon-vázaz kalóriamentes mesterséges édesítőszer előállítására
- 09.00 **Kelemen Zsolt** (BME)
Egy sokoldalú organokatalitikus ionos folyadék szén-dioxid redukció?
- 09.15 **Kókai Eszter** (BME)
A 3-as helyzetben szubsztituálatlan oxindol-1-karboxamidok előállítása aminolízissel
- 09.30 **Komjáti Balázs** (BME)
A 2-izo-2-azacefém váz néhány lehetséges intermedierjének előállítása. Védőcsoport stratégiák elemzése
- 09.45 **Kovács Dániel** (BME)
Anellált pirazolo-kinazolinok előállítása
- 10.00 **Kovács Lenke** (SZTE)
Tetrahidrokinolon származékok enantioszelektív előállítása heterogén katalitikus reakcióval
- 10.15 **Laczkó Kinga** (BBTE)
Pirido[2,3-b] indolizinek szintézise mikrohullámú reaktor felhasználásával
- 10.30 Szünet
- 11.00 **Lukács Norbert** (DE)
5-, 7- és 8-brómkumarinok előállítása és Pd-katalizált aminálási reakcióik tanulmányozása
- 11.15 **Matuz Andrea** (PE)
Flavonol- és kinolin-származékok vaskatalizált dioxigénezési reakciója
- 11.30 **Mészáros Ádám** (ELTE)
2-(ariletinil)-pivalanilidek előállítása és felhasználása rézkatalizált gyűrűzárési reakciókban
- 11.45 **Németh Tamás** (BME)
Enantiomertiszta akridino-18-korona-6-éter szelektort tartalmazó királis állófázisok előállítása és vizsgálata
- 12.00 **Pál Dávid** (BME)
Fentiazin egységet tartalmazó szenzormolekulák szintézise és anionfelismerő-képességük vizsgálata

SZERVES KÉMIA III TAGOZAT

április 5, D117

Elnök: **Huszthy Péter** (BME)**Kele Péter** (ELTE)**Somsák László** (DE)

- 13.30 **Mótyán Gergő** (SZTE)
Triazol gyűrűt tartalmazó dehidroepiandroszteron származékok szintézise 1,3-dipoláris cikloaddícióval
- 13.45 **Nagy Dávidné** (BME)
Optikailag aktív P-heterociklusok előállítása és hasznosítása szintézisekben
- 14.00 **Oláh Márk** (BME)
Pseudozyma aphidis lipáz aktivitásának vizsgálata racém aminok enzimkatalizált kinetikus rezolválásában
- 14.15 **Pethő Bálint** (ELTE)
Szén-oxigén kötés kialakítása palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókban
- 14.30 **Szabó Johanna** (SZTE)
Új oxigén- és halogéntartalmú ösztromszármazékok szintézise és antiproliferációs vizsgálata
- 14.45 **Székely Anna** (ELTE)
Hipervalens jódvegyületek alkalmazása rézkatalizált oxidatív kapcsolási reakciókban
- 15.00 **Sztankovics Andrea** (DE)
Természetes eredetű glikogén foszforiláz gátló analogonjainak szintézise
- 15.15 **Tajti Ádám** (BME)
Foszfónátok és foszfinátok alkoholízise mikrohullámú körülmények között
- 15.30 Szünet
- 16.00 **Takács Judit** (BME)
Foszfa-Michael-reakciók mikrohullámú körülmények között
- 16.15 **Tóth Balázs László** (ELTE)
Szén-szén kötés kialakítása palládium centrumon végbemenő látható fény fotoredox katalízis alkalmazásával
- 16.30 **Török Zsolt** (DE)
Teikoplanin pszeudoaglikon izoindol származékainak szintézise
- 16.45 **Urbán Béla** (PE)
Aril-jodidok Heck reakciójának vizsgálata átfolyásos mikroreaktorban
- 17.00 **Varga Gábor** (SZTE)
Klórpropilezett szilikagélen kovalens kötással immobilizált Mn(II)- és Ni(II)-védett aminosav komplexek szintézise, szerkezetvizsgálata és katalitikus aktivitása

Analitikai kémia tagozat

FARKAS ATTILA

Gyógyszervegyész-mérnöki mesterszak
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK*

Ismeretlen összetételű gyógyszerkészítmények Raman-térképezése és az adatok kemometriai elemzése

Sok esetben előfordul, hogy ismeretlen összetétel ellenére is kell a gyógyszerkészítményeket jellemezni. A gyógyszerpiacokon fokozottan jelennek meg a hamis és illegális termékek, melyek gazdasági, orvosi és analitikai kihívásokat adnak. Egyrészt ezek a gyógyszerek gazdasági károkat okoznak az eredeti gyártójának, másrészt szedésükkor a hatásban hiányok vagy egyéb mellékhatások léphetnek fel. Ezért szükséges, hogy intenzív küzdelem folyjon e készítmények ellen. Nemcsak ekkor, hanem a legális gyógyszertermékek fejlesztése és gyártása közben is előfordulhatnak nem várt, ismeretlen komponensek, szennyezések.

A kísérleteim célja annak megállapítása volt, hogy Raman mikrospektrometriás térképezés és matematikai statisztikai eszközök felhasználásával hogyan tudok jellemezni ismeretlen összetevőket tartalmazó szilárd gyógyszerkészítményeket. A módszer előnye, hogy a minták vizsgálatát roncsolásmentesen végeztem el. Raman-térképezés során képződő óriási mennyiségű adatok feldolgozását több különböző kemometriai módszerrel végeztem a célok megvalósításához.

Először egy teljesen ismeretlennek feltételezett „T” modelltablettát elemeztem. Ilyen ismeretlen tabletta lehet bármely, a „feketepiacon” feltűnő tabletta is. Sokváltozós adatelemző módszerekkel fel tudtam deríteni a komponensek Raman-spektrumait és térbeli eloszlását is. Ezután a módszereket három eltérő gyártási technológiával készült modelltablettán is teszteltem. Egyes technológiai lépések a komponensek nagyon homogén eloszlását eredményezik. Ezért ilyen körülmények között is vizsgáltam, hogy technológiától függetlenül mely módszer(ek) alkalmazhatók a legjobban a tabletta összetevőinek és a technológiai tulajdonságoknak (pl. homogenitás) kimutatására.

Egyes esetekben a minták a hatóanyag polimorf szennyezőit vagy nagyon hasonló kémiai szerkezetű segédanyagokat tartalmazhatnak. Ezekben az esetekben a tiszta spektrumok erősen korrelálnak egymással. Ilyen eseteket vizsgáltam hatóanyag-polimorfok és cukropolimerek keverékeiben. Két komponensnek nemcsak a spektruma, hanem a koncentrációja is erősen korrelálhat. Ilyen típusú, szálhúzással (elektrospinning) és extrúzióval készített mintákról készítettem Raman-térképeket, melyek vizsgálatával meghatároztam a kolloid szilárd diszperziós gyógyszerformák jellegzetességeit.

A vázolt gyakorlati problémakörök megoldására sikerült a megfelelő matematikai módszereket kiválasztani.

FARKAS ISTVÁN

gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Marosi György
egyetemi tanár, BME VBK*

Transzmissziós Raman spektrometria alkalmazása a gyógyszeriparban

A gyógyszeripar minden területén kiemelt fontosságú a gyártott termékek minőségének ellenőrzése és folyamatos biztosítása. A formulálási folyamatok, illetve gyógyszerkészítmények gyártás közbeni minőségellenőrzése az analitika többi területéhez képest gyerekcipőben jár. Az utóbbi években egyre erősebben jelentkezik az igény a technológia és a termékek gyártás közbeni, illetve a gyártási lépcsőfokok közötti ellenőrzésre.

A közeljövőben a rezgési spektrometriai módszerek elterjedése várható ezen a területen. Ezt a törekvést erősíti az is, hogy a gyógyszeriparban egyre nagyobb hangsúlyt kap a teljes folyamatszabályozás (angol nevén „Process Analytical Technology”, rövidítve: PAT) igénye. Ennek során a készítménygyártás minden lépését vizsgálat kíséri, és amely által a folyamat paraméterei és a termékek jellemzői minden eddiginél jobban kézben tarthatók. A dinamikusan fejlődő rezgési spektrometriai módszerek ilyen irányú alkalmazása az utóbbi években kezd egyre elterjedtebbé válni.

Ez a célkitűzés a spektrometriai módszerek fejlesztésének is lendületet adott. A készítménygyártás folyamán gyors, megbízható, roncsolásmentes módszerek szükségesek a készítmények jellemzőinek ellenőrzéséhez. A transzmissziós Raman spektrometria mint új vizsgálati módszer a fenti elvárásoknak megfelelően illeszthető be a gyártási folyamatokba. A technika megtartja a Raman spektrometria pozitív tulajdonságait (gyors, roncsolásmentes minőségi és mennyiségi elemzés, kis koncentrációjú szennyezők pontos kvantitatív becslése) és azon túlmenően a hagyományos visszaszórásos Raman spektrometriával ellentétben előnye a minta teljes térfogatának vizsgálata, az automatizálhatóság és számos készítménytechnológiai lépés nyomon követése.

Dolgozatomban a transzmissziós Raman spektrometria alkalmazhatóságának felderítését a készítménygyártás különböző lépései során tűztem ki célul. Egy bevonási folyamat időbeli lefutását követtem a bevonó készülékből vett minták spektrometriai elemzésével. Az új módszer mennyiségi elemzésben történő felhasználását vizsgáltam meg egy hatóanyag két polimorf módosulatának különböző arányú keverékeinek mennyiségi elemzésével. Az értékelést a hagyományos módszereknél pontosabb elemzést lehetővé tévő többváltozós (kemometriai) módszerekkel valósítottam meg. A felhasznált kemometriai regressziós modelleket empirikusan és egy új, magyar fejlesztésű nemparaméteres statisztikai módszerrel is összehasonlítottam.

Kulcsszavak: kemometria, mennyiségi elemzés, polimorfia, PAT, tablettá

FILOTÁS DÁNIEL

Kémia

BSc, 5. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:
Dr. Nagy Livia
tudományos főmunkatárs, PTE TTK
Dr. Nagy Géza
egyetemi tanár, PTE TTK*

A kén-hidrogén elektrokémiai detektálása

A kén-hidrogén a NO, CO és a H₂O₂-hoz hasonlóan, az emberi szervezetben előforduló, élettani jelentőségű gáz. Fiziológiai szerepének pontos megismerése az elmúlt években a tudományos figyelem középpontjába került. A kén-hidrogén kis koncentrációban az élő szervezetben is termelődik, a kéntartalmú fehérjék valamint az aminosavak lebontásával. Pécsi Tudományegyetem Általános és Fizikai Kémia Tanszéken az elektrokémiával foglalkozó kutató csoport tagjaként a Pécsi Tudományegyetem Általános Orvostudományi Karával közös projektbe bekapcsolódhattam, amelynek fő célkitűzése a harkányi termásvíz balneológiai kutatása volt.

A harkányi termásvíz oldott kis kén-hidrogén koncentrációjú (kb. 12,4 mg/L) fürdőinek kedvező élettani hatása régóta ismert. A termásvíz H₂S gáz koncentrációja gyorsan csökken a víz nagy hőmérséklete miatt. A H₂S a szervezetbe juthat, részben a légutakon keresztül (a levegőbe diffundált H₂S gáz) és részben a fürdőzők bőrén keresztül (a vízből közvetlenül H₂S diffúzió úton). Bizonyítást igényelt a kén-hidrogén bőrön keresztüli diffúziója, amelyre kísérleti program készült. Az elektrokémiai mérési módszerek elegáns mérési lehetőséget biztosítanak elektrokémiailag aktív komponensek mérésére in vivo és in vitro. Az elektrokémiai cella kialakítása a mérési környezethez alkalmazkodva előnyösen változtatható. Az in vitro mérésekhez voltametriás szenzort sikerült kifejleszteni, amelyet az in vivo mérésekben, a bőrön keresztüli H₂S diffúzió felderítésére alkalmaztam. Meghatároztam az optimális mediátor koncentrációt, platinázott felületű munkaelektrod készítettem, amellyel a platina korongelektrodhoz hasonlóan jól detektálható lett a kén-hidrogén. A K₃[Fe(CN)₆]/K₄[Fe(CN)₆] mediátort alkalmazó amperometriás szenzor 34,7 nA/ppm érzékenységgel alkalmas kén-hidrogén mérésére in vitro körülmények között. In vivo mérésekben, kedvezően kismértékű inváziót okozva a kísérleti állatban, a beépített mérőcella jól működött. A mérések igazolják a H₂S bőrön keresztül diffúziót.

HARANGI SÁNDOR

Vegyész MSc

MSc, 4. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Braun Mihály
egyetemi adjunktus, DE TTK*

Minta előkészítési módszerfejlesztés üledékek és kőzetek elemanalitikai vizsgálatához

Sok esetben szükség van a környezeti minták fő alkotóinak meghatározására. Geológiai minták (pl. kőzetek, üledékek, talajok) esetében jól bevált módszerek állnak rendelkezésre az analízishez. A leggyakrabban alkalmazott atomspektrometriás módszerek esetében a meghatározás oldat formájában történik. Ehhez a vizsgálati minták teljes mennyiségét oldatba kell vinni. Az ICP-OES mérések időigénye mintánként maximum 2 perc, ami lehetővé teszi napi 2-300 minta meghatározását.

Kutatócsoportunk a Retyezát-hegység (Románia) tavainak öskörnyezeti változásait feltáró vizsgálatokban vesz részt. Ennek keretében több, 1700-2000 m tszf. magasságban található tó üledékéből vettünk fúrásmintákat. A fúrások 4-6 m hosszúságú magmintákat eredményeztek. Az utolsó 10-15 ezer év környezeti eseményeinek rekonstrukciójához ezeket a magmintákat 1 cm-es felbontással kell vizsgálnunk, tehát egy-egy tóhoz 400-600 üledékminta elemzését kell elvégeznünk. Ehhez a nagymennyiségű minta feltáráshoz dolgoztam ki egy gyors és alacsony költségű mintaelőkészítési módszert.

Egyszer használatos műanyag kémcsövekben 1 cm^3 37%-os sósav és 1 cm^3 38% hidrogén-fluorid elegyével, 105°C -on 2 órán keresztül végeztem feltárást. A feltárási körülményei mellett vizsgáltam a kémcsövekből esetlegesen távozó savelegy mennyiségeket, valamint a kémcsövek tömegváltozását. További kísérleteket végeztem arra, hogy mekkora az a minimális mintamennyiség, amelyet megfelelő pontossággal lehet feltárni és visszamérni. A minta előkészítési módszer tesztelését több referencia anyagon (CRM) végeztem. Ezeknek a mintáknak a szervesanyag tartalma 5-20% közötti, ennek eltávolításához a mintákat 550°C és 950°C -on hevítettem. A referencia minták elemanalízisét az eredeti minták (1), az 550°C -on hevített (2) és a 950°C -on hevített (3) mintákból nyert hamu feltárása után végeztem. Az elemösszetételt Spectroflame ICP-OES készülékkel mértem. A minta az (1) kísérletben nem, a (2) és (3) esetben viszont megfelelően feltáródott. A módszer reprodukálhatósága igen jó (RSD <5%), a vizsgált elemek esetében. Az egyszer használatos polipropilén kémcsövekből közvetlenül kivitelezhető a mérés, és alkalmasak a feltáráshoz. A referencia minták elemzésekor eltérést tapasztaltam az elméletileg várt értéktől. A mért makro elem koncentrációk kisebbek a várt értékektől. A vasnál, viszont minden esetben nagyobbak, ezért további kísérletek elvégzése szükséges ezek kiderítése végett.

KINDNER ILDIKÓ

Vegyész MSc

MSc, 1. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Dr. Kovács Barna
egyetemi docens, PTE TTK*

p-nitro-fenol - formaldehid gyanta alkalmazása optikai szén-dioxid érzékelőben

A levegő minőség ellenőrzésére, vérgáz mérésre vagy élelmiszer ipari célokra (védőgáz csomagolás, szénsavas üdítők) gyakran alkalmaznak különböző szén-dioxid szenzorokat, melyek eltérnek a működési tartományt, a válaszidőt és működési élettartamot tekintve is. Az optikai szén-dioxid érzékelők rendszerint egy polimer membránban rögzített, bázikus formába alakított sav-bázis indikátorból állnak. A működés elve, hogy a szén-dioxid egyensúlyi reakcióban a vízzel reagálva szénsavat képez. A keletkező szénsav disszociál, és protonálja az indikátor bázikus formáját. Így az indikátor bázikus és a savas formájának aránya megváltozik, amely optikai úton mérhető. Célunk olyan új polimer előállítás és vizsgálata volt, amely indikátor hozzáadása nélkül szén-dioxid szenzor készítésére alkalmas.

Munkánk során para-nitrofenolból (p-NP) és formaldehidből polimer gyantát készítettünk: A terméket dialízissel tisztítottuk. A gélpermeációs kromatográfiai eredmények alapján a keletkezett gyanta átlagosan 5-7 p-NP alegységet tartalmazott, a kalorimetriás vizsgálatok alapján széles hőmérséklet tartományban amorf anyagként viselkedik. UV-VIS spektrofotometriás méréseket végeztünk tetrahydrofurán- puffer elegyekben a polimer gyanta protonálódásának vizsgálatára. Az anyag látszólagos pK-ja közel azonosnak vehető a p-nitrofenoléval, azonban az abszorpció nem 2 pH egységen belül, hanem széthúzódva, mintegy 5 pH egységen keresztül változik. A polimer-indikátorral szén-dioxid érzékeny filmeket készítettünk. Összehasonlításként ugyanolyan összetételű rétegeket készítettünk p-NP felhasználásával. Az anyagokat kvaterner ammónium hidroxiddal bázikus formába alakítottuk és spin-coating technikával abszorpció mérésén alapuló szén-dioxid érzékeny rétegeket készítettünk. Alumínium-morin komplex hozzáadásával készítettünk belső-szűrő hatás elvén alapuló fluoreszkáló szén-dioxid szenzorokat is. Szén-dioxid/levegő elegyben felvettük a szenzorok kalibrációs görbéit, meghatároztuk a szenzorok válaszidejét, dinamikus mérési tartományát, kimutatási határát. A polimer gyantával készült szenzorok válaszideje lassabbnak bizonyult, mint a p-NP-t tartalmazó szenzoroké. A fluoreszcenciás szenzorok dinamikus tartománya a nagyobb koncentrációk felé tolódott el az abszorpció szenzorokhoz képest. Megállapítható volt, hogy az új polimer-indikátor alkalmas szenzorokban történő felhasználásra, alkalmazásával a szenzorréteget alkotó komponensek száma csökkenthető.

KOZMÉR ZSUZSANNA

Vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:**Dr. Gyurcsik Béla**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

Vizes oldatok Hg^{II}-ion koncentrációjának meghatározására alkalmazható fluoreszcencián alapuló módszer kidolgozása

A mai kor számára egyre fontosabb feladat a környezetvédelem. A szennyező forrásoknak számos formája létezik, dolgozatom témájának középpontjában az egyik toxikus nehézfém, a higany által okozott környezeti probléma áll.

A Hg^{II}-ion vegyületei főként az ivóvízben jelentenek problémát. Így eltávolítása, illetve koncentrációjának határérték (1,0 µg/l) alatt tartása fontos feladat. Az egyre szigorodó követelmények betartásához azonban az egyre kisebb koncentráció-értékek (ppm, ppb) mérésének lehetőségét is biztosítani kell a kutatóknak.

Dolgozatomban egy új Hg^{II}-ion meghatározásra alkalmas módszert dolgozunk ki. Az eljárás alapját egy Zn^{II}-ionnal 1:2 arányban fluoreszkáló komplexet alkotó TFLZn elnevezésű szerves festék adja, amely festék mellől Hg^{II}-ionnal kompetíció során kiszorítható a Zn^{II}-ion. A folyamat közben kialakuló nagy stabilitású Hg^{II}-festék komplex nem fluoreszkál, és a kiszorítás lineáris intenzitáscsökkenéssel jár. Ez lehetővé teszi a Hg^{II}-ion mennyiségének egyszerű kvantitatív meghatározását.

Kísérleteimben a festék titrálásával fokozatosan kialakított Zn^{II}-festék komplex fluoreszcenciájának intenzitását mértem 400 és 600 nm hullámhossztartományban 360 nm-en történő gerjesztést követően. A maximális fluoreszcencia 495 nm-en volt mérhető.

Korábbi kutatásaimban módosított baktériumtenyészetek Hg^{II}-ion akkumulációját vizsgáltam, azonban a baktériumok táplálékául és életteréül szolgáló LB tápoldat Hg^{II}-ion koncentrációjának meghatározása problémát okozott. Egy ilyen vizes tápoldat Hg^{II}-ion koncentrációjának mérésére is kipróbáltam az új módszert. Ennek érdekében először megvizsgáltam a Zn^{II}-festék komplexhez adagolt tápoldat, majd a Hg^{II}-tartalmú tápoldat hatását. Ugyan meglepő módon a tápoldat hatására a fluoreszcencia intenzitása lineárisan nőtt, de ez a Hg^{II}-ionok hatását nem befolyásolta.

Kísérleteim alapján elmondható, hogy sikerült egy olyan, fluoreszcencián alapuló módszert találnom, amely alkalmas Hg^{II}-koncentráció meghatározásra vizes oldatok mellett tápoldatos mintákban is 0,080 ppm-es koncentrációig.

LEHÓCZKI TÍMEA

Biomérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Ósz Katalin
egyetemi adjunktus, DE TTK*

**A kémiai aktinometria alkalmazása diódasoros spektrofotométer,
mint fotoreaktor kalibrálására**

Munkám során egy olyan, módosított aktinometriás módszert fejlesztettem ki, amely alkalmas viszonylag kis fényintenzitású fotoreaktor (esetemben diódasoros spektrofotométer) fotonáramának a meghatározására. A mérés során trisz-oxaláto-vas(III) fotokémiai bomlását követtem spektrofotometriás módszerrel. A mérés során a besugárzási idő beállításánál fontos, hogy a változás a teljes bomlási reakciónak mindössze néhány (max. 5-10) %-a legyen, ugyanakkor a változás már jól látszódjon. Ehhez a spektrofotométer, mint fotoreaktor alkalmazásánál 30 perces, míg a spektrállámpás méréseknél kb. 30 másodperces idő volt elegendő. A méréseket 390 nm-en követtük.

A minta 1-1,5 mg $K_3[Fe(C_2O_4)_3]$ (trisz-oxaláto-vas(III)-at) és $2,5\text{ cm}^3$ $0,050\text{ mol/dm}^3$ kénsavat tartalmazott.

A képződött vas(II) mennyiségét nem egy külön, dipiridiles vagy o-fenantrolinos komplexképzéses mérésben határoztam meg, hanem a trisz-oxaláto-vas(III) mintában 390 nm-en bekövetkező abszorbanciacsökkenés alapján:

$Fe(II)\text{ koncentráció} = \Delta A(390\text{ nm})/357,44$

A módszer előnye, hogy nem szükséges külön mérésben meghatározni a képződött vas(II)-t, a környezetből, minta előkészítés során bekerülő fény nem okoz hibát (a fotométerben lévő mintát – hacsak nem szándékosan világítom meg felülről – csak a spektrofotométer fénye éri a mérés ideje alatt), az idő mérését szintén a spektrofotométer végzi kinetika üzemmódban.

Ezen módszerrel meghatároztam egy AnalytikJena diódasoros spektrofotométer által egy 1 cm-es úthosszú küvettába kibocsátott fotonáramot 190-1100 nm között, azaz a fotométer teljes működési tartományában, illetve egy, a mintát felülről megvilágító spektrállámpa fotonáramát 365 nm-en. Ennek értéke a fotométerben található lámpák teljes hullámhossztartományára összegezve $1,7 \cdot 10^{15}$ foton/s, a spektrállámpával bemutatott elrendezésében pedig ez az érték $9,274 \cdot 10^{15}$ foton/s 365 nm-en

LŐRINCZ ÁRON

Alkalmazott Biotechnológia

BSc, 9. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Gergely Szilveszter
egyetemi docens, BME VBK**Dr. Kiss Violetta
kutató-fejlesztő, Zentiva csoport, Prága*

Gyógyszerhatóanyag polimorfia vizsgálata Raman- és IR spektroszkópiával

A gyógyszergyártás és -kutatás területén napjainkban már elengedhetetlen fontosságú, a szilárd halmazállapotú gyógyszerhatóanyagok vizsgálata. Az eltérő formák ugyanis, eltérő fizikai-kémiai tulajdonsággal rendelkeznek, amik döntően befolyásolják annak felhasználhatóságát. A szerves molekulák polimorfijának vizsgálata nagyon összetett és szerteágazó tudományág, ami számos kihívás és probléma elé állítja a témával foglalkozó kutatókat. A problémák tanulmányozása és megoldása pedig megköveteli a különböző analitikai módszerek együttes, harmonikus alkalmazását.

Az új technikák megjelenése segíti a felmerülő kérdések mélyebb tanulmányozását, valamint lehetőséget adnak olyan új folyamatlemező technológiák (Process Analytical Technology, PAT) kifejlesztésére, amelyek segítségével átfogóbb képet alkothatunk a problémakörrel. A szélesebb ismeretek pedig lehetőséget adnak pontosabb elemzések készítésére, a technológiák finomítására és a gyártástechnikák jobb szabályozására.

Kísérleteimet Raman-mikroszkóppal és -szondával valamint infravörös spektrométerrel végeztem. Méréseim célja a vizsgált hatóanyag polimorf módosulatainak minőségi analízise, valamint annak a kérdéskörnek a megvizsgálása, hogy a Raman-száloptika segítségével lehetséges-e a molekulánk polimorf transzformációs folyamatának in-line, valós idejű nyomon követése.

METZINGER ANIKÓ

Vegyész MSc

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:
Dr. Galbács Gábor
egyetemi docens, SZTE TTIK*

LIBS spektrumok nyomelemanalitikai információinak felhasználása minták diszkriminációjára

A lézer indukált plazma vagy letörési spektroszkópia (röviden LIPS vagy LIBS) a lézerrel segített atomemissziós spektroszkópiái (AES) módszerek csoportjába tartozik. A LIBS spektrometria egy fókuszált impulzusüzemű lézer fényét felhasználva bontja le a mintát, és atomizálja, gerjeszti, ionizálja a minta alkotóit. Gyors mikroanalitikai módszer, amely nagyon rövid analízis időt kínál, és segítségével a minták kvantitatív és kvalitatív elemzésére halmazállapotuktól függetlenül, mintaelőkészítés nélkül és akár in situ vagy távolról is végrehajtható. A minták diszkriminációja gyakori és fontos analitikai feladat például a bűnügyi, jogi, gyógyszeripari, stb. alkalmazások során, ezért folyamatos igény mutatkozik újabb és újabb analitikai módszerek kifejlesztésére, amelyekkel a minták eredetvizsgálata, azonosítása elvégezhető. Mivel a LIBS spektrumok intenzitás-arányai a mintára és a kísérleti körülményekre utalóan igen jellegzetesek, sok információt hordoznak („ujjlenyomat”), ezért várhatóan megfelelő adatkiértékelés esetén a minták azonosítására, diszkriminációjára is használhatók. Munkám során célul tűztem ki, hogy a LIBS spektrumok ezirányú felhasználási lehetőségeit megvizsgáljam néhány kiválasztott, gyakorlati jelentőséggel bíró szilárd mintatípus (papírminták, nyomatok és forrasztófém ötvözetek) esetén. A kutatócsoportunk által kifejlesztett LIBS kísérleti rendszerekkel dolgoztam, amelyek egy gyors triggerelésű, kétsatornás, száloptikás CCD spektrométer (Avantes) és egy Nd:GGG típusú szilárdtest lézer (Technoorg-Linda) köré épültek. A felvett spektrumokat az Origin (Originlab), Office Excel (Microsoft) és Peax (Systematix) szoftverekkel értékeltem ki. Összesen 49 papír- és nyomatminta, valamint húsznál több Sn-Pb ötvözet LIBS spektrumát vettem fel különböző kísérleti körülmények között és a kapott spektrumokat három különböző numerikus módszer (átfedési integrál, lineáris korreláció és eltérés négyzetösszeg) felhasználásával, a függvényértékek 0-1 tartományra történő normálása révén hasonlítottam össze egymással. A vizsgálatot spektrális maszkolás alkalmazásával is elvégeztem. Megállapítottam, hogy az alkalmazott numerikus eljárások révén a LIBS spektrumok eredményesen alkalmazhatók a minták megkülönböztetésére még olyan esetekben is, amikor a spektrumok összehasonlítását csak a nyomszennyezőkre jellemző spektrumtartományokban végezzük el. A sikeres diszkriminációhoz nem szükséges előzetes spektrális háttérkorrekciót sem végezni.

RÁCZ ANITA

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Elek János
ügyvezető, Science Port Kft.*

Középkori pénzermék röntgenfluoreszcenciás elemösszetétel vizsgálata és az adatok statisztikai elemzése

A kézi kialakítású, kisméretű készülékek megjelenése óta, a röntgenfluoreszcencia spektroszkópiát [1] az analitikai és ipari gyakorlatban egyre elterjedtebben alkalmazzák fémek, fémötvözetek vizsgálatára. Alapja, hogy a minta felületét röntgensugárzással gerjesztve, a visszasugárzott röntgenfluoreszcencia spektrum felvételével gyakorlatilag mintaelőkészítés nélkül, roncsolásmentesen, percek alatt nyerhetünk információt az adott felület kémiai összetételéről.

A módszert a fent említett tulajdonságok különösen alkalmassá teszik érzékeny régészeti leletek vizsgálatára. Az elemösszetétel ismerete a felhasznált nyersanyagon kívül a fémérc származási helyéről is felvilágosítást nyújthat, valamint az egyes elemek koncentrációváltozásából bizonyos gazdaságtörténeti tényekre is következtethetünk.

Kutatómunkám során a debreceni Déri Múzeum éremtárában található ezüstpénzeket vizsgáltam, az Árpád-kori leletektől a Vegyesházi-királyokig bezárólag. A kutatás célja az volt, hogy a kémiai információink alapján a pénzerméket minél pontosabban tudjuk a különböző korszakokhoz rendelni, vagyis olyan modellek építése, amelyekben a pénzermék történelmi korszakok szerint csoportosítva jól elkülöníthetők egymástól. A modellépítések során azt is meghatároztam, hogy szükségünk van-e a teljes spektrumra, vagy elegendők az elemösszetétel adatok felhasználása a kiértékeléshez, valamint hogy melyek azok a kis százalékban jelen lévő, de olyan hasznos komponensek az egyes mintákban, amely alapján egymástól elkülöníthetővé válnak. Négyféle kemometriai módszert alkalmazva [2] (PCA, LDA, CART, PLS) a vizsgált mintákat történelmi korszakok szerint két csoportra bontva, a kémiai összetételek felhasználásával 76-78%-ban helyes osztályozást kaptunk az érmékre.

Az Object Target Rotation módszer [3] segítségével további összefüggéseket fedezhettünk fel az Árpád-ház korai és késői szakaszában vert pénzermék között. Az érdekes egyezések oka minden bizonnyal a pénzermék újraveretésében keresendő, ami a középkorban igen elterjedt szokás volt.

Az érmék kémiai összetétele alapján végzett kemometriai elemzések tudományosan megalapozott eredményekkel segíthetik a korszakokba való besorolást, fedhetnek fel eddig nem bizonyított összefüggéseket, kiegészítve ezzel a régészek és numizmatikusok munkáját.

[1.] Beckhoff B., Kanngießer B., Langhoff N., Wedell R., Wolff H. - Handbook of Practical X-ray Fluorescence Analysis. Springer, Berlin, 2006

[2.] T. Hastie, R. Tibshirani, J. H. Friedman – The Elements of Statistical Learning, Springer, 2001

[3.] Olav M. Kvalheim - Latent-Structure Decompositions (Projections) of Multivariate Data, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2, 283-290, 1987

SIMON JÓZSEF

Vegyész

MSc, 3. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Dr. Felinger Attila
egyetemi tanár, PTE TTK*

Kétdimenziós korreláció alkalmazása a kromatográfiában

A kétdimenziós korrelációs spektroszkópia egy évtizedek óta sikeresen használt módszer kémiai rendszerek vizsgálatára. Az 1976 óta fejlődő tudományág alkalmazhatóságát már széles körben bizonyította. Egyszerű molekuláktól elkezdve polimereken keresztül egészen bonyolult biomolekulákig számos anyagról szolgáltatott értékes információt. A rendelkezésére álló mérőműszerek palettája is igen sokszínű. Bár alapvetően spektroszkópiai mérések adják a módszer alapját, mint NMR-, IR-, NIR-, FT-IR-, Raman-, látható-, UV-, röntgen-, fluoreszcencia- vagy tömeg spektroszkópia, mára már egyéb területekre is kiterjedt. Ilyen például a mikroszkópia vagy termogravimetria. Látványos térhódítása ellenére a kétdimenziós korrelációs analízis az elválasztás-technikákban még nem vetette meg a lábát. A kromatográfiában is csupán néhány cikk látott napvilágot. Ezeknek a publikációknak is legtöbb esetben a gélkromatográfia a célterületük, vagy a módszer egy speciális formáját a minta-minta korrelációs analízist használja.

Kísérleteimmel azt vizsgáltam, hogy az alapvetően spektrumokra tervezett algoritmusok kromatogramok vizsgálatára milyen körülmények között, milyen hatáskörrel vehetők be. Először felállítottam egy olyan, az aktuális problémára könnyen szabható számítási módszert az ingyenesen elérhető R project nevű matematikai program segítségével, amivel adatok széles körének vizsgálatára nyílik lehetőség. Második lépésben feltérképeztem a kétdimenziós spektrumok tulajdonságait, nevezetesen a kromatogramok változására milyen képet adnak. Végül egy HPLC oszlopok összehasonlítását tartalmazó mérésből származó adatokat felhasználva mutattam be, hogy az elmélet határain túl, a gyakorlatban is valós potenciál bújik meg az eljárásban.

Munkám során sikerült felállítanom egy olyan széleskörűen használható módszert, amivel egyszerre nagyszámú kromatogram hasonlósága és különbsége könnyen elemezhető.

TASI ÁGOST GYULA

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Sipos Pál**egyetemi docens, SZTE TTIK**Dr. Pallagi Attila**tudományos munkatárs, SZTE TTIK*

ALUMINÁT ÉS GLÜKONÁT KÖZÖTTI KONDENZÁCIÓS KOMPLEXKÉPZŐDÉSI REAKCIÓ BAYER-TÍPUSÚ OLDATOKBAN

A D-glükonát (Gluc^-) egy közismert kristályosodási mérge a gibbszinek, Bayer-típusú, erősen lúgos oldatokban (Chem. Eng. Res. Des, 74, 1996 828.), ugyanakkor más publikáció (Polyhedron, 27, 2008 118–124.) szerint, az erősen lúgos pH-kon nincs kölcsönhatás közte és az oldatban lévő Al(III) komplexek között. Erősen lúgos közegben az $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ és Gluc^- közötti kölcsönhatást multinukleáris NMR-spektroszkópia segítségével bizonyítottuk. A spektrumokon az alumínáthoz tartozó ^{27}Al NMR jel intenzitása a Gluc^- mennyiségének növelésével fokozatosan lecsökkent, majd teljesen beleolvadt az alapvonalba. A két részecske közötti kölcsönhatást az oldatok fagyáspontcsökkenése is igazolja, mivel annak számolt és mért értéke között jelentős különbséget tapasztalható. Potenciometrikus vizsgálataink azonban (az irodalommal összhangban; Polyhedron, 27, 2008 118–124.) nem utalnak a két részecske közötti komplexképződésre $\text{pH} \geq 12$ oldatokban. A kvantitatív ^1H NMR mérések során három különböző teljes hidroxid-ion koncentrációnál, $[\text{OH}^-]_{\text{tot}} = 0,500; 1,000; 1,667$ M-on elkészített oldatsorozatok spektrumait rögzítettük. A komplexhez rendelhető csúcsok integráljainak illesztésekor 1:1 arányú komplex képződését határoztuk meg, illetve a stabilitási állandójára $\log K_{1,1} = 2,5 \pm 0,5$ közötti értéket becsültünk, melyet $[\text{OH}^-]_{\text{tot}} = 0,250$; ill. $0,650$ M-on ($I = 1,00$ M, NaCl) végzett polarimetriás méréseinkkel is alátámasztottunk. Megállapítottuk, hogy a vizsgált komplexképződés erősen lúgos oldatokban pH-független folyamatnak, kondenzációs reakciónak tekinthető. A rendszerünk Raman spektroszkópiás, illetve konduktometriás vizsgálatai összhangban vannak ezzel a munkahipotézissel.

Az UV-Vis spektrofotometriás méréseink alapján kijelenthető, hogy a Gluc^- (1C) karboxilát csoportja nem vesz részt a koordinációban. Hőmérsékletfüggő ^1H NMR méréseink alapján a Gluc^- 2. ill. 3. C-atomjához kapcsolódó alkoholát-csoportok koordinációja valószínűsíthető a komplexen belül. Eredményeink alapján javaslatot tettünk a tetraéderez geometriájú, lúgos körülmények között kondenzációs komplexképződési folyamatban kialakuló „AlGluc” komplex lehetséges szerkezetére vonatkozóan.

TEREJÁNSZKY PÉTER

Vegyésszámológész szak, nappali okleveles MSc
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésszámológész és Bioméregész Kar

*Konzulens:
Dr. Gyurcsányi Ervin Róbert
egyetemi docens, BME VBK*

Nanopipetta-alapú érzékelők nanorészecskék számlálására

Kulcsszavak: Coulter-számláló, elektrokémiai szenzor, ellenállás-impulzus technika, nanopórusos érzékelés, részecskeméret meghatározás

A nanoszerkezeteken alapuló meghatározásokat a bioanalitika legérzékenyebb módszerei között tartják számon, sok esetben ugyanis lehetővé teszik az érzékelési folyamat molekuláris szintű kontrollját, és akár egyetlen molekula detektálásához szükséges érzékenységet. Ilyen tulajdonságokkal bírnak a nanopórusos érzékelők is, amelyek kifejlesztését a sejtmembránba ágyazott ioncsatornák működési mechanizmusa inspirálta. A nanopórusos érzékelés egyik legperspektivikusabb területét a biológiai és szintetikus eredetű nanorészecskék meghatározása képezi. Ezen a területen munkám célkitűzése olyan szintetikus nanopórusok előállítására volt, amelyek alkalmasak nanorészecskék méretének és koncentrációjának meghatározására. Ennek érdekében kvarc kapillárisokból mikro- és nanopipettákat állítottam elő, amelyek egyetlen, kónuszalakú pórust tartalmaztak. A javasolt eljárással igény szerinti méretben, páratlan egyszerűséggel és költséghatékonysággal állíthatók elő nanopórus érzékelők. Ezek kialakításához 200 nm és 6 μm közötti átmérőjű kvarcpipettákat készítettem, amelyeket elektrolittal töltöttem fel és egy Ag/AgCl referencia elektródot tartalmazó pipetta befogóba illesztettem. A számlálási kísérleteknél a pipettákat a mintaoldatba merítettem, majd a minta- és belső oldatba merülő referencia elektródok között, konstans feszültség mellett, a póruson átfolyó áramot mértem. A póruson áthaladó nanorészecskék a térfogatukkal megegyező, nagy vezetési elektrolitot kiszorítva a pórusból tranzienst pórusellenállás növekedést, karakterisztikus áram pulzusokat eredményeztek. Ezeknek a pulzusoknak a frekvenciája a részecske koncentrációval, míg az amplitúdójuk a részecskék méretével volt arányos. Kísérleteimben úgy találtam, hogy a részecskeszámlálás leghatékonyabb módja, hogy hidrosztatikai nyomáskülönbség alkalmazásával áramoltassam a nanorészecskéket tartalmazó oldatot a póruson keresztül. Amennyiben a nanorészecskék felületi töltéssel rendelkeznek, a számlálási frekvenciát nagyban befolyásolta az alkalmazott feszültség polaritása és nagysága is. Ezeket a tendenciákat vizsgáltam különböző méretű gömb alakú nanorészecskékkel megfelelő méretű pórusokat alkalmazva. A részecskeszámlálás legkritikusabb problémája - a nanorészecskék aggregációja a pórus környezetében - elkerülése végett optimalmáltam a számlálás kísérleti körülményeit.

Összefoglalásként, kidolgoztam az első nanopipetta alapú számlálókat és eljárásokat, amelyek lehetőséget adtak gömb alakú polimer részecskék mennyiségi meghatározására 60 nm és 2 μm -es átmérő között, továbbá akár egymástól kevéssé eltérő méretű nanorészecskék megkülönböztetésére az áram pulzusok amplitúdói és időtartamai alapján.

TIEGER ESZTER

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Gergely Szilveszter
egyetemi adjunktus, BME VBK**Dr. Kiss Violetta
fejlesztőmérnök, Zentiva - a Sanofi csoport tagja*

Gyógyszerjelölt molekula polimorfijának vizsgálata off-line és in-line Raman-, valamint IR spektroszkópiával

A gyógyszer-hatóanyagok polimorfijának vizsgálata kiemelkedő fontosságú, hiszen a polimorf módosulatok az eltérő kristályszerkezetből eredően eltérő fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, így a biológiai hasznosulást is döntően befolyásolják.

Raman-mikroszkóppal és infravörös mikroszkóppal végzett kísérleteim célja a vizsgált anyag polimorf módosulatainak vizsgálata, a módosulatok közötti spektroszkópiai különbségek keresése, az eredmények minőségi (kvalitatív) elemzése többváltozós adatelemző módszerekkel: főkomponens analízissel és csoportanalízissel.

A valós idejű (real-time) mérési technikák alkalmazása egyre terjed az ipar számos területén, de különösen fontos a gyógyszeripari folyamatok során. A Raman-szondával történő vizsgálataim célja a polimorf módosulatok minőségi meghatározása szuszpenzióban, illetve átkristályosítás során, a dinamikus változó reakcióközeg nyomon követése akár magas hőmérsékletű, kevert rendszerekben statisztikai és többváltozós adatelemző módszerek segítségével. A Raman-spektroszkópia in-line alkalmazásával a kristályosítási eljárás monitorozható, kemometriai módszerek használatával pedig a folyamat során lezajló változások is nyomon követhetők.

A Raman- és infravörös spektroszkópia egymást kiegészítő információt ad a vizsgált molekula rotációs-vibrációs állapotairól, így a két módszer együttes alkalmazásával a vizsgált mintáról szélesebb körű ismeretekhez juthatunk. Az így kapott adatmátrixok kiértékelésében a többváltozós adatelemző módszerek nyújtanak segítséget, melyek által a vizsgált rendszerekről újabb, komplexebb képet alkothatunk.

ÜVEGES ZSUZSANNA

Környezettudomány

MSc, 9. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Eke Zsuzsanna
adjunktus, ELTE TTK*

A MEPS eljárás alkalmazása klórozott peszticidek és fenolok együttes GC-MS áttekintő vizsgálatában

Napjaink intenzív ipari és mezőgazdasági tevékenysége következtében környezetünket erős és sokrétű terhelés éri. A sok esetben bizonyítottan negatív hatások következtében az utóbbi évtizedekben egyre meghatározóbbá válik a környezettudatos szemlélet. A hatékony környezetvédelem fontos eszközét képezhetik az olyan analitikai mérési módszerek, melyekkel szimultán kimutathatóak az eltérő szennyező forrásból származó komponensek. Ilyenek a GC-MS áttekintő eljárások. E gázkromatográfiás vizsgálatok lényege a minél többféle vegyület együttes, határérték alatti koncentrációban történő kimutatása, amivel minimalizálhatjuk a vegyület specifikus analitikák számát.

Munkám során két olyan eltérő vegyületcsoport - a fenolok és a klórozott növényvédő-szerek - tagjainak együttes mérési lehetőségeit vizsgálom, melyek esetén mind környezetünkben való előfordulási gyakoriságuk, mind pedig toxicitásuk igazolja tanulmányozásuk szükségességét. A munka nehézségét jelenti, hogy ezen vegyületek fizikai-kémiai tulajdonságaikban jelentős eltérések vannak.

Az áttekintő vizsgálatok csak a megfelelő detektálási határok (Limit of Detection, LOD) értékeinek elérése esetén alkalmasak a minták előválogatására. Ezért munkám során arra törekszem, hogy a jogszabályokban előírt határértékeknél kisebb mennyiségek is biztonsággal kimutathatóak legyenek. A módszer újdonságát képezi, hogy a szabványokban szereplő, és a ma is leginkább elterjedt folyadék-folyadék extrakciót, mint minta-előkészítési módszert egy viszonylag új technikával, a környezettudatos szempontoknak is megfelelő MEPSTM-szel váltom ki.

Anyagtudományi és szerves kémiai tagozat

CAPÁRI DÁNIEL

Biomérnök

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulens:
Dallos András
egyetemi docens, PE MK*

Műanyag kompozitok termikus tulajdonságainak vizsgálata kalorimetriával

Az autóipar egyre nagyobb mértékben használ polimerekből, valamint a nagy felületi energiájú töltőanyagokból és adalékanyagokból álló kompozitokat. A kompozitok tulajdonságait az összetétel, a szerkezet és a komponensek jellemzői mellett a polimer/töltőanyag határfelületi kölcsönhatások erőssége befolyásolja. A hagyományos polimerek és adalékanyagaik termikus sajátosságainak ismerete (átmeneti hőmérsékletek, olvadáspont, üvegesedés, kristályosodás, termikus stabilitás, hősokktűrő képesség, bomlás) nélkülözhetetlen a feldolgozhatóság és a várható élettartam szempontjából. A kompozitok termikus viselkedése, a hőmérséklet-változás hatására bekövetkező szerkezeti változásai, oxidációs stabilitása, degradációja és a részlegesen kristályos polimerek kristályosodási jellemzői kalorimetriás módszerekkel jól vizsgálhatók. A differenciális pásztázó kalorimetria (DSC) igen alkalmas módszer annak megállapítása, hogy milyen hőmérsékleten következnek be ezek az átalakulások, valamint, hogy ezekhez az átmenetekhez milyen hőeffektusok kapcsolódnak.

Kísérleteim során Setaram C80 típusú reakciókaloriméterrel végeztem DSC méréseket különböző módon gyártott PET polimer mintákon. Kutatásaim arra irányultak, hogy az eltérő gyártási és kísérleti körülmények miként befolyásolják az üvegesedésre, a hideg kristályosodásra, jellemző hőmérsékleti és kalorikus értékeket, valamint a kristályképződés kinetikáját.

FÓRIZS BALÁZS

Gyógyszervegyész-mérnök MSc
MSc, 1. félév
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulens:
Dr. Szilágyi Imre Miklós
tudományos munkatárs, BME VBK

Nanoméretű WO₃ gáz szenzorok: a WO₃ összetételének és kristályszerkezetének hatása a gázérzékelésre

Nanoméretű WO₃ gáz szenzorok: a WO₃ összetételének és kristályszerkezetének hatása a gázérzékelésre.

A gázszenzoroknak számos fajtája létezik, pl. félvezető alapú, optikai alapú, elektrokémiai alapú, nemesfém alapú gázszenzorok. A gázszenzorok versenyében a meghatározó tényezők az érzékenység, kimutatási határ, megbízhatóság, stabilitás és az ár. Kutatásunk során félvezető, nanoméretű WO₃-ot használtuk mint érzékelő anyagot. A WO₃ ismert anyag a gázszenzorok világában, viszont célzottan még nem keresték a választ arra, hogy az összetétele - amely használat közben esetlegesen kis mértékben megváltozhat – és a kristályszerkezete hogyan befolyásolja az érzékelést (a jelváltozás gyorsaságát, minőségét stb.).

Kutatómunkánk során a WO₃-nak a két legfontosabb kristályos módosulatát (monoklin és hexagonális) szabályozott összetétellel (oxidált/sárga színű és redukált/kék színű) állítottuk elő, és tanulmányoztuk a WO₃ szerkezetének és összetételének hatását a gázérzékelésre. Az 50-100 nanométeres szemcsékből álló WO₃ mintákat a hexagonális-ammónium-oxid bronz, (NH₄)_xWO₃-y hevítésével állítottuk elő. A WO₃ minták kristályszerkezetét a hevítés hőmérsékletével, az összetételét pedig hevítés atmoszférájával szabályoztuk. A minták előállítását termikus analízissel (TG/DTA-MS) követtük nyomon. A minták szerkezetét, összetételét, morfológiáját és optikai tulajdonságait por-röntgendiffrakciós (XRD), Raman, diffúz reflexiós UV-VIS, és röntgen-fotoelektron spektroszkópiái (XPS) mérésekkel, valamint pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM) és elektrondiffrakcióval kombinált transzmissziós elektronmikroszkópiával (TEM-ED) derítettük fel. A négy fajta mintából gázszenzor „chip”-eket készítettünk, és három különböző hőmérsékleten (120 oC, 200 oC, 300 oC), NH₃ tesztgáz alkalmazásával, hét különböző koncentráción (250, 500, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000 ppm) mértük az ellenállásukat az idő függvényében. Tanulmányoztuk a szenzorok válasz- és visszatérési idejét, valamint érzékenységét a hőmérséklet és gázkoncentráció függvényében.

Vizsgálataink során felderítettük azt az NH₃ koncentrációtartományt, ahol gázszenzorok megfelelő érzékenységet mutattak. Megállapítottuk, hogy az érzékelés hőmérséklete összetett módon hat az érzékelésre: magasabb hőmérsékleten az érzékelés sebessége nem nő jelentősen, de jel nagyság szignifikánsan nagyobb lesz. A legjobb gázszenzor karakterisztikát az oxidált/sárga színű monoklin WO₃ mutatta 300 °C-on. Legjelentősebb eredményünk annak kimutatása, hogy 120-200 °C között a WO₃ gázszenzorok karakterisztikája úgy változott meg, mintha a WO₃ félvezető típusa változott volna meg a hőmérséklet változásával. Ugyanis amikor a WO₃ teljesen oxidált volt, (oxidált/sárga monoklin WO₃), akkor minden hőmérsékleten n-típusú félvezető gázszenzorként viselkedett, azonban, ha a WO₃ minták akár csak enyhén is redukáltak voltak, akkor 120-200 °C között megfordult az NH₃ gázra adott ellenállásváltozás iránya, és olyan válasz jelet adott, mint a p-típusú félvezető szenzorok.

HAVASI VIKTOR

Vegyész MSc
MSc, 11. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:
Dr. Kukovecz Ákos
egyetemi docens, SZTE TTIK
Győri Zoltán
tudományos segédmks., SZTE TTIK*

Holmiummal ko-aktivált stroncium-aluminátok szintézise és fotolumineszcens tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: szervetlen foszforok, hosszan tartó foszforeszcencia, SrAl_2O_4 , lecsengési idő, lantanoidák

Napjainkban igen népszerűek a különböző foszforeszcens festékekkel készülő biztonságtechnikai és kommerciális termékek. Ezen festékekkel szemben a felhasználók elvárása, hogy minél nagyobb intenzitással és minél hosszabban világítson szabad szemmel láthatóan, valamint hogy ellenálló legyen a lehető legtöbb kémiai behatással szemben. Ezért célunk egy olyan foszforeszcens anyag kifejlesztése volt, amely ezen igényeket jobban kielégíti. Ugyanezért kutatásinkat olyan szintézis technológiával végeztük, amely alkalmas lehet nagy tömegben előállítani a kívánt terméket. Eközben feltártuk a szintézis azon paramétereit, amelyek a termék minőségét erősen befolyásolják.

Jelenleg, a követelményekkel szemben legalkalmasabbnak a már a '90-es évek óta ismert európiummal és diszpróziummal dópolt stroncium-aluminátokat ítéltük. A stroncium-aluminátok a szerves foszforeszcens anyagokkal szemben hőstabilak, szinte oldhatatlanok és fotodegradációval szemben rezisztensek, valamint korlátlanul újratölthetők. Szabad szemmel észlelhető fényemissziójuk akár 12 óra is lehet és már az 520 nm alatti hullámhossz tartományú fotonok képesek gerjeszteni, így napfényben és belső terekben egyaránt feltöltődnek. Ezekben a kristályokban a fotolumineszcencia jelensége az Eu^{2+} ionokhoz kötött, azonban a hosszan elnyúló foszforeszcenciához egy másik lantanoida elem által kiváltott hibahelyek és befogadó kristály hibáinak jelenléte is szükséges.

Munkánk során ezen másik lantanoida elemet diszpróziumról részben és egészben más lantanoida elemekre cseréltük. Megállapítottuk, hogy a hibahelyek keletkezése a lantanoidák minőségétől és arányától, valamint a Sr/Al arányától egyaránt függ. A holmiummal ko-dópolt minták esetében elértük a kívánt intenzitásnövekedést, miközben az emisszió élettartama csak kis mértékben csökkent. A Sr/Al arány emelésével kis mértékben javulást tapasztaltunk az emisszió lecsengési idejében. Mintáinkat XRD, PL, UV-Vis és SEM mérésekkel elemeztük.

KALMÁR SZABOLCS

vegyésszmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulens:

Dr. Renner Károly

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

**Háromkomponensű PP/falaszt/elasztomer kompozitok
deformációs mechanizmusa és ütésállósága**

Tömegműanyagok árának csökkentésére, valamint tulajdonságaik javítására gyakran alkalmaznak töltőanyagokat. A széles körben használt ásványi alapú töltőanyagok helyett mostanában sokan választanak természetes anyagokat. Ezek előnye, hogy alapanyaguk megújuló nyersanyag, és az áruk általában alacsonyabb, mint a műanyagoké. Számos olyan terméket találhatunk a kereskedelmi forgalomban, amely polimer-falaszt kompozitból készül, főként építőipari profilokat és kerti bútorokat, de már fogkefét is készítenek ilyen anyagból. A töltőanyagok adagolása befolyásolja a kompozit mechanikai tulajdonságait. Minden esetben nő a műanyag merevsége, de általában csökken az ütésállósága, ami a szerkezeti anyagok fontos jellemzője. Ez utóbbi hatás kompenzálására elasztomert szoktak adni a rendszerhez. A kompozitok mechanikai és ütésállósági tulajdonságainak szempontjából fontosak a deformáció során lejátszódó folyamatok. Ilyen a mátrix nyírási folyása, a mikrorepedezés, a határfelületek elválása, a kavitáció, a töltőanyag szálainak tördelődése és kihúzódása. Korábbi kutatásokból kiderült, hogy ilyen többkomponensű rendszerekben különböző szerkezetek alakulhatnak ki. Az egyik lehetőség, hogy az elasztomer bevonja a töltőanyag felületét, azaz a töltőanyag beágyazódik. A másik pedig az, hogy az elasztomer külön fázist alkot és a mátrixban diszpergálódva található meg. Azonban ezek a szerkezetek és az ütésállóság közötti kapcsolat egyelőre még nem tisztázott.

A kutatás célja az volt, hogy összefüggést állítsunk fel a kompozitok szerkezete, a deformációs mechanizmus és a tulajdonságok között. Munkám során többféle falasztból és elasztomerből készítettem kompozitokat extrudálással és fröccsöntéssel. Ezek jellemzésére szakító- és ütésállósági vizsgálatokat végeztem, valamint a deformációs folyamatok nyomon követésére akusztikus emissziós mérést is végeztem. A szerkezet vizsgálatához pedig pásztázó elektronmikroszkópiát használtam.

KECENOVIC EGON

Anyagmérnök BSc

BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Hernádi Klára**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Fejes Dóra**doktorjelölt, SZTE TTIK*

A kén hatásának vizsgálata a CCVD szintézissel előállított szén nanostruktúrák szerkezetére

Kulcsszavak: szén nanoszál, katalitikus szintézis, tiofén, szimulációs szoftver

Az elmúlt húsz évben a nanotechnológia rohamos fejlődésének következtében mára gyakorlatilag mindennapjainkban is megtalálható. Ugyancsak az elmúlt évtizedekben fontos eredmények születtek a szénkémia területén is a szén nanoszál és nanocső kutatásokban. Ezek mechanikai és elektromos tulajdonságai páratlanok, ebből kifolyólag felhasználásuk is igen széleskörű. A legelterjedtebb előállítási módszere a szénhidrogének gőzfázisú katalitikus bontása (CCVD – catalytic chemical vapor deposition). Ez az eljárás azért is érdekes, mert a katalizátor és a reakció paramétereinek változtatásával a nanocső és nanoszál formákon kívül egészen más struktúrák is létrejöhettek.

A TDK dolgozat részletesen áttekinti a szükséges háttérismereteket, a CCVD előállítási módszert a szén nanostruktúrák esetében, a katalizátor fajtákat, előállításukat, és az egyes katalizátorokon elért hozamokat. A munka fő célja a kén tartalmú anyagok hatásának vizsgálata a szintézisben, az így kapott szén nanostruktúrák jellemzése, esetleges felhasználási lehetőségeinek áttekintése.

A dolgozat bemutat 4 féle nanostruktúrát, amelyek a kén jelenlétének hatására keletkeztek a CCVD szintézis alatt. Mivel ezek közül több szénforma szerkezete is különösen mutatkozott a transzmissziós elektron mikroszkópos (TEM) vizsgálatok során, ezért további módszerekkel is jellemeztük azokat (SEM, XRD, Raman, EDX, BET). Továbbá az egyik struktúra leírására fejlesztettem egy szoftvert, amely képes szimulálni ezt a morfológiát, illetve egyéb nanostruktúrákat. A szoftver részletesen bemutatásra kerül a dolgozatban.

A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a kén befolyása egészen más formációkat hoz létre a vizsgált katalizátorokon és reakcióparamétereken, mint a kén nélküli szintézisek esetében. A fejlesztett program pedig jól alkalmazható egy feltételezett keresztmetszet alapján a struktúra szimulálására.

KIRSCHWENG BALÁZS

Anyagtudomány

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésszámológiai és Biométeri Kar

Konzulens:

Dr. Földes Enikő

*tudományos csoportvezető, c. egyetemi tanár, Magyar Tudományos Akadémia
Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet*

A kurkumin feldolgozási stabilizáló hatása Phillips típusú polietilénben

Kulcsszavak: polietilén, kurkumin, degradáció, stabilizálás

A polietilén napjaink egyik legelterjedtebb tömegműanyaga, széleskörűen felhasználható. A polimert feldolgozása során magas hőmérséklet, nyíróigénybevétel és kis mennyiségű oxigén éri, ami megfelelő adalékok nélkül degradációhoz, a polimer láncok tördelődéséhez és/vagy növekedéséhez, végső soron térhálósodáshoz vezet, a termék minősége nem felel meg a követelményeknek. A gyakorlatban általában szintetikus stabilizátorokat alkalmaznak a fent említett reakciók megakadályozására, azonban ezen anyagok reakciótermékei kioldódhatnak a polimerből és károsíthatják az élő szerkezetet. Célul tűztük ki olyan természetes antioxidáns alkalmazását feldolgozási stabilizátorként, ami hatékonyan gátolja a polietilén degradációs reakcióit és a műanyagból kioldódva nem károsítja, esetleg még pozitív hatással is lehetnek az emberi szervezetre. Kísérleteim során a kurkumin, egy természetes antioxidáns hatékonyságát vizsgáltam, összehasonlítottam az iparban legelterjedtebben alkalmazott fenolos antioxidáns hatásával.

Munkám során FS471 típusú TVK gyártmányú polietilén port alkalmaztam. Referenciaként adalékmentes mintát és ipari stabilizátorokkal (Irganox 1010 és Sandostab P-EPQ) feldolgozott polietilént használtam. 1000 ppm kurkumin, valamint 1000 ppm kurkumin + 2000 ppm P-EPQ tartalmú mintákat vizsgáltam. A polimert az adalékokkal gyorskeverőben homogenizáltam, majd hatszori degradatív extrúziót végeztem. Minden lépés után mintát vettem. A polimer kémiai szerkezetét infravörös spektroszkópiával, a színét a sárgasági indexszel (YI) jellemeztem. A reológiai tulajdonságok meghatározásához a folyásindexet (MFI), valamint a dinamikus viszkozimetriás és kúszási jellemzőket mértem. A maradék termooxidatív stabilitás meghatározására az oxidációs indexet (OIT) alkalmaztam. A polimer mechanikai szilárdságát húzóvizsgálatokkal mértem. Az adalék eloszlását a polimerben optikai mikroszkópos vizsgálattal ellenőriztem.

Az eredmények azt mutatják, hogy a kurkumin hatékonyabb feldolgozási stabilizátor, mind magában, mind a szekunder antioxidánsal társítva, mint a referenciaként alkalmazott ipari stabilizátor. Hátránya, hogy erősen elszínezi (narancssárgára festi) a polimert, ami korlátozza a gyakorlati felhasználhatóságot.

KUGYELA NÁNDOR

Vegyész MSc

MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Kónya Zoltán**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Dr. Kukovecz Ákos**egyetemi docens, SZTE TTIK**Győri Zoltán**PhD hallgató, SZTE TTIK*

Titán-dioxid nanoszálak fotoérzékenyítése CdSe kvantum dotokka

Napjainkban széles körben kutatott nanoszerkezetű anyagok, az úgynevezett kvantum dotok. Ezek olyan félvezető nanokristályok, amelyeknek legelőnyösebb tulajdonságuk, hogy típusuktól és méretüktől függően finomhangolható az általuk kibocsájtott emissziós hullámhossz. Méretfüggő emissziójuk következtében nagyfokú az érdeklődés az ipari felhasználás tekintetében is. Elsősorban elektrooptikai eszközökben, biológiai nyomjelzéstechnikában és újabban különböző titán-dioxid struktúrák fotoérzékenyítésében használatosak - olcsóbb napelemek előállítására, illetve fotokatalizátorként történő felhasználásuk céljából. A harmadik generációs TiO₂ alapú napelemek elterjedésével megnőtt az igény a különböző festékanyagokkal történő fotoérzékenyítés mellett egyéb érzékenyítési módszerek kidolgozására. A kvantum dotokkal történő érzékenyítés előnye, hogy a különböző típusú, illetve eltérő méretű nanokristályokkal különböző tartományokat fedhetünk le a Napból jövő sugárzásból. Munkám során alkáli hidrotermális módszerrel előállított TiO₂ nanoszálak fotoérzékenyítésére tettünk kísérletet, az elektromágneses sugárzás látható tartományának különböző hullámhosszain abszorbeáló CdSe kvantum dotok felvitelével. A CdSe nanokristályoknak a TiO₂ nanoszálak felületre kötéséhez két eljárást használtunk. Az egyik egy bifunkciós kötőmolekulán keresztüli felvitel volt, a másik módszer pedig kötőmolekula nélküli, direkt adszorpció. Mindkét módszer esetén sikerült a nanorészecskéket a nanoszálak felületéhez rögzíteni. A mintákat UV-Vis, PL, TEM, SEM és XRD anyagvizsgálati módszerekkel elemeztük, valamint a fotoérzékenyítés sikerességét metilnarancs-bontási modellreakcióval vizsgáltuk.

MOLNÁR TÍMEA

Biomérnök
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

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

Szén nanocső és kapcsoló ágens alkalmazásának vizsgálata poli(etilén-tereftalát) polimerben

Szén nanocső és kapcsoló ágens alkalmazásának vizsgálata poli(etilén-tereftalát) polimerben

A műanyag kompozitok területén a szén nanocsövet és a különböző kompozitjait az elmúlt évtizedben igen intenzíven kutatták. Mivel a kereskedelmi forgalomban kapható szén nanocső jelenleg drága, a kutatások elsősorban a szintén drága, nagy teljesítményű polimerek területére fókuszáltak. A szén nanocső hatékony alkalmazásának alapfeltétele, hogy megfelelő kölcsönhatás alakuljon ki a polimer mátrixszal, emellett a töltőanyag igen erős agglomerálódási hajlamát is csökkenteni kell. Számos felületkezelési módszert dolgoztak már ki ennek elérésére, de legtöbbjük még csak laboratóriumi méretekben alkalmazható eljárás. A műszaki műanyagok területén is elkezdődtek a kutatások a nanocsövet tartalmazó kompozitok előállítására, de a nagyobb mennyiségben felhasznált típusokkal (pl. PET) kevesen foglalkoznak. A poli(etilén-tereftalát) (PET) csomagoló- és elektronikai iparban történő felhasználása viszont széles körben ismert, és a lakossági hulladék számottevő része PET, ezért a hasznosításának jelentősége is nagy.

Kísérleti munkánk során kereskedelmi forgalomban kapható alapanyagban, illetve üdítő palackból származó PET darálékban többfalú szén nanocsövet (MWCNT) alkalmaztunk. A feldolgozási körülmények kiválasztásához és az alapanyagok összetételének meghatározásához reológiai vizsgálatokat végeztünk. Vizsgáltuk a CNT-koncentráció hatását a kompozitok húzó jellemzőire. A szén nanocső és a polimer összeférhetőségének javítására különböző szerkezetű olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer típusú kapcsoló ágensekkel kezeltük a töltőanyagot, majd szintén vizsgáltuk a kompozitok húzó tulajdonságait. Megállapítottuk, hogy a kapcsoló ágensek összetételének megfelelő megválasztásával a kezeletlen nanocsövet tartalmazó termékek mechanikai tulajdonságai kedvezően befolyásolhatók, a húzószilárdság 10-30% tartományban növekedett. A hulladék PET alapon előállított termékek húzó szilárdsági jellemzői –az adalék szerkezetétől függően- az eredeti alapanyagot tartalmazó kompozitok húzó jellemzőit megközelítik, esetenként jobbak is.

MURÁTH SZABOLCS

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Pálinkó István**egyetemi docens, SZTE TTIK**Dr. Sipos Pál**egyetemi docens, SZTE TTIK*

**Szubsztituált akrilátionok [2+2] topotaktikus
fotodimerizációjának vizsgálata réteges kettős hidroxidban**

Kulcsszavak: interkaláció, nanoreaktor, térben behatárolt környezet, szelektivitás, fahéjsavanalógok

A réteges kettős hidroxidok, csakúgy, mint a magnézium-hidroxid, réteges szerkezetű anyagok, melyekben alapesetben a kétértékű fémionokat, amelyek nemcsak Mg(II)ionok lehetnek, részlegesen háromértékűekre cserélték. Ekkor a rétegek töltése pozitív lesz, a rétegek közötti térben pedig töltéskompenzáló (úgynevezett interkalált) anionok helyezkednek el. Ezek általában kisméretű szervetlen ionok, azonban nincs akadálya annak, hogy ezeket az anionokat nagyméretű szerves anionokra, például karbonsavak savmaradékionjaira cseréljük. Ekkor a rétegtávolság jelentősen megnőhet. Az így kapott szerves-szervetlen nanokompozitok sokféleképpen felhasználhatók. Munkánk során a kettős hidroxid rétegeit sokféle szubsztituált akrilátionnal támasztottuk ki azért, hogy közöttük négytagú gyűrűt eredményező [2+2] fotodimerizációs reakciót hajtsunk végre.

Ennek érdekében CaFe réteges kettős hidroxidba építettünk be akrilátionokat, majd az anionok beépülését műszeres módszerekkel bizonyítottuk. Az alaptéchnika a por-röntgendiffrakció (XRD) volt. A diffraktogram (003) reflexiójának helyzetéből kiszámítottuk a rétegek közötti távolságot. Az anyagok morfológiáját pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) tanulmányoztuk. Az elemeloszlást energiadiszipatív röntgenfluoreszcenciás rendszer (EDX) segítségével térképeztük fel. Molekulamodellzés segítségével megadtuk a karboxilátionok valószínűsített rétegek közötti orientációját is. Ehhez szükség volt a propenoátionokat befoglaló paralelepipedon közelítő métereire, melyeket PM3 szemiempirikus módszerrel határoztunk meg. Az interkaláció sikerességének bizonyítása után a kapott szerkezetek UV-Vis fényforrással világítottuk be. A fénybesugárzás hatására több esetben beinduló fotodimerizációt infravörös spektroszkópia (FTIR) segítségével követtük.

PAPP IBOLYA ZITA

vegyész

MSc, 10. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Konzulensek:

Dr. Kukovecz Ákos

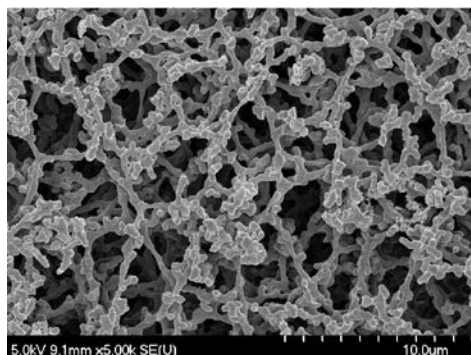
egyetemi docens, SZTE TTIK

Kozma Gábor

tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK

Többfalú szén nanocsövekkel módosított cellulóz-nitrát membránok előállítása és vizsgálata

A membránszűrők, többek között a cellulóz-nitrát is a legkülönbözőbb anyagok egyszerű és gyors elválasztására használhatók [1]. Előnyös tulajdonságaik miatt a membránszűrők fejlesztése folyamatos. Az egyik lehetséges fejlesztési irány a membránok kombinálása egydimenziós nanostruktúrákkal, például szén nanocsövekkel. Ezek 1991-ben történt felfedezésük óta egyedülálló fizikai és kémiai tulajdonságaik miatt nagy érdeklődést generáltak számos tudományos és mérnöki területen [2].



1,0 um névleges pórusméretű cellulóz-nitrát membrán SEM felvétele

Kutatásaim során szén nanocsövekkel módosított membránszűrőket készítettem és jellemeztem. Ehhez első lépésben szabályozott hosszúságú többfalú szén nanocső mintákat állítottam elő bolygó golyós malomban való őrléssel. Az átlagos csőhosszakat TEM felvételek alapján, ImageJava képelemző alkalmazás segítségével elemeztem. Ezek után a különböző pórusmérettel rendelkező cellulóz-nitrát membránokat vizsgáltam. A membránok pórusaiba szűrtem az örölt szén nanocsöveket, a minták mechanikai sajátságait Dinamikus Mechanikai Analízissel (DMA) vizsgáltam, illetve pásztázó elektronmikroszkópos felvételekkel jellemeztem

[1]: Mustafa Soylook, Rukiye Sungur Cay, Journal of Hazardous Materials, Volume 146, Issues 1–2, 19 July 2007, Pages 142-147

[2]: Róbert Rémiás, András Sági, Róbert Puskás, Ákos Kukovecz, Zoltán Kónya, Imre Kiricsi, Chemical Physics Letters, Volume 482, Issues 4–6, 12 November 2009, Pages 296-301.

PÉTER NÓRA

Vegyész MSc

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Hernádi Klára**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Réti Balázs**PhD hallgató, SZTE TTIK*

Ón-dioxid - titán-dioxid / többfalú szén nanocső kompozitok előállítása és fotokatalitikus vizsgálata

Kulcsszavak: SnO₂, TiO₂, MWCNT, metilénké

Az Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék kutatócsoportjában évek óta folynak olyan irányú vizsgálatok, amelyek különböző szén nanocső alapú kompozitok előállításával és ezeknek a felhasználásával foglalkozik. Az egyik lehetséges alkalmazási terület a heterogén fotokatalízis.

Diákköri munkám során különböző molarányú SnO₂ - TiO₂ / 10 tömeg% többfalú szén nanocső (MWCNT) kompozitok előállításával és fotokatalitikus vizsgálatával foglalkoztam. A katalizátorok előállítása savkatalizált szol-gél eljárással történt, SnCl₂×2H₂O és Ti(IV)-izopropoxid prekursorok, illetve funkcionizált MWCNT felhasználásával. A szintézisek során az együtt és az egymás utáni lecsapást alkalmaztuk.

Vizsgálni kívántuk a kompozitok hatékonyságát az összetétel függvényében a heterogén fotokatalitikus reakciókban. Továbbá célunk volt megállapítani, hogy a szén nanocsövek milyen hatással vannak a fotokatalitikus aktivitására.

Az elkészített minták morfológiáját transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM) vizsgáltuk. A hőkezelés során kialakult kompozitok kristályosságát és összetételét röntgendiffrakcióval (XRD) analizáltuk. A fotokatalízis során bontandó anyagként a metilénkéket használtuk, melynek a reakció során bekövetkezett koncentráció változását UV-Vis spektrofotometriás mérésekkel követtük nyomon.

A mintákról hőkezelés után felvett XRD spektrumok alapján megállapítottuk, hogy sikerült szintetizálni az oxidokat. A TEM felvételek alátámasztják, hogy a szén nanocsövek felületén megtalálhatóak az SnO₂-TiO₂ részecskék.

Vizsgálataink alapján megállapítottuk, hogy a katalizátorok határfoka minden esetben jobbnak bizonyult a metilénké bontása során az általunk előállított TiO₂-hoz képest. A legnagyobb fotokatalitikus aktivitást, mind a szén nanocsöveket nem tartalmazó, mind a szén nanocsöveket tartalmazó minták esetén a 25-75 molarányú mintáknál tapasztaltuk. Megállapítottuk, hogy a szén nanocsövek jelenléte jóformán az összes katalizátor esetében növeli a fotokatalitikus reakció során mutatott aktivitást a szén nanocsövet nem tartalmazó mintákhoz képest.

SZABADOS MÁRTON

Vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Konzulensek:

*Dr. Pálinkó István
egyetemi docens, SZTE TTIK*

*Dr. Kukovecz Ákos
egyetemi docens, SZTE TTIK*

*Bugris Valéria
PhD hallgató, SZTE TTIK*

Poliakrilátionok interkalálása réteges kettős hidroxidba és a kapott hibrid széleskörű jellemzése

Az elmúlt években sokat tanulmányozott anyaggá váltak a réteges kettős hidroxidok, röviden LDH-k (layered double hydroxides). Ezek természetben is előforduló, de mesterségesen is előállítható, kétdimenziós brucit ($M^{II}(OH)_2$) struktúrájú rétegek, melyek pozitív töltéssel rendelkeznek a bennük lévő két- és háromvegyértékű fémionok miatt. A fémionokat oktaédes elrendezésben hidroxid-ionok veszik körbe és a rétegek pozitív töltését a köztük lévő cserélhető anionok kompenzálják. Széles körben felhasználhatók, mivel rétegeik közé sokféle kémiai vegyület interkalálható, így módosítva azok tulajdonságait. Éppen ezért hordozóként is alkalmazhatók, nem mellékesen pedig polimerekbe keverve azok fizikai tulajdonságai kedvezően módosíthatják.

Munkám során a rétegek közé interkalált poliakrilátion tartalmú CaFe-LDH mintákat vizsgáltuk röntgen diffraktometriával (XRD), transzmissziós elektronmikroszkópiával (TEM), pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM) és egy kevésbé ismert vizsgálati eljárással a dielektromos relaxációs spektroszkópiai módszerével (DRS). Utóbbi vizsgálat során 10^{-6} Hz-től egészen 10^{11} Hz-ig terjedő frekvenciatartományba eső elektromágneses sugárzással gerjesztettük a mintákat, így térképezve fel azok elektromos és dielektromos tulajdonságait. A módszer azon a jelenségen alapszik, hogy a mintákat felépítő molekulák dipólmomentumának iránya külső elektromos erőtér hatására megváltozhat, és ez a dielektromos válasz mérhető a besugárzás frekvenciájának függvényében. Az XRD mérések eredményei alapján a poliakrilátion interkalációja után is megmaradt az LDH kristályos szerkezete és a rétegek közti távolság pedig lényegesen megnőtt. A TEM és SEM felvételek szerint is megmaradt a réteges szerkezetet, továbbá világossá vált, hogy a poliakrilátionok valóban beépültek a rétegek közé és nem csak az LDH-ák felszínére kerültek. A DRS vizsgálatból megállapítottam, hogy a poliakrilátion LDH rendszert négy darab relaxáció jellemzi és, hogy a poliakrilátionok erősen a rétegekhez kötődve helyezkednek el.

SZLUKA NIKOLETTA

anyagmérnök
BSc, 2. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

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

**Biológiailag lebomló töltőanyagot tartalmazó PP kompozitok
előállítására és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata**

A biológiailag lebomló műanyagok és kompozitok igen intenzív kutatási területet jelentenek napjainkban, mert a hulladékok mennyiségének csökkentése fontos kérdéssé vált az elmúlt években. Egyik megoldás a biológiailag lebomló termékek előállítása, amelyek hasznos életük végén részben vagy teljes egészében környezetre ártalmatlan komponensekké alakulnak vagy alakíthatók. Felhasználási területük széles, elsősorban olyan termékek készülnek biológiailag lebomló kompozitokból, amelyekkel szemben nem kell magas mechanikai követelményeket támasztani. Kísérleti munkám során polipropilénben biológiailag lebomló töltőanyagokat alkalmaztam. A tanszéki előkísérletek során megállapított feldolgozási és mechanikai tulajdonságok szempontjából előnyös koncentráció tartományon belül változtattam a biológiailag lebomló komponensek arányát, majd a mechanikai tulajdonságok és a minták homogenitásának változását vizsgáltam.

TÓTH VIKTOR

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Pálinkó István

egyetemi docens, SZTE TTIK

Sipiczki Mónika

Ph.D hallgató, SZTE TTIK

Dr. Pallagi Attila

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

A szárítás módjának hatása a Ca₂Al-réteges kettős hidroxid (Ca₂Al-LDH) szerkezetére, valamint a glükonát- és oxalácionok szerkezetmódosító hatásának jellemzése

Kulcsszavak: Bayer-eljárás, interkaláció, együttes lecsapás,

A réteges kettős hidroxidok angol nevükön layered double hydroxides (LDHs) olyan szervesetlen vegyületek, melyek rétegeit két-, illetve háromértékű fémionok alkotják. A természetben nagy számban előfordulnak, és már sok és változatos összetételű képviselőjüket állították elő. A leggyakrabban használt előállítási mód az együttes lecsapás volt. Az LDH-k, többek között, felhasználhatók nagy szerves molekulák hordozójaként, katalizátorként, illetve katalizátorhordozóként.

Az általunk tanulmányozott Ca₂Al-LDH, a hidrokalumit, egy nagyon fontos köztitermék a Bayer-eljárásban. A folyamat során Al³⁺-ot és NaOH-ot nyernek vissza úgy, hogy közben az LDH-ből CaCO₃ képződik. További jelentősége ennek a réteges kettős hidroxidnak az, hogy az oldatban jelenlévő szerves és szervesetlen anionok a rétegek közé be tudnak épülni (interkalálódni).

A kísérleteink során az együttes lecsapás módszerével Ca₂Al-réteges kettős hidroxid mintákat állítottunk elő úgy, hogy a rétegek közötti tér karbonácion-tartalmát és a kapott szilárd anyagok szárításmódját változtattuk. A minták jellemzése (röntgen-diffraktometria, pásztázó elektronmikroszkópia) során kiderült, hogy a szárítás módja befolyásolta a kapott réteges kettős hidroxidok részecskeméretét. A kísérleteink másik része arra irányult, hogy jellemezzük a glükonát- és oxalácion szerkezetmódosító hatását a Ca₂Al-LDH-kban. Az ilyen vizsgálatokat az indokolja, hogy az említett két vegyület kristályosítási méregként van jelen az ipari folyamatban.

VÖRÖS TAMÁS

Vegyész MSc.

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:**Tarczay György**egyetemi docens, ELTE TTK*

**[H, C, N, Se] izomerek vizsgálata mátrixizolációs
spektroszkópiával**

A [H, C, N, O] rendszerek kémiájának vizsgálata – mely többek között az izoméria fogalmának megismeréséhez vezetett el – évtizedek óta kutatott terület. A reaktív részecskék tanulmányozására is kiválóan alkalmazható mátrixizolációs (MI) technika kifejlesztésével a kutatók érdeklődése a homológok előállítására is kiterjedt. Mára több [H, C, N, O], illetve [H, C, N, S] izomert is ismerünk, melyeknek jelentősége a csillagközi tér fizikai és kémiai állapotának jellemzésében betöltött szerepük miatt jelentős.

A homológ sor következő tagjának, a [H, C, N, Se] izomereknek a családjából eddig csak két izomerről, a HNCSe-ről és a HCNCSe-ről vannak kísérleti adatok. Munkám célja [H, C, N, Se] izomerek előállítása és vizsgálata volt. Ezen izomerek szélesebb körű megismerése hozzájárul a periódusos rendszeren belüli tendenciák feltérképezéséhez, mélyebb megértéséhez is.

Munkám során először kvantumkémiai számításokat végeztem az egyes izomerek szerkezetének, relatív energiájának, valamint IR, Raman és UV spektrumának meghatározása céljából. Ezek ismeretében elsőként reprodukáltam a HNCSe előállítását, majd az irodalmi MI IR spektrum asszignációjának pontosítását követően áttértem a kiindulási anyag fotolízisének vizsgálatára. A számított UV spektrum alapján feltételezhető volt, hogy a kiindulási anyag szelektív, 260 nm körüli fotolízisével előállíthatóak új izomerek, melyek szélessávú UV fényre bomlanak. A HNCSe:Ar mátrix 254 nm-es fotolízisekor a kiindulási HNCSe sávjainak intenzitás csökkenésével párhuzamosan több új sáv megjelenését is tapasztaltam az IR spektrumban, melyek egy része a vártaknak megfelelően szélessávú UV fény hatására eltűnt. Ezek közül a három legintenzívebb sáv a számított hullámszám és intenzitás értékek alapján egyértelműen hozzárendelhető egy új izomerhez, a HSeNC molekulához. A fenti vizsgálatokat elvégeztem a deuterált származékkal is. A kapott eredmények megerősítették azt, hogy sikeresen előállítottam a HSeNC izomert. A számított UV spektrum kísérleti reprodukciójára több kísérletet is tettem, ezek közül tömény mátrix alkalmazása során sikerült felvennem a HNCSe UV spektrumát is.

Eredményeimet összefoglalva elmondható, hogy sikerült a [H, C, N, Se] rendszerekről egy elméleti összefoglalást adni, valamint a HNCSe és DNCSe molekula előállítása mellett egy új [H, C, N, Se] izomert, a HSeNC molekulát és ennek deuterált származékát is előállítani. Számításaink szerint további izomerek más módszerekkel (pl.:MI Raman spektroszkópia) mutathatók ki.

Biokémia I. tagozat

BACSÓ ANDRÁS

Kémia BSc
 BSc, 5. félév
 Eötvös Loránd Tudományegyetem
 Természettudományi Kar

Konzulensek:
Kazinczyné Dr. Vas Mária
tudományos tanácsadó, MTA TTK Enzimológiai Intézet
Gráczer Éva Laura
tudományos munkatárs, MTA TTK Enzimológiai Intézet

A *Mycobacterium tuberculosis* IPMDH enzim vizsgálatának első lépései

A leucin bioszintézisének egyik lépését katalizáló izopropilmalát-dehidrogenáz (IPMDH) enzim megtalálható a tüdőgümőkórt okozó *Mycobacterium tuberculosis* baktériumban. Az enzim célzott gátlása új lehetőségeket nyithat a betegség elleni küzdelemben. Kutatásom célja a *Myc* IPMDH enzim alapvető fizikai-kémiai és funkcionális tulajdonságainak jellemzése, valamint a már ismert, más baktériumoktól származó IPMDH-kal való összehasonlítása volt. Főbb eredményeim a következők:

- 1.) A *Myc* IPMDH génjét *E. coli* sejtekbe történő transzformálás után bakteriális expresszióval fermentorban állítottam elő a *Myc* IPMDH-t, melyet a sejtek feltárása után Ni-affinitás kromatográfiával tisztítottam. Ily módon sikerült limitált mennyiségű (kb 15 mg) natív állapotú, aktív enzimet előállítanom.
- 2.) Az oldott fehérje fizikai-kémiai tulajdonságait natív gélelektroforézissel, CD-, UV- és fluoreszcencia emissziós spektroszkópiás módszerekkel vizsgáltam. A *Myc* IPMDH a többi vizsgált IPMDH-hoz hasonlóan dimer szerkezetűnek bizonyult, s a másodlagos szerkezete sem különböző. Az adatok jól egyeznek a már korábban meghatározott kristályszerkezetből származó ismereteinkkel. A *Myc* IPMDH érdekes jellemzője (eltérően a többi eddig ismert IPMDH-től), hogy a tisztított enzim részlegesen köti az egyik szubsztrátját, a NAD^+ -ot.
- 3.) Meghatároztam az enzim kinetikai paramétereit (K_m , V_{max} , k_{cat}), és az IPM szubsztrát kötődési állandóját (K_d). A többi vizsgált IPMDH-hoz viszonyítva a *Myc* IPMDH-nak a legkisebb a specifikus aktivitása (k_{cat}), viszont a szubsztrátokkal való kölcsönhatása legerősebb (K_m alacsony), így katalitikus hatékonyságban nem különbözik lényegesen. Akárcsak a többi IPMDH esetén, az IPM K_d értéke megegyezett a K_m értékkel, azaz a katalízis mechanizmusa azonos. Az enzim aktivitásának pH függése a *Tt* IPMDH-hoz hasonlóan egyetlen bázikus oldallánc ($\text{pK}=7,4$) részvételét valószínűsíti a katalízisben.
- 4.) Denaturációs folyamata a szintén mezofil *Ec* IPMDH-hoz hasonlít, mind sebességi együtthatóban, mind pedig abban, hogy az IPM védő hatást gyakorol a fehérjére a kaotróp ágenssel szemben. Az izolált fehérjét csak részlegesen sikerült renaturálni, ami összhangban van a felmerült fehérjetermelési problémákkal.
- 5.) Molekuláris grafikai analízissel arra a következteték, hogy a *Myc* IPMDH térszerkezete és atomi kontaktusai tekintetében nagyon hasonló a többi IPMDH-hoz. Így működésének mechanizmusa megegyezik a nagyobb hatékonysággal előállítható *Tt* IPMDH-éval, tehát a további szerkezet-funkció vizsgálatokat célszerűbb a *Tt* IPMDH-val végezni.

BALI KRISZTINA

Kémia

BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Enyedy Éva Anna
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK**dr. Dömötör Orsolya
PhD hallgató, SZTE TTIK*

**Rákellenes Ga(III)-komplexek kölcsönhatása vérszérum-
fehérjékkel**

A Ga(III) gyógyászati alkalmazása egyre szélesebb körű, rákellenes hatása a Fe(III)-hoz való hasonlóságán alapul. A citráttal stabilizált Ga(NO₃)₃-ot (GaniteTM) már hosszabb ideje használják hiperkalcémia és egyes limfómák ill. hólyagrák kezelésére [1]. A gallium fiziológiás pH-n hidrolizál, a képződő gallát biohasznosulása pedig rossz, gyorsan kiürül, megterhelve a vesét. Ezért van szükség a fémiont erősebben kötő ligandumokkal képzett komplexeinek az alkalmazására.

Klinikai tesztelés alatt álló komplexei a Ga(III)-maltolát és a Ga(III)-oxinát (KP46), amelyek vizes oldatbeli teljes speciációjának leírására is csak idei irodalom van [2]. Egy gyógyszerhatóanyag esetében azonban alapvető fontosságú ismernünk a vérszérum fehérjékkel való kölcsönhatását is, hiszen ez befolyásolja a szervezeten belüli eloszlását, hatástartamát, metabolizmusát, kiürülését, azaz a farmakokinetikáját. Továbbá a feltételezett hatásmechanizmus alapján a Ga(III) sejtbbe kerülése legnagyobb részt transferrinhez (Tf) kötött formában történik [3]. Lényeges kérdés, hogy a vérben jelenlévő nagy mennyiségű albumin (HSA) kölcsönhatásba lép-e a Ga(III)-komplexekkel.

A KP46 ill. a trisz(maltoláto)Ga(III) szérumbeli eloszlásának modell számolásához nem elegendő a Ga(III)-Tf kölcsönhatás és a Ga(III)-oxin és Ga(III)-maltol rendszerek oldatspeciációjának ismerete, hanem a fémkomplex-HSA; ligandum-HSA kölcsönhatások kvantitatív leírása is szükséges.

A munkánk célja ezen hiányzó adatok meghatározása elsősorban spektrofluorimetriás és ultraszűrési vizsgálatokkal, majd a stabilitási állandók segítségével megjósolt Ga(III) eloszlások bizonyítása.

[1] Collery, P., Keppler, B.K., Madoulet, C., Desoize, B., *Critical Reviews in Oncology Hematology* 42 283-296 (2002)

[2] Enyedy, É.A., Dömötör, O., Varga, E., Kiss, T., Trondl, R., Hartinger, C.G., Keppler, B.K., *Journal of Inorganic Biochemistry* 117 189–197 (2012)

[3] Harris, W.R., Pecoraro, V.L., *Biochemistry*, 22 292-299 (1983)

BALOGH RIA KATALIN

Kémia

BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Gyurcsik Béla**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK**Dr. Jancsó Attila**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

A CueR fémszabályzó fehérje és variánsainak előállítás, valamint kölcsönhatása "szoft" fémionokkal

Az élő szervezetekben a fémionok optimális szintjéért felelős folyamatok szabályozását fémion-szelektív érzékelő fehérjék vezérlik. Működésük során a fémionokat megkötik, amit általában a fehérje konformációjának, vagy a fehérje és DNS közötti kötési affinitás megváltozása kísér. A baktériumokra jellemző hét fémion szabályzó család közül a MerR-fehérjecs család tagjai számos fémion szintjének szabályozásáért felelnek. Közéjük tartoznak pl. a HgII-iont szabályzó névadó MerR, ill. a CuI-iont szabályzó CueR fehérje is. A MerR-fehérjék különleges szabályzó hatásának lényege, hogy a fémion-koordináció következtében konformáció változás történik a DNS-hez kötődő fehérjében, ami a DNS szerkezetét is megváltoztatja, így az RNS polimeráz enzim működésbe léphet. Ez pedig a főlegben lévő fémionok eltávolításához szükséges fehérjék termelődéséhez vezet. A CueR transzkripciós aktivátor fehérje kristályszerkezetét CuI-, AgI- és AuI-ionok jelenlétében is meghatározták. A fémionok koordinációjáért egy, a molekula C-terminális végéhez közel elhelyezkedő fémkötő hurok, ill. az abban megtalálható két cisztein aminosav tiolat donorcsoportjai a felelősek, melyek lineáris koordinációs geometriát hoznak létre a fémion körül. A CueR az egyvegyértékű fémionok hatására igen, míg a kétvegyértékű fémionok jelenlétében nem ad biológiai választ. Az eltérésben szerepet játszhat a fehérje - fémion kölcsönhatás erőssége, vagy a megkötődést követő eltérő fehérje konformáció is. A CueR molekula fémkötő sajátságainak jobb megértéséhez előállítottam a natív fehérjét, és rekombináns DNS technológia segítségével mutáns fehérjéket is. A mutánsokban megváltoztattam a fémkötő hely környezetét, hogy pontosabb képet kapjunk az esetleges szerkezeti változásokról. A módosítás során a fémkötő hurok ciszteinjeivel szomszédos aminosavakat triptofán egységekre cseréltem, ami lehetőséget ad fluoreszcenciás mérésekre. Elképzelésünk szerint a triptofán(ok) kémiai környezete a fémion-koordináció hatására megváltozik, melynek révén a fémkötő régióban lejátszódó szerkezeti változások jelezhetők.

Kulcsszavak: toxikus fémionok, módosított baktériumok, fluoreszcencia, fehérje-fémkomplex

BATKI JÚLIA

Vegyész
MSc, 1. félév
Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Konzulensek:
Vértessy G. Beáta
MTA doktora, Egyetemi tanár, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi
Kutatóközpont Enzimológia Intézet
Horváth András
Tudományos segédmunkatárs, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi
Kutatóközpont Enzimológia Intézet

Az uracil-tartalmú DNS sorsa ecetmuslicában

Kulcsszavak: uracil, DNS hibajavítás, dUTPáz, uracil-DNS glikoziláz, ecetmuslica

Az uracil megjelenése igen gyakori hiba a DNS-ben. Az uracil-tartalmú DNS metabolizmusának legfontosabb enzimei a dUTPáz és az uracil-DNS glikozilázok (UDG). Az ecetmuslica modellszervezet metamorfózis során degradálódó szöveteiben – amelyekben normálisan nincs jelen a dUTPáz – a DNS természetes esetben nagy mennyiségű uracilt tartalmaz. A dUTPáz kifejeződés gátlásával az imaginális szövetekben is megnő a genom uracil tartalma és az enzim hiánya letalitást okoz a metamorfózis során.

Munkám során célul tűztem ki a dUTPáz hiányában bekövetkezett letalitás molekuláris mechanizmusának felderítését, melynek feltételezéseink szerint a genomi integritás csökkenése lehet az oka. Kísérleteimben a DNS integritását vizsgáló módszereket alkalmaztam (pH2AX elleni immunhisztokémia, TUNEL próba), melyekkel DNS száltöréseket tartalmazó sejteket detektáltam vad típusú és dUTPáz hiányos imaginális szövetekben. A dUTPáz hiányos szövetekben tapasztalt, a vad típusúhoz képest kiterjedtebb festődés azt igazolja, hogy a dUTPáz fontos a genom épségének megőrzésében.

Valószínűsíthető, hogy a száltörések megjelenéséért a báziskivágásos javítómechanizmus (BER) enzimei felelősek. Ennek tisztázásához olyan egyedekkel végeztem kísérleteket, melyekben egyszerre volt csendesítve a dUTPáz és a vizsgálni kívánt három BER enzim egyike (Thd1, SMUG, APE1). Mindhárom esetben különböző mértékű életképesség-növekedés volt tapasztalható, tehát a három enzim mindegyike szerepet játszhat a száltörések kialakulásában.

A BER enzimek funkcióját különállóan is szerettem volna tanulmányozni. Eddigi munkám során Thd1 csendesített és Thd1 mutációt hordozó egyedek szöveteit vizsgáltam. Ellenőriztem az expresszió csökkenését, majd egy qPCR alapú módszer segítségével megmértem, hogy az enzim hiányában a genomi uracil tartalom megnő.

További célkitűzésem volt tanulmányozni a dUTPáz túltermelésének hatását. Ennek segítségével választ kaphatunk arra a kérdésre, hogy van-e élettani szerepe az enzim hiányának, illetve a magas genomi uracil tartalomnak a degradálódó szövetekben. Ehhez olyan egyedeket vizsgáltam, melyekben a dUTPáz kifejeződése mesterségesen indukálható volt. A túltermelés sikerességét immunhisztokémiával ellenőriztem. A tapasztaltak szerint az enzim megjelenése nem okozott zavart az egyedfejlődésben. Jövőbeli tervem a DNS-beli uracil tartalom mérése, hogy a dUTPáz túltermelés hatását molekuláris szinten jellemezzem.

BEDNÁR ANDRÁS

Biomérnöki BSc
BSc, 3. félév

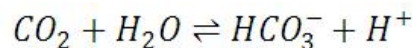
Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Konzulensek:
Bélafiné dr. Bakó Katalin
egyetemi tanár, PE MK
Dr. Nemestóthy Nándor
tudományos munkatárs, PE MK

A szénsav-anhidráz enzim kinyerése és vizsgálata

Az ipari forradalom következtében az emberiség energia illetve nyersanyagigénye ugrásszerűen megnőtt, s azóta is növekszik, ez pedig nagy mennyiségű CO₂ kibocsátásával jár(t) együtt, mely erős üvegházhatást okozó jelege miatt nagyban hozzájárul(t) a globális felmelegedéshez. A CO₂ szeparációja, megkötése, reakcióba vitele, kinyerést ezért igen fontos kihívás napjainkban.

A szénsav-anhidráz enzim a



reakciót katalizálja, így alkalmasnak tűnik a célra. A jelenleg kereskedelmi forgalomban kaphat készítmény rendkívül drága, ami lehetetlenné teszi az ipari alkalmazást. Ezért ebben a munkában az enzimmennyiség alternatív útjait kerestük. A szénsav-anhidráz enzim többféle élő szervezetben megtalálható, a növényi alapanyagok látszanak elsősorban megfelelően a kinyerésére. A kísérleti munka során először egy analitikai eljárást dolgoztunk ki a kinyert enzimmennyiség nyomonkövetésére és spenótból (*Spinacia oleracea*) kiindulva nyertük ki az enzimet.

További célunk az, hogy a kinyert, szénsav-anhidráz aktivitással rendelkező készítményt membrán szeparációs eljárással kombinálva használjuk a CO₂ tartalmú gázok szeparációjánál.

BENDES ÁBRIS ÁDÁM

Biomérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

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

**Virális gének expressziós szabályozásában résztvevő fehérje
komplexek szerkezeti és funkcionális analízise *Staphylococcus
aureus*-ban**

A *Staphylococcus aureus* egy fakultatív anaerob Gram-pozitív baktérium, mely a normál bőrflóra komponenseként gyakran megjelenik, ennél fogva az emberiség 20%-a hosszú távú hordozója ennek a mikroorganizmusnak. A *S. aureus* számos betegség kórokozója lehet, melyek között életveszélyes lefolyású fertőzések is előfordulhatnak, mint például tüdőgyulladás, vagy az agyhártyagyulladás. A sztafilokokkusok genomjában előforduló szuperantigén-hordozó patogenitás szigetek (SaPI) jelentős szerepet játszanak a populációk közti virulencia gének terjedésében. Legújabb kutatások szerint a szigeteken kódolt gének átíródását specifikus represszor fehérjék (StI) szabályozzák. A derepresszió egy virális dUTPázal való fehérje-fehérje kölcsönhatás során történik, mely a dUTPáz nem-konvencionális szerepére enged következtetni.

Munkám során a *S. aureus* $\Phi 11$ helper fág dUTPáz és az StI SaPIbov1 represszor fehérje kölcsönhatását és szerkezetét vizsgáltam *in vitro* rendszerekben.

A vizsgálandó fehérjéket *E. coli*-ban termeltem rekombináns módszerekkel (pET-15b és pETDuet-1 vektor-rendszerben). A fehérjék nagy hatékonyságú tisztítását, vektortól függően, Ni-NTA HisTrap gyantán vagy ioncserélő oszlopon végeztem és géliszűrővel növeltem tovább a tisztaságot.

A háromdimenziós térszerkezet felderítésére irányuló munkám során kristályosítási kísérleteket végeztem mind az StI SaPIbov1-el, mind a $\Phi 11$ dUTPázal önmagában és komplexben is, a nyert kristályokkal röntgendiffrakciós méréseket folytattam. A másodlagos szerkezet meghatározására távoli-UV cirkuláris dikroizmus spektroszkópiát (CD) használtam.

Funkcionális vizsgálatok során fenolvörös indikátor alapú aktivitás assay-el méréseket végeztem a $\Phi 11$ dUTPáz dUTP hidrolizáló aktivitásának meghatározására a kölcsönható partnerének jelenlétében és távollétében. Termofluor kísérletekkel meghatároztam a különálló fehérjék és a komplex olvadási hőmérsékleteit: analizáltam a $\Phi 11$ dUTPáz és a komplex stabilitásának változását lassan hidrolizáló dUTP analóg jelenléte mellett.

A *S. aureus* specifikus fágok dUTPáz szekvenciáit *in silico* módszerekkel hasonlítottam össze, több mint 60 virális dUTPáz szekvencia illesztésén keresztül. Szerkezeti hasonlóság és az irodalmi adatok alapján csoportosítottam és filogenetikailag vizsgáltam a szekvenciákat.

Munkám célja mélyebb belátást nyújtani a *S. aureus* patogenitásának és annak fág mediált terjedésének szabályozásába, és az esetleges okozott fertőzések kezelési módjainak egy új irányú megközelítésébe.

BRUSZEL BELLA

Kémia BSc
BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Konzulensek:
Dr. Enyedy Éva Anna
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Sija Éva Ilona
doktorjelölt, SZTE TTIK

Antitumor Ru(II)-cimol-piridinkarbonsav komplexek oldategyensúlyi vizsgálata és kölcsönhatásuk humán szérum albuminnal

Antitumor Ru(II)-cimol-piridinkarbonsav komplexek oldategyensúlyi vizsgálata és kölcsönhatásuk humán szérum albuminnal

Az elmúlt évtizedekben a daganatos betegségek gyógyítására irányuló kutatásokban egyre nagyobb figyelmet kapnak az átmenetifémek komplexei. Napjainkban számos kutatás irányul olyan fémkomplexek kifejlesztésére, melyek citotoxikus hatása specifikus a rákos sejtekre. Ígéretes kutatások folynak fémorganikus ruténium(III/II) vegyületekkel is, melyek közül több vegyületnek klinikai tesztelése is folyik. Munkánk során a $[\text{Ru(II)}(\text{eta}^6\text{-p-cimol})(\text{Z})_3]$ (Z: $\text{H}_2\text{O}/\text{Cl}^-$) (O,N) piridinkarbonsav típusú ligandumokkal (pikolinsav és 6-metil-pikolinsav) való kölcsönhatását vizsgáltuk oldategyensúlyi módszerekkel.

Ezek a fémkomplexek, igen hatásosnak bizonyultak egyes rákos sejtvonalakon. [1] A vizes oldatban képződő komplexek összetételét és stabilitási állandóit, elsősorban pH-potenciometriás módszerrel határoztuk meg, amit ^1H NMR és UV-látható spektrofotometriás mérésekkel is alátámasztottunk. Egy bioaktív fémkomplex farmakokinetikai jellemzéséhez hozzátartozik a vér transzportfehérjéivel való kölcsönhatásának jellemzése is. Így ennek első lépéseként vizsgáltunk a komplexek humán szérum albuminnal való kölcsönhatását is spektrofluorimetriás mérésekkel.

[1] N. Gligorijević, et al., J. Inorg. Biochem. 2012, 108, 53.

CSIPAK BRIGITTA

Vegyész

MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:
Dr. Gyurcsik Béla
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

Cinkujj fehérjék tervezése, előállítása és tulajdonságaik vizsgálata

A cinkujj fehérjék – melyek a bennük található Zn^{2+} -ion által koordinatív kötésekben keresztül kialakított ujjszerű szerkezetről kapták a nevüket - az élő szervezetekben fontos szerepet töltenek be a gének aktivációjában és inaktivációjában. Mindez annak köszönhető, hogy képesek a szervezetben előforduló nukleinsavakkal specifikus kölcsönhatásba lépni. Egy kiválasztott DNS szekvenciát felismerő fehérjék mesterségesen is előállíthatók. A tervezéshez ma számos, bárki által elérhető program nyújt segítséget (pl.: Zinc Finger Tools).

Tudományos Diákköri Dolgozatomban két ilyen metalloprotein előállítását végeztem el meglévő génjük felhasználásával bioszintézissel, majd ezeket affinitás kromatográfiás módszerrel megtisztítottam, és pontos koncentrációjukat meghatároztam UV-Vis spektrometria segítségével (Bradford-módszer). A fehérjék és a DNS kölcsönhatását sáveltoldás kísérletekkel vizsgáltam agaróz gélen, továbbá a Ni^{2+} -ionok hatását poliakrilamid gélelektroforézissel követtem nyomon.

DANCS ÁGNES

Vegyész
MSc, 8. félév
Szegei Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Konzulensek:
Dr. Gajda Tamás
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Árus Dávid
PhD hallgató, SZTE TTIK

A humán ZnT3 fehérje lehetséges fémkötő helyeinek azonosítása

A humán ZnT3 cink-transzporter fehérje az agy preszinaptikus glutamáterg vezikuláinak membránjában található; működése során ezekben Zn^{2+} ionok halmozódnak fel. Ezen transzmembrán fehérje működési mechanizmusa eddig nem tisztázott, ám felderítésére irányuló vizsgálatokat tesz szükségessé az a feltételezés, hogy a vezikulákból felszabaduló, és a szinaptikus térben átmenetileg felhalmozódó cink(II)ionoknak (s így a ZnT3 fehérjének is) szerepe lehet az Alzheimer-kórra jellemző β -amiloid plakkok képződésében.

A ZnT fehérjékre általánosan jellemző, hogy a IV. és V. transzmembrán szakaszt összekötő hurokrészük egy hisztidinben gazdag szekvenciát tartalmaz, mely fehérjerészlethez az irodalom lehetséges fémkötő funkciót rendel (MBS1). Ezen kívül a cink-transzporterek tartalmaznak még néhány jól megőrzött, jelentős fémkötő tulajdonsággal bíró szekvenciát is. Ilyen a C-terminális részen található mátrix-metalloproteináz szerű szakasz (MBS2), vagy az N-terminális –HHCH– motívumot tartalmazó fragmens (MBS3).

Jelen munka az irodalom által elsődlegesen javasolt, MBS1 fémkötő helyet érintő vizsgálatok eredményeit foglalja össze. Ennek kapcsán két, a kötőhelyet eltérő szerkezeti szinten modellező peptidet tanulmányoztunk: egy szorosán a multihisztidin szakaszt tartalmazó undekapeptiddel (Ac-RHQAGPPHSHR-NH₂, L¹), valamint egy nagyobb méretű ciklusba zárt peptiddel (cyclo(Ac-CKLHQAGPPHSHGSRGAEYAPLEEGPEEK-NH₂), L²) végeztünk oldategyensúlyi (potenciometria) és szerkezetvizsgálati (NMR, UV-Vis, ESR és CD spektroszkópia) méréseket. A fehérje két másik fémkötő tulajdonságú szekvenciájára (MBS2, MBS3) vonatkozó adatok kutatócsoportunkban már rendelkezésre állnak.

Az L¹ ligandum esetén fiziológiás pH körül mindhárom fémkötő hely jelenlétében a ML összetételű komplex képződik domináns mennyiségben, melyben M²⁺ csak hisztidin oldallánci donorcsoportok által koordinált. Cink(II) jelenlétében a pH további növelésekor amidkoordináció nem lép fel, csak a koordinált víz deprotonálódását tapasztaltuk. A ZnL¹ komplex stabilitási állandója ($\log K_{ZnL^1} = 4,27$) messze elmarad az MBS3 kötőhelyet modellező peptid (Ac-PFHHCHRD-NH₂) megfelelő értékéhez képest ($\log K_{ZnL} = 8,50$). A ciklikus L² peptid esetében a semleges pH-tartományban képződő, szintén három His által koordinált domináns részecske a ZnH₃L², melynek stabilitása ugyan nagyobb ($\log K_{ZnH3L^2} = 5,93$) az analóg ZnL¹ értékénél, de még így sem közelíti meg az MBS3 kötőhely ZnL komplexének stabilitását. Az általunk vizsgált fémkötő helyekre jelentős szelektivitást a ligandumok nem mutattak, ellentétben a –HHCH– motívumot tartalmazó ligandummal, amely szignifikáns cink-szelektivitással bír. Ezek alapján feltételezhető, hogy a humán ZnT3 fehérje elsődleges cink(II)-kötő helye nem az irodalomban javasolt MBS1, hanem az MBS3-mal jelölt N-terminális, ciszteintartalmú fragmens.

DUDÁS ERIKA

vegyész MSc

MSc, 9. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:**Bodor Andrea**egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

**Rendezetlen fehérjefragmensek NMR spektroszkópai vizsgálata:
másodlagos kémiai eltolódások és translációs diffúzió**

A Mitogén Aktivált Fehérjekináz (MAPK) kaszkádok evolúciósan megőrződött, sejten belüli jeltevőbbítő útvonalak, melyek sokféle extracelluláris ingerre adnak választ, és számos alapvető sejtanyagot irányítanak, így pl. a sejtnövekedést, a sejtosztódást, a stresszfolyamatokat és a sejthalált. A korábban megfigyelt klasszikus, strukturális domének között megvalósuló fehérje-fehérje kölcsönhatásokkal szemben ebben a rendszerben a fehérje-peptid típusú kölcsönhatások dominálnak. Mivel a különböző MAPK családok dokkoló árcai szekvenciálisan nagymértékű hasonlóságot mutatnak, feltételezték, hogy a rendszerben megfigyelhető specifikus kötődések a szubsztrátok lineáris dokkoló motívumaihoz kapcsolódnak.

Munkánk során arra a kérdésre kerestük a választ, milyen szerkezeti okokra vezethetők vissza a MAPK rendszerben megfigyelt specifikus kötődések. NMR méréseket végeztünk öt fehérjefragmensen, melyek az NFAT transzkripció faktor kivételével mind lineáris dokkoló motívumokból származtak. 2D spektrumok felvétele és az asszignáció elvégzése után a másodlagos kémiai eltolódások szekvencia szerinti alakulásából következtettünk a fragmensek szerkezeti jellemzőire. Két esetben (NFAT, MNK1) teljes rendezetlenséget állapítottunk meg, három fehérjefragmens (MK2, RSK1, RSK1_S/A) különböző hosszúságú régiójában viszont naszcens helicitást tapasztaltunk. A MAPK rendszer kötődésviszonyainak ismeretében és az eredményeink alapján arra következtettünk, hogy a specifikus kötődés a naszcens szerkezetkialakító hajlammal rendelkező régiókhoz kapcsolódik, ezek hiánya pedig a promiszkuus kötődést eredményezi. Az NMR mérésekből nyerhető atomi szintű információk felhasználásával tehát kapcsolatot tudunk teremteni a fehérjefragmensek szerkezete és biológiai funkciói között.

A méréseket denaturáló közegben is megismételtük, és megfigyeltük, hogy a naszcens másodlagos szerkezetkialakító hajlamú régiók megőrzik ezt a tulajdonságukat, illetve azt, hogy denaturáló körülmények között sem érhető el a teljes rendezetlenség. Diffúziós méréseink alapján összehasonlítottuk közel azonos molekulatömegű rendezett minifehérjék és a vizsgált rendezetlen fragmensek hidrodinamikai sugarát, melyek közül várakozásainknak megfelelően utóbbiak bizonyultak nagyobbak.

Eredményeink remélhetőleg hozzájárulnak majd a MAPK jelátviteli rendszer működésének jobb megértéséhez, és ezáltal a különböző fontos sejtanyagok szabályzásával kapcsolatos ismereteink kibővítéséhez.

HÁMORNIK GÁBOR BENCE

Biomérnöki
 MSc, 4. félév
 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
 Egyetem
 Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulensek:
Dr. Herberth Balázs
tudományos főmunkatárs, EGIS Gyógyszergyár Nyrt.
Kaufmanné Bojti Erzsébet
fejlesztő analitikus, EGIS Gyógyszergyár Nyrt.

Másodlagosan keletkező glutamát kimutatása és hatása in vitro neurotoxicitási tesztekben

Az EGIS Preklinikai Kutatási Főosztályának Molekuláris Farmakológiai Laboratóriumában célunk neurodegeneratív megbetegedések in vitro modellezése, neuroprotektív hatóanyagjelölt molekulák keresésének érdekében. A különböző neurodegeneratív megbetegedésekre specifikus elsődleges hatások, mint proteolitikus toxikus fehérjék koncentrációjának megnövekedése (béta-amyloid, prion), bakteriotoxinok (fertőzések) vagy fizikai sérülések stb., olyan celluláris stressz folyamatokat indítanak be, amelyek további sejtpusztulást előidéző, másodlagos faktorok keletkezését eredményezik. A sérült szövetből endogén módon felszabaduló másodlagos stresszor ágensek a toxicitás későbbi fázisaiban elsődlegesen felelősek lehetnek az idegsejtek pusztulásáért. Az elsődlegesen és másodlagosan kialakuló toxikus folyamatok később egymással párhuzamosan és egymást indukálva is lejátszódhatnak, sőt az egyes esetekben közvetlen kiváltó hatás más kórképben másodlagos tényezőként jelenhet meg. Ezért az egyes hatások kezelésére specifikusan alkalmas gyógyszerek kifejlesztéséhez olyan kísérletes rendszerek szükségesek, ahol az idegsejteket károsító összetett folyamatok egymástól jól elkülöníthetőek.

Feladatom az egyik legjellemzőbb másodlagos stresszorként megjelenő molekula, a glutamát szintjeinek mérésére alkalmas analitikai módszer kidolgozása volt különböző összetételű extracelluláris oldatokban, lehetővé téve a glutamát felszabadulás mértékének direkt meghatározását.

A glutamát központi idegrendszerben a legfőbb excitátoros neurotranszmitter szerepét tölti be. A glutamaterg neurotranszmisszió felelős többek között a tanulási folyamatokért és a memórianyom kialakulásáért is. A megnövekedett extraszínaptikus koncentrációja az idegsejtek túlingerlését okozza, ami végső soron a neuronok pusztulásához vezet. Ez a folyamat az excitotoxicitás, ami szerepet játszik számos elterjedt neurodegeneratív megbetegedés patomechanizmusában, mint a stroke vagy az Alzheimer-kór.

Az analitikai feladat összetettsége az extracelluláris glutamát koncentráció alacsony szintjében, valamint a tenyésztő médium összetételének komplexitásában rejlik. Ezért a feladat megoldására fordított fázisú nagyhatékonyságú kromatográfiás módszert dolgoztam ki, amely széles koncentráció tartományban alkalmas a tenyésztő médium glutamát szintjének kvantitatív vizsgálatára. Kísérleteimben az így kidolgozott analitikai módszer segítségével sikerült meghatározni a glutamátszint-változást az oxidatív stressz és az Alzheimer-kór asszociálta béta-amiloid okozta in vitro idegsejtpusztulásban. Ezáltal sikerült meghatározni azokat a kísérleti idő és koncentráció

paramétereiket, amelyek mellett a kérdéses toxicitások az additív excitotoxicitás torzító hatása nélkül vizsgálhatóak.

KECSKEMÉTI ÁDÁM

Kémia

BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Gáspár Attila
egyetemi docens, DE TTK*

Tripszin immobilizálása polidimetilsziloxán felületen fehérjék online bontásához

A peptidterkép vizsgálat olyan eljárás, mely során egy azonosítani kívánt fehérjét proteolitikusan emésztünk enzimmel (leggyakrabban tripszinnel) és a kapott peptidkeveréket analizáljuk tipikusan tömegspektrometria (MALDI-TOF-MS) vagy kapilláris elektroforézis (CE) segítségével. Az így kapott tömegspektrumot vagy elektroferogramot - mely ujjlenyomatszerűen jellemzi a fehérjét – összehasonlítjuk egy számítógépes adatbázissal. A jelenleg általánosan használt eljárás szerint (oldatban emésztés) a tripszint alacsony koncentrációban kell alkalmazni, nagyobb koncentráció esetén ugyanis a tripszin önemésztésre képes, ami újabb peptideket eredményez. Az alacsony enzimkoncentráció miatt az emésztés igen időigényes (12 órát vesz igénybe csak az emésztés); manapság intenzív kutatás folyik, hogy lerövidítsék ezt a folyamatot.

A tripszin önemésztését kiküszöbölhetjük, ha felületen immobilizáljuk, így nagyobb koncentrációban alkalmazhatjuk, ezért gyorsabb emésztést érhetünk el. Továbbá előnyös, ha a felület porózus, nagy fajlagos felületű anyag (polimerek, gélek), amit nagy felület/térfogat arányú rendszerben használunk (pl. CE, mikrofluidikai csipek).

A PDMS áttetsző, porózus, nagy fajlagos felületű, hidrofób polimer. Közismert, hogy számos anyag, különösen a nagy makromolekulák kiválóan adszorbeálódnak felületére, ezért alkalmas alapanyag lehet tripszin immobilizálásához. Saját rendszerünkben egy CE kapilláris belső felületét vonom be PDMS-sel, és erre adszorpcióval immobilizálok tripszint. A tripszin és a PDMS közti adszorpció erősségét AFM, UV/Vis ill. SPR technikákkal vizsgáltam. Miután megállapítottam, hogy az adszorpció gyakorlatilag irreverzibilis, az enzim aktivitását vizsgáltam UV/Vis ill. CE mérésekkel. Ezen eredmények alapján a rendszer alkalmas lehet fehérjebontásra, ill. mikrofluidikai csipben történő alkalmazása is lehetséges.

Biokémia II tagozat

KISS MARIANN

Kémia

BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Várnagy Katalin
egyetemi docens, DE TTK*

A szuperoxid-dizmutáz enzimet modellező peptidek réz(II)- és nikkell(II)komplexei

Egyetemünk Bioszervetlen Kémiai Kutatócsoportjában három hisztidint tartalmazó terminálisan védett hexapeptideket (Ac-His-Ala-Ala-His-Gly-His-NH₂ és Ac-His-Gly-Gly-His-Gly-His-NH₂) állítottunk elő, és vizsgáltuk őket Ni(II)- és Cu(II)-ionok jelenlétében. A kialakuló komplexeket pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás, és CD-spektroszkópiás módszerekkel vizsgáltuk.

A savas tartományban MAH, illetve MA összetételű komplexek keletkeznek. A fémion mindkét komplexben a hisztidin imidazolnitrogénjéhez koordinálódik, ami jelentősen megnöveli a komplexek stabilitását. Fiziológias pH-n az MA összetételű komplex jelentős mennyiségben van jelen.

A pH növelésével azonban megkezdődik az amidnitrogének deprotonálódása. A Cu(II)-komplexek esetében lépcsőzetes deprotonálódás következik be, míg a Ni(II)-komplexek esetén az amidnitrogének egy lépésben deprotonálódnak. Az MAH₃ összetételű komplexek esetén mindkét fémion vizsgálatánál azt tapasztaltuk, hogy izomer szerkezetek keletkeznek, de a HXXH szekvenciájú térrészen való koordináció lehet a kedvezményezettebb.

A fémionokkal végzett vizsgálatok során kétmagvú komplexek keletkezése is leírható. A két fémion a HXXH, illetve a HGH szekvenciájú részekben koordinálódhat úgy, hogy a hisztidinek imidazolnitrogénjein, illetve amidnitrogéneken keresztül kötődik a ligandumhoz.

A Ni(II)-HAAHGH rendszerek esetén NMR vizsgálatok, míg a Cu(II)-HAAHGH rendszerek esetén ESR vizsgálatok elvégzése során még több információ nyerhető a kialakuló komplexek szerkezetéről, a fémion koordinációjáról.

Dolgozatom a TÁMOP-4.2.2/B-10/-1-2010-0024 számú pályázat anyagi támogatásával valósult meg.

KISS-SZEMÁN ANNA

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Harmat Veronika**adjunktus, ELTE TTK**Karancsiné Menyhárd Dóra**tudományos főmunkatárs, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport*

„Nyitott az újra, méretszelekció másképp”, avagy a *Pyrococcus horikoshii* acilaminoacil-peptidáz vizsgálata

Munkám során a *Pyrococcus horikoshii* acilaminoacil-peptidázt (PhAAP) vizsgáltam. Ez a fehérje biológiai szerepe miatt molekuláris szintű kutatások célpontja, mert katalizátorként szerepel bizonyos oligopeptidek N-terminálisán lévő acilezett aminosavak lehasításában, így közvetve részt vesz neuropeptidek szintjének szabályozásában is. Kovalens inhibitorral képzett komplexét kristályosítottam, szerkezetét meghatároztam, összevettem a családon belüli, más fehérjékkel és molekuladinamikai számításokkal egészítettem ki a röntgendiffrakciós adatokat.

A jelenleg folyó kutatások (különböző AAP-k) arra a kérdésre keresik a választ, hogy milyen paraméterek befolyásolják az enzimek szelektivitását. A térszerkezetből adódóan (hidroláz és propeller domén, közöttük viszonylag mozgékony összekötő szakasz) azt feltételeztük, hogy a sejtben az enzim előfordulhat „nyitott” illetve „csukott” formában is. A vizsgálat célja továbbá az volt, hogy megállapítsuk, hogy van-e szerkezetrendező hatása az aktív helyhez koordinálódott 1,6-hexándiol molekulának (korábban megoldott szerkezet), illetve okoz-e változást a fehérje globális szerkezetében, ha kovalens inhibitor kötődik az aktív helyhez. A molekuladinamikai szimulációból kapott modelleken megmutattuk, hogy a fehérje monomer alakban, nagymértékű szolvatáció hatására képes kismértékű felnyílásra. Azonban ebben a fellazult állapotban is könnyen aktiválható marad a katalitikus triád. Ezek alapján arra következtettünk, hogy nem a hexamerizáció hatása a téralkat, hanem a monomer térszerkezetében megfigyelhető ún. szabad béta-él védelmére alakul ki a „stabil” szerkezetű monomerek között. Jó közelítő modellt készítettünk a teljesen üres szerkezet téralkatára. A *Pyrococcus horikoshii* acilaminoacil-peptidázban meghatározott sajátos „nyitottsága” hozza létre a szűk belépőkaput a molekula oldalán, ami hexamerizáció során keletkező csatorna-rendszerrel kiegészítve a méretszelekció sajátos, újszerű módját eredményezi.

KOVÁCS BERTALAN

Vegyész

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Jákli Imre**tudományos főmunkatárs, ELTE TTK**Perczel András**egyetemi tanár, ELTE TTK*

Béta-redők stabilitásvizsgálata párkorrelációk statisztikai és kvantumkémiai modellezésével

A β -redők stabilitásának vizsgálata kiemelt jelentőségű az ún. aggregációs betegségek esetén (pl. Alzheimer-kór, II-típusú diabétesz), melynek során a szervezet fehérjéi elveszítik natív téralkatukat, és kereszt-béta szerkezetű, amiloid csapadékot képeznek.

A redők stabilitását lényegesen befolyásolják az oldalláncok közötti kölcsönhatások. Korábbi kutatások megmutatták, hogy az aminosavak a β -redőkben nem véletlenszerűen helyezkednek el, hanem párosával korrelálnak egymással. Az aminosav párok megfigyelt gyakoriságának, valamint a véletlenszerű eloszlásnak megfelelő várható előfordulásnak a hányadosa a párpreferencia érték, amely jellemzi az egyes aminosavak korrelációját.

A fehérje adatbázis (Protein Data Bank, PDB) folyamatos bővülése, valamint a szerkezetvizsgáló módszerek fejlődése szükségessé tette a párkorrelációk újraszámolását, ám az új értékek gyakran jelentősen eltértek a korábbi eredményektől. Jelen kutatás célja jellemezni az egyes adatbázisok „jószágát” és megállapítani annak függését a kiindulási adatkészlet paramétereitől (szerkezetvizsgáló módszer típusa, felbontás, r-faktor, redundancia mértéke), valamint a feltételezhető összefüggés megállapítása az oldalláncok kölcsönhatási energiája és a párpreferencia értékek között.

A statisztikai vizsgálatokat a PDB-ben tárolt, NMR spektroszkópiával és röntgenkristallográfiával meghatározott fehérjeszerkezeten végeztük. Teszteltük különböző ingyenesen elérhető, nemredundáns adatkészletek és szűrőprogram hatását is (PDBSelect, WHATIF, PISCES, cd-hit). A kvantumkémiai számításokat tripeptid dimer modelleken végeztük, többféle módszerrel és elméleti szinten.

Megállapítottuk, hogy a röntgen-, illetve NMR-szerkezeteket tartalmazó adatkészletekből számolt párpreferencia értékek szignifikánsan különböznek. Az ideális adatbázis redundancia szintje legfeljebb 35-40%, valamint röntgenszerkezetek esetén a maximális R-faktora 0,16.

Megmutattuk, hogy az egyes aminosavak oldalláncorientáció-eloszlása pontosan leírható a kölcsönhatási energiákból számolt Boltzmann-eloszlással. Nem találtunk azonban korrelációt az aminosav párok előfordulási gyakorisága és a kölcsönhatási energiájuk között, ami arra utal, hogy a fehérje feltekeredése nem energia-kontrollált folyamat.

KREKUSKA HAJNALKA

Vegyész Msc

MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:**Dr. Gyurcsik Béla**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

A DNS kölcsönhatása potenciális gyógyszermolekulákkal, valamint azok réz(II) és cink(II) komplexeivel

Az elmúlt évtizedekben a gyógyszerkutatók új irányt vettek, és fokozott hangsúly került a hatás optimalizálására, a már használt gyógyszermolekulák tökéletesítésére pl. szubsztituensek cseréjével, a hatóanyag-molekulák fémkomplexeinek kialakításával, vagy izomerizációval, illetve a hatóanyagok szinergikus hatásának kiaknázásával.

A fentieknek megfelelően TDK munkám elkészítése során szalicilsav-, és piridinszármazékokkal, valamint azok réz(II)-, és cink(II)komplexeivel foglalkoztam. Az Aszpirin jól ismert gyógyászati alkalmazása mellett a szalicilsav-származékok réz(II)komplexeiről már korábban megállapították, hogy tumorelles hatással bírnak.

Munkám célja az volt, hogy megvizsgáljam, hogy olyan potenciális gyógyszermolekulák, mint a 4-fluoroszalicilsav (4-FSA) és a 2,6-bisz-hidroximetil piridin (pydime) képesek-e a DNS-sel kölcsönhatásba lépni, és hogy ezen molekulák komplexképződése réz(II)-, illetve cink(II)-ionokkal befolyásolja-e ezt a hatást. A DNS-sel való kölcsönhatás ugyanis alapvető jelentőségű lehet az antitumor hatás kifejtésében. Ezen kölcsönhatás vizsgálatára fluoreszcencia spektroszkópiai vizsgálatot végeztem, mely az etídium-bromid kettős hélixből történő kiszorításakor tapasztalható fluoreszcencia-csökkenésen alapult.

A pydime és a 4-FSA réz(II)-ionokkal képzett biner és terner komplexeinek oldategyensúlyi vizsgálatát, már korábban elvégezték, viszont a cink(II)-ionokkal alkotott komplexeikről nem álltak rendelkezésünkre ilyen adatok. Így ez utóbbi rendszerek pH-metriás és UV/látható spektroszkópiás vizsgálatát is elvégeztem, annak tisztázásául, hogy az emberi szervezetben jellemző pH tartományokban milyen részecskék lehetnek jelen. Ezen vizsgálatok során kimutattuk, hogy a cinkionok gyenge kölcsönhatást alakítanak ki a biner rendszerekben, ami - csakúgy, mint a réz(II)-ionok esetében is - erősebb a terner rendszerben. A fluorimetriás mérések igazolják, hogy komplexeink részben megakadályozzák az etídium-bromid interkalációját a DNS molekulába.

LOVÁSZ KRISZTINA

Biomérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Sveiczzer Ákos
egyetemi docens, BME VBK*

A hasadó élesztő G₁-fázisú méretkontrolljának vizsgálata matematikai modellezéssel

Kulcsszavak: sejtciklus, Schizosaccharomyces pombe, dinamikai rendszer, bifurkáció, sejtosztódás

A méretkontroll a sejtciklusban ható ellenőrzési folyamat, melynek köszönhetően a sejtek átlagos mérete az egyes osztódások után, valamint az egész populációra nézve állandó marad. Az Ascomycota tagozatba sorolható Schizosaccharomyces pombe vagy más néven hasadó élesztő régóta fontos modellorganizmusként használatos egyedi osztódási tulajdonságai miatt. Szimmetrikus osztódásának köszönhetően nagyon jó szinkronizálási eljárásokra ad lehetőséget. A vad típusú hasadó élesztő sejtciklusát rövid G₁- és hosszú G₂-fázis jellemzi. A méretkontroll gyakorlatilag csak a mitózis előtt működik, a DNS-szintézis előtt nem. Azt is mondhatjuk, hogy a G₁-fázisú méretkontroll rejtett a vad típusú sejtben, míg wee1 mutáns sejt esetében ez a releváns ellenőrző pont. A mechanizmusban meghatározó szereppel a ciklin-függő kinázok, röviden CDK fehérjék rendelkeznek, melyek különböző fehérjék foszforilezése útján a sejtciklus 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, ami több részből áll: szintézis, lebomlás, aktiválás stb. Így egy sokparaméteres differenciálegyenlet rendszert kapunk, amit csak közelítő módszerekkel lehet megoldani. A méretkontroll működését leíró matematikai modellt a WinPP® nevezetű, differenciálegyenleteket numerikusan megoldó szoftverrel vizsgáltam.

Munkám célja az volt, hogy a matematikai modell segítségével a G₁-fázisú méretkontrollt tovább vizsgáljam, illetve annak leírását tovább fejlesszem. A G₁-fázis hosszát alapvetően két fehérje határozza meg. Egyikük az APC (Anaphase Promoting Complex) egyik alegysége, a Ste9, mely a korai G₁-fázisban folyamatosan ubiquitinézéssel megjelöli az újonnan szintetizált Cdc13 fehérjéket degradációra, így alacsony (közel nulla) lesz egy ideig az MPF aktivitása. Továbbá a Rum1 sztöchiometrikus inhibitor, mely a CDK-ciklin dimerhez kapcsolódva gátolja annak működését. A G₂-fázisban működő meghatározó fehérje a Wee1 kináz, mely a preMPF MPF-fé való átalakulás gátlásáért felelős. Irodalmi adatok (Martin and Berthelot-Grosjean, 2009) alapján a Wee1 enzim inaktiválódása a sejt mérettel fordítottan arányos. A G₁-fázisban működő fehérjék inaktiválódásának mechanizmusára azonban nincsen kísérletes adat. Kutatásom legfőbb célja volt, hogy kiderítsem, feltételezhető-e, hogy a Rum1 fehérje inaktiválódása is fordítottan arányos a sejt tömeggel?

Martin, S. G. and Berthelot-Grosjean, M. (2009). Polar gradients of the DYRK-family kinase Pom1 couple cell length with the cell cycle. Nature 459, 852-856.

MÜLLER JUDIT

Gyógyszervegyész-mérnöki MSc

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Balogh György Tibor**osztályvezető, c. egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt, Szintézistámogató Laboratórium*

Új in vitro kémiai modell a foszfolipidózis előrejelzésére a gyógyszerkutatás korai fázisában

A foszfolipidózis egy jellemzően kationos amfifil karakterű hatóanyagok által kiváltott, lipid-anyagcsere megváltozásával járó gyógyszer mellékhatás, ami egyes szervekben (főként tüdő, agy, máj, vese) lokalizálódva a sejteken belüli foszfolipid felhalmozódásához vezet.

A foszfolipidózis vizsgálatára léteznek in vivo modellek, azonban ezek kis átérésztőképességük miatt előrejelzésre nem jól alkalmazhatóak, így általánosan elterjedt prediktív állat modell nem áll rendelkezésre. Az in silico számítások közül legszélesebb körben alkalmazott a Ploemen-modell, ami a vegyületek lipofilitását és proton-disszociációs sajátságát veszi figyelembe. A foszfolipidózis kialakulására a szakirodalom kétféle lehetséges mechanizmust említ: (1) a gyógyszerek a lipidekhez kötődve indirekt módon gátolják a foszfolipáz enzim aktivitását, illetve (2) a savas közegű lizoszómákban a hatóanyag felhalmozódásának köszönhetően csökken a foszfolipázok aktivitása. Feltételezésünk szerint a vegyületek lipidekhez való kötődésének előre jelzésére alkalmas lehet az in vitro permeabilitás mérés során kapott membránretenció értéke, ami megmutatja a vizsgált vegyület membránhoz kötött hányadát, a lizoszómákban való hatóanyag feldúsulást pedig az effektív permeabilitással lehet összefüggésbe hozni.

A gyógyszerkutatásban a hatóanyag felszívódásának jóslására egyik általánosan alkalmazott nem-sejtes alapú in vitro vizsgálat a PAMPA (Parallel artificial membrane permeability assay) permeabilitás modell. Előzetes, kisebb számú referencia vegyület vizsgálata során a PAMPA módszerrel mért effektív permeabilitás, valamint a membránretenció mértéke és a foszfolipidózis kialakulása között elméleti megfontolásainknak megfelelően sikerült összefüggést találnunk. Az így kapott modellt nagyobb mennyiségű vegyülettel végzett vizsgálattal is sikerült validálnunk.

ORGOVÁN ZOLTÁN

Kémia

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Harmat Veronika**egyetemi adjunktus, ELTE TTK**Karancsiné Menyhárd Dóra**tudományos főmunkatárs, MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport*

Egy oligopeptidáz méretszelektivitásának, szubsztrátkötésének és katalitikus mechanizmusának tanulmányozása röntgendiffrakcióval és in silico módszerekkel

Munkám során *Aeropyrum pernix* acilaminoacil-peptidázt (ApAAP) vizsgáltam, amely a proli-oligopeptidáz enzimcsalád tagja. A család több tagja is biológiai hatása miatt gyógyszer-célpont fehérje. Céлом annak a még ma sem tisztázott problémakörnek a vizsgálata, hogy a szubsztrát milyen úton jut el a molekula belsejében lévő aktív helyhez. Az enzimcsalád több tagjánál is megállapították, hogy nyitott, illetve csukott konformációt is felvehet. Nyitott állapotban az ún. aktív hely lefedését szolgáló propeller domén eltávolodik az aktív helyet tartalmazó hidroláz doméntől, így lehetővé téve a szubsztrát bejutását, ekkor azonban az aktív hely szerkezete eltorzul (a katalitikus hisztidint hordozó hurok elmozdul) tehát a reakció csak akkor játszódhat le, ha az enzim rácsukodik a szubsztrátra, így nagy, feltekeredett fehérjemolekulák védve vannak a hidrolízistől. Csukott állapotban az aktív hely és a külvilág közötti kapcsolatot egyedül a propeller doménon lévő szűk pórus biztosítja.

Céлом egyrészt a szubsztrátkötés és a hisztidin hurok visszarendeződése közti kapcsolat felderítése volt egy kisméretű szubsztrát-analóg inhibitor segítségével, fehérjekrisztallográfiával, másrészt egy oligopeptid szubsztrátnak az enzim üregében való kötődésének modellezése a ki/bejutás lehetőségének a vizsgálata molekuladinamikai szimuláció segítségével.

A krisztallográfiai kísérletek során az ApAAP fehérje előreformált –egy nyitott és egy csukott monomerből álló– aszimmetrikus dimert tartalmazó kristályait kovalensen kötő inhibitor oldatába áztattuk, ezzel egy olyan dimert előállítva, melynek egyik tagja nyitott és komplexálatlan, másik tagja pedig zárt és komplexált állapotban van jelen. Ez az eredmény arra enged következtetni, hogy a szubsztrát kötődése nem elegendő az aktív hely regenerációjához, ahhoz a propeller domén közelsége is szükséges. A szerkezet alátámasztotta, hogy kis szubsztrát-analóg inhibitor belépése a csukott monomerbe a propeller doménon lévő póruson keresztül lehetséges. A molekuladinamikai szimulációk során azt találtuk, hogy a szubsztrát N-terminálisa a propeller doménon lévő pórus nyílása felé orientálódik, vagyis a propellerlapátok közötti nyílás feltehetően nem csak be- hanem kilépő nyílásként is használható kisebb szubsztrátok számára.

PÁLFY GYULA

Vegyész MSc
MSc, 11. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

*Konzulens:
Bodor Andrea
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

Egy rendezetlen miozin fragmens, a homodimer S100A4 fehérje, illetve az egymással alkotott 'átkaroló' komplex NMR-spektroszkópai jellemzése

Kulcsszavak: NMR spektroszkópia, másodlagos kémiai eltolódás, rendezetlen fehérjék, nemizom-miozin IIA, S100A4

Az S100A4 egy kalciumkötő homodimer fehérje, az S100 fehérjék családjából. A nemizom-miozin IIA-val alkotott intracelluláris komplexe feltételezhetően kulcsszerepet játszik a tumor metasztázis kialakulásában. Munkám célja ezen alkotó elemek külön-külön történő jellemzése, illetve a komplex oldatbeli viselkedésének leírása. Oldatbeli atomi szintű információkat NMR spektroszkópia segítségével kapunk. Ennek megfelelően a nemizom-miozin IIA egy 45 aminosavból felépülő fragmenséről (MIIA), a szabad állapotú S100A4-molekuláról, végül a jelölt S100A4 jelöletlen MIIA-val alkotott komplexéről készült 2D és 3D NMR-spektrumok asszignációjából nyertem elsődleges információkat. Az MIIA-fragmens teljes asszignációjából, a másodlagos kémiai eltolódás értékek elemzéséből, valamint a 2D ^1H - ^{15}N HSQC spektrum hőmérséklet-függésének vizsgálatából egyértelműen bizonyítható, hogy ez a 45 aminosavból felépülő fragmens rendezetlen térszerkezetű. Az SCS értékek elemzése során kiderült, hogy a fragmens középső (az A11-R31 aminosavak közötti) régiójában inherens helicitás, azaz dinamikusan fel- és leépülő α -hélix szerkezet mutatható ki, ami előremutathat az MIIA komplexben felvett térszerkezetére. Az SCS értékek kiszámításához használatos többféle random coil értékek összevetését is elvégeztem. Az S100A4d13 asszignációjával kapott eltolódás értékek és az SCS értékek elemzéséből kimutatható, hogy ez egy rendezett térszerkezetű molekula, s az irodalomból ismert hosszabb S100A4 térszerkezetében szereplő négy α -hélix is megtalálható benne. Az S100A4 MIIA-fragmensével alkotott komplexe szokatlan módon aszimmetrikus, tehát az S100A4-homodimer két lánc egy molekula MIIA-val alkot komplexet. Emiatt a két lánc eltérő kémiai környezetbe kerül, és ezt az NMR egyértelműen kimutatja: a 2D ^1H - ^{15}N HSQC spektrumon megkettőződnek a jelek. A mérések elemzése során a komplexkötődés helye is kimutatható. Jelen munka teljes mértékben előkészíti a dinamikai vizsgálatok megvalósítását.

RAICS MÁRIA

Vegyész

MSc, 1. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Kállay Csilla**tudományos főmunkatárs, DE TTK*

Aszparaginsavat és hisztidint egyaránt tartalmazó hexapeptid átmenetifém-komplexei

Szervezetünk egy-egy sejtjében másodpercenként több millió kémiai reakció megy végbe, melyekben a fémion és a fehérje közötti kölcsönhatásnak meghatározó szerep jut. Erre láthatunk példát a metalloproteinek esetében vagy egyes fehérjék – akár kóros, pl. neurodegeneratív betegségeket eredményező – konformációváltozása során.

Munkánk során két, a biológiai rendszerekben jelentős fémmegkötő helyet; aszparaginsavat és hisztidint egyaránt tartalmazó peptid átmenetifém-ionokkal való komplexképzését vizsgáltuk. Az általunk szintetizált AlaAlaAspAlaAlaHis-NH₂ ligandum két egymástól elkülönült fémion-megkötőhelyet tartalmaz. A peptid N-terminális részén az egyszerű peptidekben is megvalósuló koordinációs módok mellett a harmadik helyen található Asp révén (NH₂,N⁻,N⁻,β-COO⁻) koordináció alakulhat ki, illetve ettől függetlenül, a C-terminális részen az imidazolnitrogén – mint horgony – kötődésével (N⁻,N⁻,N⁻,N(Im)) koordinációjú komplex keletkezhet.

A hexapeptid Cu(II)-, Ni(II)- és Zn(II)-komplexeinek pH-potenciometriás, UV-Vis és CD-spektroszkópiás vizsgálatai azt mutatják, hogy a savas tartományban képződő (NH₂,CO) koordinációjú komplexet a COO⁻-csoport és/vagy az N(Im) makrokelátként stabilizálja. Fiziológias tartományban a Cu(II)-ionok esetében már (NH₂,N⁻,N⁻,β-COO⁻) koordinációjú komplexek vannak jelen, a Ni(II)-ion esetében azonban az amidnitrogének deprotonálódása és az említett koordináció kialakulása kissé nagyobb pH-tartomány felé tolódik, mely során az oktaéderes geometriát síknégyszetes elrendeződés váltja fel.

Erősen lúgos tartományban a COO⁻-csoport nem csak a Ni(II)-, hanem a Cu(II)-ionok esetében is kizorul a koordinációból, és a soron következő deprotonálódott amidnitrogén koordinálódik a fémionhoz. A Ni(II)-ionoknál emellett feltételezhető az N(Im)-ről induló (N⁻,N⁻,N⁻,N(Im)) koordináció megjelenése is. A Zn(II)-ionok lúgos tartományban hidrolízist szenvedtek.

Kétszeres fémszámú esetben a ligandum a Cu(II)-ionokat képes volt megkötni: a kétmagvú Cu₂LH₄, illetve Cu₂LH₅ összetételű komplexekben az (NH₂,N⁻,N⁻,β-COO⁻) koordináció kiegészült az (N⁻,N⁻,N(Im)), illetve (N⁻,N⁻,N⁻,N(Im)) koordinációval.

A vizsgált rendszerek többségénél az NH₂-csoportról induló, (NH₂,N⁻,N⁻,β-COO⁻) koordináció nagyfokú kedvezményezettségét láthattuk az N(Im)-ről induló koordinációval szemben. A későbbiekben a harmadik helyen álló Asp jelentőségét kívánjuk mélyebben tanulmányozni annak a hasonló térkitöltésű, nem koordinálódó valinra való kicserélésével.

SCHILLI GABRIELLA KRISZTINA

vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:**Dr. Gyurcsik Béla**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

Az N-ColE7 metallonukleáz mutánsainak sejtmérgező sajátsága

A monogenetikus betegségek gyógyítása a DNS-ben lévő hiba kijavításával lehetséges. Ennek egyik módja a DNS hibahely környékén történő elhasítása lenne, aminek hatására a sejt javítómechanizmusa észleli a sérülést, és megfelelő templát jelenlétében kijavítja azt. Erre a célra tervezték az ún. cinkujj-nukleázokat, amelyek azonban citotoxikusnak bizonyultak. A fentiekből kiindulva kutatócsoportunk célja egy biztonságosabb, szabályozott cinkujj nukleáz létrehozása. Erre a célra a colicin E7 nukleáz doménje (N-ColE7) tűnik alkalmasnak, melynek felhasználásával lehetőség van allosztérikus szabályozás kialakítására: a fehérje N- és C-terminális végeinek megfelelő közelségben kell elhelyezkedniük ahhoz, hogy a fehérje nukleáz aktivitást mutasson. Egy mesterséges nukleáz kialakításához pontosan kell tudni, hogy az NColE7 fehérje mely terminális szakaszait kell az új fehérjében megtartanunk annak érdekében, hogy az a kívánt körülmények között aktív legyen. Ezért megvizsgáltuk, hogy az N-ColE7 25 aminosavból álló N-terminális hurok-részén mely aminosavak alakíthatnak ki kölcsönhatást a molekula többi részével, elsősorban az aktív központot alkotó C-terminális HNH-motívummal. Vizsgáltuk, hogy e kölcsönhatások közül, melyik elég erős ahhoz, hogy befolyásolja, esetleg megszüntesse az aktivitást. Elsőként korábbi kvantumkémiai számítások eredményei és ismert kristályszerkezetek alapján kiválasztottuk a vizsgálni kívánt aminosavakat. Ezek után előállítottuk az alaninmutánsok génjeit rekombináns DNS technológiával. A nukleáz aktivitás miatt a transzformálás során a baktériumok elpusztultak, ezért a mutáns fehérjéket egy, a működésüket gátló immunitásfehérjével együtt fejeztük ki, melyet a tisztítás során el kell távolítani.

TAKÁCS GERGELY

Vegyészmérnök

BSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:**Dr. Várnagy Katalin
egyetemi docens, DE TTK***Két hisztidint tartalmazó tetrapeptid réz(II)-komplexeinek vizsgálata**

Az emberi szervezet számára feltétlenül szükséges a réz(II)ion jelenléte. Elengedhetetlen a redoxi folyamatok katalizálásának szempontjából, és sok más különböző folyamathoz is nélkülözhetetlen, nem csak az emberi szervezet számára. A növényvilágban a fotoszintetikus folyamatokban vesz részt, míg a puhatestű és az ízeltlábú állatok oxigénszállító festékanyagának a részét képezi. Az emberi szervezetben részt vesz a csontképződésben, a légzési láncban, segíti a vas felszívódását és beépülését. A fémion metalloproteinekben és metalloenzimekben aminosav oldallánchoz kötött formában található meg.

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 olyan tetrapeptidet állítottam elő szilárd fázisú peptidszintézissel, mely a C- és az N-terminális végen is hisztidint tartalmaz (NH₂-His-Ala-Ala-His). Ezt követően réz(II)ionnal alkotott komplexeit vizsgáltam pH-potenciometria, UV-látható- és a CD-spektroszkópia segítségével.

A pH-metriás mérések során 1:1 fém-ligandum arányú komplexek keletkezésén kívül többmagvú szerkezetet is feltételeztünk. A réz(II)ion kis pH-n hisztaminszerűen kapcsolódik az imidazolnitrogénhez [CuAH]²⁺ komplexet kialakítva. A pH-t emelve a láncvégi imidazolnitrogén deprotonálódik, majd az amidcsoportok protonvesztése és koordinálódása játszódik le kialakítva a [CuA]⁺, [CuAH₋₁], [CuAH₋₂]⁻, [CuAH₋₃]²⁻ komplexeket. A C-terminális részen elhelyezkedő imidazolnitrogén koordinációja is feltételezhető a [CuA]⁺, [CuAH₋₁], [CuAH₋₂]⁻ komplexekben. A három koordinálódott amid donorcsoport és az aminocsoport telíti a réz(II)ion koordinációs szféráját, így ennél a szerkezetnél ([CuAH₋₃]²⁻) már nem képes kapcsolódni a távolabbi imidazolnitrogén.

Egy [Cu₃A₂H₋₆]²⁻ összetételű többmagvú komplex képződését is feltételeztünk. Az UV-látható spektrofotometriás eredmények és a CD-spektroszkópiás adatok is alátámasztják ezen szerkezetek keletkezését.

ZSÓTÉR SOMA

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Vértessy G. Beáta**MTA doktora, egyetemi tanár, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont**Enzimológia Intézet**Róna Gergely**doktorandusz, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont Enzimológia**Intézet***Uracil detektálása a DNS-ben fluoreszcensen jelölt UNG fehérjével**

Kulcsszavak: Uracil, DNS-hibajavítás, UNG, Kvantitatív uracil mérés, Uracil detektálás

A munkám célja egy olyan jelölt enzim előállítása és jellemzése volt, amellyel sejtekben és szövetekben lehetne vizsgálni a DNS-ben előforduló uracil eloszlásának mintázatát. Erre a feladatra a DsRed nevű fluoreszcens fehérjével fuzionált, katalitikusan inaktív humán UNG2-t (D145N és H268N pontmutáns) szeretném használni. A konstrukt génjét hordozó expressziós plazmid kész állapotban állt a rendelkezésemre. A kísérleteim első része a fehérjeexpresszió optimalizálásából, majd ezt követően a szükséges mennyiségű fehérje előállításából és tisztításából tevődött össze. SDS-PAGE és mikroszkópos eredmények alapján az enzim termelését E. coli BL21 ung- sejtípussal végeztem, 20°C-os hőmérsékleten, 16 órán keresztül. A fehérjét Ni-NTA töltetű oszlopon tisztítottam gradiens elúciót alkalmazva.

A kísérleteim második része az így előállított fehérje karakterizálása volt. Irodalmi adatokból ismert, hogy a D145N és H268N pontmutációk hatására a humán UNG2, az uracil kötő képességének megtartása mellett, képtelenné válik a β -N-glikozidos kötés hidrolízisére. Kérdés azonban, hogy a DsRed-el történő kapcsolás után megmaradnak-e ezek a tulajdonságok. Ennek eldöntésére a fehérje aktivitását agaróz-assayvel, a DNS kötő képességét pedig elektroforetikus mobilitás tessel (EMSA) ellenőriztük. Az agaróz-assay és az EMSA alapján megállapítottuk, hogy a fúziós konstrukt katalitikusan inaktív és rendelkezik DNS kötő képességgel. A rekombináns fehérje uracil tartalmú DNS-re mutatott specificitását dot-blot technikával ellenőriztem. A módszer optimalizálása során bebizonyosodott, hogy az enzim szelektív az uracil tartalmú DNS-re és a megfelelő kalibrációs pontok biztosítása mellett alkalmas a gyors, kvantitatív uracil meghatározásra bármely DNS mintából.

Jelenlegi munkám során 5-Fluorodezoxiuridinnel (FdUR) kezelt, ung-/- egér embrionális fibroblast sejteket festek az előállított fehérjével. Az FdUR a timidilát-szintáz gátlásán keresztül uracil felhalmozódást idéz elő a genomban. A konfokális mikroszkóppal készült felvételeken jól látható különbség van az FdUR-el kezelt és nem kezelt minták között.

Jövőbeli terveim között szerepel a festési eljárás optimalizálása és olyan további konstruktok előállítása, amelyekkel még nagyobb érzékenység érhető el. A módszer így olyan biológiai jelenségek vizsgálatára is alkalmas lenne, amelyek csak csekély mértékű lokális uracil felhalmozódással járnak.

Elméleti kémia és Kémiai Informatika tagozat

ÁRENDÁS PÉTER

matematikus

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:
Császár Attila
egyetemi tanár, ELTE TTK
Furtenbacher Tibor
tudományos munkatárs, ELTE TTK*

Gráfelméleti módszerek a spektroszkópiában

A spektroszkópiai hálózat (SN) fogalmát 2007-ben vezette be Császár Attila és Furtenbacher Tibor, a nagyfelbontású molekulaszpektroszkópia nagyméretű adatbázisainak kezelésére. Munkám során az SN-ek matematikai módszerekkel történő vizsgálatával foglalkoztam, gráfelméleti és adatbányászati módszereket felhasználva. Az algoritmusok implementálása után a H_2^{16}O molekula SN-jén teszteltem ezeket. A molekula mért spektroszkópiai hálózata 17.690 csúcspot (energiaszintet) és 99.335 élet (átmenetet) tartalmaz, míg a dolgozat során felhasznált, ab initio számítások segítségével megadott SN-t 505.806.202 él és 221.097 csúcs alkotja.

Három fontos, a spektroszkópiai hálózatokkal kapcsolatos problémával foglalkoztam. Először egy olyan módszert kerestem, mely olyan minimális számú, maximális intenzitású átmenetet ad meg, melyek segítségével az SN egy komponensén belül minden csúcs elérhető lesz. Ezután szerettem volna hatékony algoritmust adni arra, hogy mely, még nem mért átmenetek segítségével tehetjük összefüggővé a mért spektroszkópiai hálózatot. Végül arra kerestem a választ, miként tudjuk hatékonyan bővíteni az asszignált energiaszintek halmazát, új energiaszintek hozzávételével a számított SN csúcsai közül.

A H_2^{16}O molekula vizsgálata során mutattam egy módszert, amely meghatározza a minimális számú fontos átmenetet, és összeköti a mért spektroszkópiai hálózat komponenseit. A módszer Joseph Kruskal minimális súlyú feszítőfa előállítására szolgáló algoritmusán alapul, és az intenzitások negatív logaritmusát használja súlyfüggvényként a hálózat élein. A dolgozatban példákat mutattam ismert csúcsok közt futó, még nem mért átmenetekre, melyek hasznosak lehetnek a nagyfelbontású molekulaszpektroszkópia kutatói számára is.

Bevezettem emellett egy iteratív algoritmust a mért hálózat energiaszintjeinek halmazának bővítésére is. Két programot írtam ennek implementálására, melyeket a H_2^{16}O tesztmolekulán futtatva 50.243 nem mért átmenetet kaptam. Ezek asszignálásával 29.575 új energiaszinttel bővíthetjük a H_2^{16}O molekula mért SN-jét.

Végezetül megemlítettem néhány olyan további kérdést a spektroszkópiai hálózatok területéről, melyekre az itt tárgyaltakhoz hasonlóan szintén matematikai módszerek alkalmazásával kereshetünk hatékonyan megoldást, legyen az gráfelmélet, adatbányászat, valószínűségi számítás vagy statisztika.

BENDA ZSUZSANNA

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

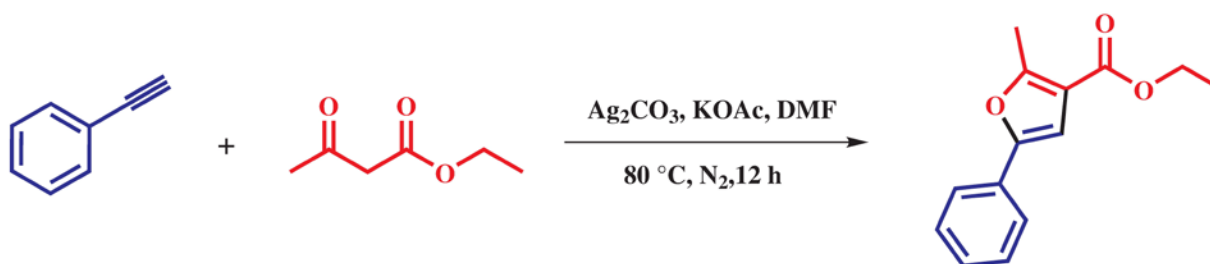
Konzulensek:
Stirling András
tudományos tanácsadó, MTA TTK
Daru János
doktorandusz, ELTE TTK

 β -Oxoészterek ciklizációs reakciójának vizsgálata

Furán részletet tartalmaz számos gyógyszer, és széleskörűen alkalmaznak furán származékokat vegyipari szintéziseknél, ezért fontos minél gazdaságosabb és hatékonyabb módszereket kifejleszteni az előállításukra. β -oxoészterek acetilénszármazékokkal gyűrűzáródással járó oxidatív C-H/C-H funkcionálizációs reakcióba léphetnek ezüst-karbonát jelenlétében.¹ Ennek során egy lépésben, kitűnő kitermeléssel és nagy szelektivitással triszubsztituált furán termék keletkezik.

Az irodalomban számos átmenetifém-katalizált C-H/C-H funkcionálizáció ismert 1,3-dioxovegyületek és aril-alkének, illetve aril-alkinek közt, a kísérleti tapasztalatok alapján azonban az ezüst-karbonát hatására végbemenő reakció mechanizmusa valószínűleg ezektől különböző. A reakció mechanizmusának ismerete kísérleti együttműködő partnereinknek lehetőséget nyújtana a reakciókörülmények optimalizálására és a szintézis hatékonyabbá tételére.

A dolgozatomban elméleti kémiai módszerek segítségével vizsgálom az ábrán bemutatott, ezüst-karbonát jelenlétében lejátszódó oxidatív ciklizációs reakciót. Számításaim során a M06 hibrid meta-GGA kicserélődési-korrelációs funkcionált használtam.



Fenil-acetilén és etil-acetoacetát ezüst-karbonát hatására lejátszódó oxidatív ciklizációs reakciója

A feltételezett intermedierek és átmeneti állapotok szerkezetét és képződési szabadentalpiáját a kísérleti munkáknál alkalmazott hőmérsékleten és az oldószer hatásának figyelembevételével állapítottam meg. Az egymást követő lépéseket és különböző reakcióutakat végigkövetve meghatároztam a reakcióutak szabadentalpia profilját. Az intermedierek stabilitása és a gátmagasságok alapján kiválasztottam a legkedvezőbbet a felírt reakcióutak közül.

¹ He, Guo, Ke, Hao, Xu, Chen, and Lei, J. Am. Chem. Soc. 2012 5766

BERTA DÉNES

Kémia BSc
BSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

KOVÁCS ÁDÁM

kémia
BSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

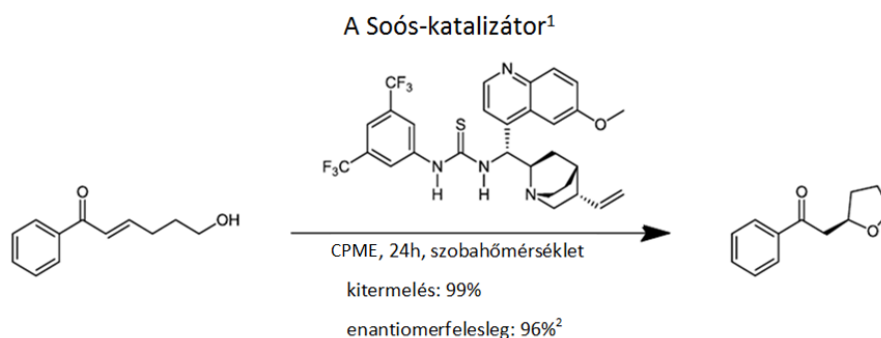
Témavezető:

Madarász Ádám

tudományos munkatárs, MTA TTK, Szerves Kémiai Intézet, Elméleti Kémiai Osztály

Organokatalitikus reakció mechanizmusának vizsgálata elméleti kémiai módszerekkel

Munkánk során egy α,β -telítetlen oxovegyület intramolekuláris Michael-addícióját vizsgáljuk elméleti kémiai módszerekkel, mely során egy kettes helyzetben királis tetrahydrofuran származék keletkezik. A reakció enantioszelektív, a termék kiralitása az alkalmazott katalizátor konfigurációjától függ.



Elsődleges célunk a mechanizmus felderítése, illetve az enantioszelektivitás geometriai magyarázata. Ehhez modellezzük a reagáló rendszert, és klasszikus módszerek segítségével – OPLS2005 erőtermodell – megkeressük a lehetséges kiindulási geometriákat. A sűrűség funkcionál elméleten (density funkcionál theory, DFT) alapuló módszerek segítségével optimaljuk a vizsgált szerkezeteket B97D/6-31G* szinten, majd meghatározzuk az egyes reakciólépések valószínűsíthető átmeneti állapotait, illetve kiszámoljuk ezek szabadentalpiáit M06-2X funkcionállal és 6-311++G** bázissal. Az így kapott információk birtokában már képesek lehetünk magyarázatot találni az enantioszelektivitásra.

Eredményeink alapján elmondható, hogy a reakció két lépésben zajlik le. Kezdetben a reaktáns komplexálódik a katalizátorral. Ezt követően egy lépésben zajlik le a hidroxil-csoport hidrogénjének átkerülése a katalizátor tercier nitrógenjére, illetve az asszimmetria centrum konfigurációjáért felelős szén-oxigén kötés létrejötte. Így, az első lépés után egy ionpár képződik intermedierként, melyet a reaktánsból képződött enolátió és a katalizátorból kialakult kvaterner ammónium-ion alkot. A második lépésben ezen töltésmegoszlás szűnik meg, a kvaterner ammónium-ionon lévő proton α -szénre történő átkerülésével.

Továbbá megmutattuk, hogy mindkettő enantiomer képződése során az első lépés a sebességmeghatározó, így az enantioszelektivitás magyarázatához ezeket a geometriákat kell összehasonlítani. Szembetűnő, hogy a két releváns átmeneti állapotban eltérő a hidrogén-kötések rendje. Feltételezésünk szerint ez a szelektivitás irányába változtatja a reakciót. Emellett a major termék képződése során az első átmeneti állapotban észlelhetők még diszperzós kölcsönhatások is, melyek alapján szintén kedvezőbbnek jósolható ennek a terméknek a képződése.

¹ Benedek Vakulya, Szilárd Varga, Antal Csámpai, Tibor Soós, *Org. Lett.*, 2005, 7 (10), 1967-1969

² Keisuke Asano, Seijiro Matsubara, *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, 133 (42), 16711-16713

FEHÉR PÉTER

Vegyész MSc

MSc, 1. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Purgel Mihály**tudományos segédmunkatárs, DE TTK*

A fahéjaldehid szelektív C=C hidrogénezésének vizsgálata RuII(PPh₃)₃ katalizálta folyamatban DFT módszerrel

A diákköri munka keretein belül a fahéjaldehid C=C kötésének telítését vizsgáltam DFT módszerrel Ru^{II}H₂(PPh₃)₂(H₂O) jelenlétében.

A korábbi irodalmakban a cisz dihidrido komplexre végeztek számításokat, s volt melyben a hidrogénezés szelektivitását is megmagyarázták. Számításaik azonban PH₃ ligandumokkal történtek, így a sztérikus hatások nagy részét nem tapasztalták.

A kutatócsoportban NMR mérésekkel formiát ionok (mint hidrogénforrás) jelenlétében a transz dihidrido Ru^{II}H₂(mtppps)₂(H₂O) komplexet azonosították. Ezek alapján mi a transz-komplexszel végeztünk számításokat. Emellett a mi rendszerünkben az egyszerűsítés kisebb mértékű, a mtppps helyett PPh₃ ligandumokkal számoltunk, vagyis csupán a szulfocsoportokat hanyagoltuk el.

A C=C hidrogénezéshez a fahéjaldehidnek mindenképpen koordinálnia kell, ami úgy valósulhat meg, hogy a kiindulási komplexből egy PPh₃ ligandumnak távoznia kell.

A reakcióra két lehetséges utat találtunk, melyek egyike alfa, másik pedig béta hidrid (enolát) intermediereken keresztül valósul meg. A folyamat két fő lépése egy hidrid-, majd egy protontranszfer, melyeket kis energiájú belső forgások kötik össze. Mindkét útvonalon a proton-átmenet lépése a sebesség-meghatározó.

A protontranszfer a béta hidrid útvonalon kétféleképp lehetséges. A koordinált víz átbillenése (inverziója) az alfa szénatom (HCA kialakulása), míg forgása a formil oxigénatom protonálódásához (enol kialakulása) vezet. Ez utóbbi sebesség meghatározó lépése a tautomerizáció, ami a szubsztrát disszociációját követően valósulhat meg. Ennek energiagátja jelentős (+84,7 kJ/mol), s így összességében előnytelenné teszi ezt a reakcióutat.

A C=O telítéséhez képest minden esetben magasabb aktiválási energiákat találtunk, ami összhangban van a kísérleti tapasztalatokkal, vagyis modellünk képes magyarázatot adni a fahéjaldehid szelektív hidrogénezését illetően.

FÖLDES TAMÁS

Vegyész

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Konzulens:

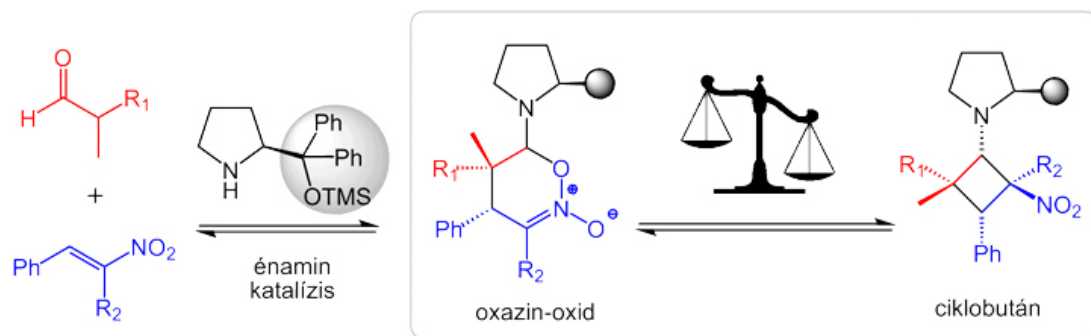
Pápai Imre

tudományos osztályvezető, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóintézet

Szerves Kémiai Intézet

Prolin-alapú organokatalizátor működésének elméleti vizsgálata

Egyszerű prolinol-származékok igen hatékonyak bizonyultak aldehidek és nitroolefinek aszimmetrikus Michael-addíciójának katalizálásában, azonban az α -szubsztituált aldehidek és nitroalkének esetében a reaktivitás erősen lecsökken [1]. Hogy közelebb kerüljünk a jelenség értelmezéséhez, az MTA TTK Elméleti Kémiai Laboratóriumának munkatársai által javasolt új mechanizmust [2] alkalmazva kísértem meg a szubsztituált aldehidek reakciójának modellezését. Sűrűségfacionál-elven alapuló elméleti kémiai vizsgálataim középpontjában a feltételezett sebességhatározó lépést (protonálást) megelőző szén-szén kapcsolás állt.



Az aldehid aktiválásából származó énamin pirrolidin-gyűrűjének és oldalcsoportjainak konformációs analízise, valamint az addíciós lépés elemzése után sikeresen megtaláltam a mechanizmus által jósolt oxazin-oxid és ciklobután intermediereket (1. ábra). A kvantumkémiai számítások eredményei szerint a ciklobután köztitermék stabilitását nem változtatja meg számottevően az α -helyzetben szubsztituált aldehid oldalcsoportjainak szterikus befolyása. Viszont az oxazin-oxid speciesz jelentősen destabilizálódik, illetve a vizsgált átalakulások gátjai is megnönek. Megmutattam, hogy a reaktivitás csökkenéséért elsősorban a pirrolidin-gyűrűvel fellépő kedvezőtlen, taszító kölcsönhatások felelősek. A számításokból levont következtetéseket a finn Jyväskylä-i Egyetem laboratóriumában végzett in situ NMR spektroszkópiai vizsgálatok is alátámasztották.

A modell és az általa kapott eredmények felhasználásával nemcsak teljesebb képet kaphatunk a prolinol-éter alapú katalizátorok működésével kapcsolatban, de a tapasztalatokat kihasználva a katalizátor jövőbeni fejlesztésével kapcsolatban is könnyebben előreléphetünk.

[1] Blackmond, D. G., Burés, J., Armstrong, A. J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 8822-8825; Blackmond, D. G., Burés, J., Armstrong, A., J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 6741-6750.

[2] Sahoo, G., Rahaman, H., Madarász, Á., Pápai, I., Melarto, M., Valkonen, A., Pihko, P. M., Angew. Chem. Int. Ed., DOI: 10.1002/anie.201204833

GYEVI-NAGY LÁSZLÓ

Vegyész MSc

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:**Dr. Tasi Gyula**egyetemi docens, SZTE TTIK*

Szilánok konformációs flexibilitásának vizsgálata

A kvantumkémiaiában alkalmazott Born-Oppenheimer közelítésen belül létező potenciális energia felület koncepciója alapvető fontosságú az elméleti kémiában. E hiperfelület fogalma nélkül a konformációs analízis, mely a konformerek energiáinak meghatározásával foglalkozik, elképzelhetetlen lenne. A torziós szögek függvényében számított potenciális energia felület lokális minimumaihoz egy-egyértelműen molekulaszervezeteket rendelhetünk. E struktúrákat nevezzük egy molekula konformereinek. Az energiaminimumok ismeretében írhatjuk le a molekula szerkezetét, amely annak tulajdonságait, köztük a kémiai reakciók kimenetelét is meghatározza. A normál alkánok konformációs tulajdonságai jól ismertek különböző módszerekkel végzett vizsgálatok alapján, azokkal több cikk is foglalkozik. Munkám során a szilánok konformációs sajátságait vizsgáltam, amellyel kapcsolatban hasonló eredményeket a szakirodalomban eddig nem közöltek. A dolgozatban először bemutatom az alkánok és a szilánok tulajdonságai közötti különbségeket leíró eddigi eredményeket, amelyek főleg a szén- és szilíciumvegyületek eltérő termodinamikai és reakciókinetikai sajátságaira támaszkodnak. Ezután különböző kvantumkémiai módszerekkel végzett számítások alapján összehasonlítom a két vegyülettípus eddig ismert konformációs tulajdonságait, az eddig talált konformerek számát és azok energiasorrendjét, amelyek a számítások alapján jelentősen különböznek egymástól. A számításokat különböző *ab initio* módszerekkel, Hartree-Fock, másodrendű Moeller-Plesset, csatolt klaszter, valamint G2(MP2,SVP) kompozit módszerrel, illetve SEOEM közelítő kvantumkémiai módszerrel végeztük, mind az alkánoknál található öt torziós szög felhasználásával, mind Monte-Carlo módszerrel generált kiindulási geometriákkal. A dolgozatban bemutatom az egyes módszerek közötti különbségeket is, valamint azok alkalmazhatóságát az adott problémára.

MEZEI PÁL DÁNIEL

vegyészmérnöki

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Csonka Gábor István
egyetemi tanár, BME VBK*

Sűrűségfunkcionálok delokalizációs és diszperziós hibája: Hogyan teszteljük és javítsuk?

A sűrűségfunkcionál módszerek a modern kvantumkémiai számítások széles körben elterjedt, igen hatékony csoportját alkotják. A kvantumkémiai módszerek a számítási sebesség növelése érdekében közelítéseket tartalmaznak, amelyek célja, hogy lecsökkentsék a számítások erőforrásigényét, ugyanakkor az eredmények a kémiai pontosságon belül legyenek. A sűrűségfunkcionál módszerek esetében a kicserélődési-korrelációs funkcionál minősége szabja meg az eredmény pontosságát. A minőség tesztelésére szolgál például a GMTKN30 adatbázis, melynek egy érdekes része a Diels-Alder reakciókat tartalmazó DARC adatbázis.

Kimutattam, hogy a DARC adatbázis nincs megfelelően megkonstruálva, mert csak egyszerű szerkezeti hasonlóság alapján lett összeállítva a hibák mélyebb analízise nélkül. Megvizsgáltam az adatbázisban lévő reakciók hibáinak elméleti kémiai és statisztikai jellegét, és azt találtam, hogy egyes reakciók elhagyhatók információvesztés nélkül. Ezek alapján javaslatot tettem az adatbázis módosítására. A módosított DARC adatbázis által szolgáltatott statisztikai mutatók már helyesebben mutatják a módszerek hibáit, jelentősen kisebb számítási erőforrásigény mellett. A funkcionálok tesztelése során meghatároztam az egyes módszerek teljesítményességét. Az azonos pontosságú funkcionálok közül kiválasztottam a leggyorsabbat, a PBE funkcionált. Meghatároztam azt a bázist, az augcc-PVTZ(-f,-Hd)-t, amely kellően gyors és pontos. Megmutattam, hogy a PBE funkcionálból képzett globális hibrid funkcionálok esetében nem adható meg minden DARC reakcióra egyaránt optimális egzakt kicserélődési energia arány. A hibákat az egzakt kicserélődés súlyának növelése minden típusú reakció esetében hasonló lineáris függvény szerint tolja el. A PBE funkcionállal kapott DARC reakció energiákat az egyesített rövid és hosszú távú kétszeres tompítású dD10 diszperziós korrekcióval korrigáltam. A PBE-dD10 jobb eredményeket adott, mint a hibrid PBE funkcionálok, és a hibákat ténylegesen csökkentette, nem csak lineárisan eltolta. A dD10 korrigált módszerek a hibrid módszerekkel szemben kevesebb, mint fele annyi időt vesznek igénybe. A további kutatások megfelelő irányának a diszperziós korrekció alkalmazását, valamint új korrekciós megoldások kifejlesztését tekintem. A módosított DARC adatbázist a jövőben magasabb szintű funkcionálok tesztelésére is fogom használni. A módosított DARC adatbázissal szerzett tapasztalatok alapján további teszt adatbázisokat kialakítását tervezem.

PAPP DÓRA

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Perczel András**egyetemi tanár, ELTE TTK**Pohl Gábor**tudományos segédmunkatárs, ELTE TTK*

Amiloid szerkezetek stabilitása fehérjékben

Kulcsszavak: fehérje-aggregáció, amiloid, kvantumkémia, β -redős szerkezet, stabilitás

Számos neurodegeneratív betegség kialakulása peptidek aggregációja során létrejövő ún. amiloid szerkezetű plakkok jelenlétéhez köthető a szervezetben, amelyekhez hasonló jellegű aggregátumok számos fehérjében előfordulnak függetlenül azok primer szekvenciájától. Ez alapján valószínűsíthetjük, hogy az eredeti rendezett térszerkezet amiloid formába történő átalakulásának oka a fehérjék gerincevázának tulajdonságaiban keresendő.

Hogy közelebb kerülhessünk e folyamatok hajtóerejének megértéséhez, kisebb modellpeptideknek az amiloidra jellemző β -redős szerkezetté történő di- és oligomerizációját vizsgáltuk kvantumkémiai módszerekkel. Teljes szerkezetoptimalást és frekvenciaszámítást végeztünk a $\text{HCO}-(\text{Ala})_n-\text{NH}_2$, $[\text{HCO}-(\text{Ala})_n-\text{NH}_2]_2$ ($n=1-6$), valamint a $[\text{HCO}-\text{Ala}-\text{NH}_2]_m$, $[\text{HCO}-(\text{Ala})_2-\text{NH}_2]_m$ ($m=2-6$) modellszerkezeteken az M05-2X/6-311++G(d,p)/M05-2X/6-31G(d) elméleti szinten, mind parallel, mind antiparallel elrendeződés esetén. Különböző termodinamikai függvényeknek (entalpia, entrópia, illetve szabadentalpia) az aggregátumok létrejötte során fellépő megváltozását számítottuk, majd ezeknek a változásoknak adott felépítő egységre normált értékeit felhasználva nagyobb rendszerek stabilitását is jósolhatóvá tettük. Emellett antiparallel redők esetén a dimerizációs folyamatot vizsgálva rezgési analízist végeztünk, amely szerint a dimerizáció során csökkenő entrópiát újonnan keletkező dimer rezgések kompenzálják. A redők kialakulásakor fellépő szabadentalpia-változás minden esetben negatívnak, így a kialakuló amiloid szerkezet termodinamikailag stabilnak adódott. Az antiparallel redős szerkezetek stabilitásának hátterét a dimer modell rendszerek ún. természetes molekulapályái segítségével vizsgáltuk.

Az elvégzett számítások egy elméleti jellegű magyarázatot adnak a fehérjék amiloid szerkezeteinek kialakulására, illetve az aggregációs folyamat hajtóerejére. Eredményeinket felhasználva következtetni lehet hasonló, kiterjedtebb rendszerek stabilitására, illetve az ezek disszociációjához szükséges befektetendő energia nagyságrendjére, így növelve az aggregáció visszaszorításának esélyét.

PAPP TAMARA

Kémia

BSc, 7. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:**Dr. Kégl Tamás**tudományos főmunkatárs, PTE TTK*

Platinakatalizált hidroformilezés regio- és enantioszelektivitásának meghatározása kvantumkémiai számítások segítségével

A hidroformilezés egy olyan, az iparban és a kutatásokban egyaránt nagy jelentőséggel bíró homogén katalitikus eljárás, melynek eredményeképpen normál és elágazó aldehideket nyerünk. A hidroformilezési reakciók során leggyakrabban alkalmazott kobalt- és ródium-tartalmú katalizátorrendszerek mellett, az utóbbi évtizedekben, kiváló szelektivitásuk miatt a platina-ón-tartalmú rendszerek is egyre nagyobb népszerűségnek örvendenek. Munkám alapvető célja a Pt/Sn-katalizált hidroformilezés regio- és enantioszelektivitásának meghatározása volt DFT-számítások segítségével.

A sztirol platinakatalizált aszimmetrikus hidroformilezését PBEPBE/SDD elméleti szinten vizsgáltam, királis difoszfinként leegyszerűsített chiraphos-ligandumot [2,3-bisz(difoszfino)-bután] alkalmazva. Megállapítást nyert, hogy az olefin beékelődés a sebesség-meghatározó lépés, illetve hogy a termék aldehidek arányát is e lépés határozza meg. A regioszelektivitás esetében elfogadható, míg az enantioszelektivitás esetén kiváló egyezést kaptam a rendelkezésre álló kísérleti eredményekkel.

A para-szubsztituált sztirolok Pt/Sn/BDPP-katalizált hidroformilezése során az optikai hozam hőmérsékletfüggést mutat, az abszolút konfigurációváltozashoz tartozó hőmérséklet összefügg a szubsztituens Hammett-konstans értékével. A platina, és a koordinációs övezetében lévő többi atom magjában számított elektrosztatikus potenciál (EPN) értékek a para-szubsztituensek Hammett-konstans értékével, az acetoxi-csoport kivételével, kiváló lineáris korrelációt adtak. Az acetoxi-szubsztituensre új Hammett-konstanst javasoltam olyan széles körben alkalmazott kvantumkémiai paraméterek segítségével, mint a Wiberg-féle kötésindex, az elektronsűrűség a kötéskritikus pontban, a parciális töltés, és az atommagban számított elektrosztatikus potenciál.

PÓS ESZTER SAROLTA

Kémia

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Szalay Péter**egyetemi tanár, ELTE TTK**Tarczay György**egyetemi docens, ELTE TTK*

Az adenin molekula elektrongerjesztéseinek kísérleti és elméleti vizsgálata

A genetikai információt a pirimidin-, és purin-vázis bázispárok által hordozó nukleinsavak elektronszerkezetének különböző hullámhosszú sugárzások hatására bekövetkező változása nagymértékben befolyásolhatja azok helyes működését. A gerjesztési energia útjának követése tehát kiemelt jelentőséggel bír ezekben a molekulákban. Korábbi kísérletek azt mutatták, hogy a DNS-t, illetve RNS-t felépítő nukleotid egységekben kizárólag a nitrogéntartalmú bázisok képesek sugárzás abszorpciójára. Elsődlegesen tehát e bázisok elektrongerjesztéssel szembeni viselkedését érdemes tanulmányozni.

TDK munkám során az adenin molekula spektroszkópiájával foglalkoztam. Céлом ugyan a DNS-molekula csak egy kis részletének, az egyik nitrogéntartalmú bázisnak a vizsgálata volt, de végig arra törekedtem, hogy ezt a lehető legmagasabb szintű kvantumkémiai módszerrel végezzem.

Az adenin molekula UV-spektroszkópiájának vizsgálatát két egymást kiegészítő módszerrel végeztem. Az elmélet segít a jelenség megértésében, a mérés pedig megmutatja, hogy megfelelő elméleti szintet használtunk-e a számításokhoz. A spektrumok összehasonlításából megbízható módon elvégezhetjük a jelek asszignációját is.

Először mátrixizolációs módszerrel előzetesen optimált körülmények között felvettem az adenin UV-spektrumát. A kapott eredmények megértéséhez elméleti módszerekkel spektromszimulációt végeztem. Az elméleti munka első lépéseként magas szintű kvantumkémiai módszerek segítségével meghatároztam a szimulációhoz szükséges paramétereket, melyekből a spektrum előzetes részspektrumokra bontásával kisebb számítási igényű feladatok elvégzésével elkészítettem az elméleti színeképet, melyből fény derült arra, hogy nem szükséges minden állapot és minden lehetséges csatolás figyelembe venni. A teljes spektrum szimulációjához végül az $1(\pi\pi^*)-1(n\pi^*)-2(\pi\pi^*)-3(\pi\pi^*)-3(n\pi^*)$ állapotokat és a köztük fellépő vibronikus csatolásokat használtam.

A mért és az elméleti úton kapott spektrumok összehasonlításából jól látszik, hogy az elméleti leírás sokkal részletesebb leírásra ad lehetőséget, az $(n\pi^*)$ -átmenetekhez tartozó csúcsok a kísérleti spektrumban nem jelennek meg, de az elméleti szimuláció azt mutatja, hogy a fektetett burkolók alakját jelentősen befolyásolják. Ugyanakkor a két spektrum egymástól való eltérése azt mutatja, hogy a jövőbeni számítások során szükség lehet egyéb járulékokat is figyelembe venni.

TÁBOROSI ATTILA

Környezetmérnök BSc

BSc, 11. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:
Dr. Kurdi Róbert
adjunktus, PE MK*

Montmorillonit nanokompozitok vizsgálata számításhos kémiai módszerekkel

Munkám alapvető célja a montmorillonit-didodecil-dimetil-ammónium (MMT-DDDMA) komplex szerkezetvizsgálata volt, a kísérletes úton meghatározott kationcsere-kapacitás (CEC – Cation Exchange Capacity), illetve az ehhez tartozó bázislap távolság függvényében. Nem foglalkoztam az egyes szerkezetekhez tartozó pontos energia értékek kiszámításával, de a molekulamechanikai módszer használatával az egyes szerkezetekhez tartozó energiaértékek tekintetében relatív sorrendet tudtam felállítani.

A kísérletes módszerek során R.L. Frost és munkatársai a montmorillonit bázikus kationjait DDDMA kationra cserélték le. A MMT-DDDMA komplex modellezéséhez ezért szükséges volt a csere-kation konformáció analízisének elvégzésére is, az interkalálószer (DDDMA) legstabilabb állapotának megállapítása érdekében.

Elvégeztem mind az „üres”, mind az interkalált MMT illetve MMT-komplex rácsszerkezetének meghatározását különböző ioncsere-kapacitás értékek függvényében. Az így kapott szerkezeteket illetve bázislap távolság értékeket korreláltattam, a kísérletes úton meghatározott röntgendiffrakciós mérési adatokkal.

Megállapítottam, hogy korlátai ellenére is jól használható a molekulamechanikai módszer a nagy atomszámú montmorillonit-komplex szerkezetének felderítésére és a kísérleti adatokból tett következtetéseket a számításhos módszerek jól kiegészítik.

TÓBIÁS ROLAND JÓZSEF

Vegyész MSc.

MSc, 10. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:**Dr. Tasi Gyula**egyetemi docens, SZTE TTIK*

Az elsőrendű reakciók matematikai modellezése

Az izomerizációs folyamatok igen nagy jelentőséggel bírnak, főleg azokban az esetekben, amikor a ligandumok elhelyezkedése is befolyásolja a vegyületek alkalmazhatóságát. Ahhoz azonban, hogy a pontos az izomereeloszlást megállapítsuk, a korrekt matematikai és reakciókinetikai tárgyalásmód elengedhetetlen.

Munkánk során a szakirodalomban jól ismert, az utóbbi időben kissé elfeledett, általánosított modellt elemeztük, mellyel az összes elsőrendű reakció konzisztens módon kezelhető. Ehhez, amint azt Gerald R. Eyring is tette az irreverzibilis reakcióhálózatok esetében, segítségül hívtuk a Laplace-transzformációt, illetve a mátrixalgebra és a nemlineáris algebra eszközeit, megalkotva az N komponensű elsőrendű reakciórendszer komponensmérlegének általános (szemi)analitikus megoldását.

TÓTH ZSUZSANNA

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Szabados Ágnes
adjunktus, ELTE TTK*

Alsó korlát formulák alkalmazása a sajátérték probléma közelítő megoldására

A kvantumkémiai rendkívül elterjedt a felső korlátok használata. Különösen fontos a várható érték, mint felső korlát, aminek kedvező tulajdonsága, hogy: fizikai jelentéssel bír és segítségével a próbafüggvény egyszerűen javítható. Ezzel szemben, alsó korlát formulák kevésbé ismertek és szinte alig kerülnek alkalmazásra az elméleti kémia mai eszköztárában. Ennek oka, hogy ezek a formulák a várhatóértéknél jóval bonyolultabbak, számításuk drágább és alkalmazásukhoz számos feltételbiztosítani kell.

Az alsó korlátot adó képletek egy része alkalmazza a perturbációszámítás alap gondolatát, hogy a megoldandó problémát egy nulladrendű, ismert tagra és egy kicsi maradékra osztjuk (particionáljuk). A nulladrend választása nem mindig egyértelmű, néha a fizikailag megalapozott felbontás rossznak bizonyul. Munkánk során azt a kérdést vizsgáltuk, hogy alsó korlát formulák maximálása, mint irányelv, felhasználható-e a korábbiaknál jobb partíció kiválasztására.

Az ötletet egy mátrixpéldán és a H₂ molekula minimális bázison felépített elektronikus Hamilton mátrixán próbáltuk ki. Utóbbi esetben a disszociáció problémájával is foglalkoztunk. A mátrixpéldán azt láttuk, hogy az alsó korlát maximálásával sikerült a bevett diagonális-nemdiagonális felbontásnál jobbat találnunk. A H₂ molekulára kapott eredmények kevésbé kedvező képet mutatnak, csak egyensúlyi kötéstávolságnál sikerült az ismert eljárásoknál jobbat találnunk.

Vizsgálódásunk során további két lényeges eredményre jutottunk. Alternatív levezetést adtunk a Löwdin-féle bracketing-függvény kifejezésére és meggondolást tettünk az ún. Epstein-Nesbet partícióval számolt másodrendig pontos energia alsó korlát tulajdonságára.

TÓTH ZSUZSANNA

Vegyész

MSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Szabados Ágnes
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

Gerjesztési energia számítása molekulafragmensen

Gyakran előfordul, hogy egy nagy kémiai rendszernek csak egy része érdekes, mert a megérteni kívánt jelenség lokalizált. Ilyen jelenség lehet például az elektronikus gerjesztés. Kísérleti tapasztalat, hogy az abszorpciós sávért felelős molekularészlet – úgynevezett kromofór csoport – tipikus gerjesztési energiája szűk határok között mozog, amennyiben a csoporthoz nem kapcsolódik olyan oldallánc, ami a gerjesztést térben kiterjesztené. Mivel a kvantumkémiai módszerek erőforrásigénye a molekula méretének növelésével hatványfüggvény szerint nő, praktikus igény, hogy a kromofórhoz rendelhető átmenet számításakor a teljes molekula helyett csupán a számunkra fontos részletet kezeljük.

Dolgozatomban egy olyan módszert alkalmaztam gerjesztési energia számítására, amellyel a fenti cél megvalósítható. Az eljárás neve FLMO (Frozen Localized Molecular Orbitals) módszer. Az FLMO megközelítés alap gondolata, hogy az egész molekulára Hartree-Fock (HF) szintű számítást végzünk. Ezek után a számunkra érdekes kis molekula részletre (fragmentsre) végzünk magas szintű korrelációs számítást, a molekula maradék részét HF-szinten befagyasztva. A fagyasztás elve megegyezik a kvantumkémiaiában sokszor alkalmazott „frozen core” eljárásával. A különbség abban áll, hogy nem a törzselektronok atompályáit fagyasztjuk be, hanem a fragmensen kívül lokalizált molekulapályákat.

A fragmens elektronikus gerjesztéseinek számításakor több ponton is választás elé kerülünk az FLMO eljárás során. Az egyik legfontosabb döntés, hogy milyen molekularészletet választunk ki és hogyan kezeljük a fragmens és a befagyasztott részt összekötő pályákat. Tudományos diákköri munkám során arre tettem kísérletet, hogy megtaláljam az optimális választást a fenti, és számos további, technikai jellegű ám a numerikus eredmények szempontjából nem elhanyagolható kérdés ügyében.

Élelmiszerkémia és biotechnológia tagozat

ECSEDI ANITA BEATRIX

Vegyészmérnöki szak

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:**Dr. Horváth Viola**tudományos főmunkatárs, BME VBK*

**D-vitamin meghatározása füstölt szalonnából HPLC-MS-MS
módszerrel**

Napjainkra kiderült, hogy a D-vitamin nemcsak a csontok egészséges állapotának megőrzésében játszik szerepet, hanem az immunrendszer működésében is és hiánya többek között szív- és érrendszeri, valamint különböző daganatos betegségekhez vezet. Bár a D-vitamin a szervezetünkben elsősorban a napsugárzás hatására jön létre, fontos tudni, hogy egy-egy élelmiszer mennyi D-vitamint tartalmaz, mert a napsugárzáson kívül ezek lehetnek számunkra kiegészítő D-vitaminforrások. Feltételezhető, hogy az állati szövetekben megtalálható D-vitamin mennyisége is függ attól, hogy mennyi időt töltött napfényen az állat. Ezért az volt a célom, hogy megállapítsam, hogy a szabadon tartott, vagy az ólban nevelt disznó füstölt szalonnája tartalmaz-e több D-vitamint. Ehhez munkámban a D3-vitamin mennyiségének füstölt zsírszalonnából történő meghatározására dolgoztam ki analitikai módszert. A mérésekhez HPLC-MS-MS módszert választottam, mivel a D-vitamin nagyon kis koncentrációban található a szövetekben. A módszerfejlesztés első lépése a folyadékkromatográfiás-tandem tömegspektrometriás mérés kidolgozása és optimalítása volt. Ezután kidolgoztam egy elszappanosításon és folyadék-folyadék extrakción alapuló minta-előkészítést, amely a Magyar Szabvánnyal szemben egyszerűbb, és kisebb méretben megvalósítható. D2 vitamint használtam belső standardként. Végül a módszert validáltam, majd a validált módszerrel megmértem szabad tartásban nevelt, illetve zárt körülmények között tenyésztett disznókból származó szalonna mintákat és összehasonlítottam őket.

GÁL ISTVÁN

kémia BSc

BSc, 5. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Konzulens:**B. Tóth Szabolcs**adjunktus, EKF TTK*

Fusarium illetve Aspergillus fajok által termelt toxinok degradációjának analitikai vizsgálata mûgyomorban

A mûgyomorban történõ emésztési kísérletek során annak felderítése a legfõbb cél, hogy adott mikotoxin adott körülmények között szenved-e degradációt. Amennyiben pedig bomlás tapasztalható, akkor az milyen körülménnyel vagy körülményekkel hozható összefüggésbe. Ennek érdekében a különbözõ kiindulási, kísérleti, illetve bomlási paraméterek függvényében kerül vizsgálat alá a többi körülmény, illetve eredmény. (A kísérletek kezdetekor az idõ (kontaktidõ) került kijelölésre alap paraméterként, melynek függvényében kerülnek vizsgálatra az adott minták értékei, azonban a kísérletek eredményei, kivitelezési lehetõségei ezen a terven nagy mértékben módosítottak.) Ezek alapján, illetve a közöttük lévõ korreláció figyelembevételével történik a bomlás hátterének feltárására tett válasz megadása. Az in vitro megfigyelés során modellünknel cél volt az, hogy az emberi gyomrot a vizsgálat szerint fontos szempontokból jól leképezze az emésztési kísérlet, míg az említett szempontokon kívül esõ összetevõket gyakorlatilag elhanyagolja. A mûgyomor elsõsorban így inkább kémiai modellje a szervnek, mint a biológiailag megfelelõ leképezése. Természetesen az ilyen „vegyi” jellegû rendszer megalkotása szerepelt a célok között. Továbbá ez szolgált „helyszínül” a bélbaktériumokkal történõ kísérlethez is, mely szintén a célok között szerepelt, mint a további tápcsatorna szakaszokban történõ esetleges degradáció kimutatási módja.

GUBICZA KRISZTINA

Biomérnöki

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Barta Zsolt**egyetemi tanársegéd, BME VBK*

Mezőgazdasági melléktermékek enzimes hidrolízise és a folyamat kinetikai modellje

A második generációs bioetanol-gyártás nagy előnye, hogy élelmiszer előállítására is alkalmas alapanyagok helyett lignocellulóz-tartalmú biomasszából indul ki, mint például fa, fű, kukoricaszár vagy búzaszalma. A lignocellulózok három fő összetevője a cellulóz, a hemicellulóz és a lignin, melyek közül előkezelést követően a cellulóz hidrolízise után keletkező cukrok fermentációjával állítható elő a bioetanol. Az utóbbi időben a bioetanol-gyártás enzimes útja került a kutatások középpontjába, amely során celluláz enzimeket használnak fel. Az enzimmrendszer által katalizált lépés heterogén folyamat, és annak érdekében, hogy a hidrolízis minél hatékonyabban valósuljon meg, elengedhetetlen a körülmények optimalizálása. Az enzimes hidrolízis kinetikájának matematikai leírása segítséget nyújt mindehhez, hiszen egy megfelelő modell segítségével csökkenthető a kísérletek száma, emellett hasznos előrejelző eszköz is az eredményeket illetően. Annak ellenére, hogy az utóbbi években egyre több tanulmány foglalkozik ezzel a kutatási feladattal, a cellulázok lignocellulóz-tartalmú biomasszán való működésének pontos mechanizmusa még nem ismert, vagy a korábban felírt összefüggések csak bizonyos korlátok mellett állják meg a helyüket, így további vizsgálatok, kísérleti adatok szükségesek a meglévő modellek fejlesztéséhez.

Munkám célja lignocellulózok enzimes hidrolízisét leíró modell kifejlesztése korábbi irodalmi és saját mérési eredmények alapján. A kísérleteket extrúzióval előkezelt búzaszalmával végeztem a hidrolízist befolyásoló fontosabb paraméterek beállításonkénti változtatása, azaz különböző szubsztrátkoncentrációk és enzimdózisok (Cellulosic Ethanol Enzyme Kit - Cellulase complex NS22086) mellett állandó hőmérsékleten (50°C) és fordulatszámon (150 rpm), 0,05 M acetát pufferben (pH 5) 72 órán keresztül. A mintavétel 0, 4, 8, 24, 48 és 72 óra elteltével történt, majd centrifugálás (10 min, 13000 rpm) után kétféle módszerrel mértem a felülúszó cukortartalmát. DNS-reagens (3,5-dinitroszalicilsav) hozzáadása után fotometriával a redukálócukor-tartalmat, HPLC-analízissel pedig a hidrolízis során felszabadult glükóz koncentrációját határoztam meg. Az így kapott adatokat használtam fel a modellezéshez, melynél a független változó a hidrolízis ideje, a függő a glükózkoncentráció, a kezdeti értékek pedig az enzimdózis és a szubsztrátkoncentráció. A számításokat és illesztéseket Berkeley Madonna és Matlab 7.1 programok segítségével végeztem el. Megállapítottam, hogy a felírt háromparaméteres összefüggés jól közelíti a glükózkoncentráció időbeli alakulását.

LANKÓ JÁCINTA

Biomérnöki
BSc, 7. félév
Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Konzulensek:
Dr. Nemestóthy Nándor
tudományos munkatárs, PE MK
Bakonyi Péter
Ph.D. hallgató, PE MK

Termikusan előkezelt anaerob mikrobakonzorcium alkalmazása biohidrogén előállítására

Kutatómunkám során biohidrogén előállítási kísérleteket végeztem, melyhez beoltó kultúráként a Pálhalmai Agrospeciál Mezőgazdasági Termelő, Értékesítő és Szolgáltató Kft. anaerob rothasztójából származó iszapot, szubsztrátként (szénforrásként) keményítőt, kiegészítő nitrogén- és nyomelem forrásként pedig élesztőkivonatot alkalmaztam.

Elvégzett méréseim elsődleges célja volt a biogáz fermentorból származó iszap megfelelő előkezelése, mellyel elérhető a nem kívánatos, hidrogénfogyasztó metanogén baktériumtörzsek eliminálása a számomra hasznos hidrogéntermelő mikroorganizmusok mellől. Ennek megvalósítására termikus előkezelési eljárást választottam és vizsgáltam a módszer két fő paraméterének (kezelési idő és hőmérséklet) hatását a hidrogénképződési hatékonyságra vonatkozóan, kísérlettervezéses alapon. Az eredmények alapján megállapítottam, hogy a változók közül a kezelési hőmérséklet rendelkezik szignifikáns hatással és meghatároztam az előkezelés optimális paramétereit (70 °C, 20 perc), mellyel egységnyi szubsztrátra vonatkozóan a hidrogénhozam maximalizálható.

Ezt követően kísérleteket végeztem a hidrogéntermelés hatékonyságának növelése céljából az optimális körülmények között előkezelt mikrobakonzorcium alkalmazásával, melyben a keményítő- és élesztőkivonat koncentrációjának a biohidrogén képződésre kifejtett hatását tanulmányoztam. A kapott adatok kiértékelésével megállapítottam, hogy a vizsgált faktorok külön-külön, s azok kölcsönhatása is statisztikailag jelentős hatást fejt ki a hidrogén fermentációra, így ezek optimalizálásán keresztül nagymértékű növekedést lehet elérni az elérhető hidrogénhozamok tekintetében.

MÁRKUS MÁRIA

vegyeszmernoki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Poppe László**egyetemi tanár, BME VBK**Boros Zoltán**doktoráns, BME VBK*

Felületmódosított szilikagél hordozók előállítása és vizsgálata szakaszos és folyamatos reaktorban felhasználható lipázok rögzítésére

A biokatalitikus szintetikus reakciók során a felhasznált enzimek sokszor nehezen nyerhetőek vissza a reakcióelegyből, illetve a terméktől való elválasztásuk is nehézkes feladat. Az ebből fakadó gazdaságossági problémákat a rögzített (immobilizált) enzimek kifejlesztése oldotta meg. Az enzimeket biotechnológiai felhasználásuk során gyakran valamilyen hordozóhoz rögzítik. A művelet általában bizonyos mértékig rögzíti az aktív konformációt, amely az enzim aktivitását jelentősen megnövelheti. Ezen felül az enzim könnyebben eltartható, szállítható és újra felhasználható lesz a rögzítésnek köszönhetően.

Munkám célja az enzimek rögzítéséhez alkalmazható felületmódosított, nagyipari használatra alkalmas, olcsó hordozók fejlesztése és ezek alkalmazhatóságának tanulmányozása. A téma keretében többféle szilikagél hordozó felületmódosítását végeztük el különböző organoszilánokkal (fenil-, oktil-, 3-aminopropil-trialkoxi). Vizsgáltuk a felületmódosítás időfüggésének és a módosításra használt közegnek az enzimrögzítésre gyakorolt hatását is.

Az elkészített felületmódosított hordozókon négy lipáz (lipáz PS, lipáz AK, *Candida rugosa* lipáz, *Candida antarctica* B lipáz) rögzítését vizsgáltuk a racém 1-feniletanol kinetikus rezolválásán keresztül szakaszos és folyamatos, átáramlásos bioreaktorokban.

MOLNÁR ZSÓFIA

kémia BSc

BSc, 4. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Konzulens:**B. Tóth Szabolcs
adjunktus, EKF TTK*

Mikotoxinok és metabolitjaik felhalmozódásának vizsgálata a házityúk (*Gallus gallus domesticus*) szervezetében

A kutatás lényeges és fontos kérdéseket boncolgat a mindennapokban nagy mennyiségben fogyasztott egyik alapélelmiszerének előforduló szennyezettségével kapcsolatban. Az állattartási és etetési kultúrában bekövetkezett változások során a jelen időszakban irányadó trendek a természetes folyamatokat támogatják mind az etetésben, mind az állattartásban, amely folyamatok alapvetően a biogazdálkodás színterét vázolják fel. Elsősorban és hatványozottan megjelenő probléma a biogazdálkodásban a mikotoxinok jelenléte a különböző (*Fusarium* és *Aspergillus*) gombák megtelepedéséből és szaporodásából adódóan. A nem ezen gazdálkodási módban termelt gabonán is előforduló ugyanazon gombák is termelhetnek toxint. Általánosan a mikotoxinok penészgombák által termelt másodlagos anyagcseretermékek, amelyek a produktív gomba fajtától adódóan más és mások lehetnek. A gabonán előforduló gombák által termelt gombatoxinok közül a Deoxynivalenol, Nivalenol és Zearalenon toxinok azok, amelyek a vizsgálat körébe beletartozhatnak. A munka során a házityúk (*Gallus gallus domesticus*) természetes módon történő etetése során a táplálékláncba bekerülő általánosan előforduló mikotoxinokat vizsgálata valamint a mikotoxinokból származó metabolitok felderítése történik az egyed különböző szerveiben. A vizsgálatok során az azonosítás folyadékromatográfiás rendszer segítségével UV (HPLC-UV) illetve tömegspektrometriás (HPLC-MS) detektorok használatával történik megfelelő fordított fázisú analitikai oszlopon történő elválasztás után.

NAGY FLÓRA

Biomérnök Bsc.

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Poppe László
egyetemi tanár, BME VBK*

Terner szol-gél rendszerekbe rögzített lipázok szisztematikus optimalizálása és felhasználhatósága

Napjainkban az enzim katalizált átalakításoknak egyre növekvő szerepe van a modern szintetikus eljárások során, így egyre növekszik az igény hatékony és szelektív biokatalizátorok iránt. A natív enzimek a környezeti paraméterekre is igen érzékenyek, aktivitásuk és stabilitásuk erősen függ a reakciókörülményektől. Emellett a terméktől való elválasztásuk és a reakcióelegyből történő visszaforgatásuk is nehézkes. Ezekre a technológiai problémákra megoldást jelenthet az enzimek immobilizált formában történő alkalmazása. Natív formájukhoz képest a rögzített enzimek stabilitása, aktivitása és szelektivitása jelentősen javulhat, továbbá könnyebben eltarthatók és újra felhasználhatók.

A létező számos enzimrögzítési technika közül a szol-gél immobilizálás, amely során az enzim egy térhálós polimer mátrixban rögzül, több előnyös tulajdonsággal bír. Az enzim molekulákat körülvevő polimer láncok jelentősen megnövelhetik a biokatalizátor kémiai és fizikai stabilitását, továbbá a szol-gél mátrixot kialakító organoszilán prekursorok is hatással lehetnek az enzim katalitikus aktivitására.

TDK munkám során iparban is számos területen alkalmazott lipázok szol-gél rögzítését vizsgáltam. Céлом volt a megfelelő organoszilán prekursorok arányának finomhangolásával az enzimkészítmények aktivitásának, szelektivitásának és stabilitásának fokozása. Szisztematikus kísérletterv segítségével vizsgáltam a szol-gél mátrix összetétele és a szubsztrát affinitás összefüggését, aromás és alifás racém alkoholok kinetikus reszolválásában.

Vizsgáltam az általam fejlesztett szol-gél lipázok szerves közegben mutatott hőstabilitását, a reakcióelegyből történő többszöri visszaforgathatóságát és agresszív detergenses kezeléssel szembeni stabilitásukat.

NÉMETH ANASZTÁZIA

Biológia

BSc, 5. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Dr. habil. Kiss Attila

tszv. főiskolai tanár, EKF TTK

Patonay Katalin

tudományos segédmunkatárs, EKF TTK

**Kiemelt jelentőségű gyógynövények, köztük a bugás macskamenta
(*Nepeta pannonica* Linné) kivonatainak vizsgálata borászati
alkalmazásokhoz**

Jelen dolgozat tárgya többretű.

- Célunk hét, eltérő alapösszetételű gyógynövényfaj potenciális biológiai hatásainak felmérése, összehasonlító vizsgálata.
- Célunk egyedi, kiemelkedő pozitív élettani hatású gyógynövény-kombináció kialakítása ürmösbor készítéséhez.
- Célunk a kevésbé ismert és feltárt bugás macskamenta (*Nepeta pannonica* syn. *Nepeta nuda* Linné) antioxidáns képességének vizsgálata és polifenol-összetételének leírása.
- Célunk a régi egri receptek alapján készülő boralapú ital készítésének optimalizálásával kapcsolatos oldódási, kivonatolási és antioxidánskapacitás- vizsgálatokat elvégezni; annak
- Végül pedig célunk, hogy megalapozott javaslatot tehessünk az ürmös avinálására finomszesz helyett etanolos növényi kivonatokkal. Cél megtalálni azt a kivonatot, amellyel be lehet állítani az alkoholtartalmat a megcélzott 17%-ra; és amely kivonat az ürmös kedvező élettani hatását tovább erősíti elsősorban az antioxidáns hatás növelésével.

NÉMETH GABRIELLA

Biomérnök BSc

BSc, 7. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Dallos András**egyetemi docens, PE MK**Tollár Ágnes Nikolett**PhD hallgató, PE MK*

Klimatikus változásokhoz alkalmazkodó kukorica hibridek bioetanol hozamának vizsgálata

Kulcsszavak: hidrolízis, fermentáció, gőz-folyadék egyensúly, kinetika, konverzió

Napjainkban a bioetanol egyre szélesebb körben alkalmazott alternatív üzemanyag, mivel számos előnnyel rendelkezik a hagyományos üzemanyagokkal összehasonlítva. Alkalmazható motorhajtóanyagként, különböző keverék-típusok állíthatók elő belőle, valamint az üzemanyagcellák hajtóanyagául szolgálhat. Kísérleti munkám célja az volt, hogy öt új, martonvásári nemesítésű, jó szárazságtűrő genotípusokat képviselő kukorica hibridből történő bioetanol előállításának lehetőségeit vizsgáljam laboratóriumi körülmények között. A kukoricakeményítő hidrolízisét és a keletkező cukrok alkoholos fermentációját Sartorius B Plus típusú automata fermentorban hajtottam végre. A kukoricaszemek keményítő-tartalmát aprítás után két lépésben hidrolizáltam. A hidrolízis első lépésében, az elfolyósítás során, Liquozyme SC DS α -amilázt használtam. Ezután került sor az elcukrosításra Spirizyme Fuel glükó-amiláz segítségével. Végül *Saccharomyces cerevisiae* élesztő segítségével elvégeztem az alkoholos erjesztést. A reakciók lejátszódását nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás analízissel vizsgáltam a glükóz, illetve az etanol koncentráció-változásának nyomon követésével. Meghatároztam a szárazságtűrő hibridek keményítő- és glükóz-hozamát, valamint bioetanol kihozatalát és potenciálját. Kimértem az etanol gőz-folyadék egyensúlyi jellemzőit a szeszcefre és gőzfázisa között. Kimutattam, hogy az etanol gőzfázisbeli móltörtje pozitív irányban tér el a víz-etanol elegynél mért móltörttől, tehát a fermentációs elegyekben nagyobb az etanol aktivitása, mint a biner víz-etanol elegyen. Az eredmények alapján megállapítottam, hogy az új kukorica hibridek kiváló bioetanol alapanyagul szolgálhatnak. Mérési adataim segíthetik a bioetanol technológiák és az etanol-desztilláció optimalizálását.

POKORNYI GÁBOR

kémia BSc

BSc, 7. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Konzulens:**B. Tóth Szabolcs
adjunktus, EKF TTK*

**Jelentősebb mikotoxinok hőtranszformációjának vizsgálata
élelmiszerekben eltérő térfogatnövelő szerek hatására**

Az élelmiszer alapanyagok mezőgazdasági termelésben történő termesztése során a napjainkban preferált biogazdálkodás miatt a növényvédő szerek felhasználása háttérbe szorult. Ezen tevékenység hozományaként a növényeken megtelepedő gombák száma megnőtt a számukra kedvezően alakuló életkörnyezet hatása miatt. A penészgombák által termelt másodlagos anyagcseretermékek – mikotoxinok – keletkezése, összes mennyisége a gombák számának a növekedtével egyenes arányban nőtt, amely az élelmiszerek minőségében jelentős kockázati tényezőként szerepel. A kutatás alapját a mikotoxinok lúgos közegben történő bomlásának vizsgálata és kimutatása képezi [1].

A vizsgálati alapról elindulva, kiterjesztve a vizsgált mikotoxinok minőségét, különböző élelmiszeripari adalékanyagok hatásának vizsgálata során a toxintartalom csökkentése volt a cél a termékekben. A kutatás jelentősége az élelmiszerek – főleg kenyérfélék – sütése során felhasznált fő-, segéd- illetve adalékanyagok minőségi hatásának a vizsgálata a különböző mikotoxinok mennyiségi változására. Valamint meghatározni azon adalékanyagokat, amelyek hozzáadása révén a toxin mennyisége csökkenhet az élelmiszerekben, főleg kenyérfélékben.

A kutatás során egy, a hétköznapi életben használt kenyérsütési recept felhasználásával készített pékáruban a különböző toxinok bomlásának vizsgálata a cél. A sütési paraméterek közül csak a térfogatnövelő szer minőségének a változása határozza meg a toxinok bomlását a normál élesztő, sütőpor és szalalkáli viszonylatában. A feltevés alapja Ryu D, Hanna MA, Eskridge KM, Bullerman LB: Heat stability of zearalenone in an aqueous buffered model system. J Agric Food Chem. 2003 Mar 12;51(6):1746-8 cikke, a toxin bomlásának vizsgálata különböző pH-jú közegek kapcsolatában az volt, hogy a zearalenon erősen lúgos közegben jelentősen bomlik, hatása megszűnik. A zearalenon toxinon kívül az aflatoxin B1 és patulin toxinok kerültek a vizsgálat középpontjába

[1] Ryu D, Hanna MA, Eskridge KM, Bullerman LB: Heat stability of zearalenone in an aqueous buffered model system. J Agric Food Chem. 2003 Mar 12;51(6):1746-8

SZABÓ SÁNDOR

matematika-kémia BSc

BSc, 8. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

*Konzulens:**B. Tóth Szabolcs**adjunktus, EKF TTK*

Ózon hatásának vizsgálata mikotoxinok bomlására

Az élelmiszer alapanyagok közé tartozó gabonafélék (búza, árpa, kukorica) mezőgazdasági termelésben történő termesztése során napjainkban egyre jobban előtérbe kerül a biogazdálkodás, amelyben a növényvédő szerek alkalmazása háttérbe szorul. Emiatt a növényeken megtelepedő gombák (penészgombák) száma jelentősen megnőtt a számukra egyre inkább kedvező életkörülmény hatására. A penészgombák által termelt másodlagos anyagcseretermékek (mikotoxinok) termelése, a penészgombák ilyen magas arányú elterjedése miatt szintén megnőtt, amely az élelmiszerek minőségében jelentős kockázatot jelent.

Az összes mikotoxin száma mintegy 300-500.000 db-ra becsült, ezek közül csupán 10-15 db a jelentős kárt okozó méreganyag. A mikotoxinok jelenlétének a megszüntetésére több beavatkozási helyen lenne lehetőség az élelmisznövény fejlődése során, de sajnos sokszor már a learatott termény fertőzött a nem megfelelő és hiányos beavatkozások miatt. A learatott termények, így az élelmiszer alapanyagoknak felhasznált gabonák mikotoxin tartalma főleg a külső héj részén összpontosul. A külső héj részben lévő toxin elbontása illetve eltávolítása egy jó megoldás lehet a szennyezett gabona toxinmennyiségének csökkentésére.

A kidolgozott módszer alapja az ózon fertőtlenítő, oxidáló hatásában keresendő. Az egyszerű technikával előállított ózon és a gabonaszem érintkezése során a szem külső héj részében feldúsult mikotoxin reagál az ózonnal, amely reakció végeredményeként a toxin elveszítheti mérgező hatását, más típusú vegyület keletkezik. Az ózon előállítása két különböző technikával történik, az első az ívfényes technika, a második technika az UVC (254nm) Germicid lámpás technika.

A kísérlet során zearalenon, deoxynivalenol és nivalenol mikotoxinok mennyiségének és minőségének a meghatározása történik ózonnal dúsított közegben HPLC-UV illetve HPCL-MS technika felhasználásával. A vizsgálatok során először az ózon bomlásának mértékét, majd tiszta toxin bomlásának mértékét határozzuk meg modell rendszerben. Valós körülmények közötti meghatározás során a szennyezett gabonaszemek a toxin mennyiségének a változását vizsgáljuk a három toxinra. Vizsgáljuk az egyes mikotoxinok és ózon reakciója során keletkezett bomlástermékeket is, amelyek kémiai szerkezete és tulajdonsága lényegese a keletkező termékek esetleges toxicitása miatt.

SZTERNÁCSIK KLAUDIA

Biomérnök

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Simándi Béla**egyetemi tanár, BME VBK*

A fűrészpálma (*Serenoa repens*) kivonatok hatóanyagainak vizsgálata

A fűrészpálma (*Serenoa repens*) egy Amerikában őshonos pálmaféle. A növény hatóanyag tartalmú része (drogja) a gyümölcs, melynek feldolgozása érett állapotban történik. A drog jótékony hatása évezredek óta ismeretes vizeleti gondok, jóindulatú prosztatata megnagyobbodás kezelésére, illetve egyéb női és férfi bajok enyhítésére. A növény jelentősége évről évre nő, népszerűségének alapja, hogy kivonatának használata biztonságos, számos klinikai tanulmány készült róla és a növény hatalmas mennyiségben áll rendelkezésre, elsősorban Amerikában.

Korábbi munkám során a hasznos összetevőket hagyományos (Soxhlet-, keveréses), illetve szuperkritikus fluidum extrakcióval nyertem ki. A Soxhlet-extrakcióhoz n-pentánt, illetve 96%-os etanolt, a keveréses extrakcióhoz 96%-os etanolt, a szuperkritikus fluidum extrakcióhoz szén-dioxidot használtam oldószerként. Elvégeztem a különböző kivonatok zsírsav-analízisét és megállapítottam, hogy minőségi eltérés nincs a kivonatok között, az egyes zsírsavak mennyiségi eltérése pedig csekély.

Jelen munkám célja az egyéb hatóanyagok, ezen belül is a fitoszterinek, illetve a kivonatok vörös színét okozó karotinoid-tartalom megvizsgálása volt. A fitoszterin analízist gázkromatográfiás, a karotinoid analízist spektrofotometriás vizsgálattal végeztem el. Vékonyréteg kromatográfia segítségével a teljes szterin-tartalmon kívül sikerült külön-külön megvizsgálnom a szabad fitoszterineket, illetve a metil-szterineket. A legnagyobb mennyiségben előforduló fitoszterinek a kivonatokban a β -szitoszterin, a kampeszterin és a sztigmaszterin. A metil-szterinek közül a fő komponens a cikloartenol képviseli.

Ugyancsak célul tűztem ki a szuperkritikus extrakció modellezésének közelebbi tanulmányozását, ahol a Sovová-modellt használtam az extrakciós hozam leírására, majd a belső anyagátadási tényezőt tanulmányoztam. Az irodalomban számtalan Sherwood-összefüggés ismeretes, de mind pórusos mátrix jelenlétében adnak becslést a fluidum oldali anyagátadási tényezőre. Így ugyan jól alkalmazhatóak azoknál a konkrét növényeknél, amelyekre illesztették azokat, de univerzálisan nem.

TOBAK TEODÓRA

Biomérnök Msc

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Marosi György**egyetemi tanár, BME VBK*

Új gyógyszer- technológiai eljárások fejlesztése probiotikumok szilárd formulálására és stabilizálására

Az elmúlt évszázadban a biotechnológia egyre nagyobb teret hódított, így a gyógyszeriparban is erősödött a biotechnológiai eredetű hatóanyagot tartalmazó gyógyszerkészítmények jelenléte. A biotechnológia jelenlegi és várhatóan tovább erősödő térnyerése a gyógyszer formulálást is új kihívások elé állítja.

Munkám során a biotechnológiai eredetű hatóanyagok csoportján belül a probiotikumok szilárd formulálásának lehetőségeit vizsgáltam. Célom olyan új kéméletes technológiák fejlesztése és vizsgálata volt, amelyek hatékony alternatívát nyújtanának, a gyógyszeriparban leggyakrabban alkalmazott, azonban rendkívül idő- és energiaigényes fagyasztva szárítás kiváltására. A formulálási kísérleteket *Lactobacillus acidophilus* probiotikus baktériummal végeztem. Vizsgáltam, hogy az általam alkalmazott eljárások segítségével létrehozható-e stabil szilárd formula, ami a hatásos dózisonak megfelelő 10 millió élő csíraszámot tartalmazza, valamint, hogy, meddig tartható fenn a hatásos mennyiség.

Az egyik általam alkalmazott technológia, a gyógyszeriparban széles körben alkalmazott tablettá bevonási módszer, a filmbevonás volt. Ezzel a technológiával egy lépésben állítható elő élő baktérium tartalmú tablettá így elkerülhető a tablettázás során felmerülő mechanikai stressz okozta csíraszám csökkenés. A másik alkalmazott eljárás az elektrosztatikus nanoszálképzés volt. Ez a módszer rendkívül kéméletes körülmények között pillanatszerű szárítást biztosít, további előnye, hogy folyamatos és alacsony energiaigényű technológia, ami gazdaságos termelést tesz lehetővé. A technológia méretnövelése már megoldott, akár napi 10kg- os termelés is megvalósítható. A folyamatos gyártás ipari méretű megvalósíthatóságának lehetőségei tehát adóttak.

Annak érdekében, hogy a baktériumok minél nagyobb számban éljék túl a szárítási technológiát, illetve hogy a szilárd végtermék baktériumtartalma a legkevésbé csökkenjen a tárolás során, különböző stabilitásjavító szereket (trehalóz, szacharóz, sovány tejpor) alkalmaztam és vizsgáltam, hogy milyen mértékben segítik elő a hosszú távú stabilitást.

VINCZE OTÍLIABiológia BSc
BSc, 3. félévEszterházy Károly Főiskola
Természettudományi Kar

Konzulensek:
Dr. habil. Forgó Péter
főiskolai tanár, EKF TTK
Korózs Marietta
tudományos segédmunkatárs, EKF TTK

Eltérő laktóz átalakítási módszerek továbbfejlesztése és optimalizálása

Kutatásaink során különböző tejcukor-bontási eljárásokat hasonlítottunk össze, illetve dolgoztunk ki, mely lehetőséget teremt, innovatív megközelítéssel, korábban nem leírt kísérleti metodika alkalmazásával tejcukormentes, illetőleg egészségvédő hatású tejtermékek előállítására, kedvező élettani hatású cukoralkohol keletkezésére alapozva. Ehhez hasonló diabetikus, illetve prebiotikus élelmiszert a tejipari szegmensben nem fejlesztettek ki, így az általunk kidolgozott sokrétű protokoll új termékek megjelenéséhez is vezethet a szükséges própagyártások, illetve tesztüzemi kísérletek végrehajtását követően. Az irodalomban még nem közölt, háromlépéses, tejcukor-bontási folyamatsort fejlesztettünk ki, melynek során enzimatis és fermentatív átalakításokat alkalmaztunk. A folyamat első lépésében a tejcukor glükózzá és galaktózzá történő konverziójának enzimatis és fermentatív úton történő megvalósulásának hatékonyságát vetettük össze, ezáltal lehetőség nyílt a legmegfelelőbb hidrolitikus módszer, illetve körülmények kiválasztására ipari célokra. A tejcukor enzimatis bontását a *Kluyveromyces lactis*-ből izolált β -galaktozidáz segítségével végeztük el, fermentatív úton pedig *Lactobacillus casei*, *Lactobacillus acidophilus*, és *Streptococcus thermophilus* probiotikus hatású mikroorganizmusokat alkalmaztuk. Az enzimatis bontás hatékonyságát több tényező - szubsztrát koncentráció, enzim koncentráció, pH-hatás, aktivátorok jelenléte, élelmiszer mátrix hatás- figyelembevételével optimalizáltuk. Második lépésben a hidrolizált tejcukorból származó glükóz izomerizációja fruktózzá, glükóz izomeráz enzimmel történt. A folyamat utolsó lépésében, a szakirodalmi előzményekre is alapozva, fruktózból kiinduló cukoralkohol képződést értünk el, heterofermentatív baktériumok közreműködésével, így a konszekutív átalakítási folyamatsor végén prebiotikus hatású és diabetikus sajátságú reakcióelegyhez jutottunk. A folyamatsor kidolgozása lehetővé teszi az emészthetetlen tejcukor funkcionális diabetikus élelmiszer komponenssé –mannitol-lá- való konverzióját. A többlépcsős folyamat ily módon funkcionális élelmiszerek kifejlesztésére is alkalmazható lesz.

A téma aktualitását mutatja, hogy napjainkban a tejcukorral szembeni intolerancia és malabszorpció – vagyis a laktáz enzim csökkent aktivitása következtében kialakuló tartós tejcukor-felszívódási zavar - változó mértékben ugyan, de a világ felnőtt lakosságának több mint 75%-t érinti, ezzel a leggyakoribb enzim-hiány okozta betegség az emberi szervezetben. A betegség manifesztálódása genetikailag determinált, előfordulása szoros korrelációt mutat az adott nép eredetével. A tejcukor-felszívódási zavarok kialakulása a β -galaktozidáz enzim teljes hiányának, vagy csökkent aktivitásának köszönhető. Tanulmányok igazolták, hogy a csökkentett tejcukor tartalmú tejtermékek a tejcukor-intoleráns emberek által is fogyaszthatók.

ZSÓKA PÉTER

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:**Dr. Marosi György**egyetemi tanár, BME VBK*

Antivirális hatóanyag-tartalmú gyógyszerkészítmény fejlesztése és biofarmáciai vizsgálata

A gyógyszerformulálás területén a jelen kor egyik legnagyobb feladata a hatóanyag biológiai hasznosulásának maximalizálása, s ennek érdekében olyan gyógyszerkészítmények fejlesztése, melyek farmakokinetikai paraméterei a meglévőknél kedvezőbbek. Az új készítmények fejlesztésének másik fontos célja a meglévő gyógyszerpaletta szélesítése azért, hogy egy hatóanyag minél több gyógyszerformában legyen elérhető, hiszen a növekvő terápiás és adagolási igények ezt gyakran megkövetelik.

A munkám tárgyát képező antivirális hatóanyag jelenleg csak tablettaként van forgalomban. Az orálisan alkalmazott szer a gasztrointesztinális traktusból felszívódva jelentős oxidatív átalakulást szenved a máj first pass metabolizmusa révén. A rektális bevitel azáltal, hogy a hatóanyag nagy része a májat megkerülve jut a szisztémás vérkeringésbe, jobb hozzáférhetőséget tehet lehetővé. Ezen alternatív adagolási forma szükségességét indokolja az is, hogy bizonyos esetekben (hányás, máj megbetegedései, gyermekkor, rossz beteg compliance) az orális adminisztráció nem megvalósítható. A fennálló terápiás igények okán célom volt egy olyan biztonságosan alkalmazható és megfelelő minőségű kúp készítmény kifejlesztése, amely a hatóanyag optimális felszabadulását teszi lehetővé.

Figyelembe véve a szervezet fiziológiás jellemzőit, a rektális gyógyszerbevitel biofarmáciai aspektusait, valamint a hatóanyag fizikai és kémiai tulajdonságait, a farmakont különféle kúpalapanyagokban formuláltam, s vizsgáltam a hatóanyag in vitro felszabadulását az optimális vehikulum megválasztása érdekében. Megfelelő segédanyagok segítségével sikerült a farmakon felszabadulását tovább fokozni. E célból anionos és nemionos felületaktív anyagokat vizsgáltam, s kerestem azok ideális mennyiségét. Megállapítottam és értelmeztem az akceptor fázis pH-jának a hatóanyag felszabadulására gyakorolt hatását, a kúpban szuszpendált hatóanyag szemcseméretét pedig stabilitási, biofarmáciai és technológiai szempontok alapján optimalizáltam.

Eredményeimet felhasználva javaslatot tettem az antivirális hatóanyag-tartalmú készítmény lehetséges összetételére, mely a vizsgálati körülmények között a lehető legjobb hatóanyag-felszabadulást tette lehetővé.

Fizikai kémia tagozat

BAZSÓ FANNI LAURA

Vegyész

MSc, 2. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Láng Győző**egyetemi tanár, ELTE TTK**Ujvári Mária**tanársegéd, ELTE TTK*

A poli(3,4-etiléndioxitifén) elektrokémiai degradációjának vizsgálata

A szakirodalomban jól ismert tény, hogy a vezető polimerek közül a poli(3,4-etiléndioxitifén) (PEDOT) rendelkezik a legnagyobb stabilitással, ezért számos ipari alkalmazása létezik, - többek közt - napelemekben, tüzelőanyag-cellákban, ionszelektív elektródokban alkalmazzák a polimert. E berendezések élettartama a polimer stabilitásától függ, ezért használhatóságukat a polimer esetleges degradációjának ideje és mértéke határozza meg.

Bár a PEDOT fizikai és kémiai tulajdonságaira vonatkozóan hatalmas mennyiségű ismeretanyag gyűlt össze az elmúlt évtizedekben, a szakirodalom tanulmányozása alapján kiderült, hogy egyes alapvető fontosságúnak tűnő, pl. a PEDOT-filmek elektrokémiai stabilitására, vonatkozó adatok alig, vagy csak korlátozottan állnak rendelkezésre.

Saját kutatásaim elsődleges célja a hiányzó információk összegyűjtése volt. Munkám során a PEDOT-ot vékony polimerfilmként több fémfelületre leválasztva vizsgáltam elektrokémiai impedancia spektroszkópia, ciklikus voltametria, elektrokémiai kvarckristály nanomérleg, illetve bending beam módszerek segítségével.

Mivel eredményeink közvetett szerkezeti információkat is tartalmaznak ezért célszerű a belőlük levont következtetéseket más, nem elektrokémiai módszerekkel is alátámasztani. Tapasztalatainkat ezért összevetettük pásztázó elektronmikroszkópos, gázkromatográfiai, folyadékromatográfiai valamint totálreflexiós infravörös spektroszkópiai vizsgálatok eredményeivel.

Munkám során a PEDOT különböző potenciáltartományokban kialakuló szerkezetét és viselkedését vizsgáltam. Elsősorban azokra a kérdésekre adtam választ, hogy a polimerfilm milyen potenciáltartományban stabilis, illetve ezen a potenciáltartományon belül milyen makroszkópikus szerkezet rendelhető hozzá. Túloxidációja milyen potenciálértéken kezdődik meg, és ennek következtében milyen szerkezeti változások indulnak el a polimeren belül.

Vizsgálataim során megállapítottam, hogy a galvanosztikus módszerrel leválasztott PEDOT -0,2 és 0,8 V (vs. SCE) között stabilis, jól rendezett szerkezettel rendelkezik, a polimerfilm erős kölcsönhatást alakít ki a szubsztráttal. 0,8 V felett oxidálva azonban szerkezeti változások következnek be a polimerfilmen belül. E változások során a filmen belül felszakadnak a kötések és kisebb méretű darabok válnak ki a szerkezetből. Ennek következtében árokszerű sávok jelennek meg a polimerfilm felszínén, szabad aranyfelület jelenik meg, amely elektrokémiai reakciókban is részt vehet.

BOHNER BÍBORKA

Vegyész MSc

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:**Dr. Horváth Dezső**egyetemi docens, SZTE TTIK**Dr. Tóth Ágota**egyetemi docens, SZTE TTIK*

Áramlásvezérelt mintázatképződés kalciumtartalmú csapadékokban

Munkám során áramlás hatására kialakuló, biológiailag fontos kalcium-oxalát, -karbonát, illetve -foszfát mintázatokot tanulmányoztam. A csapadékképződés pH-függését egyensúlyi számításokkal térképeztem fel. A kísérletek során az anionok nátriumsójának megfelelően beállított kémhatású oldatába alulról, egy vékony furaton keresztül áramoltattam be kalcium-klorid-oldatot perisztaltikus pumpa segítségével. Az edény alján sugárirányban, egy belső körrel induló vékony szálal szerkezetű csapadék képződött, amelyek fejlődését digitális kamerával rögzítettem. A kísérleteket különböző reaktánskoncentrációknál és eltérő kémhatású oldatokkal végeztem el. Meghatároztam az áramlási sebességnek és az oldatok sűrűségkülönbségének a mintázatra gyakorolt hatását. A csapadékok mikroszerkezetét pásztázó elektronmikroszkóppal vizsgáltuk; a kalcium-oxalát különböző hidrátjainak kémiai összetételét pedig termogravimetriás, valamint Raman mérések alapján állapítottuk meg.

DITRÓI TAMÁS

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Lente Gábor
egyetemi docens, DE TTK*

Stopped-flow készülék kalibrációjának fejlesztése

A gyorskinetikai folyamatok tanulmányozására már 80 éve léteznek módszerek, ezek közül az általunk is vizsgált technika a megállított áramlásos, azaz stopped-flow módszer, amely a reaktánsok nagyon gyors áramlással végzett összekeverésén, majd az áramlás megállításán alapul. Ez a fajta módszer csekély oldatigényű technika, amely során a reaktánsok keverése 1 milliszekundumos időtartam alatt történik.

A készülék rendelkezik felső méréshatárral is: saját mérésünk alapján mintegy 500 s^{-1} nagyságú elsőrendű sebességi állandójú reakciókig lehet nagy pontossággal mérni. Ennél gyorsabb folyamatok helyes tanulmányozásához azonban korrekcióra van szükség, amelyre már egy 1974-es cikkben felhívták a figyelmet^[1]. A korrekcióhoz fontos a készülék megfelelő paramétereinek meghatározása, ezeket kalibrációs mérésekkel végezhetjük. Munkám során több kalibrációs reakciót próbáltam ki egy 1977-ben publikált^[2] és még máig használt kalibrációs reakcióval szemben.

Megvizsgáltuk az egyik ilyen, 1980-as cikkben^[3] leírt kétlépéses reakciót, amely az 5,5'-ditiobisz-nitrobenzoészav és tioglicerín reakcióján alapul. A módszerrel több problémánk is adódott, a holtidőre helytelenül nagy értéket kaptunk az irodalomban leírt módszerrel, valamint a reagens a mérések alatt is bomlott, emiatt nem kaptunk reprodukálható görbéket. Egy másik, ebben a munkában vizsgált reakciót 1977-ben javosolták kalibrációs célokra.^[2] Ennek alapja ferricianidion redukciója aszkorbinsavval, amely megfelelő körülmények használatával pszeudo-elsőrendű kinetikát ad. A reakció a várttal szemben azonban kétexponenciális kinetikai görbéket eredményezett, emellett a mérési görbéink sem voltak jól reprodukálhatóak, habár a kiértékelés meglehetősen jó eredményt szolgáltatott a holtidőre.

Végeztem ezentúl a diffúzió hatásának vizsgálatát célzó méréseket is, melyek során megállapítottam, hogy az általam használt mérési módszernél a dugattyúk kézi mozgatása jelentősen befolyásolja a kapott eredményt. Ezen kívül igazoltam, hogy a rutinmérések során jellemzően alkalmazott kis oldattérfogatok esetében a reagensfecskendők felőli komponensek diffúziójánál jelentősebb hatása van a megállítófecskendő felől történő diffúzióknak.

[1] Lin, C. T., Rorabacher, D. B. J. Phys. Chem. 78, 305. (1974)

[2] Tonomura, B., Nakatani, N., Ohnishi, M., Yamaguchi-Ito, J., Hiromi, K., Analytical Biochemistry, 84, 370 (1978)

[3] Carlton Paul, Kasper Kirschner, Gernot Haenisch: Analytical Biochemistry, 101, 442. (1980)

KÁNNÁR DÁNIEL

Kémia BSc

BSc, 5. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

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

Külső elektromos tér hatása Li⁺, Na⁺ és K⁺-ionok grafén felületen történő adszorpciójára és diffúziójára

Napjainkban a nanotechnológia fejlesztések középpontjában a szén újonnan felfedezett módosulatai állnak. A grafének optoelektronikai, elektrokémiai és szenzorkémiai széleskörű alkalmazhatóságának szempontjából igen fontos eredmény, hogy etanollal kezelt többfalú szén nanocsövek zafír szubsztráton növesztett nanoszerkezettel rendelkező CeO₂ felületre történő párologtatásával rendezett struktúrájú grafén ill. nanografít rétegeket hozhatunk létre. Az létrehozható grafén-CeO₂-zafír réteg - elektrokémiai módosításokat követően - potenciális felületéül szolgálhat egy, a külső elektromos tér által meghatározott ion diffúzióknak. A felületre merőlegesen és azzal párhuzamosan alkalmazott elektromos tér változtatásával elérhető lenne az ionok szelektív vándorlása.

A gyakorlati megvalósíthatóság egyik előfeltétele annak tisztázása, hogy a külső elektromos tér milyen hatást gyakorol az ion – grafén kölcsönhatásra. Az adszorpciós folyamat molekuláris szintű értelmezése céljából DFT módszerrel M05-2X/6-31G(d) szintű kvantumkémiai számításokat végeztünk. Megvizsgáltuk, hogy a felületre merőleges homogén külső elektromos tér milyen hatást gyakorol magára a grafén felületre, illetve az alkálifém ionok grafén felületen történő adszorpciós és diffúziós tulajdonságaira. Eredményeink szerint a pozitív töltésű ion az elektromos tér közel kényszeríti a grafén felülethez, ahol megnő a töltésátvitel az alkálifém-ion és az elektronban gazdag grafén között. Egy, az anyagi minőségtől függő meghatározott erősségű elektromos térnél az ilyen módon elektrontöbbletre szert tett alkálifém-ion negatív töltésűvé válik. Ezt követően a negatív töltésű ion elkezd távolodni a felülettől. A sztatikus számítások alapján a vizsgált három alkálifém-ion közül a legkisebb ionsugárral rendelkező Li⁺-ion lesz a legmozgékonyabb semleges térben, míg a leglassabb a felületre merőleges külső homogén elektromos térben.

Reményeink szerint eredményeink hozzájárulhatnak ionok grafén felületen történő adszorpciós és diffúziós tulajdonságainak megértéséhez, továbbá az elméleti kémiai vizsgálatok hatékonyan segítik elő a kapcsolódó kísérletek megtervezését, a különböző anyagi minőségű ionokra szelektív grafén-CeO₂-zafír réteg alapú szenzorok tervezését.

KAVICZKI ÁKOS

Vegyészmérnök

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

Konzulens:
Dr. Kristóf Tamás
egyetemi docens, PE MK

Membrántranszport vizsgálata molekuláris szimulációkkal

Kulcsszavak: szelektivitás, gáz elegy, nemegyensúlyi szimuláció, betöltöttség, permeabilitási arány.

Molekuláris szimulációkban többnyire atomi szinten definiált rendszerekkel, viszonylag kevés és egyszerű információkból kiindulva az anyagi rendszer egészére érvényes eredményekhez lehet jutni. Az adszorbensekben lejátszódó folyamatok értelmezésében manapság különösen fontos szerepet töltenek be a molekuláris szimulációk. Adszorbensek leírására elsősorban egyensúlyi adszorpciós vizsgálatokat alkalmaznak, de a számítástechnikai kapacitás fejlődésével az anyagtranszport-számítások is egyre inkább teret nyernek.

Zeolitmembránon keresztül lejátszódó stacionárius anyagtranszport direkt szimulációját nemegyensúlyi molekuláris dinamikai technikával végeztem H_2 , N_2 , CO_2 és CH_4 gázok esetében. A gázmolekulák potenciálmodelljeit irodalomból vettem. A számítások során alkalmazott szilikalit-membrán modellparamétereit az irodalomban rendelkezésre álló, különféle gázokkal vett kölcsönhatásokra definiált modellekből határoztam meg. A paraméterek jóságát adszorpciós számításokkal ellenőriztem, összehasonlítva a számított eredményeket kísérleti adszorpciós izotermák adataival. A stacionárius transzport szimulációs eredményei azt mutatták, hogy a biner elegyek permeációs szelektivitása eltér a tiszta komponensek permeabilitási arányától. A különbség a komponensek eltérő membránbeli mozgékonyságának, ezek betöltöttségtől való függésének és a molekulák adszorpciós kötőhelyekért való versengésének a következménye. A jelenség összetettsége miatt a permeációs szelektivitási eredmények értékelésére egyensúlyi szelektivitást szolgáltató elegyadszorpciós számításokat is végeztem.

KIRÁLY ANNA

Molekuláris bionika

BSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Haspel Henrik**tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK**Dr. Kukovecz Ákos**egyetemi docens, SZTE TTIK*

Mélyhőmérsékletű kváziizotermális dielektromos spektrumok mérésének új és egyszerű módszere - rövid szénláncú alkil-karbonátok vizsgálata

A dielektromos relaxációs spektroszkópia egy olyan méltatlanul kevésbé ismert spektroszkópiai módszer, amely – többek között – nem nulla elektromos dipólusmomentummal rendelkező molekulárisztruktúrákat tartalmazó anyagok orientációs polarizációs dinamikájába enged bepillantást. A módszer az 1 mikroHz és 1 THz közötti frekvenciatartományban zajló folyamatok tanulmányozását teszi lehetővé. A vizsgálandó dipólus molekulárisztruktúrák relaxációs ideje több paraméter függvénye és igen tág határok között (néhány pikoszekundumtól több napig) változhat.

A kisméretű, üvegesedési átmenetet mutató szerves folyadékok orientációs polarizációjának tipikus relaxációs ideje szobahőmérsékleten mikrohullámú mérés technikával mérhető. Kihasználva azonban a relaxációs dinamika erőteljes hőmérsékletfüggését, a vizsgálandó folyamatok a rendelkezésünkre álló szélessávú (1 mikroHz – 10 MHz) dielektromos rendszerrel is tanulmányozhatóakká válnak. Ehhez a méréseket elegendően alacsony hőmérsékleteken kell végezni, tipikusan a -100°C -tól 0°C -ig terjedő tartományban. Jelenleg nincs hozzáférésünk olyan termosztáthoz, melynek segítségével mélyhőmérsékletű izotermális dielektromos spektroszkópiás mérések elvégezhetőek.

A jelen munkában célul tűztük ki olyan mérési elrendezés kialakítását, mellyel mélyhőmérsékletű mérések kis eszközigénnyel, rutinszerűen kivitelezhetőek. Az így kialakított berendezés és eljárás teljesítőképességét a szakirodalomban korábban publikált, megbízhatónak tekintett anyagokkal ellenőriztük [1]. Ezután rövid szénláncú alkil-karbonátok dielektromos relaxációs spektroszkópiai vizsgálatát kezdtük meg.

[1] Haspel, H., Bugris, V., Király, A., Kukovecz, Á., Kónya, Z., A simple and economic way to measure low-temperature quasiisothermal dielectric spectra. Poster presentation, Broadband Dielectric Spectroscopy and its Application (BDS 2012), 3-7 September 2012, Leipzig, Germany

KRICSFALUSI NIKOLETTA

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

LÖVEI ALIDA

Vegyész
MSc, 1. félév
Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Lente Gábor
egyetemi docens, DE TTK*

Dopamin és norepinefrin oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal

Jelen munkában a norepinefrin és a dopamin oxidációját tanulmányoztuk peroxomonoszulfát-ion jelenlétében, elsősorban UV-vis spektrofotometriás detektálási módszerrel.

Az előkísérleteink során rögzített spektrális változások alapján megállapítottuk, hogy a vizsgált reakciók többlépéses folyamatok, illetve kiválasztottunk egy jól követhető hullámhosszt, melyen további méréseinket végezhetjük (279 nm).

A reakciók sztöchiometriáját elektropray tömegspektrometriás és $^1\text{H-NMR}$ módszerrel is megkíséreltük tanulmányozni. Vizsgálataink során egyértelmű következtetést nem tudtunk levonni, az eredmények azonban azt valószínűsítik, hogy a többlépéses reakció első oxidációs köztterméke mindkét catecholamin esetében a kételektronos oxidációval keletkező o-kinon forma, s emellett, a dopamin esetén dopamin-N-oxid képződésére utaló jelek is tapasztalhatók.

A dopamin és peroxomonoszulfát-ion közötti reakció kinetikai vizsgálatakor tapasztaltak arra utaltak, hogy a reakció dopaminra nézve telítési, míg peroxomonoszulfát-ionra nézve kevert első- és másodrendű kinetikát mutat (pH = 7,0; 6,2; 5,2; 4,7). A 4-es pH-n végzett vizsgálataink során azt tapasztaltuk, hogy a több lépésben lejátszódó oxidációs folyamat első lépésében a peroxomonoszulfát-ionra nézve elsőrendű a reakció, míg a következő lépésben nagy peroxomonoszulfát-ion koncentrációknál az oxidálószer már nem befolyásolja a reakciósebességet. Megállapítottuk, hogy erősen savas közegben (pH = 1,5) számottevő változás már nem történik.

A norepinefrin és a peroxomonoszulfát-ion között lejátszódó reakció esetén a kezdeti reakciósebesség koncentrációfüggésének vizsgálatakor tapasztaltak arra utaltak, hogy oxonra nézve kevert első- és másodrendű, míg norepinefrinre nézve elsőrendű kinetikát mutat (pH = 7,0; 6,2; 5,2; 4,7). A 4-es pH-n mért kinetikai görbék jelentősen eltértek az addig tapasztaltaktól. Az oxonra nézve elsőrendű kinetika állapítható meg az először lejátszódó reakcióra, azonban a második folyamat telítési kinetikát mutat, a reakciósebességet nagy oxonkoncentrációknál a peroxomonoszulfát-ion nem befolyásolja. Erősen savas közegben (pH = 1,5) nem megy végbe a reakció.

Megalapozott kinetikai modellek felállítása azonban, elsősorban az oxidációs folyamatok igen összetett jellege miatt, még további kísérleti munkát igényel.

KOCZOR -BÁLINT

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Konzulens:
Rohonczy János
egyetemi docens, ELTE TTK

PIC mikrokontroller vezérlésű, gyors analóg-digitál konverter szilárd NMR spektrumok szélessávú detektálására

NMR mérések során az információt a Zeeman kölcsönhatást perturbáló egyéb, finomabb kölcsönhatások szolgáltatják, melyek irányfüggőek, de az oldatfázisban tapasztalható gyors mozgások miatt kiátlagolódnak, vagy eltűnnek. ^1H mérések esetén a detektálható kölcsönhatások a hangfrekvenciás tartományba esnek, így a spektrum szélessége is mindössze néhány tíz kHz.

Szilárd fázisban a gátolt mozgások következtében a kölcsönhatások nem átlagolódnak ki, ezért a jelek elkenődnek, a spektrum kiszélesedik, MHz-es nagyságrendbe eshet. A spektrum ablak szélességének növelése kulcsprobléma, mely FT NMR esetén az analóg digitál-konverter mintavételezési frekvenciájának növelésével érhető el. Erre a célra szélessávú analóg-digitál konvertereket gyártanak.

Munkám során egy olyan analóg-digitál konverter modult építettem, melynek maximális mintavételezési frekvenciája 10 MHz. Erre azért van szükség, mert a spektrométer gyári elektronikájának ezen paramétere mindössze 100 kHz, mely meglehetősen kis spektrum szélességet biztosít, ami nem teszi lehetővé szélessávú FID-ek detektálását. A modul lehetőséget biztosít túlmintavételezésre is, ami a spektrum jel/zaj arányát javítja. Utóbbi gyorsan relaxáló, kvadrupól magok esetén jelentős szerepet kaphat. Az spektrométer átviteli karakterisztikájának ismeretében egy korrekciós függvénnyel a szélessávú spektrumok frekvencia torzulása korrigálható. A modul építésére csupán néhány, ma már kommersz integrált áramkört használtam, így az építés költsége elhanyagolható volt egy szélessávú ADC árához képest.

Dolgozatomban ismertetem a megvalósítás részleteit, a felmerült problémákat és megoldásukat, alkalmazási példákat és a spektrométer átviteli karakterisztikájának felvételét.

KONTOS JÁNOS

vegyészmérnök BSc

BSc, 8. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Dallos András**egyetemi docens, PE MK**Járvás Gábor**tudományos segédmunkatárs, PE MK*

Többkomponensű rendszerek párolgásának modellezése

A bioetanol napjaink egyik legnagyobb mennyiségben előállított megújítható energiaforrása. Az EU 2009/28/EK irányelv 2020-ig 10% bio-komponens bekeverését írja elő az üzemanyagokban a tagállamok számára. Ennek következtében az etanol-benzin üzemanyag-keverékek vizsgálata rendkívüli jelentőséggel bír.

A motorbenzin és etanol keverék fizikai-kémiai szempontból változó összetételű reális többkomponensű elegy, amely modellezésével és párolgási jellemzőinek előreszámításával az idő- és költségigényes kísérleti munka mennyisége csökkenthető. Munkám célja egy olyan folyadék csepp-párolgásra vonatkozó modell létrehozása volt, amely többkomponensű, reális rendszerek esetén is megbízhatóan alkalmazható, és nem tartalmaz az adott elegyre jellemző illesztendő paramétereket.

A kifejlesztett párolgási modell kvázi-egyensúlyi lépéseken keresztül képes a párolgó csepp fizikai-kémiai paraméterei (méret, összetétel, hőmérséklet) időbeli változásainak és a csepp élettartamának számítására. Az intermolekuláris kölcsönhatások modellezésére és a folyadékfázis reális viselkedésének leírására a COSMORS elméletre épülő COSMOTHERM kvantumkémiai programot használtam. A molekulák gázfázisbeli transzportjának szimulációjához a Maxwell-Stefan féle diffúziós és konvekciós elméletet alkalmaztam. A párolgási tömeg-fluxus számításához szükséges parciális differenciálegyenletek megoldására, illetve a környezet felől a cseppbe vezetéssel közölt hő mennyiségének meghatározásához a COMSOL Multiphysics programcsomagot alkalmaztam, mely a végeselemek módszerén alapszik. A számítások elvégzéséhez és a különböző szoftverplatformok közötti kapcsolat kialakításához saját fejlesztésű Matlab keretprogramot készítettem.

A létrehozott csepp-párolgási modellt kísérleti adatok felhasználásával validáltam. A tesztelés során megállapítottam, hogy a modell alkalmas többkomponensű folyadék-elegyek cseppjei párolgásának becslésére annak ellenére, hogy a szimulációkba bevont rendszerek igen változatos összetételűek voltak. A validált modell segítségével különböző összetételű (0-100 m/m%) benzin és bioetanol elegyét tartalmazó cseppek párolgását szimuláltam. A számítások során kapott eredmények összhangban voltak a kísérleti tapasztalatokkal.

KORMÁNYOS ATTILA

Vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Visy Csaba**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Dr. Janáky Csaba**tanársegéd, SZTE TTIK**Endrődi Balázs**PhD hallgató, SZTE TTIK*

Lakkáz-enzim rögzítése vezető polimer mátrixban magnetit nanorészecskék segítségével

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

A kutatócsoport korábbi tapasztalataiból kiindulva munkám során egy olyan nanokompozit létrehozását tűztük ki célul, mely esetén a vezető polimer mátrixba (polipirrol) módosított magnetit nanorészecskéket építünk be, melyek felületén egy adott enzim (az oxidoreduktázok családjába tartozó lakkáz-enzim) van megkötve.

Tudományos Diákköri munkám során kidolgoztunk egy olyan szintézismódszert, mely segítségével sikeresen immobilizáltunk lakkáz-enzimet magnetit nanorészecskék felületén. A szintézis során az alkalmazott vezetősó (K-tetraoxalát) kölcsönhatásba lép a magnetittel, melynek felületén vegyes Fe(II)/Fe(III)-oxalát alakul ki. Ennek karboxil-csoportja reakcióba lép az enzimmel, rögzítve azt a nanorészecske felületére. ATR-FT-IR technikával igazoltuk, hogy a reakció mindösszesen tíz perc alatt lezajszódik.

A továbbiakban ezen nanorészecskéket sikeresen építettük be polipirrol mátrixába. A leválasztást, korábbi tapasztalataink alapján, galvanosztatikusan végeztük. Kísérleteink során azt tapasztaltuk, hogy az enzim kifejezetten pH-érzékeny, ezért a szintézisek során vegyes vezetősót, NaCl - K-tertraoxalát keverékét használtuk, melynek összetételét optimalizáltuk.

Az elkészített vékonyrétegek elektrokémiai viselkedését ciklikus voltammetriával vizsgáltuk. Telített oxigén atmoszférában a kompozit esetén jóval nagyobb redukciós töltéstöbblet volt megfigyelhető, mint a tiszta polipirrol vagy a polipirrol/magnetit esetén, továbbá a hibrid vékonyréteg esetén megjelent egy újabb csúcs is. A folyamat kinetikáját lineáris voltammetriával vizsgáltuk.

KOVÁCS RÓBERT

Vegyészmérnök MSc

MSc, 9. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:
Dr. Boda Dezső
egyetemi docens, PE MK*

Szelektív iontranszport számítása póruson keresztül a Nernst-Planck egyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációval

Kulcsszavak: nanopórus, sejtmembrán, izomsejt, ioncsatorna, elektrokémiai potenciál,

A különféle membránokon keresztül történő részecsketranszport mind biológiai (pl. sejtmembrán), mind technológiai (pl. ionszelektív membránok) szempontjából a kísérlet és elméleti vizsgálatok középpontjában áll. A kutatócsoport ezeken belül az ionok transzportjára koncentrálnak olyan membránokon keresztül, ahol az ionok transzportját különböző mérettartományba tartozó ionok biztosítják. A gyakran erősen szelektív biológiai ioncsatornákon keresztül folyó iontranszport különböző élettan folyamatok szempontjából (idegimpulzus, izomműködés stb.) felbecsülhetetlen jelentőségű. A technológiailag könnyen manipulálható szintetikus nanopórusok vezetési tulajdonságai különböző nanoeszközök (egyenirányítók, ionpumpák, logikai kapuk stb.) kifejlesztésében játszhatnak szerepet.

A póruson keresztül való transzportot (a fluxust) vagy egy fenomenológiai transzportegyenlettel (Nernst-Planck egyenlet), vagy egy dinamikus szimulációs módszerrel (Langevin dinamika, Dinamikus Monte Carlo) számoljuk. Ahhoz, hogy ezekhez a módszerekhez a hajtóerőt (az elektrokémiai potenciál gradiensét) biztosítsuk, a témavezető és munkatársai által újonnan bevezetett Lokális Egyensúlyi Monte Carlo (LEMC) módszert alkalmazzuk, ahol a pórus, az elektrolit és a membrán egy molekuláris modelljét szimuláljuk oly módon, hogy a rendszert kis térfogatelemekre osztjuk, majd ezekre a térfogatelemekre nagykanonikus MC szimulációkat végzünk különböző elektrokémiai potenciálokat használva a térfogatelemekben. Számításainkból feszültség-áram karakterisztikákat határozunk meg az elektrolitnak a membrán két oldalán lévő különböző összetételei mellett. Eredményeink az ioncsatornák és a nanopórusok vezetési és szelektivitási tulajdonságainak jobb megértéséhez vezetnek.

KOZMÉR ZSUZSANNA

Vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Alapi Tünde**egyetemi tanársegéd, SZTE TTIK**Arany Eszter**PhD hallgató, SZTE TTIK**Dr. Wojnárovits László**igazgató, MTA Energiatudományi Kutatóközpont, Izotópkutató Intézet***A reaktív közttermékek szerepe fenol vizes oldatának vákuum-ultraibolya fotolízisében és γ -radiolízisében**

Vizek szerves szennyezőinek eltávolítására alkalmas a vákuum-ultraibolya (VUV) és gamma (γ) fotonokkal történő megvilágítás, amely során a szennyezők hatékonyan és adalékanyagok hozzáadása nélkül lebonthatók. Ezen eljárásokat alkalmazva a célvegyületek mineralizációja szabad gyökös (hidroxilgyök ($\cdot\text{OH}$), hidrogénygyök/hidratált elektron (H/e_{aq}^-), hidroperoxilgyök/szuperoxid gyökion ($\text{HO}_2\cdot/\text{O}_2^{\cdot-}$) stb.) folyamatokon keresztül megy végbe. A bontási folyamatok optimalizálásához szükséges a mechanizmusok pontos ismerete, így a kevésbé tanulmányozott, kisebb reaktivitású gyökök szerepének megismerése. Kutatásaink ezért arra irányultak, hogy változtatva a reakciókörülményeket befolyásoljuk a bontás gyökkészletét, és megfigyeljük annak hatását egy egyszerű szerkezetű modellvegyület, a fenol vizes oldatának VUV-fotolízisére (Xe excimer lámpa: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \cdot\text{H}$ és $\cdot\text{OH}$) és γ -radiolízisére (^{60}Co -forrás: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow e_{\text{aq}}^-$ és $\cdot\text{OH}$).

Kísérleteink során 10^{-4} mol dm^{-3} koncentrációjú vizes fenololdatokat sugároztunk be VUV-, illetve γ -fotonokkal, különböző oldott gázok (N_2 , O_2) jelenlétében, illetve 0,50 mol dm^{-3} terc-butanol, mint $\cdot\text{OH}$ -fogó vagy 0,05 mol dm^{-3} hangyasav vagy Na-formiát, mint $\cdot\text{OH}$ -transzfer anyagok hozzáadásával. A fenol bomlását HPLC-s elválasztással követtük. A képződő reaktív oxigéntartalmú gyökök (ROS) reakcióiból származó H_2O_2 koncentrációjából következtethetünk a ROS koncentrációjára, ezért a H_2O_2 képződését Cu^{II} -dimetilfenantrolin redukcióján alapuló módszerrel spektrofotometriásan mértük.

Oxigénmentes oldatban a fenol bomlásáért a vízből képződő $\cdot\text{OH}$ -ök, $\text{H}\cdot$ -ök, illetve e_{aq}^- -ok felelősek. A fenol bomlási sebessége (r) N_2 helyett O_2 -t alkalmazva nagyobb volt, mivel ekkor megnő a $\cdot\text{OH}$ koncentráció, a redukáló típusú H/e_{aq}^- -ok oxidáló típusú $\text{HO}_2\cdot/\text{O}_2^{\cdot-}$ -okká alakulnak, illetve mivel oldott O_2 hatására a $\cdot\text{OH}$ reakcióiban keletkező ciklohexadienil-gyökök peroxigyökké alakulnak, megakadályozva ezzel az esetleges visszaalakulást.

Adalékanyagok jelenlétében az r lecsökkent. Oxigénmentes mintákban a túlsúlyban levő H/e_{aq}^- -ok járulhatnak hozzá mérsékelt módon a bomláshoz, melyek közül a $\text{H}\cdot$ -ök hatása a jelentősebb. Az oxigén jelenlétében képződő $\text{HO}_2\cdot/\text{O}_2^{\cdot-}$ -ok szintén kis reaktivitást mutatnak a fenollal szemben, azonban a $\text{HO}_2\cdot$ -ök szerepe jelentősebb. Eredményeink alapján nagyságrendileg megbecsültük a mindeddig ismeretlen fenol és $\text{HO}_2\cdot$ közötti reakció reakciósebességi együtthatóját ($1,2 \times 10^6$ mol $^{-1}$ dm 3 s $^{-1}$). A mért H_2O_2 koncentrációk alátámasztották a bomlásgörbékből levont következtetéseket.

KUNSÁGI-MÁTÉ ÉVA

Vegyészmérnök

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Kubinyi Miklós**egyetemi tanár, BME VBK**Dr. Baranyai Péter**tudományos munkatárs, MTA TTK MFI*

Új, xantphos típusú ligandummal rendelkező arany(I) komplexek lumineszcenciájának vizsgálata

A szerves aranyvegyületek szintézise és vizsgálata fontos kutatási területté vált az elmúlt időszakban, hiszen alkalmazásuk számos új lehetőséget kínál több tudományterületen is (orvostudomány: reuma-, ill. daganatellenes szerek; anyagtudomány: lumineszkáló anyagok).

A xantphos ligandum az irodalomban már korábban is ismert vegyület. A xantphos homológjának tekinthető 4,5-bisz(difenilfoszfinometil)-9,9-dimetilxantén (xP_2) új vegyület, amelyet BME / MTA-TTK együttműködés keretében állítottak elő. Célunk volt lumineszcenciás vizsgálatok segítségével összehasonlítani a két anyag arany(I) komplexeit, amelyek másik ligandumként klórt, ill. aromás etinil (Ph, Naph, Phen) származékot tartalmaztak.

A fenti komplexeket szilárd és oldatfázisban (oldószer: CH_2Cl_2) is megvizsgáltuk. A spektrumokat stacionárius és időfelbontásos lumineszcencia spektroszkópiai módszereket alkalmazva is felvettük (időkorrelált egyfoton-számlálás, foszforeszcencia lecsengés mérése). Megfigyeltük, hogy a fluoreszcencia mellett szilárd fázisban szobahőmérsékleten mindegyik anyagnál tapasztalható foszforeszcencia is, amely az aromás acetilén-származék típusú ligandumok esetében oldatfázisban is jelentkezett.

Az $[Au_2Cl_2(xantphos)]$ komplex szilárd fázisban rövid élettartamú, élénk narancsszínű lumineszcenciát mutat, aminek oka feltehetően az aurofil kölcsönhatás jelenléte. Az xP_2 analóg klórkomplexében röntgendiffrakciós mérések szerint az arany atomok viszonylag távol helyezkednek el egymástól, ezzel összhangban, a lumineszcencia-spektrumban sem mutatkoznak az Au-Au kölcsönhatás jelei. Az xP_2 etinil tartalmú komplexeinek kristályszerkezete még nem ismert, lumineszcencia sajátságai utalnak arany-arany kölcsönhatásra.

Kulcsszavak: difoszfin ligandum, alkinil ligandum, foszforeszcencia élettartam, koordinációs kötés, kristályszerkezet

NAJBAUER ESZTER ÉVA

Kémia BSc

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Tarczay György
egyetemi docens, ELTE TTK*

A cisztein konformációs eloszlásának vizsgálata IR lézerbesugárással kombinált mátrixizolációs technikával

Az aminosavak a fehérjék építőköveiként a leggyakrabban vizsgált molekulák közé tartoznak. Többek között konformációs eloszlásuk is egy izgalmas téma, melynek meghatározására számos módszert alkalmaznak. A vizsgálatok jelentőségét az adja, hogy sok esetben, így több aminosav esetében is azt tapasztalták, hogy nem minden olyan konformer mutatható ki kísérletileg, amelynek az elméleti számítások szerint elvileg kimutatható mennyiségben kellene előfordulnia.

Tudományos diákköri munkám során a ciszteint vizsgáltam mátrixizolációs infravörös spektroszkópia segítségével. Munkám elődleges célja az volt, hogy infravörös lézer használatával kiegészített mátrixizolációs IR spektroszkópiai technikával azonosítsam a cisztein konformereit. Kísérleteim során szelektív lézeres besugárást alkalmaztam, amelynek hatására bekövetkező konformerarány-változás lehetőséget ad arra, hogy ilyen bonyolult esetben is el tudjuk választani a különféle konformerekhez tartozó spektrumvonalakat, be tudjuk azonosítani a molekula mátrixban jelenlevő konformereit.

Korábbi mátrixizolációs vizsgálatokkal kimutatható volt, hogy mind hidrogénkötésű, mind hidrogénkötés nélküli konformerek is jelen vannak nemesgázmátrixban, a konkrét (például az oldallánc térállásában eltérő) konformereket azonban sem sikerült beazonosítani. Korábbi kvantumkémiai számításokból rendelkezésünkre álltak a mátrixban még elvileg látható konformerekre vonatkozó geometriai adatok. Munkám során ezekre a konformerekre számítottam ki B3LYP módszerrel az elméleti frekvenciákat, majd SQM módszerrel skáláztam azokat, hogy megkapjam az Ar-mátrixban várható frekvenciáikat. A konformerek azonosítását ezekre a számítási adatokra alapoztam.

Szelektív lézerbesugárással alkalmazásával sikerült egyértelműen azonosítanom a ciszteinnek két nem-hidrogénkötött konformerét, valamint kizárni a harmadik, alacsony energiájú nem-hidrogénkötött konformer jelenlétét. A hidrogénkötött konformerek közül nagy valószínűséggel sikerült azonosítani a két legalacsonyabb energiájú konformert. A méréseim során kapott eredmények konzisztensek a más technikákkal, például mikrohullámú spektroszkópiával kapott eredményekkel.

Reményeim szerint munkám egy kis molekula, a cisztein, esetében segít feltérképezni a kísérletileg észlelhető konformereloszlást, ami értékes információt nyújt az elmélet és a kísérlet közötti esetleges eltérések további vizsgálatához. Biológiai érdekesebb nagyobb rendszereken (pl. peptidek, fehérjék) végzett vizsgálatokat is csak akkor érthetünk meg alaposan, ha a kismolekulákra (akár a nagy biomolekulák építőköveire) vonatkozó eredményeket már tökéletesen meg tudjuk magyarázni.

PÁLLAI ZOLTÁN

Vegyész MSc

MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Konzulensek:
Dr. Hernádi Klára
egyetemi tanár, SZTE TTIK
Németh Zoltán
doktorjelölt, SZTE TTIK

SnO₂/MWCNT nanokompozitok kontrollált előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: ón-dioxid, többfalú szén nanocső, gáz szenzor

Az Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék laboratóriumaiban régóta foglalkoznak szén nanocsövek előállításával és alkalmazhatóságainak vizsgálatával. A többfalú szén nanocsövek (MWCNT) kiváló mechanikai és elektronikai tulajdonságokkal rendelkeznek ezért széleskörűen alkalmazhatóak kompozit alapanyagként. Ismeretes, hogy a többfalú szén nanocsövek tulajdonságait kedvezően befolyásolhatjuk egy a felületen kialakított szervesetlen fém-oxid bevonattal. Az így előállított ún. nanokompozitokat napjainkban széleskörűen alkalmazzák. Tudományos munkám keretében a feladatom ón-dioxid (SnO₂) többfalú szén nanocső nanokompozitok előállítása és vizsgálata volt. Az SnO₂ egy n-típusú félvezető, és ez az egyik legfontosabb gáz szenzorként használt anyag a különböző gyúlékony és mérgező gázok kimutatásában.

Az SnO₂/MWCNT nanokompozitokat két különböző szintézis módszerrel állítottuk elő, melyek az impregnálás és a hidrotermális szintézis voltak. Az előállítás során az általunk használt oldószerek a víz és az etanol voltak, prekursorként SnCl₂·2H₂O alkalmaztunk. A nanokompozitok előállítása során az SnO₂/MWCNT mintákban vizsgáltuk a tömegarány hatását a kialakuló szervesetlen réteg minőségére. Az általunk vizsgált nanokompozitokban a MWCNT:SnO₂ tömegarányok 1:4, 1:8, 1:16, 1:32, 1:64 voltak.

Az elkészített mintákat transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM) és pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) vizsgáltuk. A kialakult szervesetlen réteg hőkezelés során kialakult kristályosságát és összetételét röntgendifrakcióval (XRD), energia diszperzív röntgen spektroszkópiával (EDX) és Raman spektroszkópiával elemeztük. A minták fajlagos felületét BET módszerrel megmértük.

Vizsgálataink során megállapítottuk, hogy a nanokompozitok előállítása mindkét módszerrel sikeres volt, de a kapott termékek minősége és szerkezete jelentősen eltér, tehát a szintézis módszer megválasztása alapvető fontosságú a SnO₂/MWCNT nanokompozitok előállítása során. Az általunk alkalmazott eljárások közül a hidrotermális szintézis szolgáltatja a legjobb eredményeket.

A jövőben egy nemzetközi kooperáció keretein belül az előállított termékek gáz szenzorként történő tesztelését kívánjuk megvalósítani.

Kémiai technológia tagozat

BABOS KATALIN

Vegyészmérnök MSc

MSc, 4. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulensek:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK
Kasza Tamás
technológus, Magyar Olaj- és Gázipari Nyrt.*

Bioparaffinok izomerizációja

A különböző természetes triglicerideket tartalmazó olajok és származékaik motorhajtóanyagként való alkalmazása iránti igény a világon egyre nagyobb. Ennek oka – többek között – a fosszilis energiahordozók korlátozott rendelkezésre állása, a kőolajtól való függőség csökkentése és a környezet megóvása. Ezen trigliceridek (pl. napraforgó-, repceolajok) önmagukban való alkalmazása Diesel-motorokban csak jelentős mértékű átalakítással lehetséges. Ezért szükséges a természetes trigliceridek kémiai átalakítása, hogy megfelelő minőségű motorhajtóanyagokat, illetőleg keverőkomponenseket nyerjünk. Jelenleg főként a különböző növényolajokból átészterezéssel előállított biodízeleket alkalmazzák gázolajok keverőkomponenseként. Ezek azonban számos hátránnyal rendelkeznek (pl. rossz hő-, oxidációs és tárolási stabilitás, nagyobb bekerülési költség). Ezek a hátrányok kiküszöbölhetőek például a növényolajok heterogén katalitikus átalakításával (speciális hidrokrakkolásával), amely során termékként kedvező alkalmazástechnikai tulajdonságokkal rendelkező (kivéve a hidegfolyási tulajdonságokat) ún. biogázolaj keletkezik.

A főként normál-paraffinokból álló biogázolaj cetánszáma ugyan nagy (70-90), de hidegszűrhetőségi határhőmérséklete meglehetősen kedvezőtlen (CFPP > 20°C), ami korlátozza dízelgázolaj-keverőkomponensként való felhasználásukat.

Kísérleti munkám célja katalitikus átalakítással olyan természetes trigliceridből előállított, Diesel-motorok hajtására alkalmas motorhajtóanyag előállítására nagy hozammal (>75%), amely nem csak nagy cetánszámmal, hanem kedvező hidegfolyási tulajdonságokkal (hidegszűrhetőségi határhőmérséklet: -5 és -20°C között) is rendelkezik. A kísérletek során napraforgóolajból hidrogénező katalizátoron célirányosan megválasztott műveleti paraméterek között előállított alapanyagot használtam (CFPP = +23°C; szénhidrogén összetétel: C_{17:}: 6,3%, i-C_{17:}: 0,3%, n-C_{17:}: 46,7%, i-C_{18:}: 0,4%, n-C_{18:}: 43,3%, C₁₉₊: 2,0%). A kísérleteket egy 100 cm³ hasznos térfogatú nagynyomású reaktorrendszerben végeztem el, amely minden olyan műveleti és szabályozó egységet tartalmazott, ami a nagyipari hidrogénező üzemben is megtalálható. A nyert eredmények alapján megállapítottam, hogy a kedvezőnek talált műveleti paraméterkombinációk (340-360°C; P = 40-50 bar; LHSV = 0,75-1,0 h⁻¹, H₂/alapanyag térfogatarány: 300-400 Nm³/m³) mellett nagy hozammal (>95%) 70-85 cetánszámú illetve -15 és -10°C közötti CFPP értékkel rendelkező termékek (biogázolaj) állíthatók elő. Ezek önmagukban vagy keverőkomponensként használhatók fel.

BALOGH ATTILA

gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Marosi György**egyetemi tanár, BME VBK**Dr. Nagy Zsombor**egyetemi tanársegéd, BME VBK*

Olvadék alapú elektrosztatikus szálképzés alkalmazása a gyógyszertechnológiában

A gyógyszeriparban egyre növekvő igény mutatkozik a folyamatos technológiák alkalmazására. Az elektrosztatikus szálképzés az egyik lehetőség, amely meg tud felelni a gyógyszeripari elvárásoknak a gyógyszerformálás területén. A technológia elvi alapja, hogy nagy elektromos térerősséget alkalmazva polimer oldatokból és olvadékokból szálat lehet előállítani. Az így kialakított szövedékek szálainak átmérője elérheti a szubmikronos mérettartományt.

Az oldószeres elektrosztatikus szálképzés alkalmazásának előnye, hogy az oldószer gyorsan történő elpárolgása következtében az oldott hatóanyag amorf formában marad a polimer mátrixban, ezáltal rossz vízoldhatóságú kristályos hatóanyagok kioldódási sebessége megnövelhető, amelyet tovább fokoz a szálak nagy fajlagos felülete. Az olvadék alapú elektrosztatikus szálképzéssel elkerülhető a nagy mennyiségű oldószer felhasználása és az ezzel járó robbanásveszély. A termelékenység is javítható az oldószeres elektrosztatikus szálképzéshez képest, ipari alkalmazását megkönnyítheti az egyszerű méretnövelhetőség (extrúderrel történő összekapcsolás). Ez a téma terület ez idáig kevésbé vizsgált, nem találni publikációt olvadék alapú szálképzéssel előállított gyógyszerformákról. Munkám során olvadék alapú elektrosztatikus szálképzéssel állítottam elő szövedékeket különböző polimerek felhasználásával. A modellhatóanyag a rossz vízoldhatóságú vérnyomáscsökkentő hatású carvedilol volt. Összehasonlítási alapként oldószeres szálképzéssel előállított szálak és az extrudált termékek szolgáltak. Az olvadék alapú elektrosztatikus szálképzéshez építettem egy laboratóriumi vizsgálatokra alkalmas adagoló berendezést, amelynek tervezésekor szem előtt tartottam a lehető legkisebb hőstressz biztosítását, ezért az olvadék hőmérséklete két zónában állítható. A készülék emellett képes széles tartományban nagy felbontással változtatni az olvadék térfogatáramát.

A műszeres vizsgálatok alapján (DSC, XRD, FTIR) a hatóanyag az olvasztásos elektrosztatikus szálképzéssel készült mintákban amorf volt, továbbá a hatóanyag vagy a polimer bomlására utaló jelek sem voltak felfedezhetőek. A kioldódási vizsgálatok eredményei azt mutatták, hogy az olvasztásos elektrosztatikus szálképzéssel készített szálak esetén a tiszta kristályos hatóanyaghoz képest jelentősen gyorsabb hatóanyag leadás érhető el, amely még az óriási fajlagos felülettel rendelkező oldószeres elektrosztatikus szálképzéssel készült szálakhoz viszonyítva is nagyobb kioldódási sebességet jelent.

CSEH BORBÁLA

Vegyéssz mérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

SÁGI DÁNIEL

Vegyéssz mérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulensek:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK
Tóth Csaba
egyetemi tanársegéd, PE MK*

Biokomponens tartalmú dízelgázolaj előállítása

A mobilitás a fenntartható fejlődés egyik alapvető pillére, így a mai modern társadalmunk számára fontos annak megőrzése. Napjainkban azonban az ehhez szükséges energiát főként a fosszilis energiahordozókból nyert munkából fedezik. A kőolajkészletek kimerülése, a kőolajtól illetve az import energiahordozóktól való függőség mérséklésének és a nagymértékű környezetszennyezés csökkenésének igénye a figyelmet az alternatív energiahordozókra irányította, azokon belül is a bioeredetű energiahordozók kifejlesztését és alkalmazásba vételét tette szükségessé. Az alternatív motorhajtóanyagok közé tartoznak a biomasszából, mint állandóan megújuló, illetőleg megújítható energiaforrásból előállítható biomotorhajtóanyagok. Ezek gyártása, tárolása, szállítása és felhasználása során kisebb a károsanyag kibocsátás, mivel a felhasználás során keletkező CO₂ nem terheli a környezetet, mert az a növények fotoszintézise során azokba ismét beépül. Így kisebb mértékben terhelik a környezetet, mint a fosszilis energiahordozókból előállított motorhajtóanyagok használata. A növényolajok önmagukban, átalakítás nélkül nem, illetve csak költséges gépjármű átalakítások útján alkalmazhatóak motorhajtóanyagként. A napjainkban elterjedten felhasznált növényolajokból átészterezéssel előállított biodízelek számos hátrányos tulajdonsággal rendelkeznek (pl. hidrolízisre való hajlam, rossz oxidációs stabilitás, magas ár stb.). Ezért fontos más kémiai úton való átalakítási lehetőségek kutatása, például a hidrogénezése. Ekkor a trigliceridekből oxigéntávolítással n-paraffinokban dús termékelegy állítható elő, mely kitűnő dízelgázolaj keverőkomponens. Kísérleti munkánk során célunk gázolajpárlat és növényolaj elegyek (0%, 5%, 15%, 25%) katalitikus hidrogénezésének vizsgálata volt. Az iparban is alkalmazott NiMo/Al₂O₃ katalizátoron különböző paraméterkombinációk (hőmérséklet: 320-380 °C, nyomás: 60-80 bar, folyadékterhelés: 1,0 h⁻¹, H₂/szénhidrogén arány: 600 Nm³/m³) termékhozamra és termékminőségre gyakorolt hatását vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy a kísérletek során a legkedvezőbb tulajdonságú biogázolaj - tartalmú termékeket T: 360-380 °C, P: 80 bar, LHSV: 1,0 h⁻¹ műveleti paraméterek, és 5 - 15%-os növényolajtartalom mellett nyertük (hozam: 91-93,5%; többgyűrűs aromástartalom: <2,5%; kéntartalom: <10 mg/kg; CFPP: - 1 és 2 °C között). Ezek a termékek kielégítik a dízelgázolaj termékszabvány (MSZ EN 590:2009+A1:2010) mérsékelt égővre vonatkozó nyári minőségi előírásait.

DANICS NÓRA

vegyésszámológiai mesterképzési
MSc, 4. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
dr. Varga Zoltán
egyetemi docens, PE MK*

Desztillációs üzem rugalmasságának vizsgálata

A világ energiafelhasználásának öt százalékát a desztillációs műveletekkel történő szétválasztó eljárások teszik ki. Ennek megfelelően egy kőolajfinomító egyik legenergiaigényesebb technológiája a kőolaj atmoszférikus és vákuum desztillációja. A desztillációs üzemek energiahatékonyságának növelése érdekében arra törekednek, hogy minél kisebb energia befektetéssel tudják biztosítani a megfelelő termékminőségeket. Ebben segít az ún. pinch analízisen alapuló energiaintegrációs módszer, illetve a hozzátartozó hőcserélőhálózat tervező eljárás. Az energiaintegráció során a technológiai meleg áramok hőtartalmát a lehető legnagyobb mértékben érdemes felhasználni a kőolaj előmelegítésére, hiszen így csökkenthető leginkább a külső energia felhasználása, valamint ennek köszönhetően csökken az üzem károsanyag kibocsátása is.

A kőolajfinomítók egyik fontos tulajdonsága a rugalmasság, azaz, hogy különböző kőolajtípusok feldolgozására is alkalmasak legyenek. Ahhoz, hogy az eltérő alapanyagokból, kívánt minőségű elsődleges lepárlási termékeket állítsanak elő, az üzem hőcserélő hálózatának az adott kőolajok esetén képesnek kell lennie a megfelelő hőmérsékletprofil biztosítására. Az atmoszférikus- és vákuumdesztilláló üzem hőcserélőinek optimális kapcsolásával az eltérő kőolajtípusok esetén is az előírt termékminőségeket érhetjük el.

Az előadásban ismertetett kutatás célja, hogy folyamat szimulációs (PRO/II) programmal elkészített modell alapján különböző kőolajok esetén vizsgáljam az üzem optimális hőcserélő kapcsolatát az előírt termékminőségek biztosítására és a legkevesebb segédenergia felhasználásra törekedve. Bemutatom a szűkületi pont helyzetének alakulását az egyes esetekben, valamint vizsgálom, hogy azonos hőcserélő elrendezés esetén megfelelő módon előmelegíthetőek-e az eltérő típusú kőolajok.

DEZSŐ GYÖRGY

Vegyéssz mérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

NAGY DÁNIEL

Vegyéssz mérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
Horváth Dávid
PhD hallgató, PE MK*

Agresszív anionok adszorpciójának vizsgálata magnetittel borított ipari ausztenites korrózióálló acélfelületen in-situ radioizotópos nyomjelzéstechnikával

Az ipari fémfelületeken végbemenő kloridion okozta korrózió mechanizmusának megismerésével már több kutatás foglalkozott, azonban a megkötődés folyamata mind a mai napig nem ismert pontosan. A határfelületi rétegben lejátszódó folyamatok vizsgálatában nagy múltra tekint vissza a nyomjelzéses módszerek alkalmazása, hiszen megfelelő cellakialakítással a módszer kombinálható elektrokémiai mérésekkel, valamint segítségével az egyensúlyi állapot megzavarása nélkül végezhetünk vizsgálatokat. Jelen kutatás célja a mechanizmus pontosabb megismerése, melyhez az in-situ radioizotópos nyomjelzéses „vékony réteg” módszer intézetünkben továbbfejlesztett változatát használtuk. A módszer eredeti változatát optikai minőségben polírozott, jól definiált felületek vizsgálatára dolgozták ki. Segítségével szimultán vizsgálható mind az anyag-, mind a töltéstranszport mértéke. Az eredeti módszerrel is több hasznos információhoz jutottak, azonban csak kis érdekességi tényezőjű acélfelületeken lehet vele méréseket végezni. Az elmúlt években elvégzett módszerfejlesztésnek köszönhetően azonban lehetőség nyílik porózus felületi rétegű minták vizsgálatára is. A jelen munka során az alábbi részlepeket végeztük el:

1. A módszer alapösszefüggéseinek átgondolásával, a vizsgálandó felület paramétereinek optimalítása matematikai számítások segítségével.
2. A Paksi Atomerőműben is alkalmazott ausztenites korrózióálló acélfelület megfelelő előkészítése
3. A megfelelően kezelt, optikai minőségűre polírozott felületekre a meghatározott paraméterekkel rendelkező magnetitréteg leválasztása, a leválasztási paraméterek optimalizálása

A fentiekben vázolt számításoknak és felület előkészítéseknek köszönhetően elérhetővé válik a kloridionok adszorpciójának mérése magnetittel borított acélfelületeken. A méréseknek köszönhetően újabb, pontosabb információkat szerezhetünk a korrózió mechanizmusáról, ajánlásokat tehetünk rendszer specifikusan az optimális műveleti paraméterekre, melyek mellett a kloridionok koncentrációja a felületen minimálisra csökkenthető.

FÓNAGY ORSOLYA

Környezetmérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
Szabóné dr. Bárdos Erzsébet
egyetemi adjunktus, PE MK*

Benzolszulfonsav mineralizációja nagyhatékonyságú oxidációs eljárások kombinálásával

A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közé tartozó heterogén fotokatalízissel a szerves anyagok széles köre lebontható ártalmatlan vagy kevésbé környezetterhelő egyszerű szerves anyagokra. Ahhoz, hogy a módszer a gyakorlati életben felmerülő problémák megoldására is alkalmas legyen, növelni kell a hatásfokát. Egyik lehetséges megoldás, hogy más eljárásokkal, pl. az ózonizálással kombinálva alkalmazzuk.

Részletesen tanulmányoztam egy anionos felületaktív anyag, a benzolszulfonsav mineralizációját különböző körülmények között. Kísérleteimet $2,5 \text{ dm}^3$ hasznos térfogatú fotokémiai reaktorban hajtottam végre. Sugárforrásként 40 W-os fénycsövet, fotokatalizátorként Degussa P25 titán-dioxidot alkalmaztam. A fotokémiai bontás során bekövetkező változásokat a reakcióelegy pH-jának, szerves széntartalmának mérésével, valamint fényelnyelési és emissziós színeképek felvételével követtem nyomon. A fotokémiai és termikus reakciók során keletkező különböző köztitermékek koncentrációját HPLC analízissel határoztuk meg.

Megállapítottam, hogy a heterogén fotokatalízis és az ózonizálás együttes alkalmazásakor szinergikus hatás lép fel, azaz kombinációjuk bontási hatékonysága jelentősen meghaladja egyedi hatékonyságaik összegét. Szimultán alkalmazásuk előnyös megoldásokat kínál a szennyvíztisztításban.

A benzolszulfonsav szulfocsoportjából aerob körülmények között oxidálódva szulfáttá képződik, koncentráció változását ionkromatográfiás analízissel követtük nyomon. Az eredmények valószínűsítik, hogy a felületaktív anyag degradációjakor az első lépés a OH támadása, a deszulfonálódás ezután következik.

A folyadékfázis pH-ja szabályozza az oldott, különböző mértékben protonált részecskék koncentrációját és a félvezető felületi töltését. E két tényező együttesen befolyásolja az adszorpciós egyensúlyi folyamatokat, amelyek a szubsztrátum elsődleges fotokémiai reakciójának sebességét, és ennek következtében a teljes mineralizáció hatékonyságát is meghatározzák. Ezt figyelembe véve részletesen tanulmányoztam a modellvegyület fotodegradációját különböző pH-jú reakcióelegyekben levegő/ TiO_2 /UV és O_3 / TiO_2 /UV eljárások során. Megállapítottam, hogy a két módszer optimális pH-ja közel azonos.

FÖLDESI MARCELLA

Környezettan

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezetők:**Mika László Tamás**egyetemi docens, BME VBK**Tukacs József Márk**PhD-hallgató, ELTE TTK*

Fluoros ruténium tartalmú katalizátorok előállítása és alkalmazása transzfer-hidrogénezési reakciókban

Mindennapjaink pazarló és környezetszennyező életvitelét a vegyipar teljes mértékben, esetenként túlzottan kiszolgálja. A zöldkémia egyik alapvető célkitűzése olyan technológiák megteremtése, melyek hosszú távon a lehető leggazdaságosabb keretek között mennek végbe, ezzel csökkentve közvetlen és közvetett környezetkárosító hatásukat. Ígéretes anyag a gamma-valerolakton¹ (GVL), mivel természetes eredetű biomasszából – nem ehető szénhidrátokból – könnyen előállítható. Előnyös fizikai és kémiai tulajdonságai miatt, mint fenntartható folyadék,² szerves platform molekulaként,³ oldószerként, oktánszám növelőként és üzemanyagként egyaránt alkalmazható.

Dolgozatom középpontjában a GVL, mint potenciális vegyipari alapanyag, és lehetséges gazdaságos előállítása áll. Jelen esetben a levulinsavat kétfázisú transzfer-hidrogénezéssel alakítottam át GVL-lé, melynek során egy ismert ruténium tartalmú komplex – $\{[2,5\text{-Ph}_2\text{-3,4-(p-MePh)}_2(\eta^5\text{-C}_4\text{CO})]_2\text{H}\}\text{Ru}_2(\text{CO})_4(\mu\text{-H})^4$ – perfluorozott változatát alkalmaztam katalizátorként, hidrogén donorként pedig hangyasavat használtam a megszokott molekuláris hidrogén helyett. Ezzel a módszerrel enyhébb reakciókörülmények között, kockázatmentesebben viszonyok állnak fent. Az eljárás jelentősége mindemellett abban nyilvánul meg, hogy a létrehozott fluoros kétfázisú rendszer⁵ (FBS) biztosítja a reagensek és a termék viszonylag egyszerű és hatékony elválasztását, így módon a katalizátor újfent alkalmazható, melléktermék keletkezésével pedig – a víz mellett – nem kell számolni. Munkám során a prekursor előállítása és alkalmazása mellett, a katalizátor aktivitását is vizsgáltam transzfer-hidrogénezési reakciókban.

¹ I. T. Horváth, 10th Annual Green Chemistry & Engineering Conference, Washington, DC, July 26–30, 2006, abstract number 27.

² I. T. Horváth, H. Mehdi, V. Fábos, L. Boda, L. T. Mika, Green Chem., 2008,10, 238–242.

³ Bond, J. Q. - Alonso, D. M. - Wang, D. - West, R. M. - Dumesic, J. A., Science, 2010, 327, pp. 1110.

⁴ Fábos V., Doktori értekezés, ELTE, 2009.

⁵ Rábai J., MTA Doktori értekezés tézise, 2010, 13.

FÖLDESI TAMÁS

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

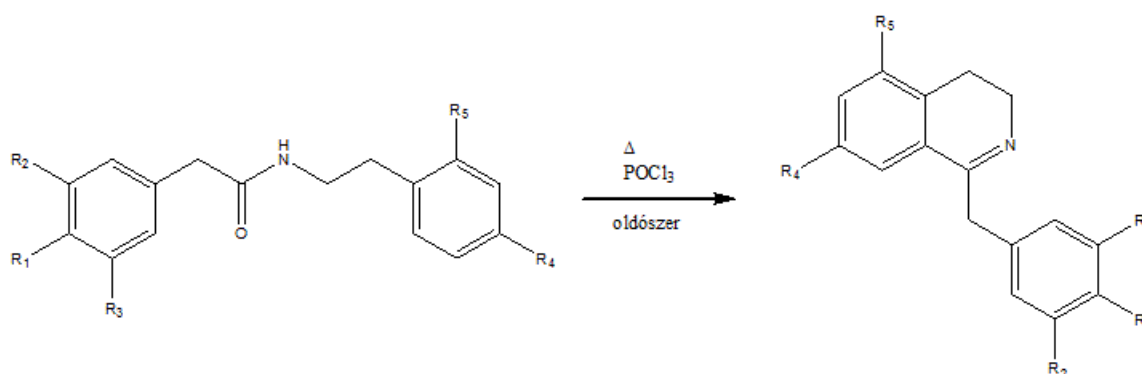
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK**Dr. Milen Máttyás**kutató-fejlesztő vegyész, tiszteletbeli oktató, Egis Gyógyszergyár Nyrt.**Dr. Grün Alajos**egyetemi adjunktus, BME VBK***Amidok előállítása és a Bischler-Napieralski gyűrűzárás megvalósítása
mikrohullámú körülmények között**

Számos polimer, peptid, természetes vegyület és gyógyszer tartalmaz amidkötést. Jól ismert a savakból és aminokból történő amidképzés. Munkánk során fenilecetsav és feniletil-amin, ill. ezek helyettesített származékaiknak reakcióját vizsgáltuk oldószermentes reakciókban mikrohullámú körülmények között.

Mikrohullámú körülmények között a savak és aminok környezetbarát és gyors reakciója hatékonyan szolgáltatja az amidokat, köztük több az irodalomban eddig le nem írt származékot.

Az izokinolin-származékok előállítására a Bischler-Napieralski gyűrűzárást alkalmazzák, melyet leggyakrabban foszforoxi-kloriddal valósítanak meg.



Munkánk további célja, hogy ezt a zöldkémiai szempontból rossz reagenst a MW besugárzás és valamilyen, kevésbé ártalmas katalizátor segítségével kiváltsuk. Eddigi munkánk során a polifoszorsavval értünk el számottevő eredményeket.

VARGA DÁNIEL

Vegyészmérnök

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Székely Edit
egyetemi docens, BME VBK*

Cisz-permetrinsav diasztereomer sóképzésen alapuló reszolválása szuperkritikus szén-dioxidban

Racém vegyületek enantiomerjeinek elválasztására hatékony és környezetkímélő eljárás a szuperkritikus szén-dioxidot (scCO₂) oldószerként használó extrakciós reszolválás (SFE-R). Ekkor a reszolváló szert egy megfelelő oldószerben feloldják, és a módosított Pope–Peachy módszer szerint félekvivalens mennyiségben adják a racém anyaghoz. A jó reszolváló szer a vákuumbepárlás során szelektíven reagál az egyik enantiomerrel. Az oldószer elpárologtatása után visszamaradó szilárd minta kerül az extraktorba. A szén-dioxid az extrakció során az elreagálatlan enantiomert kioldja és a diasztereomer só a reaktorban visszamarad.

A cisz-permetrinsav (CPS) 2-benzilamino-1-butanollal (BAB) a diasztereomer só kristályosításával szerves oldószerben hatékonyan reszolválható. Az SFE-R módszerrel végzett korábbi CPS reszolválási kísérletek azt mutatták, hogy a CPS szuperkritikus extrakciós technikával (R)-feniletilaminnal (FEA) reszolválható, ezzel a technikával azonban BAB-bal nem értek el számottevő enantiomer megkülönböztetést.

TDK munkám során kísérleteimet CPS-BAB ill. CPS-FEA rendszereken végeztem állandó nyomáson és hőmérsékleten egy nagynyomású kevert reaktorban. Feladatom volt annak vizsgálata, hogy az SFE-R módszernél a hagyományosan alkalmazott vákuumbepárlásos minta előkészítéssel, illetve ennek a lépésnek az elhagyásával (a reszolváló szert és a CPS-t közvetlenül a reaktorba mérve be) milyen időbeli lefutást látunk. A kiértékelés során az enantiomer tisztaság (ee) értékek meghatározására királis gázkromatográfias elválasztást használtam.

A vizsgált reakcióidő-tartományban (1–170 óra) FEA használatakor a vákuumbepárlással készült minták esetében látunk hatékony elválasztást (raffinátumban 83%, 44 óránál kevesebb reakcióidőnél), míg mintaelőkészítés nélkül hosszú idő után is igen csekély a reszolválás. Az elválasztás megvalósulásakor mért ee értékek azonban időben gyakorlatilag nem változnak, egy hosszabb lefutású kísérlet szerint még 170 óra elteltével is 25%-os enantiomer tisztaság a jellemző a szén-dioxid fázisban. BAB reszolváló szert használva, az extraktumban - adott nyomáson és hőmérsékleten – a legnagyobb enantiomer tisztaságot az oldószeres mintaelőkészítés alkalmazásával érhetjük el, a raffinátum enantiomer tisztasága 90% 20 óra elteltével. Habár CPS-BAB rendszer esetén a reaktorban megvalósított diasztereomer sóképzés során is létrejön elválasztás, az egyensúly beálltat később érjük el, illetve az egyensúlyban mérhető ee értékek valamivel alacsonyabbak, mint az atmoszférikus mintaelőkészítés módszerét alkalmazó reszolválási reakció során.

LUDÁNYI ANDRÁS

Vegyészmérnök

MSc, 3. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

Konzulensek:
Dr. Hancsók Jenő
egyetemi tanár, PE MK
Baladincz Péter
PhD hallgató, PE MK

Hulladék zsiradékok motorhajtóanyag célú hidrogénezése

Napjainkban a mobilitás biztosítása az egyik legfontosabb célunk, hiszen ez gazdaságaink mozgatórugója. A XX. században ezt a célt alapvetően fosszilis eredetű motorhajtóanyagok előállításával és alkalmazásával érték el. Ezen termékek növekvő keresletével párhuzamban a nyersanyagkínálat csökkenést mutat. Ezért a fejlett és fejlődő államokban egyaránt kutatásokat végeznek, hogy csökkentsék a kőolajtól mint nyersanyagtól való függőségüket. A legújabb környezetvédelmi direktívák és szigorodó szabványok figyelembevételével mellett az alternatív motorhajtóanyagok kifejlesztése és alkalmazása az egyik megoldás a hagyományos motorhajtóanyag-igény egy részének kiváltására. Az ehhez tartozó kutatások esetén mindig meg kell vizsgálni a gazdaságosságot és a nyersanyag megfelelő rendelkezésre állását.

Az alternatív motorhajtóanyagok közé tartoznak a hulladék növényi olajokból (pl. használt sütőolajból), illetve állati eredetű zsiradékokból (pl. vágóhídi hulladék zsiradékból) előállítható bio-motorhajtóanyagok is. Ezen alapanyagok heterogénkatalitikus hidrogénezésével és oxigéneltávolításával előállított, gázolajforráspont-tartományba eső normál- és izoparaffinok elegyét biogázolajnak nevezzük. A triglicerid-tartalmú hulladékokból előállított kiváló minőségű, második generációs biomotorhajtóanyag hatékony keverőkomponens lehet a motorhajtóanyagokra előírt egyre növekvő bio-tartalom teljesítéséhez és fontos jövedéki adó forrás az állami költségvetés számára is. Ráadásul a biogázolaj számos pozitív tulajdonsággal rendelkezik a jelenleg elterjedt biodízellel (növényolaj-zsír-sav-metilészterrel) szemben.

Kísérleti munkám során alternatív komponenst (biogázolajat) tartalmazó gázolajok előállítási lehetőségét vizsgáltam. Ennek során tanulmányoztam gázolajpárlat és hulladék zsiradék elegyek katalitikus hidrogénezését, illetve annak összefüggéseit. A rendelkezésemre bocsátott katalizátor alkalmazása mellett, a műveleti paraméterek (hőmérséklet: 300-380°C, nyomás: 40-80 bar, folyadékterhelés: 1,0 h⁻¹, hidrogén/alapanyag arány: 600 Nm³/m³) termékhozamra és termékminőségre gyakorolt hatását vizsgáltam. A kapott eredmények alapján meghatároztam a kedvező technológiai paramétereket.

RÉTFALVI NÓRA

Környezettan
BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Mika László Tamás
egyetemi docens, BME VBK
Dibó Gábor
egyetemi docens, ELTE TTK

Szerves vegyipari alapanyagok cukorcirok alapú előállítás

Napjainkban energiaszükségletünk túlnyomó részét nem megújuló, fosszilis energiaforrásokból fedezzük. A vegyipar különösen nagy mennyiségű kőolaj-felhasználása sem a készletek fogyása és azok egyre nehezebb elérhetősége, sem környezeti szempontból nem fenntartható. A metanol-, illetve hidrogéngazdaság lehetőségei mellett kiemelkedően fontos kutatási terület a biomassa – mint alternatív energia- és nyersanyagforrás – vegyiparban történő felhasználási módjainak kifejlesztése.

A gamma-valerolakton (GVL), mint lehetséges fenntartható folyadék, fizikai és kémiai tulajdonságai lehetővé teszik mind energiaforrásként, mind platform molekulaként történő alkalmazását. Sokoldalú felhasználása – miszerint egyaránt alkalmazható üzemanyag-adalékként, gyújtófolyadékként, vegyipari alapanyagként és ionos folyadékként is – bizonyítja, hogy nem elképzelhetetlen a „GVL-gazdaság” megvalósítása. A GVL szintézisének legígéretesebb alapanyaga a levulinsav, amelyből katalitikus hidrogénezéssel könnyen előállítható. A levulinsav maga savkatalizált dehidratálással jó hozammal kinyerhető mind növényi-, mind állati eredetű szénhidrátokból.

Munkám célja, hogy ezzel az eljárással egy valódi, természetes anyagból állítsak elő levulinsavat. Ilyen lehetséges alapanyag a cukorcirok (*Sorghum saccharatum*), amely az egyik legmagasabb zöldhozamú és -cukortartalmú, Magyarországon is elterjedt igénytelen mezőgazdasági növény. Munkám során a növény szárából préseléssel és membránszűréssel előállított cukorciroklé mintákat használtam fel, amikor is mikrohullámú reaktorban, kénsav, illetve Lewis-sav katalizátor segítségével állítottam elő levulinsavat. A kísérletek során a reakció hőmérséklet-, idő- és savkoncentráció-optimalizálását végeztem, megtalálva ezzel a vizsgált tartományon belül a legnagyobb levulinsavhozam eléréséhez szükséges körülményeket. A hagyományos kénsav katalizátor mellett sikerrel vizsgáltam a levulinsav előállítását egy ritkábban alkalmazott, lantanida alapú Lewis-sav katalizátor jelenlétében is.

Dolgozatomban a kísérletek során elért levulinsavhozamokat és a vizsgált reakcióparaméterek hatását mutatom be a két különböző reakcióút során. Munkám eredményeként elmondható, hogy a cukorcirok megfelelő alapanyag lehet a levulinsav, és ezáltal a GVL biomassa alapú, fenntartható módon történő előállításában. Alacsony vízigénye révén termesztése különösen előnyös hazánkban, ahol a klímaváltozás következtében egyre szárazabb nyaraknak nézünk elébe, komplex felhasználásának lehetősége pedig még alkalmasabbá teszi a nagyobb mértékű termesztésre.

TÖRÖK JUDIT

Környezetmérnök

BSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:**Dr. Halász János**címzetes egyetemi tanár, SZTE TTIK*

Mg, Al, Cu és Ni tartalmú keverénoxid katalizátorok alkalmazása hidrodeklórozási reakciókban

Az iparban nagy mennyiségben gyártott és felhasznált halogénezett szénhidrogének számos kedvező kémiai és fizikai tulajdonsággal rendelkeznek, ezek között szerepel a nagyfokú stabilitás. A klórozott szénhidrogének sokrétű felhasználása napjainkban még nem teszi lehetővé, hogy lemondjunk alkalmazásukról. A felhasználás szempontjából előnyös tulajdonságaik viszont hulladékkezeléskor problémát jelentenek. Fontos feladat tehát az egyszerű és gazdaságos ártalmatlanítási eljárások kidolgozása.

Környezetbarát és gazdaságilag is hatásos eljárásnak mutatkozik a katalitikus hidrodeklórozás (HDC) a klórozott szerves vegyületek ártalmatlanításában. A HDC reakciók a szervesetlen klór vegyületek képződése miatt kedvezményezettek, amik azonban károsítják és ezáltal dezaktiválják a katalizátorokat, viszont az ipar számára hasznos szénhidrogéneket nyerhetünk vissza.

Munkám célja Cu és Ni tartalmú katalizátorok előállítása és HDC reakciókban való összehasonlítása volt, illetve olyan eljárás keresése, amellyel a deklórozó folyamatok során dezaktiválódott katalizátorok olcsón regenerálhatók.

Munkám során a HDC-nál alkalmazható katalizátorok közül a réteges kettős hidroxidból (LDH) előállítható keverénoxid katalizátorokat teszteltem. Az LDH-k önmagukban is, de leginkább kalcinálás után számos kedvező tulajdonsággal rendelkeznek. Olcsón előállíthatóak, nem tartalmaznak nemesfémeket, nagy fajlagos felülettel és bázikus karakterrel rendelkeznek.

Kísérleti munkám során különböző Mg, Al, Cu és Ni tartalmú, háromkomponensű keverénoxid katalizátorokat állítottam elő, amelyeket triklóretilén, mint modellvegyület HDC reakcióiban teszteltem. A keletkezett termékek analízise gázkromatográfiával történt. A katalizátorok kristályszerkezetét reakciók előtt és azokat követően röntgendiffraktometriás módszerrel határoztam meg. A klór anyagmérték meghatározásához AOX (Adsorbable Organically Bound Halogens) méréseket végeztem, amelyeket gázkromatográfiás mérési eredményekkel egészítettem ki.

Az alkalmazott katalizátorok aktívnak bizonyultak a triklóretilén bontásában. Magas konverzió mellett nagy hozammal jelent meg az értékes terméként etilén illetve vinil-klorid. A katalizátorok dezaktiválódtak a bontási reakciók során, viszont hidratációval részlegesen regenerálhatónak bizonyultak.

LŐRINCZ LÁSZLÓ

vegyészmérnök Bsc

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Közelné dr. Székely Edit
egyetemi docens, BME VBK*

Diasztereomersók kristályosítása szuperkritikus antiszolvens technológiával

A vegyipar egyre több területén szükségesek az optikailag aktív vegyületek. Ezért nagy jelentősége van azoknak a technológiáknak, amelyekkel gazdaságosan, nagy mennyiségben, környezetbarát módon lehet előállítani nagy enantiomer tisztaságú termékeket.

TDK munkám során különböző racém vegyületek resolválását vizsgáltam szuperkritikus antiszolvens technológiával (SAS). A módszer elvi alkalmazhatóságát eddig az irodalomban is összesen két cikkben mutatták be 1-1 mintapéldán, részletes vizsgálatok közlése nélkül. A kísérleti módszerem lényege: a racém elegy oldatához félekvivalens mennyiségben adtam a resolváló szert, amely az egyik enantiomerrel diasztereomer sót képezhet. Az oldatot nyomás álló készülékbe mértem, feltölttem szén-dioxiddal, amely az antiszolvens. A szén-dioxid az oldatba diffundált, ezáltal az oldószer oldóképessége lecsökkent, az elreagált enantiomer diasztereomer só formájában kivált. A teljes kiválás érdekében egy órán át kevertettem, majd állandó nyomáson és hőmérsékleten szén-dioxidot áramoltattam át. Ezzel kimostam az elreagálatlan enantiomert és az oldószert. Nyomásmentesítés után a diasztereomer sót szilárd formában nyertem ki. Az enantiomer tisztaságot királis gázkromatográfiával határoztam meg.

A vizsgált resolválási rendszerek közül a *cisz*-permetrinsav-2-(benzilamino)bután-1-ol (CPS-BAB), a *transz*-1,2-ciklohexándiol-1-borkősav(CHD-BS) és a *cisz*-krizantémsav-2-(benzilamino)bután-1-ol (CKS-BAB) rendszerek esetén metanolt alkalmazva nem tapasztaltam királis megkülönböztetést, a 150 bar nyomáson és 45 °C hőmérsékleten kikristályosodott diasztereomer sók gyakorlatilag racémak voltak. A *cisz*-permetrinsav-(R)-1-(feniletil)amin (CPS-FEA) és *ibuprofén*-(R)-1-(feniletil)amin rendszerek esetében kevés diasztereomer képződött, azonban enantiomerfelesleg értékeik elérték a 80–90%-ot.

A CPS-FEA rendszer esetén részletesen vizsgáltam a nyomás hatását 200 bar és 100 bar között 45 °C-on. Az eredmények alapján a nyomásnak igen jelentős hatása van az enantiomertisztaságra és a termelésre is. Az enantiomer tisztaság 96%-tól egészen 0%-ig változik, 130 bar és 120 bar között igen éles változás figyelhető meg.

A IBU-FEA rendszer esetén 200-150-100 bar nyomáson mérve kisebb mértékű eltérés figyelhető meg, a diasztereomer só enantiomertisztasága 80-90% volt.

TDK dolgozatomban bemutatom, hogy a szuperkritikus antiszolvens kristályosítás resolválási rendszertől függően a körülmények megfelelő megválasztása esetén hatékony és szelektív enantiomerelválasztást tesz lehetővé.

Kolloid-, felület-, és makromolekuláris kémia tagozat

BERKI PÉTER

Vegyész MSc

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Témavezetők:**Dr. Hernádi Klára**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Németh Zoltán**doktorjelölt, SZTE TTIK*

In₂O₃-MWCNT nanokompozitok előállítása és vizsgálata

Napjainkban a szén nanocső alapú nanokompozitok felhasználási lehetőségei igen széleskörűen vizsgáltak. Munkám során In₂O₃-MWCNT nanokompozitokat állítottam elő egyszerű impregnálási módszer segítségével. Mivel a szakirodalomban számos eltérő adat található arra vonatkozóan, hogy az indium-oxid (In₂O₃) kristályok mekkora hőmérsékleten és milyen formában képződnek, így diákköri munkám egyik fő célja az volt, hogy tisztázzam, a hőkezelés miként hat az In₂O₃-kristályok kialakulására, és morfológiájára. Abból kiindulva, hogy a többfalú szén nanocsövek (MWCNT) 500°C-tól kezdenek el égni oxigén atmoszférában, azt a legalacsonyabb kalcinálási hőmérsékletet kerestem, amely még elegendően nagy ahhoz, hogy In₂O₃-MWCNT nanokompozit alakuljon ki a nanocsövek égése nélkül. Munkám során azt is vizsgáltam, hogy az előállítás során kapott nanokompozitok csupán mechanikai keverékek, vagy kémiai kapcsolat is kialakult az In₂O₃ és a MWCNT között.

A szén nanocsövek felületi borításának kialakításához indium-(III)-kloridot (InCl₃) használtam perkurzorként, és desztillált vizet oldószerként. Az előállítás során alkalmazott tömegarány 4:1 (In₂O₃:MWCNT) volt, a minták kalcinálását pedig különböző hőmérsékleteken végeztem el: 300°C, 350°C, és 400°C-on egyaránt. A kapott termékek vizsgálatához és jellemzéséhez röntgendiffraktometriát (XRD), Raman-mikroszkópiát, valamint transzmissziós- (TEM) és pásztázó elektronmikroszkópiát (SEM) használtam, továbbá egy energiadiszperzív röntgenanalízist (EDX) és termogravimetriás vizsgálatot is végeztem. Az átfogó elemzés érdekében InOCl- és In₂O₃-referenciamintákat is készítettem. A nanocsövek felületén kialakult szervesetlen réteg átlagos vastagságát, valamint a létrejött indium-oxid részecskék átlagos méretét a Scherrer-formula és az ImageJ-program segítségével állapítottam meg. Eredményeim azt mutatják, hogy a kalcinálás hőmérséklete nagymértékben befolyásolja az előállított nanokompozitok morfológiáját és kristályszerkezetét.

Az általam előállított szén nanocső alapú kompozitanyagok ígéretes jelöltek lehetnek, mint jövőbeli gáz-szenzorok illetve katalizátorok.

Kulcsszavak: többfalú szén nanocső, indium-oxid, indium-oxiklorid, hőkezelés

DABÓCZI MÁTYÁS

Vegyéssz mérnöki Szak

BSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulens:
Dr. Hórvölgyi Zoltán
egyetemi docens, BME VBK

Szabályozott hatóanyag-leadásra alkalmas pórusos szilika alapú modellrendszer fejlesztése

Kulcsszavak: vékonyréteg, kitozán, inkubálás, kapillaritás, kinetika

Hatóanyagok hordozóból való szabályozott, célzott kibocsátása igen nagy figyelemnek örvend és a gyógyszerkutatás területén egyre inkább kitüntetett szerepet kap. Pórusos szilika vékonyrétegek is alkalmasak lehetnek ilyen tulajdonságú rendszerek tervezésénél, köszönhetően biokompatibilitásuknak és nyílt pórusrendszerüknek, ami megfelelő lehet különböző hatóanyagok felvételére, tárolására és leadására.

Kutatásom célja az volt, hogy pórusos szilika vékonyréteg felhasználásával hatóanyag leadására alkalmas modellrendszert alkossak és fejlesszek. A vékonyréteget az alkalmazott modell hatóanyaggal való inkubálás, illetve a kiáramlás kinetikája szempontjából vizsgáltam. Olyan modellrendszer kialakítása volt a célom, melyben a hatóanyag kiáramlás polimer rétegek képzésével illetve ezek módosításával befolyásolható.

Munkám során a vékonyrétegek előállítására a mártásos („dip-coating”) módszert használtam, melynek előnye, hogy a rétegeképzési sebességgel egyszerűen befolyásolható a rétegvastagság, valamint egy könnyen hozzáférhető, költséghatékony módszer. Modellhatóanyag gyanánt, a pórusos rétegek inkubálására Rodamin 6G, kationos színezéket használtam.

A modellhatóanyag vékonyrétegekből való kiáramlását 7,3-as pH-jú foszfát-pufferben vizsgáltam. A hatóanyag-kiáramlás kinetikájának megismeréséhez párhuzamos minták segítségével vizsgáltam a kiáramlott anyag mennyiségét a kioldás idejének függvényében.

A kiáramlás sebességének módosítása céljából a pórusos szilika réteg felületére kitozán ecetsavas oldatából polimer vékonyréteget képeztem. A kitozán kationos biopolimer, aminek igen előnyös tulajdonságai közé tartozik, hogy biokompatibilis, biodegradábilis, duzzadása illetve oldódása pH-ra érzékeny, térhálósítható, valamint nem túl magasak az előállítási költségei. A kitozán réteget különböző polimerekkel módosítottam a modellhatóanyag-kiáramlás további befolyásolása érdekében.

A vizsgálatok alapján a modellrendszer rétegei jól szabályozható vastagságúnak bizonyultak. Megállapítottam, hogy a hatóanyag inkubálás során a kapilláris felszívás játszik döntő szerepet. A fejlesztett rendszer lehetőséget nyújt (a kb. 5 perc alatt) bejuttatott modellhatóanyag elnyújtott (24 óra alatt történő) leadására és ennek szabályozására további polimer bevonatokkal.

Tapasztalataim alapján a fejlesztett pórusos szilika alapú modellrendszer igen alkalmas lehet szabályozott hatóanyag-leadás területén való felhasználásra, így érdemes a modellrendszer és a vizsgálati módszerek további fejlesztésével foglalkozni.

DOBRÁDI ANITA

Környezettan

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:**Kiss Éva**egyetemi tanár, ELTE TTK*

Gyógyszerhordozó nanorészecskék előállítása és vizsgálata

A politejsav (PLA) és tejsav- glikolsav kopolimer (PLGA) alapú kolloidális gyógyszerhordozók jól alkalmazhatóak a programozott hatóanyag leadás és a célzott hatóanyagtranszport megvalósítására. Nano méretű részecskék célszerűen a nanoprecipitáció módszerével állíthatók elő. Az irodalomban számos ilyen nanorészecske előállításáról és különböző hatóanyagoknak ebbe való kapszulázásáról számoltak be.

Mivel sok paraméternek van hatása a képződő rendszer tulajdonságaira (hőmérséklet, fázisarány, oldószer minősége, oldószer elegy összetétele, kolloid stabilizáló szer minősége és mennyisége, különböző adalékanyagok, a keverés módja, a minta feldolgozása), eddig nem alakult ki egy áttekinthető kép arról, milyen módon állítható elő kívánt tulajdonságú rendszer.

A célunk az volt, hogy szisztematikusan vizsgáljuk meg néhány kiválasztott paraméter hatását a biodegradábilis nanorészecskék előállítására. Ezek a tényezők a PLA, PLGA polimer összetétele, a szerves oldószer minősége, a kolloid stabilizáló szer minősége.

Az előállított nanoszuszpenziók jellemzésére a lehetséges felhasználás szempontjából meghatározó jelentőségű tulajdonságokat vizsgáltunk. Ezek a méret és méreteloszlás, elektrolit oldatban való stabilitás, valamint a feldolgozás utáni rediszpergálhatóság.

A tanulmányozott paraméterek alapján egy kiválasztott rendszerrel hatóanyag kapszulázási vizsgálatokat is tervezünk. Ehhez egy modellvegyületet, a 4-amino-szalicilsavat (PAS) használtuk. A PAS régóta ismert tuberkulózis elleni szer, azonban a megfelelő hatás elérése érdekében mindaddig nagy dózisban kellett alkalmazni. Emiatt több, súlyos mellékhatás jelentkezett. Gyógyszerhordozó rendszer alkalmazásával ezek várhatóan mérsékelhetőek. A PAS különös jelentősége abban rejlik, hogy a korlátozott alkalmazásának köszönhetően hatásos az új, multirezisztens tuberkulózis törzsek ellen.

Meghatároztuk a hatóanyagot tartalmazó gyógyszerhordozó rendszer jellemző paramétereit, a kapszulázási hatékonyságot és a hatóanyagtartalmat. Emellett tanulmányoztuk a hatóanyag felszabadulás ütemét is.

ÉRSEK GÁBOR

Kémia

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Konzulensek:

Szabó Ákos

tudományos segédmunkatárs, MTA Természettudományi Kutatóközpont

Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK Kémia Intézet MTA Természettudományi Kutatóközpont

Polianilin tartalmú összefonódó térhálók előállítása és vizsgálata

Napjaink korszerű ipari termelésében és modern gyógyászatában egyre nagyobb a különleges tulajdonságokkal bíró anyagok szerepe. Ilyen anyag lehet például a poliizobutilén (PIB), poli(poli(etilén-oxid)-metakrilát)-ok (P(P(EO)₂MA)) [1] és a polianilin (PANI) [2].

Munkám során ezen három polimer felhasználásával szintetizáltam újszerű, tudomásom szerint eddig még nem leírt makromolekuláris szerkezeteket. Elsőként a poliizobutilént állítottam elő, majd a megfelelő funkcionálzás után a kapott polimert használtam fel a PIB és P((EO)₂MA) alapú amfifil kotérhálók szintéziséhez. Ennek során makromonomeres módszert alkalmaztam, azaz az előre elkészített telekelikus, hidrofób PIB-MA makromonomert kopolimerizáltam a hidrofil szegmenst alkotó di(etilén-oxid)metil-éter-metakriláttal.

Az elkészült gélekből duzzasztásos módszerrel polianilin tartalmú szemi-interpenetráló kotérhálókat állítottam elő [2]. A kapott géleket – melyek az alábbi ábrán láthatóak – kisszögű röntgenszórással, ciklikus voltammetriával, pásztázó elektronmikroszkóppal, UV-VIS spektroszkópiával és elemanalízissel vizsgáltam.



[1] Szabó, Á, Iván, B, *Studia Universitatis Babes-Bolyai, Chemia*, 2009, LIV, Sp.Iss. 2, 123-134

[2] Molina, M. A. et al., *Eur Polym J.*, 47, 2011, 1977-1984

FÜLÖP GERGŐ

Biomérnöki szak

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Deák András**tudományos munkatárs, MTA Természettudományi Kutatóközpont - Műszaki Fizikai és
Anyagtudományi Intézet (MTA TTK - MFA)*

Arany nanostruktúrák létrehozása irányított önszerveződéssel

A nanostrukturált vékonyrétegek speciális optikai és felületi tulajdonságaiknak köszönhetően komoly érdeklődésre tartanak számot az energiakonverzió (napelemek, fényforrások, katalízis), illetve biológiához közeli alkalmazások terén (mikrofluidika, szenzorika). Nemesfémekből (tipikusan arany, ezüst) létrehozott, nanoléptékben megfelelő geometriával rendelkező struktúrákon látható fénnel kölcsönhatásba lépve ún. plazmon rezonancia jelenség alakul ki. A rezonancia jelenség következtében kialakuló rendkívül nagy elektromos térerősség számos új alkalmazási lehetőséget rejt magában. Segítségével nagyobb hatásfokú napelemek, fényforrások, vagy katalitikus eszközök építhetők, valamint lehetséges biomolekulák érzékeny detektálása.

Kísérleteim során speciális felületi geometriával rendelkező nanostruktúrák létrehozása volt a cél alulról történő építkezéssel, az irányított önszerveződésben rejlő lehetőségek kiaknázásával. Arra kerestem a választ, hogy kolloidkémiai megfontolások alapján mennyire hatékonyan lehet komplex rendszerek szerkezetét, és ezáltal tulajdonságait befolyásolni. Kísérleteimben nanorészecskék szilárd hordozón létrehozott monorétegeiből indultam ki. Ezeket a monorétegeket, valamint nedveskémiai módszereket (elektrokémia, kapilláris litográfia) felhasználva állítottam elő arany-nanostruktúrákat makroszkópikus felületeken. Az így előállított szerkezeteket optikai spektroszkópia, atom erő mikroszkópia, pásztázó elektronmikroszkópia segítségével vizsgáltam és minősítettem.

HEGYESI NÓRA

Vegyéssz mérnöki szak

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Szilágyi András
egyetemi adjunktus, BME VBK*

Poliaszparaginsav alapú gélek valódi térhálósítási fokának meghatározása

Az elmúlt években egyre szélesebb körben kezdődött meg a polimer alapú hidrogélek kutatása. A megfelelő polimerváz megválasztásával környezeti paraméterekre (pl.: pH, hőmérséklet) érzékeny biokompatibilis rendszerek alakíthatóak ki, melyek külső hatásra egy előre programozott módon változtatják fizikai és kémiai tulajdonságaikat, leggyakrabban a térfogatukat. A polimer gélek tulajdonságait a felépítő polimer molekulák minősége, molekulatömege, valamint a polimer molekulák közötti kialakuló fizikai és kémiai kölcsönhatások határozzák meg. A fizikai kölcsönhatások száma statisztikusan állandó, de a polimer molekulák folyamatos mozgásának köszönhetően helyük állandóan változik. Ezzel szemben a térhálóban található kovalens kötéssel kialakított kémiai térhálópontok helye állandó. Kutatómunkám során diaminokkal utólagosan térhálósított poliaszparaginsav hidrogélek kémiai térhálópont-sűrűségének meghatározására dolgoztam ki módszert [1]. Meghatároztam a gélesedés alatt a polimerrel nem reagáló, illetve csak egyik aminocsoportjával kapcsolódó térhálósító molekulák számát. Ehhez a primer aminocsoportokkal szelektíven reagáló 2,4,6-trinitrobenzol-szulfonsavat (TNBS) használtam. A TNBS enyhén lúgos közegben, gyors reakcióban SN₂Ar mechanizmus szerint reagál a primer aminocsoportot tartalmazó molekulákkal, az így kapott sárgaszínű reakciótermék UV-VIS spektroszkópia segítségével mérhető. A származékképzéssel párhuzamosan, az enyhén lúgos közegben jóval lassabban megtörténik a TNBS hidrolízise is. Ez gyors mérések esetén nem zavarja az analízist [2].

A gélesedés során nem reagáló térhálósító molekulák mennyiségét a gélből kimosva direkt módon mértem. A térhálóhoz kapcsolódó, de nem keresztkötő molekulák mennyiségét visszaméréssel határoztam meg. A mellékreakció kiküszöbölésének érdekében a reakcióközeg lecserélésével továbbfejlesztettem a mérési módszert, mely alkalmassá teszi a TNBS t lassabb, akár heterogén fázisú mérések esetén is.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást támogatta az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA PD76401) és az NKTH – A*STAR (Szingapúr) - Kétoldalú Tét Pályázat (BIOSPONA). A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

Referenciák:

[1] Gyenes T, Torma V, Gyarmati B, Zrinyi M. Synthesis and swelling properties of novel pH-sensitive poly(aspartic acid) gels. Acta Biomaterialia 2008;4:733-44.

[2] Kiranas ER, Tzouwara Karayanni SM, Karayannis MI. The reaction of glutamic acid and trinitrobenzenesulfonic acid-kinetic study and analytical application. Talanta 1997;44:1113-21.

HOLCZER ESZTER

vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Fürjes Péter**tudományos főmunkatárs, MTA Természettudományi Kutatóközpont Műszaki Fizikai és
Anyagtudományi Intézet*

PDMS alapú mikrofluidikai rendszerek felületmódosítása tenzidekkel

A PDMS (poly-dimetil-sziloxán) napjainkban elterjedten használt szilícium bázisú polimer, mely könnyen kezelhető, rugalmas, víztiszta, kémiaileg és biológiailag inert, így széleskörűen alkalmazható bioanalitikai rendszerek szerkezeti anyagaként. Kémiai összetétele lehetővé teszi megbízható, szivárgásmentes kötését mind önmagához, mind más Si alapú vegyületekből előállított anyagokhoz, így mikrofluidikai csatornarendszerek kialakítására is használható. Hátránya elsősorban felületének hidrofób jellege, mely jelentősen kihat a csatornarendszerekben elérhető áramlási sebességre. Továbbá, képes adszorbeálni felületén biomolekulákat is, így azok mintaoldatbeli koncentrációja megváltozhat a transzport során a fluidikai rendszerben, mielőtt az elérné az eszköz aktív, érzékelő területét.

Jelen munka célja olyan PDMS anyagösszetétel meghatározása, mely mind a nedvesítési, mind a fehérje kitapadási tulajdonságokat képes kedvezően befolyásolni. A PDMS térhálósodási reakcióját megelőzően, eltérő mennyiségben TX-100 típusú felületaktív anyagot adagoltunk a mintákhoz, majd a vizsgálatok során elemeztük a tenzid hatását a térhálósodási reakcióra, valamint a térhálósodott polimer felületi minőségére. A különböző komponensű PDMS keverékekből ún. gyors prototipizálási technikával mikrocsonna rendszereket alakítottunk ki, melyekben a hidrodinamikai tulajdonságokat, és a nem-specifikus fehérje bekötődést fluoreszcensen jelölt HSA (Human Serum Albumine) alkalmazásával vizsgáltuk.

SAMU GERGELY FERENC

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Visy Csaba

egyetemi tanár, SZTE TTIK

Endrődi Balázs

PhD hallgató, SZTE TTIK

Termoelektromos tulajdonságú szénnanocsőszőnyeg/vezető polimer kompozit előállítása és jellemzése

A termoelektromos anyagokban hőmérséklet gradiens hatására potenciálkülönbség indukálódik (Seebeck-effektus), illetve ugyanezen anyagokban feszültségkülönbség esetén hőmérséklet gradiens alakul ki (Peltier-effektus). Ezen sajátásaik miatt a termoelektromos anyagok mind hűtésre/fűtésre (Peltier-elem), mind pedig energiatermelésre alkalmasak.

Napjainkra a termoelektromos hatékonyság növelésére két irányvonal alakult ki. Az első termoelektromos struktúrák kialakításával, míg a második új termoelektromos anyagok fejlesztésével próbálja elérni célját. Ilyen kutatások alapanyagaként a vezető polimerek ideális jelölteknek bizonyultak, hiszen ígéretes tulajdonságokkal (mind termoelektromos mind pedig fizikai) rendelkező anyagok. Seebeck-koefficiensük nagy (mV/K nagyságrendű is lehet), hővezetési tényezőjük pedig kedvezően kicsi. Alkalmazásukat csupán fajlagos vezetékük korlátozza. Ezen tulajdonságuk akár adalékolással (ez másik két tulajdonságukat is befolyásolja), akár nanokompozit anyagok kialakításával növelhető.

Munkánk során poli(3-hexil-tiofén) (P3HT) poli(3,4-etilén-dioxi-tiofén) (PEDOT) és egy kombinált poli(3,4-etilén-dioxi-tiofén)/nátrium-polisztirol-szulfonát (PEDOT:NaPSS) elektrokémiai leválasztását valósítottuk meg nagyfokú rendezettség mutató többfalú szénnanocső (MWCNT) szőnyegekbe. A különböző módszerekkel történő leválasztás után a vezető polimer/MWCNT nanokompozitok elektrokémiai jellemzését ciklikus voltammetriával végeztük. A kompozitok szerkezetét Páztázó Elektron Mikroszkópia, valamint Raman Spektroszkópia segítségével vizsgáltuk. Eredményeink bizonyítják, hogy a polimer leválása az MWCNT szőnyegek belsejébe, magukra a szálakra történt. A vezető polimer/MWCNT nanokompozitok termoelektromos tulajdonságát Seebeck-koefficiensük és a vezetékük alapján meghatároztuk.

SOLTI KATALIN

Gyógyszervegyész-mérnöki Mesterszak
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Szilágyi András Ferenc
egyetemi adjunktus, BME VBK*

Poliaszparaginsav-l-poli(N-izopropilakrilamid) kotérhálós hidrogél szintézise és tulajdonságainak vizsgálata

A polimerek és a polimer gélek szerepe felértékelődött a gyógyszer-technológiában, mivel a belőlük készült hordozó mátrixokkal biztosítani lehet a hatóanyag-molekulák jól definiált kinetikával lejátszódó kioldódását. Az emberi testben a két legmeghatározóbb fizikai-kémiai paraméter a hőmérséklet és a pH, ezért kerültek a fejlesztések homlokterébe az olyan multireszponzív polimer gélek, melyek tulajdonságaik ugrásszerű és jelentős megváltoztatásával válaszolnak az említett környezeti paraméterek változására.

A kutatómunka célja egy, az emberi szervezettel teljes mértékben biokompatibilis, a környezetet és a szervezetet nem terhelő, toxikus bomlástermékeket nem generáló, a környezeti paraméterek változtatására érzékeny kotérháló előállítás volt, mely alkalmazható hatóanyag-leadó mátrixként. Olyan rendszereket állítottam elő, melyekben a testhőmérséklet közeli fázisátalakulással rendelkező hőmérsékletérzékeny polimer, a poli(N-izopropilakrilamid) [PNIPAAm], illetve a pH-érzékeny poliaszparaginsav [PASP] tulajdonságai ötvöződnek.

A kotérháló szintézise vizes közegben zajlott, ehhez elsőként a poliszukcinimid [PSI] alap polimer vízoldhatóságát oldottam meg, a főlánc etanolammal történő kémiai módosításával. Allil-amin oldalcsoportok beépítésével biztosítottam, hogy a PSI részt vegyen az N-izopropilakrilamid gyökös mechanizmusú polimerizációjában, kialakítva ezzel egy multireszponzív hidrogél kotérhálót. A PASP-l-PNIPAAm kotérhálót végül lúgos hidrolízis után kaptam meg.

A hidrogélek szerkezetét NMR- és FTIR mérésekkel vizsgáltam. SEM felvételekkel igazoltam, hogy a hidrogélek morfológiája megváltozik a környezeti pH és a hőmérséklet módosításának hatására. Egyensúlyi duzzadásfok méréseket végeztem a pH-, illetve a hőmérsékletváltozás hatásának bemutatására.

A gélből történő kioldódást diklofenák-nátrium, nem szteroid típusú gyulladáscsökkentő felhasználásával tanulmányoztam. A hidrogél kotérháló alkalmazásakor a hatóanyag-leadás elnyújtható, így a mellékhatások veszélye csökkenthető.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást támogatta az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA PD76401) és az NKTH – A*STAR (Szingapúr) - Kétoldalú TÉT Pályázat (BIOSPONA). A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

Referenciák:

- [1]. Ward M. A.; Georgiou T. K.: *Polymers* 3 1215-1242 (2011)
[2]. Erdodi G.; Kennedy J. P.: *Progress in Polymer Science* 31 1-18 (2006)

SZILÁGYI BARNABÁS ÁRON

Gyógyszervegyész-mérnök MSc
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Szilágyi András Ferenc
egyetemi adjunktus, BME VBK*

Enzimérzékeny aminosav alapú hidrogélek szintézise és vizsgálata

Az értékes terápiás szerek felhasználásának hatékonysága jelentősen növelhető az úgynevezett „szabályozott és célzott hatóanyag-leadású” készítmények alkalmazásával. Ezen rendszereknél a hatóanyagok pontos hely és idő szerinti célba juttatása, a szervezetben megtalálható környezeti paraméterek megváltozásával indukálható. Humánbiológiai alkalmazás esetén, az alkalmazott készítmények rezponzív tulajdonságai mellett – pH- és hőmérsékletérzékenység, illetve humán enzimekre való válaszadó képesség – elengedhetetlen, hogy biokompatibilisek és biológiailag lebonthatók legyenek. Ezen követelmények miatt tűnnek ígéretesnek az aminosavakból felépülő polimer gélek szintézise és alkalmazása, hatóanyag-hordozó, illetve -leadó rendszerként.

Kutatómunkám célja egy olyan kizárólag aminosavakból felépülő hidrogél előállítás, mely enzim specifikus hasítási hellyel rendelkező tetrapeptideket tartalmaz keresztkötőként. A tetrapeptid helyes megválasztásával elérhető, hogy a keresztkötések adott enzim hatására hasadjanak, mellyel szabályozható a hatóanyag kiszabadulásának helye a szervezetben.

Munkám során tripszin specifikus hasítási hellyel rendelkező keresztkötő molekulákat állítottam elő oldatfázisú peptidszintézissel. Preparációs eljárást dolgoztam ki poliszukcinimid (PSI) utólagos térhálósítására a tetrapeptid keresztkötő molekulák felhasználásával. Optimalizáltam a gélesedést befolyásoló legfontosabb paramétereket (keresztkötő- és polimerkoncentráció, hőmérséklet, katalizátorok). Poliaszparaginsav géleket a PSI gélek lúgos hidrolízisével állítottam elő. Kísérletekkel igazoltam, hogy a szintetizált gél specifikusan bomlik tripszin hatására. Citotoxicitás-vizsgálatok eredményei alapján a gél nem toxikus, így a kizárólag aminosavakból felépülő hidrogél alkalmas lehet szabályozott hatóanyag-leadásra.

Köszönetnyilvánítás: A kutatást támogatta az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA PD76401) és az NKTH – A*STAR (Szingapúr) - Kétoldalú TÉT Pályázat (BIOSPONA). A dolgozat bemutatását az Új Széchenyi Terv TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0009 programja támogatja.

UNGOR DITTA ANITA

Vegyész MSc

MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Visy Csaba**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Dr. Peintler-Kriván Emese**tanársegéd, SZTE TTIK*

Poli(3-hexil-tiofén)/arany nanokompozit előállítása, jellemzése

Munkám során poli(3-hexil-tiofén) vezető polimert (P3HT) állítottam elő kémiai oxidációval, melyet átkristályosítással nanoszálak szerkezetűvé alakítottam. A nagy ellenállással rendelkező polimert kompozit előállítására használtam fel elektromos vezetésének és termoelektromos tulajdonságának javítása céljából. A kompozit másik alkotóeleme a jellegzetesen kialakuló kén-arany kötés lehetősége folytán az arany szol volt. Feladataim közé tartozott, hogy a megfelelő és reprodukálható szemcseméretű arany szol elkészítésére az irodalomban leírt eljárást adaptáljam, ennek felhasználása útján nanoszálak szerkezetű polimert tartalmazó arany nanorészecskéket is tartalmazó kompozitot (P3HT/Au) állítsak elő, és azt széleskörűen jellemezzem. Munkám során transzmissziós elektronmikroszkópos felvételek alapján meghatároztam a polimerszálak átlagos hosszúságát, valamint az arany nanorészecskék méreteloszlását. A TEM felvételek bizonyították a kompozit nagyfokú rendezettségét. A kompozit jellemzésre UV-látható spektrofotometriát és Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiát alkalmaztam, elektrokémiai viselkedését ciklikus voltammetria segítségével vizsgáltam. A kompozit elektromos vezetését ellenállásméréssel, a termoelektromos tulajdonságát a Seebeck-együttható mérésével határoztam meg. Munkám eredményei azt jelzik, hogy tapasztalataim a későbbiekben alapjául szolgálhatnak a P3HT/Au nanokompozit különböző területeken – elsősorban termoelektromos eszköz kifejlesztése terén – történő felhasználásához.

Koordinációs kémia tagozat

BIHARI ZSOLT

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

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

A [Ru(η^6 -p-cimol)(H₂O)₃]²⁺ kölcsönhatása 1-metil-imidazollal és N-acetil-hisztaminnal

A kutatómunkám során a hexahapto kötésmódú 1-metil-4-izopropil-benzol (p-cimol) aromás ligandumot tartalmazó félszendvics, fémorganikus ruténium(II) kation 1-metil-imidazol (MeIm) és N-acetil-hisztamin (AcHm) ligandumokkal, oldatfázisban történő komplexképződését vizsgáltam. Három módszert alkalmaztunk a képződő komplexek összetételének és stabilitási állandóinak a meghatározásához, a pH-potenciometriát, a ¹H-NMR spektroszkópiát és az ESI-TOF-MS spektrometriát.

A pH-potenciometriás módszerrel meghatároztuk a ligandumok protonálódási állandóit. Vizsgáltuk a fémes rendszerekben történő komplexképződést, ahol a lassú reakció folyamatok, illetve a már savas pH-tartományban megjelenő inaktív hidroxokomplex képződése megghiúsította a pH 5 fölött lejátszódó komplexképződési folyamatok jellemzését. A szokásos várakozási idő, 10 - 15 perc alatt sem állt be az egyensúly a fémes rendszereknél.

Emiatt ¹H-NMR spektroszkópiás módszert hívtunk segítségül. Felvettük a ligandumok spektrumait, illetve az 1:1 és 1:3 arányú fémes rendszereket vizsgáltuk. Az 1:1, illetve 1:3 aránynál a szabad fémion aromás liganduma és az imidazol modell ligandumok jelei mellett feltűnt egy valószínűleg 1:1 és 1:2 összetételű komplex, melynek mennyisége a pH növelésével változott. Mind a két ligandum esetében az 1:3 arányú fémes rendszerekben a ligandum feleslege esetén a hidrolízis visszaszorult.

További vizsgálatokat végeztünk ESI-TOF tömegspektrometriás módszerrel. Az 1:1 és 1:3 arányú mintáknál kapott spektrumok kiértékelése során megállapítottuk, hogy a [Ru(η^6 -p-cimol)(H₂O)₃]²⁺ - metil-imidazol rendszerben, a pH 12 fölött egy MLH₁ összetételű komplex van jelen. Emellett detektálható volt a ML, ML₂ és annak hidroxokomplexe a ML₂H₁ összetételű részecske, illetve kis intenzitással megjelent az ML₃ összetételű komplex is a fémes rendszerekben. A pH ~ 5 fölött mind a két ligandum esetében a fémes mintákban megjelent a trihidroxihidas [$\{Ru(\eta^6$ -p-cimol)₂(μ^2 -OH)₃]⁺ hidroxokomplex is.

A többi rendszerbeli részecske összetételének tisztázására további NMR spektroszkópiás és ESI-TOF-MS vizsgálatokat is tervezünk.

Emellett, a különböző pozícióban hisztidin aminosavat tartalmazó kis oligopeptidek szilárdfázisú peptidszintézisét is szeretnénk elvégezni és [Ru(η^6 -p-cimol)(H₂O)₃]²⁺ -megkötő képességüket is tanulmányozni, hogy a képződő komplexek összetételét, stabilitási állandóit és oldatszerkezetét meghatározzuk.

BORSOS KATALIN

Kémia
BSc, 4. félév
Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

TÓTH ESZTER

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

Témavezetők:

Plánkáné Dr. Szabó Terézia
egyetemi docens, SZTE TTIK

Dr. Gyurcsik Béla
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

pH-függő koordinációs szféra fluktuáció a réz(II) - 5-fluoro-szalicilsav - 2,6-bisz-hidroximetil-piridin terner rendszerben

A szalicilsav és származékai régóta ismert gyulladáscsökkentő és fájdalomcsillapító szerek. Fiziológiás pH-n a fluor-szalicilsavak negatív töltése kompenzálható fémion koordináció, vagy pozitív töltésű molekulákkal képzett asszociátumaik révén, így felszívódásuk javítható. Kutatócsoportunk a Szlovák Műszaki Egyetemen együttműködve megállapította, hogy a fluor-szalicilsavak és a piridinszármazékok kölcsönösen segítik egymás fémion-koordinációját [1]. TDK munkánk során a réz(II)-4,5-fluor-szalicilsav-2,6-bisz-hidroximetil-piridin (pydime) rendszer viselkedését vizsgáltuk. Az előállított egykristály szerkezete alapján a pydime molekulák a réz(II)ion belső koordinációs szférájában találhatóak, az 5-fluor-szalicilsav molekulák külsőszféráson stabilizálják a szerkezetet.

A pH-metriás titrálások a képződő komplexek összetételéről, míg az UV-Vis és az ESR-spektroszkópiai eljárások a képződő részecskék oldatbeli szerkezetéről nyújtottak információt. A réz(II)komplexek koordinációs szférájában a pH változtatása a fémionhoz közvetlenül koordinálódó ligandumok cseréjét eredményezte: enyhén savas közegben a pydime koordinációja a domináns, majd a fenolos OH deprotonálódása révén a kelátképző fluor-szalicilsavak kötődnek erősebben a fémionhoz, míg bázikus közegben a pydime alkoholos hidroxilcsoportjainak deprotonálódása a fluor-szalicilsavak ismételt kiszorulását eredményezi a belső koordinációs szférából.

[1] Szabó-Plánka, T., Nagy, N.V., Rockenbauer, A., Tóth, E., Gyurcsik, B., Vasková, Z., Moncol, J., Valigura D., Polyhedron, 30, 2421–2429 (2011).

CSIRE GIZELLA

Vegyész

MSc, 2. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Várnagy Katalin**egyetemi docens, DE TTK*

Cu(II)–bisz(imidazolil)-származékok redoxi sajátosságainak és SOD aktivitásának vizsgálata

Az egyszerű bisz(imidazolil)-csoportot tartalmazó származékok esetén a koordináció 2, illetve 4 imidazolnitrogén donoratomon keresztül valósul meg. A Cu(II):His-BIMA 3:2 arányú rendszerben kialakuló hárommagvú komplex egy imidazoláto-hidas szerkezetet tartalmaz. A bisz(imidazolil) koordinációjú komplexek, valamint a Cu(II):His-BIMA 3:2 arányú rendszerben kialakuló $[Cu_3A_2H_4]$ összetételű komplex szerkezetében hasonlítanak a Cu,Zn-szuperoxid-diszmutáz (Cu,Zn-SOD) enzim aktív centrumához, amelyben a fémionok imidazolnitrogénekhez koordinálódnak és a két fémiont egy imidazoláto-híd köti össze. Így ezen enzimnek jó modelljei lehetnek az egyszerű bisz(imidazolil)-származékok Cu(II)-ionnal alkotott komplexei.

Célkitűzésünk a BIMA, a His-BIMA, β -Ala-BIMA, Gly-BIMA és BIP deprotonálódási állandóinak, valamint pontos koncentrációjának ellenőrzése, Cu(II)-komplexeik redoxi paramétereinek meghatározása, és SOD aktivitásának vizsgálata volt.

A ciklikus voltametriás vizsgálatok során megállapítottuk, hogy a bisz(imidazolil) koordinációjú komplexek redoxipotenciál értékei hasonlóak, és közel vannak a nullához. A folyamat egy elektron-átmenettel járó, kvázireverzibilis reakció, és Cu(II)→Cu(I) átalakulás valósul meg. A redoxipotenciál értékek alapján megállapítottuk, hogy a kialakuló Cu(II)-komplexek stabilisabbak, mint a Cu(I)-ionnal képzett komplexek. A bisz(imidazolil) koordinációjú komplexekre jellemző formálpotenciál értékek a 0 V körüli tartományba estek, amely értékek benne vannak a SOD aktivitáshoz szükséges potenciál tartományban, de annak alsó határát közelítik meg.

A Cu(II):His-BIMA 3:2 arányú rendszerben kialakuló imidazoláto-hidas komplex redoxi sajátosságainak meghatározására nem volt alkalmas a ciklikus voltametria. Ugyanakkor SOD aktivitás mérésére lehetőség volt. Így három biszimidazol koordinációjú biszkomplexnek valamint a Cu(II)–His-BIMA rendszerben képződő hárommagvú komplexnek a SOD aktivitását is megvizsgáltuk. A hárommagvú komplex aktivitása nagyobb, mint a korábban meghatározott Cu(II)-peptidkomplexek IC₅₀ értéke és relatív aktivitása, viszont a Cu,Zn-SOD-enzimhez képest egy nagyságrenddel kisebb. Ez a komplex így jó kiindulópontot jelenthet megfelelő SOD modellek tervezésében.

A dolgozat a TÁMOP-4.2.2/B-10/-1-2010-0024 pályázat anyagi támogatásával készült.

FODOR MELINDA ANNA

Vegyész

MSc, 9. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Horváth Ottó
egyetemi tanár, PE MK*

Vízoldható mangán- és kobalt-porfirin komplexek fotokémiai és fotofizikai vizsgálata

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

Munkám során előállítottam mangán(III)- ill. kobalt(III)-5,10,15,20-tetrakis(1-metilpiridínium-4-il) porfirin-komplexeket, valamint ugyanezen központi fémionoknak az analóg – már felületaktív – hexilpiridínium-4-il szubsztituensekkel rendelkező porfirin-komplexeit. Meghatároztam e vízoldható metalloporfirinek spektrális és fotofizikai tulajdonságait (pl. lumineszcenciás élettartam) szobahőmérsékleten.

Valamennyi vizsgált komplex esetében megvalósítottam a központi fémion hatékony fotokémiai redukcióját (+2 oxidációfokúra) megfelelő redukív kioltó (trietanol-amin) alkalmazásával a látható tartományba eső, monokromatikus besugárzás mellett. A fém-porfirin – ligandumról a központi fémre irányuló elektronátmenet következtében bekövetkező – degradálódását oxidatív kioltó metil-viologénnel sikerült mérsékelnem, mely egyúttal fotokatalitikus rendszer (ciklus) kialakulását is eredményezte. Összehasonlító kísérleteket végeztem arra vonatkozóan, hogy a központi fémion (Mn(III) vs. Co(III)) hogyan befolyásolja e komplexek fotoaktivitását, s a kialakított fotokatalitikus rendszer hatékonyságát.

Kationos felületaktív anyag (cetil-trimetil-ammónium-bromid) alkalmazásával vizsgáltam, hogy a micelláris mikrokörnyezet milyen hatással van e koordinációs vegyületek fotofizikai és fotokémiai tulajdonságaira, a pozitív felületi töltés és a hidrofób kölcsönhatások hogyan befolyásolják a gerjesztett állapotokból kiinduló elsődleges folyamatokat, valamint a rákövetkező termikus reakciókat.

GARDA ZOLTÁN

Vegyész MSc

MSc, 9. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Tircsó Gyula**egyetemi adjunktus, DE TTK*

Mn²⁺-komplexek kinetikai inertségének hangolása a ligandumok szerkezetének módosításával

Az Nefrogén Szisztémás Fibrózis megjelenésével Mn²⁺ makrociklusos ligandumokkal képződő komplexeinek egyensúlyi és kinetikai vizsgálata újabb lendületet vett. Ehhez a kutatáshoz csatlakozva jelen munkánk során meghatároztuk három makrociklusos ligandum, a PCMEA, tDO2A és a PCTA, protonálódási ill. Mn(II)-komplexeik stabilitási állandóit. A tDO2A és PCTA Mn(II)-komplexeire meghatározott stabilitási állandók értékek, hasonlóak a már publikált [Mn(EDTA)]²⁻ (log β=13.8, 0,1 M NaClO₄) értékéhez, de alacsonyabbak, mint azt a [Mn(DOTA)]²⁻-komplex esetében tapasztalták. A negatív töltésű donoratomok hiánya a [Mn(PCMEA)]²⁺ esetében szignifikánsan alacsonyabb termodinamikai stabilitást eredményez, mint a piklén-monoacetát (PCMA) és -mono(metilénfoszfónát) (PCMP) származékai esetébe találták. Vizsgáltuk továbbá a [Mn(PCMEA)]²⁺- a [Mn(PCTA)]⁻ és a [Mn(tDO2A)]⁻ komplexek bomlási kinetikáját illetve a disszociációs reakciókat jellemző sebességi állandók ismeretében kiszámítottuk a komplexek disszociációját jellemző felezési időket (t_{1/2}) fiziológias körülmények között (pH=7,4 és 1x10⁻⁵ M Zn²⁺-ion kicserélő fémion mellett). A felezési idők összehasonlításából kiderül, hogy a [Mn(PCTA)]⁻-komplex kinetikai inertsége jóval nagyobb az irodalomban publikált [Mn(DOTA)]²⁻ és [Mn(NOTA)]⁻-komplexeikénél. Az [Mn(tDO2A)]-komplexre kapott felezési idő alapján azt mondhatjuk, hogy annak kinetikai inertsége összevethető a [Mn(NOTA)]⁻-komplexeivel. A [Mn(PCMEA)]²⁺-komplexre kapott felezési idő ugyanakkor azt mutatja, hogy a komplex inertsége nagyságrendekkel kisebb az összes általunk vizsgált és az irodalomból ismert makrociklusos Mn(II)-komplexeinél. Ezek alapján levonhatjuk azt a következtetést, hogy a piridincsoport makrociklusos gyűrűbe való fúziója növeli a Mn(II)-komplex kinetikai inertséget, viszont az acetát karok számának a csökkenése a termodinamikai stabilitás és a kinetikai inertség (és a redoxi stabilitás) csökkenéséhez vezet.

A [Mn(PCTA)]⁻, [Mn(tDO2A)]⁻ és a [Mn(PCMEA)]²⁺-komplexeik esetében mért kis relaxitási értékek nem teszik lehetővé azok kontrasztanyagként való alkalmazását. Mindazonáltal, az általunk kapott kinetika és a termodinamikai adatok arra mutatnak, hogy a komplexek kinetikai inertsége nagymértékben befolyásolható az makrociklusos poliamin (ciklén vs. piklén vagy DOTA vs. PCTA) és az oldalláncok megfelelő megválasztásával. Így, az inert komplexek szintéziséhez olyan ligandumokat kell előállítani, amelyek gyengén savas (pl. acetát, 2 metilacetát) vagy merev, előredefiniált (pikolinát) oldalláncokat tartalmaznak. Kerülni kell a könnyebben protonálható, foszfónát-, ill. amin-csoportokat, mert a keletkező protonált komplex minden esetben hajlamosabb a disszociációra. Ezek az eredmények összhangban vannak a Gd³⁺-komplexeik esetében tapasztalt eredményekkel is.

HANCSÁKNÉ DUDÁS CSILLA

Kémia BSc

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Pálinkó István**egyetemi docens, SZTE TTIK**Dr. Sipos Pál**egyetemi docens, SZTE TTIK*

A Ca(II)-ion komplexálódása cukorszármazékokkal

A Ca^{2+} -ionok komplexképződési tulajdonságait vizsgáltuk semleges vizes oldatban multinukleáris NMR spektroszkópiával és a számításon alapuló kémia módszereivel. Ligandumként D-glükonátot, D-glükózt vagy D-szorbitolt használtunk. Az oldat ionerősségét állandó értéken tartottuk ($I = 1 \text{ M}$).

A komplexképződés tényét (mindhárom ligandum esetén) ^{13}C és ^{43}Ca NMR spektroszkópiával bizonyítottuk. A ^{13}C NMR mérésekből származó kémiai eltolódás értékek változásából megbecsültük a komplexképződés egyensúlyi állandóit, és azt is megállapítottuk, hogy az 1:1 összetételű komplexek a domináns részecskék. A kapott egyensúlyi állandók is azt mutatták, hogy ugyan van komplexképződés, de a kapott komplexek stabilitása meglehetősen alacsony.

2D ^1H - ^{43}Ca NMR spektrumok elemzése alapján valószínűsítettük a ligandumok kötőhelyeit, és ennek alapján felépítettük komplexeink molekulamodelljeit. Az így megalkotott kezdeti modellek geometriáját optimalizáltuk HF 6-31 G** ab initio számításokkal. Az így kapott komplexek képezték a vizes oldatban történő geometriai optimalizálás kiindulási állapotát. Az oldatot explicit vízmolekulák és az illető komplex egy molekulájával szimuláltuk. A számításokat, a rendszer nagy mérete miatt, szemiempirikus kvantumkémia módszerrel (PM3) végeztük el.

NMR mérések és molekulamodellzés együttes alkalmazásával felderítettük a komplexek kötőhelyeit vizes oldatokban. Kiderült, hogy minden alkalmazott cukorszármazék többfogú ligandumként viselkedett, és komplexálódás során mintegy körülölelték a Ca(II) -iont.

HÜSE DÁNIEL

vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

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

A [Ru(η^6 -p-cimol)(H₂O)₃]²⁺ kölcsönhatása hidroxikarbonsavakkal és kéntartalmú analógjaikkal

A daganatos megbetegedések kezelésére alkalmazott gyógyszerek között fontos területet jelenthetnek az átmenetifém komplexek alkalmazásai, ezek közül egyes Ru(III) vegyületek már a klinikai kipróbálás II. fázisában vannak. Újabb kutatások keretében fémorganikus Ru(II) komplexeket vizsgálnak, melyekben a fémionhoz (N,N), (O,N) vagy (O,O) donoratómú ligandum koordinálódik. A közelmúltban több tanulmány is arról számolt be, hogy az (O,O) donoratómú ligandum egyik oxigénjét kénre cserélve, az előállított félszendvics ruténium(II) komplex rákos sejtekre kifejtett sejt szaporodást gátló hatása lényegesen megnő az oxigén tartalmú analóghoz képest.

Másrészt ezek a vegyületek a szervezetbe bejutva számos oxigén vagy kéndonor biomolekulával léphetnek kölcsönhatásba. Ezen okoknál fogva fontos területet jelent ilyen típusú kismolekulák és a fémorganikus ruténium(II) vegyületek kölcsönhatásának vizsgálata.

Ezért munkám során a potenciálisan rákellenes hatású ruténium(II) komplexek disszociációja során képződő [Ru(η^6 -p-cimol)(H₂O)₃]²⁺ kölcsönhatását vizsgáltam (O,O) donor hidroxikarbonsavakkal (L-almasav, L-borkósav) és (O,S) donor merkaptokarbonsavakkal (DL-tiotejsav, DL-tioalmasav, mezo-2,3-dimerkaptoborostyánkősav).

Eredményeink alapján a hidroxikarbonsavak közül a laktáttal képződő (COO⁻, O⁻) kötőmód nem bizonyult stabilnak, viszont a plusz egy karboxilcsoporttal rendelkező ligandumok (citrát-, malát-, tartarátion) fiziológiás pH-án is képesek megkötni a fémiont (COO⁻, COO⁻, O⁻) koordinációval. Továbbá azt is megállapítottuk, hogy a tartarátionnal lúgos közegben is stabil komplexek képződnek, amit a további hidroxilcsoport jelenlétével és a koordinációban való részvételével magyarázhatunk.

A merkaptokarbonsavak közül már a tiotejsav is rendkívül stabilan képes megkötni a Ru(II) iont lényegében a 0,75 < pH < 12,6 tartományban, valószínűleg egy [Ru₂L₂] összetételű komplex keletkezése közben. A fémion – tiomalát és –2,3-dimerkaptoszukcinát rendszerekben az oldategyensúlyi vizsgálatok csapadékképződés miatt nem vezettek eredményre. Viszont a szilárd fázisú vizsgálatok során a [Ru(η^6 -p-cimol)Cl₂]₂ és a tioalmasav reakciójában képződő dimer komplexből sikerült egykristályt növesztetni és szerkezetét röntgendiffrakciós módszerrel meghatározni. A molekulában egy-egy tiomalátion (COO⁻, S⁻) koordinációval kötődik egy-egy fémionhoz és a két egységet a tiolát csoportok kötik össze egy négytagú planáris Ru-S-Ru-S gyűrűt képezve.

KUTUS BENCE

vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Sipos Pál**egyetemi docens, SZTE TTIK**Dr. Peintler Gábor**egyetemi docens, SZTE TTIK*

Erősen lúgos oldatokban képződő kalcium-heptaglukonát komplexek összetétele és egyensúlyai

Munkánk során a kalcium(II)- és heptaglukonátionok (Hpgl^-) között lejátszódó komplexképződést vizsgáltuk erősen lúgos oldatokban ($11 < \text{pH} < 13$). Erről a rendszerről kevés irodalmi adat áll rendelkezésre, más rokon ligandumokkal (glükonát, izoszacharinát) kapcsolatos vizsgálatok alapján megfelelően magas pH-jú oldatokban egymagvú részecskék képződése lenne várható.

A rendszer egyensúlyi sajátságait először potenciometriás titrálások segítségével tanulmányoztuk. Első lépésben megvizsgáltuk a ligandum deprotonálódásának mértékét. Az adatsorokat a PSEQUAD programmal értékeltük. A titrálási görbék alapján a Hpgl^- valamely OH-csoportja deprotonálódik $\text{pH} \sim 12$ felett. A számolás eredményeként a savi állandóra $\log K_s = -13,41 \pm 0,01$ adódott. Ezt követően a Ca^{2+} -okat is tartalmazó oldatokban azt tapasztaltuk, hogy a Ca^{2+} és Hpgl^- koncentrációjának növelése jelentősen megváltoztatja a potenciált a fémionokat nem tartalmazó rendszerekben mért értékekhez képest. A számítások eredményei alapján kiválasztott modell szerint egy $\text{Ca}_3\text{Hpgl}_2(\text{OH})_4$ összetételű domináns komplex képződése mellett egy $\text{CaHpgl}(\text{OH})$ összetételű részecske jelenléte is valószínűsíthető. A stabilitási állandók: $\log \beta_1 = 14,09 \pm 0,01$ a hárommagvú, és $\log \beta_2 = 3,41 \pm 0,01$ az egymagvú komplexre.

A $\text{Ca}_3\text{Hpgl}_2(\text{OH})_4$ kiemelkedő stabilitással bír, képződése pedig jelentős részecskeszám-csökkenéssel jár, amit fagyáspontcsökkenés (ΔT_m) mérésével bizonyítottunk: az általunk vizsgált oldatokban jóval kisebb ΔT_m értéke, mint amit akkor kapnánk, ha nem lennének asszociációs folyamatok. Ugyanakkor, a töltés nélküli komplexek képződésük során nagy moláris fajlagos vezetőségű OH^- -okat kötnek meg, ezért keletkezésük jelentős vezetéscsökkenéssel kell, hogy járjon. Ezt konduktometriás titrálásokkal igazoltuk.

Oldatszerkezeti vizsgálatokat is végeztünk. ^1H -NMR-mérések alapján erősen lúgos közegben komplexképződés játszódik le, és valószínűleg a karboxilátion melletti szénatom hidroxilcsoportja vesz részt a koordinációban.

LENGYEL ATTILA

vegyész Msc

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Kuzmann Ernő
egyetemi magántanár, ELTE TTK*

Vas(II)-dioxim komplex vegyületek Mössbauer-vizsgálata

Az oxim vegyületek többek között a rákellenes gyógyszeralapanyagok kifejlesztésében jutnak szerephez. A maximális biológiai szelektivitás gyakran csak bonyolult molekula geometriával érhető el, ennek megfelelően, ebben a kutatásban vas-oxim-származékok előállítása és jellemzése volt a célunk.

Az előzetes kutatásokban axiális helyzetű ligandumokkal rendelkező vas-dimetil-glioxim komplexeken és vas-trisz-dioximokon végeztek Mössbauer-méréseket és DFT számításokat. Megállapították, hogy az axiális helyzetű ligandumok hiányában a vas kettes vegyértékű és nagyspinű állapotban van a vas-bisz-glioximokban. Minden más általuk vizsgált esetben kisspinű állapotot találtak az axiális helyzetű ligandumokkal rendelkező vas-metil-etil-glioximokban [1].

Kérdéses, hogy a fent említett kutatásokban tett megállapítások elágazó oldalláncú dioxim komplexekre is igazak-e, vagy a felhasznált dioximtól függően változhat a vas spinállapota? Annak a megállapítása is céljaink közt szerepelt, hogy sikerült-e a kívánt terméket előállítanunk? Ehhez szorosan kapcsolódik az a kérdés, hogy sikerült-e elkerülnünk a minta szennyeződését?

A jelen vizsgálatokhoz az ^{57}Fe Mössbauer-spektroszkópia módszerét alkalmaztuk, ami szelektíven tudja vizsgálni a különböző vas szpecieszeket.

Az új vas-dioxim komplexek preparációjának számos nehézsége ellenére, sikerült szennyezés mentes egyfázisú termékként előállítanunk háromféle új vas-dioxim komplexet, ezek: $[\text{Fe}(\text{gliox})_3(\text{BOH})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-glioxH})_2(2\text{-imidazolidon})_2]$, $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-glioxH})_2(2\text{-amino-pirimidin})_2]$. Az együttműködő partnereink várakozásai szerint ezek a komplexek egyes rákos megbetegedések kezelésére szolgáló gyógyszerek alapanyagául szolgálhatnak.

Az új vas-dioxim komplexekre jellemző Mössbauer-paramétereket meghatároztuk. Kitűnt, hogy a vas-dioxim komplex előállítását célzó preparációk sikeressége könnyen ellenőrizhető Mössbauer-spektroszkópiával.

A Mössbauer-paraméterek alapján meghatároztuk ebben a három vas-dioxim komplexben a vas spin állapotát: – $[\text{Fe}(\text{gliox})_3(\text{BOH})_2]$ – kisspinű a vas;

– $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-glioxH})_2(2\text{-imidazolidon})_2]$ – nagyspinű a vas;

– $[\text{Fe}(\text{Me-i-propil-glioxH})_2(2\text{-amino-pirimidin})_2]$ – nagyspinű a vas.

Fényt derítettünk egy nem várt érdekes jelenségre is: a dioximokhoz kapcsolt elágazó oldalláncok jelentős hatással lehetnek a vas spin állapotára. A planáris részhez kapcsolt különböző ligandumokkal spinváltást idézhetünk elő a központi vas atomban – ennek kihasználása a későbbi biológiai alkalmazásokban még hasznos lehet.

1 Kuzmann E. et al. 2012: Mössbauer study of novel iron(II) complexes with oximes in low spin and high spin states. – Radiation Physics and Chemistry. pp1 632-634.

LIHI NORBERT

Vegyész MSc

MSc, 1. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Várnagy Katalin
egyetemi docens, DE TTK*

[O,N]-donorcsoportú ligandumok, mint potenciális vasmegkötők

A vas felhalmozódásának egyik betegsége a β -talasszémia. A betegség kezelése tüneti, a korábban alkalmazott eljárások (vérátömlesztés, deszferrioxamin) azonban rendkívül mód kihatnak a páciensek életminőségére. Ezért a gyógyászatban egyre jobban terjednek el azok a fajta kelátor vegyületek, amelyeket szájon át is szedni lehet.

Ezek alapján mi két új, potenciális vas-kelátor oldategyensúlyi, redoxi és szerkezeti vizsgálatát végeztük el, valamint összehasonlítóképpen egy, a gyógyászatban már alkalmazott vas-kelátor származékát is vizsgáltuk. Az eredmények azt mutatják, hogy mindhárom vegyület rendkívül nagy stabilitású komplexet képez a vas(III)ionnal. A koordináció minden esetben az aromás hidroxilcsoportok oxigén atomjain, illetve az azonitrogéneken keresztül valósul meg, amelyet szerkezetvizsgálati módszerekkel is igazoltunk. A számított eloszlási görbék alapján az mondható el, hogy fiziológiás pH-n mind a három ligandum biszkomplexet képez, telíti az oktaéderes elrendeződésű vas(III)ion koordinációs szféráját, amely a vas megkötésének szempontjából fontos.

A vas-kelátorok fontos paramétere a pFe értéke. Ez minél nagyobb, a vegyület annál alkalmasabb a vas megkötésére. A stabilitási állandók alapján számolt pFe értékek közel hasonló értékűek voltak, mint a szervezetben megtalálható transferrin pFe értéke. Így ezen ligandumokat a szervezetbe juttatva köztük és a transferrin között kompetíció alakulhat ki.

Az oldategyensúlyi vizsgálatokat vas(II)ionokkal is elvégeztük. Az eredmények itt azt mutatták, hogy ez a fémion kevésbé nagy stabilitású komplexeket képez a vizsgált ligandumokkal. Ez a vas megkötése szempontjából fontos, ugyanis a kelátor vegyületeknek a kevésbé reaktív vas(III)ionokat kell erősebben kötnie.

A ciklikus voltammetria segítségével megállapítottuk, hogy a szabad ligandumok oxidációra hajlamosak CV körülmények között. A reverzibilitás vizsgálata alapján megállapítottuk, hogy a vas(III)ionnal létrejövő komplexek elég stabilisak ahhoz, hogy megakadályozzák a ligandum oxidációját.

Összefoglalva elmondható, hogy a szervezetben felhalmozódott vas megkötésére az általunk vizsgált ligandumok a képződő komplexek stabilitása és szerkezete alapján alkalmasak lehetnek. Ugyanakkor további vizsgálatok szükségesek, amelyek bizonyítják, hogy a vizsgált ligandumok szelektíven kötik a fémiont, továbbá, hogy a létrejövő vas-komplexek olyan redoxipotenciállal rendelkeznek, amelyek nem katalizálják a szervezetben lezajló oxidatív stressz folyamatait.

A dolgozat elkészítését a TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0024 számú pályázat támogatta.

NAGY GÁBOR

Kémia BSc

BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

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

$[\text{Os}(\eta^6\text{-p-cym})(\text{O},\text{O})_x]^{n+}$ komplexek előállítása és tanulmányozása különbéféle ligandumok esetén

A ciszplatin nevű rákellenes vegyület felfedezése óta intenzíven folynak kutatások a platinafémek körében (Pt, Pd, Ir, Rh, Os, Ru), hogy újabb, hasonló hatású, de kevesebb mellékhatással rendelkező komplexet állítsanak elő. Az elmúlt időben számos kísérletet végeztek Ru komplexekkel, amelyek során előállítottak olyan vegyületeket, amelyek antitumor hatásúak voltak és mellékhatásaik is enyhébbek a ciszplatinéhoz képest. Ezen túl arra a következtetésre jutottak, hogy a különféle kapcsolódó donoratomok közül az oxigénnel alkotja a leglabilisabb komplexet a ruténium. A periódusos rendszerben közvetlenül a Ru alatt elhelyezkedő Os-nak a tulajdonságai hasonlóak, de a nagyobb mérete miatt inertebb, így a ligandumcsere olyan lassú lehet, hogy oxigén donoratomok esetén kevésbé labilis az analóg Ru komplexekhez képest, így ligandumcsere nélkül elérheti a szervezetben a célsejtet.

Munkám során olyan Os félszendvics vegyületek előállítása és analitikai módszerekkel történő vizsgálata volt a cél, ahol (O,O) donort tartalmazó ligandum gyanánt piron és piridinon származékokat használtam. A piron vegyületek egyik tagja a 3-hidroxi-2-metil-4H-pirán-4-on, közismertebb nevén maltol, amit élelmiszeripari adalékként használnak, így szervezetbarát tulajdonsága miatt komplexekben való alkalmazása kedvezményezett, más toxikusabb anyagokkal szemben.

Először elő kellett állítanom az $[\text{Os}(\eta^6\text{-p-cimol})\text{Cl}_2]_2$ dimert, illetve a szükséges ligandumokat, majd tisztaságuk vizsgálata után elkezdtem a komplexek szintézisét. Ezt követően az előállított komplexeket jellemeztem $^1\text{H-NMR}$, IR, elemanalízis, ESI-MS és röntgendiffrakciós szerkezetvizsgáló módszerekkel.

Az $[\text{Os}(\eta^6\text{-p-cimol})\text{Cl}_2]_2$ dimer, a ligandumok és az $[\text{Os}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{O},\text{O})\text{X}]^{n+}$ szerkezetű komplexek reprodukciója sikeres volt. Ezt követően a szerkezetvizsgáló módszerek tisztának mutatták az összes anyagot, illetve utaltak a komplexek kialakulására. Egy komplex esetén sikerült egykristályt előállítani, amelynek a röntgendiffrakciós vizsgálata közvetlen bizonyítékot mutatott arra, hogy az adott ligandum a várt (O,O) keláton keresztül koordinálódik a fémionhoz.

Az előállítások és szerkezetvizsgálatok során fellépő problémákra sikerült megoldást találni, és magyarázni az adott esetekben fellépő különféle eltéréseket és jelenségeket.

Köszönettel tartozom a TÁMOP-4.2.2/B-10/-1-2010-0024 jelzésű pályázat anyagi támogatásáért.

PARAJDI-LOSONCZI PÉTER LÁSZLÓ

kémia

BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

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

A $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ kölcsönhatása α -alaninhidroxiámsavval

A dolgozat keretében a $[\text{Ru}(\eta^6\text{-p-cimol})(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$ félszendvics Ru(II) kation α -alaninhidroxiámsavval való kölcsönhatását vizsgáltuk pH-potenciometriás, ESI-TOF-MS és $^1\text{H-NMR}$ módszerek segítségével. A vizsgálatokhoz használt ligandumot magunk állítottuk elő a megfelelő aminosavból kiindulva a klasszikus hidroxiámsav szintézissel.

A félszendvics Ru(II) kationokat az utóbbi időben mint potenciális rákellenes szereket tartják számon, emellett ismert egyes hidroxiámsavak daganatellenes hatása is. A Tanszéken eddig előállított ruténium-hidroxiámát komplexek nem mutattak biológiai aktivitást, így most a hidroxiámsavak származékaival, az aminohidroxiámsavakkal kezdtünk vizsgálatokat.

Az eredményeket összefoglalva elmondhatjuk, hogy az α -alaninhidroxiámsav igen jó komplexképző liganduma ennek a fémionnak. Az 1:1 fémion-ligandum aránynál végzett pH-potenciometriás mérések szerint a komplexképződés már $\text{pH} = 2,0$ körül megindul, melynek során először egy egymagvú, (O,O) kelátot tartalmazó részecske képződik. A pH növelésével ez átadja a helyét egy kétmagvú, majd egy (N,N) kelátot tartalmazó egymagvú részecskének. Ez utóbbi a rendszer meghatározó részecskéje, amely a fiziológiás pH-n a fémion közel 90%-át köti. $\text{pH} = 9$ felett ez a komplex deprotonálódik, amely folyamatra két különböző modellt tudunk felállítani, két különböző képződő részecskével. A ligandum lúgos közegben is képes komplexben tartani a fémiont, a megfelelő hidroxiokomplex mennyisége $\text{pH} = 11$ -nél csak 10%. Az elvégzett ESI-MS és $^1\text{H-NMR}$ mérések jó egyezést mutatnak a pH-potenciometriás mérések alapján felállított modellel.

A munka a TÁMOP-4.2.2/B-10/-1-2010-0024 pályázat anyagi támogatásával valósult meg.

PATALENSZKI JÁNOS

kémia

BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

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

A [(η^6 -p-cimol)Ru(H₂O)₃]²⁺ kölcsönhatása kéntartalmú kis biomolekulákkal

A rákellenes hatású félszendvics fémorganikus ruténium(II)vegyületek a szervezetbe kerülve kölcsönhatásba léphetnek a vérszérum kis- és nagy molekulatömegű alkotóival. Ezért a Debreceni Egyetem Szervtelen és Analitikai Kémiai Tanszékén vizsgálták az [O,O] donor kelátképző részecskék közül az oxalát, a laktát és a citrát kölcsönhatását a fémionnal. Az eredmények alapján olyan nagy stabilitású komplexek keletkezése is lehetséges, amelyek még fiziológiás körülmények között (pH = 7,4) is képesek megakadályozni a fémion hidrolízisét. Így merült fel a nagyobb bázicitású kén donoratomot tartalmazó DL-cisztein kölcsönhatásának vizsgálata a [(η^6 -p-cimol)Ru(H₂O)₃]²⁺-kationnal. A cisztein mellett két másik modellvegyületének (CysMe, AcCys) komplexképző sajátosságait is megvizsgáltuk. Az oldatfázisban lejátszódó egyensúlyi komplexképződési folyamatok tanulmányozására pH-potenciometriás, UV/VIS, ¹H NMR és ESI-MS módszereket alkalmaztunk. A szilárd fázisú vizsgálatok során előállított egykristályok szerkezetét röntgendiffrakciós módszerrel határoztuk meg.

A [(η^6 -p-cimol)Ru(H₂O)₃]²⁺-CysMe rendszer esetében, a lúgos tartományban feltehetően a fémion hatására bekövetkező ligandum hidrolízis miatt irreverzibilis, lassú folyamatok játszódtak le, így csak a savas pH-tartomány értékelése volt lehetséges. Ezen a szakaszon egy- és/vagy kétmagvú, nagy stabilitású komplexek keletkeznek, melyekben a ligandum [S,N] koordinációval öttagú kelátot valósíthat meg.

A [(η^6 -p-cimol)Ru(H₂O)₃]²⁺-AcCys rendszerben kénhidakkal összekötött kétmagvú [Ru₂A₂] részecske keletkezhet. A komplexben [S,O] koordinációval hattagú kelátok jöhetnek létre, viszont a lúgos tartományban a hidroxidion a koordinálódó karboxilátcsoportokat kiszoríthatja. Olyan komplex keletkezhet ([Ru₂A₂H₁]⁻), melyben a hidroxidion egyszerre két fémionhoz is kötődhet, így a meglévő két kénhid mellett a [(η^6 -p-cimol)Ru]₂(μ^2 -OH)₃⁺ részecskéhez hasonló triplahidas dimer szerkezet alakulhat ki.

A [(η^6 -p-cimol)Ru(H₂O)₃]²⁺-Cys rendszerre kapott eredmények alapján feltételezhető, hogy a [RuA] komplexben a cisztein háromfogú ligandumként, [S,N,O] koordinációval kötődik a ruténium(II)ionhoz. Feltehetően két ilyen egység kénhidakon keresztül fémionfelesleget is meg tud kötni, [Ru₃A₂]²⁺ összetételű, nagy stabilitású komplexet létrehozva.

A Cys és az AcCys fiziológiás körülmények között is képes megakadályozni a ruténium(II)ion hidrolízisét.

Köszönettel tartozom a TÁMOP-4.2.2/B-10/-1-2010-0024 jelzésű pályázat anyagi támogatásáért.

SZEKERES LEVENTE ISTVÁN

Vegyész

MSc, 8. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Jancsó Attila**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK**Dr. Gyurcsik Béla**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

Tiolcsoportokat tartalmazó vegyületek kölcsönhatása arzénessavval

Az arzén a periódusos rendszer ötödik főcsoportjában található félfémes elem. Közismert toxikus jellege, habár élettani hatásai ennél jóval sokrétűbbek. Akut mérgezési esetei többnyire halálos kimenetelűek. Hosszú távú emelt dózisban történő bevitele elsősorban az emésztőrendszert, a csontvelőt és az idegrendszert károsítja, továbbá karcinogén hatásai is ismertek.

Az említett tulajdonságai miatt a társadalom számára megoldandó probléma a magas arzéntartalmú ivóvizek tisztítása, melyek többek között hazánkban is az arzénbevitel egyik legfőbb forrását jelentik. A feladat megoldásához azonban jelenleg nincs kellően olcsó és jól működő technológia, mely az As^V mellett az As^{III} oxidációs állapotot is képes hatékonyan eltávolítani előoxidációs lépés alkalmazása nélkül.

Ilyen eljárások kidolgozásához szükséges az arzénvegyületek oldatkémiai tulajdonságainak felderítése, mellyel kapcsolatban meglehetősen kevés szakirodalmi adat áll rendelkezésre. Munkám célkitűzése a ditiol típusú 2,3-dimerkaptopropanol (British Anti-Lewisite, BAL) As^{III} -mal történő kölcsönhatásának vizsgálata volt. Az arzénessav (az As^{III} stabil vizes közegű formája) az ilyen típusú tiol csoportot tartalmazó vegyületekkel kovalens jellegű As–S–C kötések kialakítását képes előidézni. A folyamat vízkilépéssel játszódik le, azaz nincs megfigyelhető pH-effektusa, azaz nem követhető közvetlenül kvantitatív módon pH-potenciometria alkalmazásával. Ennek ellenére ez a módszer is szolgáltat hasznos információkat. Az előbbi technikán kívül vizsgálataim során UV-spektrometriát, illetve egy- és kétdimenziós 1H mágneses magrezonancia spektroszkópiát (NMR) alkalmaztam. Tanulmányoztam az As^{III} -BAL rendszerben végbemenő folyamatok pH, illetve As^{III} -ligandum arány függését, valamint az alacsony pH-n lejátszódó lassú kinetikai folyamatokat is. Eredményeim alapján a körülményektől függően 2:3, 1:1 és 1:2 As^{III} -ligandum összetételű komplexek jelenléte feltételezhető, melyekben a ligandum(ok) 2, 3, illetve 1+2 donorcsoporttal kapcsolódhatnak az arzén centrumhoz.

Kulcsszavak: tiol vegyületek, koordinációs kémia, arzén, spektrofotometria, NMR

SZILVÁSI DÁVID SZILVIO

vegyész

Osztatlan, 13. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezetők:
Kaizer József
egyetemi tanár, PE MK
Pap József Sándor
adjunktus, PE MK*

Meridionális ligandumok hatása karboxilátoréz(II) komplexek szupramolekuláris és redox tulajdonságaira

A karboxilát ligandumot tartalmazó, vegyesligandumú rézkomplexek iránt töretlen érdeklődés mutatkozik a szerkezeti, a gyógyszer-, a katalitikus és a bioszervetlen kémiában. Ilyen komplexeket a merev szerkezetű, három nitrogén donoratomot tartalmazó 1,3-bisz-(2-piridil-imino)-izoindolinnal is előállítottak és szerkezetileg jellemeztek. Érdekes, hogy az utóbbi vegyületekben a karboxilát kivétel nélkül egyfogú ligandumként koordinál, holott más kelátképzők esetében az izoindolin által hagyott szabad helyeken a kétfogú koordinációs módra is van példa. Épp ezért célunk az volt, hogy a karboxilát és az izoindolin ligandumok szisztematikus változtatásával megpróbáljuk megváltoztatni előbbi koordinációs módját. Egymagvú réz(II) fenilglioxilát- és 4-R-benzoáto-komplexeket állítottunk elő (R = NO₂, CH₃, H, CN, stb.) és jellemeztünk két 1,3-bisz-(2-aril-imino)-izoindolin ligandummal (aril = piridil, vagy benzimidazolil). Infravörös spektroszkópiái és néhány esetben röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározási módszerrel megállapítottuk, hogy a karboxilát ligandumok kötési módja minden esetben nagyon hasonló. Elektrokémiai vizsgálataink ugyanakkor azt mutatták, hogy a rézcentrum redox viselkedése jelentősen függ a szubsztituensektől. N,N-dimetil-formamidból kristályosítva a komplexek változatos szupramolekuláris egységekké rendeződnek, ahol az arilcsoportok és a karboxilát-ligandumok minősége hidrogén-hidak és π - π kölcsönhatásokon keresztül befolyásolja a szintonok szerkezetét.

Kulcsszavak: izoindolin, réz(II), redox kémia, karboxilát, vegyesligandum

Környezetkémia és környezettechnológia tagozat

DOBOSY PÉTER

Környezettudomány

MSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Barkács katalin**adjunktus, ELTE TTK**Jurecska Laura**PhD-hallgató, ELTE TTK*

Biofilm kolonizáció vizsgálata műszál alapú hordozókon

A biofilmeket a szennyvíztisztítás során az utóbbi években egyre szélesebb körben alkalmazzák szerte a világon. Elterjedésük elsősorban azzal magyarázható, hogy rendkívül jól kombinálhatóak más szennyvíztisztítási technikákkal, valamint, hogy segítségükkel rendkívül jó hatásfokú nitrifikáció, denitrifikáció és szerves anyag degradáció érhető el.

Tudományos diákköri munkám célja volt, hogy megállapítsam a vizsgálatokhoz kiválasztott műszál alapú biofilm hordozó típusok közül melyik segíti a szennyvíztisztítás során a biofilm kialakulását. Vizsgálataimat 4 különböző műszál alapú biofilm hordozóval (3 különböző szövésű polipropilén és 1 poliészter) végeztem. A négyféle hordozót egy kommunális szennyvizet kezelő, 8 kaszkád reaktorból álló félüzemi biológiai tisztító rendszerbe telepítettük az Organica Technológiák Zrt Telki Ökotechnológiai Fejlesztő Központjában. A 18 napos kísérlet során minden reaktorból 5 alkalommal vettem biofilm mintát.

Kísérleti munkám során a hordozókról kinyert biofilmek szárazanyag- és szervesanyag-tartalmát, valamint dehidrogenáz-enzimaktivitását mértem TTC (trifenil-tetrazólium-klorid) teszttel, laboratóriumi körülmények között. A mért adatokat összevettem a főbb, rendelkezésemre álló vízminőségi paraméterek értékeinek alakulásával.

Vizsgálataim során kimutattam, hogy a polipropilén hordozókon nagyobb mennyiségű biofilm képződött, mint a poliészteren. A polipropilén hordozók közül az egyik típusú, műszaki polipropilén szál felületén kolonizált a legnagyobb tömegű és egyben az enzimaktivitás mérések alapján a legnagyobb aktivitású biofilm.

KIRÁLY ANDRÁS

Környezetmérnöki BSc

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Cséfalvay Edit
egyetemi adjunktus, BME VBK*

Nanoszűrés alkalmazhatósága termálvizek keménységének csökkentésére

Hazánk rendkívül kedvező geotermikus adottságokkal rendelkezik. A legalább 30°C hőmérsékletű termálvíz az ország területének 70%-án hozzáférhető. Energetikai szempontból kétféle módon hasznosítható: fűtésre és áramtermelési célra. A hasznosítással kapcsolatban az egyik legkomolyabb probléma a termálvizek kémiai összetételéből származik. Jelen dolgozatban a vízkőképződés megakadályozásának lehetőségét vizsgálok nanoszűrés segítségével.

A nanoszűrés széles körben elterjedt vízkezelési technológiaként. Számos tanulmány bizonyította hatékonyságát a vízlágyítás területén, ugyanakkor a termálvíz rendkívül speciális követelményeket támaszt vele szemben. A hagyományos eljárásokhoz képest jónéhány előnnyel bír, elválasztási tulajdonságai alapján alkalmasnak ígérkezik a vízkőkiválási problémák megoldására.

A szakaszos szűrési kísérletek egy ún. Thin Film NF DK membránon (GE Osmonics) valósultak meg a CM-CELFA Membrantrenntechnik AG P-28 típusú berendezésen 50°C-on 35 bar nyomás mellett négy mintával, melyek Magyarország négy különböző városából (Eger, Komárom, Mályi és Mezőkövesd) származtak. A permeátumot 95%-os kihozatalig, tehát a kezdeti minta 5 (V/V)%-ra történő töményedéséig gyűjtöttem. A permeátumfluxus mellett mértem a vezetőképességet, a permeátumok és retentátumok koncentrációját ionkromatográf segítségével határoztuk meg.

Méréseim alapján megállapítható, hogy az NF DK membrán nagy visszatartást eredményez a kétértékű ionokra (Ca²⁺ esetén közel 90%-os, Mg²⁺ esetén 80% körüli visszatartás jelentkezett) és viszonylag magas értékeket az egyértékűekre is (Na⁺-ra 54%-os, K⁺-ra 43%-os visszatartást is kaptam). A komáromi minta esetén viszonylag nagy fluxus mellett (252 l/m²/h) 92%-os Ca²⁺, és 88%-os Mg²⁺ visszatartás adódott.

A szűrést követően a termálvizek kiválási tulajdonságait egy Visual MINTEQ 3.0 nevű kémiaegyensúly-modellező szoftverrel vizsgáltam (a program a U.S. EPA MINTEQA2 programkódján alapul). A permeátumokra vonatkozó eredmények azt mutatják, hogy a nanoszűrés hatékony eljárásként alkalmazható termálvizek keménységének csökkentésére.

KONKOLY BENJÁMIN

Környezettan

BSc, 5. félév

Eszterházy Károly Főiskola

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Dr. habil. Kiss Attila

tszv. főiskolai tanár, EKF TTK

Dr. Virág Diána

tudományos asszisztens, EKF TTK

**Eltérő típusú peszticidek oxidáció hatására végbemenő
degradációjának vizsgálata, a feltételezett mechanizmusok feltárása**

Vizsgálataink középpontjában különböző kémiai szerkezetű növényvédő szerek oxidációs stabilitásának vizsgálata áll. Kutatásaink során célunk annak megállapítása, hogy különböző szerkezetű peszticidek ellenállnak-e az őket ért oxidációs hatásoknak, valamint eltérő oxidációs körülmények hatására a peszticidek milyen mértékű degradációja következik be. Az oxidációs eljárások nagy nehézségekbe ütköznek megfelelő környezeti viszonyokat modellező rendszerek hiányában. Mi ezen célra a Fenton-reakciót alkalmaztuk, illetve fejlesztettük tovább és adaptáltuk a mi vizsgálati rendszerünkbe, mivel ez a viszonylag enyhe oxidációs eljárás módot ad az átalakulás részlépéseinek értelmezésére is. Amennyiben oxidációs degradáció végbemegy, célunk a bomlástermékek azonosítása, keletkezésük során arányaik megállapítása. Az azonosított degradátumok alapján feltételezett bomlási mechanizmusra teszünk javaslatot.

LUKÁCS DIÁNA

Környezetmérnöki BSc
BSc, 9. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulensek:
Dr. Hajós Péter
egyetemi docens, PE MK
Dr. Horváth Krisztián
egyetemi adjunktus, PE MK*

**Gadolinium-vegyületek környezeti és egészségügyi jelentősége,
kromatográfiás analízise**

A lantanoidák csoportjába tartozó gadolinium (Gd) vegyületeinek alkalmazása egyre növekvő jelentőséggel bír különböző alkalmazási területeken. Az orvosi képalkotó módszerekben nagyfelbontású MRI felvételeket biztosítanak az intravénásan adagolt Gd-kelátok, amelyek nagymértékben elterjedtek, mivel segítik a megbízható klinikai diagnózis felállítását. A mikroelektronikai ipar és a környezetbarát hűtőgépek Gd-vegyületeket is alkalmaznak különböző problémák megoldásában, amely a Gd különleges tulajdonságainak következménye. Ugyanakkor ezen vegyületek felhasználása környezetvédelmi szempontból körültekintést igényel.

Munkám során tanulmányoztam a Gd-vegyületek fizikai, kémiai tulajdonságait, felhasználási területeit, környezeti jelentőségét és hatásait. Komplexképződési és protonálódási egyensúlyok figyelembevételével vizsgáltam Gd-kelát-komplexek ionkromatográfiás elválasztásának, meghatározásának lehetőségeit. Megállapítottam, hogy lúgos pH tartományban a Gd elsősorban negatív töltésű kelát-komplex formában van jelen az oldatban, így analitikai meghatározására az anion kromatográfia előnyösen alkalmazható. Számításaimat az elvégzett kísérletek is alátámasztották. Vizsgáltam továbbá Gd-kelátok (Gd-EDTA, Gd-DTPA) szimultán elválasztását, szervetlen és szerves ionok zavaró hatását, illetve az alkalmazott módszer kimutatási határát.

Kulcsszavak: anion kromatográfia, gadolinium-kelát-komplex, EDTA-komplex, DTPA-komplex, MRI kontraszt anyagok

MÁTÉFFY KORNÉL

Középiskolai hallgató

Bolyai Tehetséggondozó Gimnázium és
Kollégium, Zenta

*Konzulensek:
Dr. Jasna Adamov
egyetemi tanár, ÚE
Szórád Endre*

gimnáziumi tanár, Bolyai Tehetséggondozó Gimnázium és Kollégium, Zenta

A felszíni vizeket szennyező hidrofób anyagok eltávolítása különböző polimerek alkalmazásával

A felszíni vizeket szennyező hidrofób anyagok eltávolítása különböző polimerek alkalmazásával

A felszíni vizeket szennyező anyagok egy sajátos csoportját képezik azok az anyagok, amelyek közvetett hatásúak, ugyanis ezek a vízbe kerülve a vízi élet tényezői közül a fizikai elemeket blokkolják vagy kizárják. Ezen anyagok közül a legismertebb és előfordulási arányát tekintve a leggyakrabban előforduló szennyező anyag az ásványi olaj és származékai.

A vízbe kerülő olaj, ha nem ütközik akadályba, gyorsan szétterül, és vékony filmszerű réteget alkot és kialakul az olajfedettség. Tiszta vízben ez a fedettség terjed és fokozatosan hártává alakul. A szemmel is érzékelhető vizekbe kerülő olaj legkisebb rétegvastagsága $\sim 4 \cdot 10^{-5}$ [mm], ami 1 km^2 felületre vetítve alig $40 \text{ [dm}^3 \text{] olaj}$.

Kísérleteim során az ásványi olaj összegyűjtését és semlegesítését szimuláltam laboratóriumi körülmények között új fejlesztésű hidrofób anyagokkal.

A szennyeződés összegyűjtését olyan módszerekkel próbáltam megoldani, amely nem környezetszennyező és nem okoz újabb környezetszennyezést.

Két anyagot fejlesztettem ki és vizsgáltam olajfelszívó képességüket:

- a) Alacsony sűrűségű, karbamid-formaldehid gyanta, gyapothordozó alapon
- b) Környezetbarát, kukoricakeményítő alapú műanyag

Az általam használt két minta sikeresnek bizonyult az ásványi olaj hatástalanítására. Mindkét anyag képes volt vékony réteget alkotni az ásványi olajjal a víz felszínén, majd ez a réteg könnyedén eltávolítható volt. A kukoricakeményítő alapú műanyag képes volt a festékhígítóval is elérni ugyanezt a hatást.

Egy konkurens termék leírása szerint a termék olajfelszívó képessége víz felszínén $0,19 \text{ dm}^3 \text{ olaj/dm}^3$ adszorbens. Ehhez az értékhez képest az általam vizsgált két anyag hatásfoka kétszer magasabb. Ez azt jelenti, hogy a vizsgált két anyagból kétszer kisebb térfogatú mennyiség szükséges, mint a konkurencia által használt anyagokból.

A költségszámítás elvégzése után megállapítottam, hogy az általam vizsgált két anyag előállítása nem drágább a konkurens termékek előállításától, hanem olcsóbb.

Összesítve tehát a vizsgált két anyag olcsó és hatásos megoldást nyújt az olajszennyeződés eltávolítására a víz felszínéről.

MEGYERI GÁBOR

Környezetmérnök
MSc, 2. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Nemestóthy Nándor
tudományos munkatárs, PE MK*

Ionos folyadékok a mezőgazdasági hulladékok hasznosításában: úton az egylépéses előkezelés és cellulóz hidrolízis felé

Az olcsó, megújuló forrásból származó lignocellulóz tartalmú anyagok jelentik a bioüzemanyag gyártás jövőjét. A fa és a mezőgazdasági hulladékok (pl. szalma, kukoricaszár, stb.) képezik azt az étkezési célokra nem használható nyersanyagforrást, amiből a bioüzemanyagok egy része megtermelhető, ugyanakkor nem veszélyeztetik az élelmiszer ellátást.

A lignocellulóz három fő összetevője a cellulóz, a hemicellulóz és a lignin. A bioüzemanyag előállítása ebből – ellentétben a szénhidrátokat (pl. glükóz és keményítő) felhasználó első generációs gyártással – három fő lépésben történik: 1) a nyersanyag aprítása és előkezelése, ami lignocellulóz tartalmú anyagokat alkalmassá teszi enzimés/mikrobiális/savas hidrolízis számára; 2) a cellulóz és hemicellulóz hidrolízise fermentálható redukáló cukrokká; 3) a cukrok fermentálása bioüzemanyagokká.

E lépések közül a napjainkban a leginkább vizsgált lépés az előkezelés, mert ennek elsődleges célja a lignocellulóz komplex feltárása, minek hatására az enzimek számára hozzáférhetővé, lebonthatóvá válik. A számos, eddig vizsgált fizikai, kémiai, biológiai vagy ezek kombinációjából álló eljárás mindegyike rendelkezik olyan hátrányokkal, melyek megakadályozták a gazdaságos használatot. Napjainkban előtérbe kerültek az ionos folyadékban végzett előkezelések. Ezek hatására a cellulóz szerkezet olyan mértékben fellazul, hogy antiszolvens adagolás hatására nagy hozammal nyerhető ki az amorf, az enzimés hidrolízis számára alkalmas cellulóz.

Kísérleti munkám célja és újszerűsége, hogy az ionos folyadékos (1-n-butil-3-metil-imidazolium-klorid ([Bmim]Cl)) előkezelést úgy végezzem el, hogy ne legyen szükség az antiszolvens alkalmazására, hanem a hidrolízist, az ionos folyadékos oldatban tudjam elvégezni. Vizsgálataimhoz modell anyagként tisztított cellulózt használtam. Több paraméteres kísérlettervezéssel határoztam meg az előkezelésre és az enzimés hidrolízisre jelentős hatást gyakorló paramétereket és optimális értékeiket. Ezen adatok birtokában végeztem további kísérleteimet kukorica (*Zea mays*) levélnek és szárának a keverékével. Megállapítottam, hogy az ionos folyadékos kezelés hatására a cellulóz szerkezet olyan változáson esett át, hogy a NOVOZYMES (Dánia) cég által kifejlesztés alatt levő Cellic® CTec2 és Cellic® HTec2 enzimkoplexek hatására magas hozammal képződött a már fermentálható glükóz.

MERÉNYI ANNA

Környezetmérnök

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Szakácsné Dr. Földényi Rita
egyetemi docens, PE MK***Különböző foszforformák vizsgálata talajban és üledékben**

A foszfor az alapvető anyagcsere-folyamatokban, az ATP-ADP átalakulásban, fotoszintézisben és szinte valamennyi biokémiai folyamatban nélkülözhetetlen tápelem, de részt vesz örökletes tulajdonságot hordozó vegyületek (DNS, RNS) felépítésében is. Emellett a növények növekedéséhez nélkülözhetetlen tápanyag, ezért műtrágyák összetevőjeként gyakran alkalmazzák. Azonban a műtrágya használatának következményeként a foszfor bemosódással bekerülhet az élővizetekbe. Főként az állóvizetekben okoz komoly problémát, mert a foszfor koncentráció növekedése elősegíti a különböző algák (elsődlegesen a planktonok) elszaporodását, ami eutrofizációhoz vezet.

A kutatás célja a Balaton üledékében lévő különböző foszforformák meghatározása. Ahhoz, hogy az egyes foszforformákat meg tudjam határozni, először ismerni kell az adott mintában lévő összes foszfort, ami a következő fontosabb formákból adódik össze: szervetlen monofoszfát, polifoszfát, szerves foszfor. Az eddig alkalmazott összes foszfor (TP) mérési eljárások foszfor-feltárás tekintetében nagy bizonytalansággal dolgoznak, ezért szükséges új, olcsó módszer fejlesztése. A kutatás első lépéseként a TP meghatározással foglalkoztam részletesebben, így a dolgozat elsősorban ezzel foglalkozik.

Ebben a vizsgálatban mikrohullámú roncsolással tartam fel az adott mintákat lúgos nátrium-peroxo-diszulfát-oldat segítségével, melynek hatására az összes foszfor mennyiség orto-foszfáttá alakult. Ammónium-molibdenátot tartalmazó reagens keveréket adtam hozzá a feltárt mintához, hogy a molibdenát az orto-foszfáttal kék színű, stabil komplexet képezzen, amelynek koncentrációja UV-VIS spektrofotometriás módszerrel mérhető. A fejlesztéshez ismert foszfor-tartalmú, a természetben is előforduló hidroxil-apatit mintát használtam referenciaként. Ez a vegyület nehezen feltárható, kristályban kötött foszfort (foszfátot) tartalmaz, ezzel a mintával próbáltam a feltárás hatékonyságát maximalizálni. A hidroxil-apatit mintákat átlagosan 95-105%-os visszanyeréssel tudtam feltárni. A későbbiekben a mérések során általam készített modellrendszerekkel, majd különböző helyekről származó üledékekkel dolgoztam. A modellek eltérő összetételű apatit-kvarc, apatit-humuszanyag keverékek voltak, míg az üledékminták a Balatonból és a Lónyay főcsatornából származtak. Megállapítható, hogy a szervesanyag-tartalom miatt a jobb visszanyerés érdekében az oxidálószer mennyiségét növelni kell.

A fent részletezett TP meghatározást követően a különböző foszforformákat szekvens kioldással vizsgálom.

Kulcsszavak: apatit, humuszanyag, kvarc, mikrohullámú feltárás, molibdenát

MÉSZÁR ETELKA ZSUZSANNA

Vegyészmérnöki

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezető:**Jedlovsky Pál**egyetemi magántanár, ELTE TTK*

Aromás szénhidrogének jégen történő adszorpciójának vizsgálata számítógépes Monte Carlo szimulációval

A feladatom során négy aromás vegyület jégfelületen történő adszorpcióját vizsgáltam Monte Carlo szimulációval. A négy aromás molekula az egy gyűrűből álló benzol, a két gyűrűből álló naftalin, valamint a három-három gyűrűből álló antracén és fenantrén. Utóbbi két molekula azonos szénatomszámú, de különböző geometriai szerkezettel jellemezhető.

Ezek az aromás vegyületek jégen történő adszorpciója elsősorban a felsőbb troposzférában játszódik le a természetben, ahová a repülőgépek által kibocsátott koromból jutnak aromás szennyeződések. Fontos tudni, hogy ezek az aromás vegyületek ilyen körülmények között milyen módon adszorbeálódnak a jég felületén, hiszen ezáltal bekerülhetnek a vízkörforgásba is. Jelen munkámban a troposzférában uralkodó körülményeknek megfelelően választottam meg a szimuláció paramétereit. A szimulációkban változtattam a kémiai potenciál értékét, és ennek függvényében vizsgáltam az aromás vegyületek adszorpcióját. A kapott eredmények alapján kiszámítottam az adszorpció izotermáit, valamint további analízisekkel meghatároztam az adszorbeálódott molekulák kétféle darabszámsűrűség-profilját, a különböző molekulák közötti kölcsönhatási energiák eloszlását, valamint a felülethez viszonyított orientációjukat, majd összehasonlítottam a négy aromás szénhidrogénre kapott értékeket, és levontam a következtetéseket.

Az eredmények alapján megállapítottuk, hogy a naftalin és a fenantrén esetén a kondenzáció a teljes felületi borítottság elérése előtt következik be, míg a benzol és az antracén képes a kondenzációhoz közeli állapotban telített monoréteg létrehozására a jég felületén. A molekulák a fekvő, a felszinnel párhuzamos helyzetet preferálják, viszont a szerkezetükből adódóan ferde elhelyezkedés is megjelenik másodlagos preferenciaként. Ezeket az eredményeket az orientációs vizsgálat mellett az energia eloszlások, – valamint a rendszerekről készült pillanatfelvételek is igazolják.

Kulcsszavak: kondenzált policiklikus aromás szénhidrogének, számítógépes szimuláció, adszorpció izoterma, légkörkémia, energia eloszlások

NÉMETH ZOLTÁN

Vegyész MSc

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Salma Imre
egyetemi tanár, ELTE TTK*

Légköri nukleáció városi környezetekben

Az ultrafinom aeroszol részecskék ($d < 100$ nm) nukleációval és közvetlen emisszióval kerülnek a levegőbe. Kutatásuk éghajlati hatásuk és egészségügyi többletkockázatuk miatt kiemelten fontos. Az aeroszol részecskék a felhőkondenzációs magvakon keresztül befolyásolják a felhők szerkezetét és élettartamát, tehát a planetáris albedót, és így a Föld energiamérlegét. A légzőszervek védekező mechanizmusai nincsenek felkészülve rendkívül nagyszámú, idegen anyagszemcse eltávolítására. A legkisebb részecskék bekerülhetnek a vérkeringésbe és megváltoztatják a vér egyes tulajdonságait (pl. alvadékonyságát). Kutatómunkánk során célul tűztük ki a légköri nukleáció és az ultrafinom aeroszol tulajdonságainak felderítését Budapest különböző környezeteiben.

Az aeroszol részecskék számának méreteloszlását differenciális mobilitás részecske szeparátorral (Differential Mobility Particle Sizer) mértük a 6–1000 nm átmérőtartományban. A rendszerrel mintegy 10 perces időfelbontással regisztráljuk a méreteloszlásokat 30 csatornában. Folyamatos méréseket végeztünk Budapest négy eltérő környezetében: városi háttérben (KFKI Telephely) 2 hónapot, nyílt belvárosi környezetben (ELTE Lágymányosi Campus) 1 évet, utcakanyonban (ELTE, Rákóczi út 5.) 2 hónapot és közlekedési mikrokörnyezetben (Várhegy-alagút) 2 hetet mértünk.

Az ultrafinom részecskék medián napi koncentrációja a városi háttérben, belvárosban, utcakanyonban és az Alagútban rendre 3.600, 10.200, 22.000 és 134.000 cm^{-3} , az ultrafinom-járulék a teljes koncentrációhoz a szórással rendre (77±9)%, (79±6)%, (85±3)% és (85±2)%.

Belvárosi forgalmas utak mentén a napi medián koncentráció hatszorosa, a Várhegy-alagútban több, mint harmincszorosa a városi háttérnek. Az ultrafinom részecskék átlagos járuléka a teljes koncentrációhoz lényegében állandó a különböző környezetekben. Nyílt belvárosi területen a napok 27%-ában történt nukleáció éves skálán. A nukleációs gyakoriságnak télen minimuma volt (7%), míg tavasszal elérte a 44%-ot. Az utcakanyonban a szennyezettebb környezet miatt kevesebb, a városi háttérben a kevésbé szennyezett környezet miatt több nukleáció történt a nyílt belvárosi területhez viszonyítva.

További terveink között szerepel a nukleáció térbeli eredetének becslése, az aeroszol részecskék keletkezési és növekedési sebességének számítása, kémiai összetételük meghatározása, illetve a részecskék növekedési faktorának vizsgálata is.

SÁGI GYURI

Környezettudomány

MSc, 5. félév

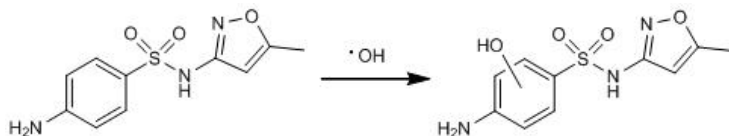
Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulensek:**Takács Erzsébet**tudományos tanácsadó, Magyar Tudományos Akadémia Energiatudományi Kutatóközpont**Csáy Tamás**tudományos munkatárs, Magyar Tudományos Akadémia Energiatudományi Kutatóközpont**Homonnay Zoltán**egyetemi tanár, ELTE TTK***Szulfametoxazol bontása ionizáló sugárzás hatására**

A modern társadalmak számára a hétköznapiak már elképzelhetetlenek a különböző, mesterségesen előállított vegyi anyagok nélkül. Az ipari mennyiségben előállított termékek sokszor a nem kellően megtisztított szennyvízzel együtt kikerülnek az élővizekbe, majd onnan az ivóvízbázisokba. A vízzel együtt elfogyasztott, lassan bomló, toxikus anyagok az élővilágban és az emberben is hosszú távon degeneratív elváltozásokat okozhatnak (BARAN W. et al. 2011). A molekulák környezetbe jutása elkerülhető lenne nagyhatékonyságú oxidatív eljárásokon alapuló szennyvíztisztító technikák, mint például az ionizáló sugárzás alkalmazásával (WOJNÁROVITS L. 2007).

Egy, a különféle vizekben gyakran megjelenő antibiotikum hatóanyag a szulfametoxazol (SMX) (LOOS R. et al. 2008). Munkánk során részletesen vizsgáltuk az SMX γ -sugárzás hatására bekövetkező degradációját vizes közegben, és a vízből keletkező reaktív közttermékek egyedi reakcióit. A mérésekhez számos analitikai módszert, úgymint az UV-látható spektroszkópiát és az LC-MS technikát is felhasználtuk. Megállapítottuk, hogy az SMX a vizsgált körülmények között hatékonyan bomtható, valamint azt, hogy levegő atmoszférán az elsődleges bomlástermék az SMX aromás gyűrűjének hidroxilálódásából keletkező molekula (ábra).



Az SMX és a sugárzás hatására keletkező termékek lebontását az elegyek TOC és KOI értékeinek mérésével követtük nyomon egészen a teljes mineralizációig. Megállapítottuk továbbá, hogy *Vibrio Fischerii* baktérium esetén, alacsony dózisoknál az SMX-nél toxikusabb anyagok keletkeznek, melyek azonban a dózis további növelésével lebonthatóak.

BARAN W. –ADAMEK E. –ZIEMIANSKA J. –SOBCZAK A. 2011: Journal of hazardous materials. 196. pp. 1-15.

LOOS R. –GAWLIK B. M. –LOCORO G. –RIMAVICIUTE E. –CONTINI S. –BIDOGLIO G. 2008: JRC Scientific and Technical Reports. 51 p.

WOJNÁROVITS L. 2007: Sugárkémia. –Akadémia Kiadó, Budapest. 247 p.

SCHÖFFER MÓNIKA

Környezetmérnöki

MSc, 1. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulens:**dr. Kovács József**egyetemi adjunktus, PE MK*

Néhány szénhidrogén koncentráció-eloszlásának tanulmányozása Veszprém város levegőjében

Kulcsszavak: levegőszennyezés, BTEX, illékony szerves szennyezők, adszorpció, GC-FID

Az emberi szükségletek kielégítésére szervezett termelő folyamatok és szolgáltatások következtében a környezeti levegő szennyezőanyag tartalma –különösen az ipari termelés és a nagyobb lélekszámú agglomerátumok környezetében- növekvő tendenciájú. Az előforduló levegő szennyező komponensek közül egyre többről nyerünk olyan információt, hogy az emberi egészségre ártalmasak (lehetnek). Ezen szempontok alapján a dolgozatomban a környezeti levegő szennyezőanyagai közül az illékony szerves vegyületekkel, részletesebben a benzol, toluol, etil-benzol és xilolok (BTEX vegyületek) szerepével foglalkozom.

A dolgozat irodalmi részében röviden összefoglaltam az illékony szerves szennyezők természetes és mesterséges kibocsátó forrásait, az ismert egészségügyi hatásaikat, az atmoszférában lejátszódó kémiai folyamatait, valamint a légkörre gyakorolt hatásait. Ismertetem a szakirodalomban fellelhető -ezen komponensekre alkalmazható- mérési módszereket, melyek közül célirányosan bemutatom a BTEX vegyületek légköri koncentrációjának meghatározására alkalmazható eljárásokat.

A diákköri dolgozatom gyakorlati részében bemutatom Veszprém város kijelölt helyein, meghatározott időben végzett levegőminta vételi, majd az adszorbeált mintáknak a laboratóriumi előkészítése utáni gázkromatográfiás analízis módszerét, és a feldolgozás utáni eredményeket ismertetem. A BTEX vegyületek koncentrációinak meghatározása mellett kitértem a mintavétel során használt Anasorb CSC adszorbens csőben található aktív szén (eredeti és használt minta) morfológiai vizsgálatára is, vizsgálva az esetleges újrafelhasználás lehetőségét.

A dolgozatomban bemutatott eredmények azt bizonyítják, hogy Veszprém városában a BTEX vegyületek koncentrációja mérési helyenként eltérő mértékű, még a közlekedéssel kevésbé terhelt helyszíneken is jelentős koncentrációban fordulnak elő, forrásuk behatárolásához további mérésekre van szükség.

SZEREMI ZSOLT RÓBERT

Vegyéssz mérnök

BSc, 5. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulens:
dr. Varga Csilla
egyetemi adjunktus, PE MK*

Műszaki gumihulladék újrahasznosítása

Kísérleti munkám célja az etilén-propilén-dién kopolimer (EPDM) tartalmú műszaki gumihulladék újrahasznosítási lehetőségeinek vizsgálata volt. Ennek érdekében tanulmányoztam a műszaki gumik felhasználási területeit, újrahasznosítási lehetőségeiket, illetve az EPDM blendekhez alkalmazható adalékokat, azok hatásait.

Munkám során kereskedelmi forgalomban kapható, nagy sűrűségű polietilént (HDPE, TIPELIN 7100S), illetve újrahasznosított polietilént használtam. Mindkét alapanyagban különböző koncentrációban alkalmaztam EPDM hulladékot, illetve a homogenitás elősegítése érdekében kísérleti kompatibilizáló adalékokat. Az alapanyagokból a blendeket hengerszéken homogenizáltam, majd préseléssel állítottam elő a mechanikai vizsgálatokhoz megfelelő mintadarabokat.

A minták húzó igénybevétellel szembeni ellenálló képességét vizsgáltuk. A komponensek összeférhetőségének javítására a tanszéken kifejlesztett kompatibilizáló adalékokat alkalmaztam, és vizsgáltam a húzó mechanikai jellemzőkre kifejtett hatást. Az eredmények alapján megállapítottam, hogy a megfelelő szerkezetű adalék kiválasztásával akár 30-50%-os javulást is elérhetünk a hulladék polietilén alapú blendekben.

SZLUKA NIKOLETTA

Biomérnök
BSc, 3. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
dr. Varga Csilla
egyetemi adjunktus, PE MK*

Biológiailag lebomló töltőanyag alkalmazása hulladék polietilénben

A környezetvédelem jelentőségének növekedésével a biológiailag teljes vagy részben lebomló kompozitok kutatására nagy figyelmet fordítottak az elmúlt két évtizedben. Nagy erőfeszítéseket tettek annak érdekében, hogy a petrokémiai alapanyagokból előállított műanyagokat biopolimerekkel, illetve biokompozitokkal helyettesítsék.

Egyfajta megoldás lehet, ha a tömegműanyagokban, pl. PP-ben vagy PE-ben, biológiailag lebomló komponenseket alkalmazunk. Így részben biológiailag lebomlóvá lehet tenni a készterméket, ezáltal csökkenthető a környezetterhelés, másrészt gazdasági szempontból is kedvező lehet, mert olcsó alapanyagokból indulunk ki.

Kísérleti munkám során ezért különböző összetételű, biológiailag lebomló töltőanyagot alkalmaztam polipropilén és polietilén mátrixban. Vizsgáltam egyrészt a polimer alapanyag típusának hatását. Ebben a kísérletsorozatban kereskedelmi forgalomban kapható PP és PE polimerek mellett hulladék HDPE alapanyagot is alkalmaztam. Kísérleti munkám második részében különböző összetételű biológiailag lebomló töltőanyagokat alkalmaztam hulladék HDPE alapanyagban. Az alapanyag és a töltőanyagok, illetve a feldolgozási körülmények hatását mindegyik esetben a húzó mechanikai jellemzők változásán keresztül vizsgáltam.

SZUNYOG GYÖRGYI

Kémia

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:
Szilágyiné Puskás Erzsébet
laborvezető, DE TTK*

Szennyvíztisztító telepek tisztítási hatásfokának összehasonlítása különböző kémiai paraméterek vizsgálata alapján

Az általam vizsgált két szennyvíztelepen az alkalmazott tisztítási technológia közel azonos, de a telepekre érkező szennyvizek mennyisége és minősége is lényeges eltérést mutat.

Az alapvetően kifogástalanul működő Nyíregyházi Szennyvíztisztító Telep működését nyári szezonban a konzervüzemi szennyvizek magas szerves-anyag tartalma zavarja, de ennek ellenére a tisztított szennyvíz valamennyi paramétere megfelel a jogszabályi előírásoknak

Nem mondható el ugyanez a Nyírbogdányi Szennyvíztisztító Telep esetén, ahol az ammónia eltávolítás hatásfoka nem megfelelő. A tisztított szennyvíz ammónia tartalma tartósan, de különösen a téli időszakban határérték fölött van. Jelentős javulást a telep átalakítása fog jelenteni.

A grafikonokban mutatkozó kisebb ingadozások elemzése további vizsgálatot igényelne.

A meglévő szennyvíztisztítási technológiákat folyamatosan fejleszteni kell, mert a kibocsátási határértékek egyre szigorodnak, ill. várható, hogy újabb paraméterek vizsgálata (gyógyszermaradványok, hormonok stb.) válik kötelezővé.

A közcsatornába szennyvizet bocsátó ipari fogyasztóknak is érezniük kell a felelősségüket a környezet megóvásában. A környezetvédelmi hatóságok szerepe pedig az, hogy követeljék meg határozottabban az előtisztítók létesítését és hatékony üzemeltetését.

A dolgozat elkészítését a TÁMOP--4.2.2/B-10/-1-2010-0024 számú pályázat támogatta.

TÓTH BALÁZS

Vegyészmérnök

BSc, 11. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

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

Hulladék gumiőrlemény újrahasznosítási lehetőségeinek vizsgálata

TDK dolgozatomban a gumihulladék újrahasznosíthatóságának három módozatát vizsgáltam. Az első részben az alapkeverék hulladék gumiőrlemény visszadolgozott koncentrációjának hatását tanulmányoztuk. Ennek során azt vizsgáltuk, hogy mennyi hulladék gumiőrleményt lehet visszakeverni töltőanyagként az alapkeverékhez a mechanikai tulajdonságok romlása nélkül. Ettől függ ugyanis, hogy mennyi alapanyag spórolható meg ezzel a művelettel. Továbbá a hulladékot minél kevesebb számú feldolgozó eljárás után lehessen használni, vagyis egy széles szemcseméret tartományú őrlemény minél nagyobb arányú visszakeverése a cél, mivel a finom őrlés nagyon megdrágítja a hulladék feldolgozást. A második eljárás egy új fizikai-kémiai devulkanizációs eljárás kidolgozásával a káros anyag kibocsátás csökkentése és az eljárás egyszerűsítése mellett. A harmadik alkalmazása során szén nanocsővel erősített gumikompozitok mechanikai vizsgálata és az eredmények értékelése volt a feladatomban. Mivel a szén nanocsőnek kiemelkedő tulajdonságai vannak, nagy teljesítményű anyagok állíthatók elő ha erősítőanyagként alkalmazzák kompozitokban. Emellett igen drága a gumi viszont olcsó, ezért nem foglalkoznak elterjedten a társításukkal. További problémát jelent, hogy a szén nanocsővel nehéz dolgozni, sok előírást kell betartani, mivel egészség károsító hatása is van. A vizsgálattal azt kívánom feltárni, hogy alapkeverék tulajdonságú kompozitok előállíthatók e hulladék gumiőrlemény szén nanocsővel történő erősítésével.

Reakciókinetika és katalízis tagozat

BAGI NÁRCISZ MÁRIA

Vegyész MSc.

MSc, 12. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Speier Gábor
professzor emeritus, PE MK*

Tiofenol katalitikus oxidációja dioxigénnel

Kulcsszavak: FAD, 2,3-dihidro-1,3,2-benzoxazafoszfol, fémmentes katalizátor

A ma ismert enzimek közel egyharmada tartalmaz fémiont vagy fémionokat, amelyek többféle funkciót is elláthatnak. Amennyiben a fém aktívan részt vesz a katalízisben, ezeket metalloenzimeknek nevezzük. Az oxidoreduktázok (vagyis szerves molekulák redox átalakítását elősegítő enzimek) legtöbbször is metalloenzim, ahol egy redoxaktív fém tölt be kulcsszerepet az elektronátviteli reakcióban. Léteznek azonban olyan képviselőik is, amelyek nem tartalmaznak fémiont, ilyenkor szerves molekularészek (pl. a tirozin fenolos hidroxilcsoportja, a redukált FAD (Flavin-adenin-dinukleotid) flavinja) töltik be az elektronátvivő szerepet.

Ezen enzimekkel párhuzamba állíthatók az egyre elterjedtebben alkalmazott szerves katalizátorok, amelyek számos esetben helyettesíthetik a drága és kevésbé környezetbarát fémeket homogén katalitikus folyamatokban.

Biológiai rendszerekben a tiolokból FAD közreműködésével is képződhet diszulfid-híd. Kutatásunk célja ennek mintájára olyan fémmentes katalitikus rendszer tanulmányozása volt, ahol a FAD szerepét az általunk előállított oxazafoszfol heterociklus tölti be. Katalitikus rendszert dolgoztunk ki tiofenol oxidációjára dioxigénnel, oxazafoszfol jelenlétében, majd a reakciót kinetikai módszerekkel vizsgáltuk és javaslatot tettünk a mechanizmusra.

BAJUSZ DÁVID

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Lente Gábor
egyetemi docens, DE TTK*

Kémiai reakciók az Os(VI)-Os(VIII)-perjodation-formiácion rendszerben

A metán metanollá történő oxidálása egy régen fennálló kihívás és egyelőre megoldatlan probléma a kémikusok számára. [1] Kutatómunkánk legfontosabb előzményét egy 2006-ban megjelent cikk adja, amelynek szerzői sikeresen oxidáltak metánt metanollá laboratóriumi körülmények között, nátrium-perjodát és ozmium-tetroxid elegyével. [2] A szerzők olyan megfigyeléseket is tettek a rendszerrel kapcsolatban, amelyek reakciókinetikai szempontból érdekesek. Megfigyelték, hogy külön-külön a két oxidálószer nem alkalmas a reakció kivitelezéséhez, tehát egyfajta egymást segítő, szinergikus hatás feltételezhető a komponensek között.

Kutatócsoportunk munkájának célja a perjodationnal és ozmium-tetroxiddal történő oxidációk mechanizmusának a vizsgálata reakciókinetikai úton. Redukálószernek a formiáciont választottuk, mivel oldatfázisban is használható (ezáltal a kísérletek könnyebben kivitelezhetők és ismételhetők a metán oxidációjához képest), ezenkívül a metánhoz hasonlóan C-H kötés oxidálódik benne.

Kutatómunkánk során reakciókinetikai méréseket végeztünk, elsősorban UV/VIS spektrofotometria segítségével. Összehasonlításképpen megvizsgáltuk a perjodation és a formiácion közötti reakciót is, ozmium-tetroxid nélkül, de egyébiránt azonos körülmények között. A két reakció mechanizmusa egymástól lényegesen különböző, így mindkét folyamatra meghatároztuk a reakciósebesség függését a reaktánsok koncentrációjától és az eredmények értelmezésére kinetikai modellt állítottunk fel.

Továbbra is tisztázatlan kérdés az ozmium-tetroxid szerepe a reakcióban: az eddigi eredmények alapján azt valószínűsítjük, hogy az ozmium-tetroxid a perjodation – oxidatív reaktivitás szempontjából jelentősen eltérő – tetraéderes, illetve oktaéderes formái közötti egyensúlyi reakcióra lehet hatással. Ennek a kérdésnek a tisztázása végett a kutatómunkát kiterjesztettük a rendszerben végbemenő további folyamatok, közülük is elsősorban a perjodation és a köztiterméként megjelenő ozmation vizsgálatára.

[1] Olah, G. A.; Goepfert, A.; Surya Prakash, G. K.: Beyond oil and Gas: The Methanol Economy, Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

[2] Osaka, T.; Watson, E. J.; Dehestani, A.; Bales, B. C.; Mayer, J. M. Angew. Chem. 2006, 118, 7593.

BALOGH ÁGNESVegyészmérnök
BSc, 7. félévDebreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar**CSIMBÓK ERVIN**vegyészmérnök
BSc, 7. félévDebreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Lente Gábor
egyetemi docens, DE TTK*

Az 1-metil-triptofán és a triptofánamid oxidációja peroxomonoszulfát-ionnal

Tudományos diákköri munkánk során a triptofánamid és az 1-metil-triptofán peroxomonoszulfát-ion közötti reakció kinetikáját és mechanizmusát vizsgáló kísérleteket végeztünk. A triptofánamid esetén 278 nm-es hullámhosszon, valamint az 1-metil-triptofán esetén a 296 nm-es hullámhosszon végzett spektrofotometriás vizsgálatok alapján arra következtettünk, hogy a görbék első, csökkenő szakaszát exponenciális görbével jól lehet illeszteni, így az említett két triptofánszármazékokra tekintve elsőrendű. A görbék hosszabb szakaszát kétexponenciális görbével jól lehet értelmezni, így meghatároztuk a másodrendű sebességi együtthatókat is. Következtetésképpen levonható, hogy a reakciók oxonra nézve is elsőrendűek. Spektrofotometriás titrálás segítségével a reakció sztöchiometriájára következtethetünk. Az általunk vizsgált mindkét triptofánszármazék esetében ezen kísérletek alapján megállapítható, hogy a reakció több lépést tartalmaz. A két vegyület vizsgálatát összehasonlítva arra következtethetünk, hogy sem az amid sem pedig a metil csoport nem befolyásolja a reakció végbemenetelét. A kísérleteket savas és semleges pH-n is elvégeztük és megállapítottuk, hogy a pH nincs számottevő hatással az oxidációra. A triptofánamid változó koncentrációjának a vizsgálata során a vártnak megfelelően azt a következtetést kaptuk, hogy a meghatározó reaktáns koncentrációjától a pszeudo elsőrendű sebességi állandók függetlenek.

BARANYI ATTILA

Kémia

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Papp Gábor**tudományos munkatárs, MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok Kutatócsoport,
Fizikai Kémia Tanszék*

Kationok hatása a $[RuCl_2(mtpms)_2]$ -komplex katalizált formiát bontásban

Alkálifém- és alkáliföldfém-formiátok homogén katalitikus bontását tanulmányozva megállapítottam, hogy a különböző kationokat tartalmazó sók bomlási sebessége változik. Megállapítottam hogy Mg^{2+} és Ca^{2+} kation tartalmú rendszerek sokkal lassabban bomlanak az adott körülmények között, mint a Li^+ , Na^+ , K^+ illetve Cs^+ tartalmú rendszerek. A lítium, nátrium és kálium formiátsók hasonló sebességgel bomlanak. A Cs^+ kation tartalmú oldattal való vizsgálatok esetében a meghatározott TOF értékek láthatóan nagyobbak, mint az összes többi formiát esetében. Következtetesképpen elmondható, hogy a vizes oldatokban az alkalmazott Ru-komplex katalizátorral a leggyorsabban a HCOOCs bomlik így a későbbi gyakorlati alkalmazhatóság szempontjából ezzel a formiáttal érdemes folytatni a vizsgálatokat.

Minden formiát esetében az Arrhenius-összefüggés grafikus formáját alkalmazva meghatároztam a látszólagos aktiválási energia értékeket. Ezek rendre a vártak szerint alakultak a TOF értékek változásával, azaz a legnagyobb E_a a $(HCOO)_2Mg$ -hoz míg a legkisebb a HCOOCs-hoz tartozik.

Ezen különbségek pontos magyarázatának felderítése nagy segítség lehet, hogy közelebb kerüljünk egy megfelelő hidrogéntárolási módszerhez, melynek köszönhetően felhagyhatunk az eddig alkalmazott üzemanyagok használatával, és környezetbarátabbá tehetjük a mindennapi energiatermelést, energiafelhasználást.

BOGÁTH DÁNIEL

Vegyészmérnök BSc

BSc, 3. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Kaizer József**egyetemi tanár, PE MK**Dr. Pap József Sándor**egyetemi adjunktus, PE MK*

N3 és N3O donor ligandumok átmenetifém-komplexeinek katalitikus hatása hidrogén-peroxiddal végzett reakciókban

Míg egyes enzimek (katalázok) a hidrogén-peroxid gyors elbontására specializálódtak, amellyel részt vesznek a szervezet oxidatív stressz elleni védekezésében, addig más enzimek hidrogén-peroxidot termelnek, vagy épp felhasználják azt oxidációs reakciókban. E kettősség mintájára mesterséges modellek is elképzelhetők, amelyeknek mindkét irányú tulajdonsága vizsgálható. A kataláz modellek gyógyászati, a hidrogén-peroxiddal végzett, ún. biotánzó reakciók (zöld oxidációk) pedig ipari szempontból lehetnek fontosak.

A csoportban végzett korábbi kutatások folytatásaként szeretnénk volna olyan ligandumpárral dolgozni, amely lehetővé teszi a karboxilát-csoportnak a fenti reakciókban betöltött szerepének vizsgálatát. Modellvegyületként egymagvú átmenetifém-komplexeiket (Mn, Fe, Co, Ni és Cu) állítottunk elő, N-metilpropionát-N,N-bisz-(2-piridil-metil)-amin (MPBMPA) és N-propionát-N,N-bisz-(2-piridil-metil)-amin (HPBMPA) ligandumok [1] segítségével. A komplexeket infravörös és UV-látható spektroszkópiával, ciklikus voltammetriával és röntgendiffrakciós mérések segítségével jellemeztük [2].

Munkánk során vizsgáltuk a H_2O_2 bomlási sebességét (kataláz modell), ill. a morin oxidációját (oxigenáz aktivitás) a komplexek jelenlétében. Összefüggést találtunk e két aktivitás között, ami arra utalhat, hogy ugyanazon aktív intermedierek lépnek fel mindkét reakciótípusban.

[1] N.M.F. Carvalho, A. Horn, Jr., R.B. Faria, A.J. Bortoluzzi, V. Drago, O.A.C. Antunes, Inorg. Chim. Acta 359 (2006) 4250–4258.

[2] József S. Pap, Balázs Kripli, István Bors, Dániel Bogáth, Michel Giorgi, József Kaizer, Gábor Speier, J. Inorg. Biochem. 117 (2012) 60-70.

BOGDÁNDI VIRÁG

kémia

BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Lente Gábor
egyetemi docens, DE TTK*

Az izoniazid és a permanganát közötti reakció

Tudományos diákköri dolgozatom tárgya az izoniazid és a permanganátion közötti reakció. Az izoniazid a tuberkulózis megelőzésében és kezelésében használt első számú antibiotikum, melynek lebontása az élő szervezetben oxidáció valamint hidrolízis által történhet. Munkám célja egy oxidációs reakció tanulmányozása volt, így kísérleteim során az izoniazidot kálium-permanganáttal oxidáltam kénsavas közegben.

Első lépésben a reakció sztöchiometriáját határoztuk meg spektrofotometriás titrálással. Az izoniazid hidrazinscsoportjának oxidációja két úton is lejátszódhat, egyik esetben izonikotinsav, míg másik esetben izonikotinamid keletkezik, emellett mindkét reakcióban nitrogéngáz is fejlődik. A termékeket tömegspektrometriás mérés segítségével is azonosítottuk. A sztöchiometria meghatározásánál kapott eredmények, valamint a tömegspektrum jelintenzitásai arra engednek következtetni, hogy az izonikotinsavat eredményező folyamat dominál.

A reakciókinetikai mérésekhez az optimális hullámhossz 537 nm-nek adódott, amely összhangban van azzal, hogy a reakció során a permanganátion jellegzetes színének eltűnését tapasztaltuk. A kinetikai méréseket ezen a meghatározott hullámhosszon folytattuk stopped-flow készülék segítségével, ugyanis a reakció egy-két másodperc alatt lezajlik.

Az izoniazidot nagy feleslegben alkalmaztuk a kísérletek során, így arra számítottunk, hogy a reakció elsőrendű lesz a permanganátionra nézve. Ezt az elméletet azonban két okból is el kellett vetni. Egyrészt az exponenciális görbe illeszkedése a kinetikai görbére nem volt tökéletes, másrészt az elsőrendű illesztésből kapott pszeudo-elsőrendű sebességi állandó nemcsak az izoniazid, hanem a kálium-permanganát koncentrációjától is függ.

Figyelembe véve azt, hogy az alkalmazott savas közegben a permanganátionok redukciójakor autokatalitikus hatású Mn^{2+} ionok keletkeznek, feltételeztük, hogy a vizsgált reakció is ilyen sajátosságot mutat. A feltevést alátámasztotta az autokatalitikus sebességi egyenlet meglepően jó illeszkedése a kinetikai görbére. Emellett azt is megállapítottuk, hogy a Mn^{2+} -ionok hatása nem nagy mértékű, tehát gyengén autokatalitikus reakcióról van szó.

GERGELY MÁTÉ

Vegyész

MSc, 1. félév

Pécsi Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Dr. Kollár László
egyetemi tanár, PTE TTK*

Palládium-katalizált aminokarbonilezési reakciók pikolilaminok jelenlétében

Tudományos diákköri munkám során a pikolilamin három szerkezeti izomerének, mint N-nukleofilnek alkalmazását vizsgáltam homogénkatalitikus aminokarbonilezési reakcióban. A jódaromás (jód-benzol) és jódarkén (1-jód-ciklohexén) szubsztrátumok esetében mutatott kemoszelektivitásbeli eltérések feltérképezése során a következő megállapításokra jutottam.

- A jódbenzol szubsztrátum pikolilamin izomerek, mint N-nukleofilek jelenlétében végzett, palládium-katalizált aminokarbonilezési reakciójában megvalósítottam a megfelelő N-pikolil-karbonsavamid, ill. N-pikolil-glioxilamid származékok előállítását. Az N-(2-pikolil)-benzamidot és valamennyi N-pikolil-glioxilamid származékot analitikai tisztaságban elkülönítettem és meghatároztam szerkezetét.
- Az 1-jód-ciklohexén aminokarbonilezési reakciója során kizárólag az egy szén-monoxid beékelődésével magyarázható karbonsavamid keletkezett. Mindhárom pikolilaminnal kapott amidot analitikai tisztaságban kinyertem és meghatároztam szerkezetét.
- Megállapítottam, hogy jódbenzol aminokarbonilezése során a nagy nyomás (>20 bar CO) a kettős szén-monoxid beékelődéssel keletkező ketokarbonsavamid képződésének kedvez.
- A fenti reakcióban, a 20-60 bar tartományban a CO nyomás növelése nem befolyásolja lényegesen a kemoszelektivitást.
- Megállapítottam, hogy jódbenzol aminokarbonilezése során az alacsonyabb hőmérséklet a karbonsavamidok, míg a magasabb hőmérséklet a ketokarbonsavamidok képződésének kedvez.

A jövőbeli terveim közé tartozik olyan biológiai fontosságú vegyületek szintézise, új szintézis-stratégiák kidolgozása, amelyek pikolilamin izomerek jelenlétében végzett aminokarbonilezés mint kulcsreakció alkalmazásán alapulnak.

HOMOLYA LEVENTE

Kémia BSc

BSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

Konzulensek:
Dr. Joó Ferenc
egyetemi tanár, DE TTK
Voronova Krisztina
PhD hallgató, DE TTK

Új, vízdoldható Pd-szalán komplexek előállítása és katalitikus alkalmazása

Napjaink környezettudatos gondolkodásmódja megköveteli a kutatóktól is, hogy munkájuk során olyan reakciókat, módszereket fejlesszenek, melyek energia- és költségtakarékosak, illetve kevésbé szennyeznek a környezetet. Ennek okán egyre inkább használnak szerves kapcsolási reakciókban is vizet oldószerként. A víz, szemben a szerves oldószerekkel, olcsó és nem mérgező vagy gyúlékony.

A Sonogashira-reakció napjaink egyik legelterjedtebb C-C kapcsolása könnyű kivitelezhetősége és nagy funkciós csoport toleranciája miatt. Ezért célul tűztük ki olyan vízdoldható Pd-komplexek előállítását, melyek katalitikusan aktívak lehetnek foszfin- és rézmentes Sonogashira-kapcsolásban.

Munkánk során három vízdoldható Pd-szalán komplexet szintetizáltunk (PdHSS, PdBuHSS, PdCyHSS) és jellemeztünk. A ligandumok közül kettőt (BuHSS, CyHSS) mi állítottunk elő és jellemeztünk először. A komplexek egyike sem ismert még az irodalomban.

A Sonogashira-kapcsolás vizsgálatára jód-benzol és fenilacetilén reakcióját választottuk. Oldószerként vizet alkalmaztunk, a szubsztrátumok képezték a szerves fázist. A reakciókat fázistranszfer katalizátor hozzáadása nélkül végeztük el.

Tanulmányoztuk a különböző szerves és szervetlen bázisok hatását a reakciósebességre. Mind a három Pd-komplex esetében trietil-amin alkalmazása mellett értük el a legmagasabb konverzióértékeket (96-98 %, szubsztrátum/bázis= 1/2, szubsztrátum/katalizátor= 100/1, 80°C, 6 óra). További méréseinkhez a PdBuHSS komplexet alkalmaztuk. Trietil-amin bázissal vizsgáltuk a reakció időfüggését. Azt tapasztaltuk, hogy fél óra reakcióidőig (67,5 %) a konverzió értéke gyorsan nő, majd ezután lelassul. Ennek okát keresve tanulmányoztuk a szubsztrátum/bázis arány reakcióra gyakorolt hatását. Azt tapasztaltuk, hogy 1/4 aránynál a reakció már 1 óra alatt is közel teljes mértékben lejátszódik (93 %), a bázis mennyiségének további növelése nem eredményezett magasabb konverziót.

A katalizátor mennyiségének hatását is vizsgáltuk a reakciósebességre. Azt tapasztaltuk, hogy a Pd-komplex arányának csökkenésével természetesen a konverzió is csökkent. Azonban az óránkénti katalitikus ciklusszám (TOF) maximum görbe alapján változott. A legmagasabb TOF értéket 3000/1= szubsztrátum/katalizátor aránynál értük el 30 perc alatt, melynek értéke 1596 h⁻¹. A reakció idő függését is tanulmányoztuk, mely alapján elmondható, hogy 4 óra alatt a kapcsolás majdnem teljesen lejátszódik (97 %). Eredményeink alapján elmondható, hogy az általunk előállított Pd-szulfoszalán komplexek hatékonyak vizes közegű Sonogashira kapcsolási reakciókban. A kiemelkedő aktivitást foszfin- és rézmentes körülmények között értük el, hozzáadott fázistranszfer katalizátor nélkül.

KISS MELITTA PATRÍCIA

Vegyész mesterszak
MSc, 1. félév
Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Konzulensek:
Dr. Valicsek Zsolt
egyetemi adjunktus, PE MK
Dr. Horváth Ottó
egyetemi tanár, PE MK

Szamárium(III)ion és vízdoldható, anionos porfirin reakciójának kinetikai vizsgálata

Kulcsszavak: síkon kívüli komplex, lantanoida(III)ionok, oligomerizáció, farok-farok kapcsolat, spektrofotometria

A porfirin komplexek széles körben tanulmányozott vegyületek. Ezek között is kiemelt figyelmet érdemelnek a síkon kívüli (out-of-plane=OOP vagy sitting-atop=SAT) komplexek, ugyanis ha a fémion sugara 75-90 pm érték körül van, valamint nem hajlamos oktaédes vagy síknégyzetes elrendeződésre, nem fér bele a porfirin koordinációs üregébe, hanem annak síkja felett helyezkedik el, és kupolásan torzítja azt. 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. Ezen kívül a SAT komplexek termodinamikai stabilitása és kinetikai inertsége kisebb, mint a normál metalloporfirineké, ezért utóbbiak katalitikus előállítására is alkalmasak lehetnek.

A lantanoida(III) fémionok sugara 86-103 pm között változik, az általam vizsgált szamárium(III)ioné 6-os koordinációs számnál 95,8 pm (8-asnál 107,9 pm). Így ezek a fémionok a ligandum koordinációs üregére „ülnek”, ezáltal alkalmasak a SAT porfirin komplexek tulajdonságainak vizsgálatára.

Munkám során a szamárium(III)ionnak és egy vízdoldható, anionos porfirinnek a reakcióját vizsgáltam spektrofotometriásan, a látható fény tartományában követve. Vizes oldatban a kemény lantanoida(III)ionok beépülése a négyfogú, N-donor porfirin ligandum koordinációs üregébe az oldószermolekulák erős koordinációja miatt is lassú és összetett folyamat. Háromféle ionerősség-szabályzó iont használtam: acetátot, kloridot és perklorátot, melyek különböző koordinációs képességgel rendelkeznek. Az acetátion 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 biszporfirin komplex képződött.

Vizsgáltam az ionerősségnek és a hőmérsékletnek a hatását is a reakcióra, s megállapítottam, hogy a fémion és a porfirin asszociációja is szerepel a sebesség-meghatározó lépések között. Emellett azt tapasztaltam, hogy kisebb hőmérsékleten a szamárium(III)ion nem a porfirin üregéhez koordinálódott, hanem az oldalláncban levő szulfonáto-csoporthoz. Tehát a hőmérséklettel befolyásolható, melyik koordinációs helyre épüljön be a fémion.

A szamárium(III)ionok oligomerek formájában vannak jelen az oldatban, és a porfirin komplex képződéséhez ezen oligomerek elődisszociációjára is szükség van.

Az egyensúly teljes leírására a ZITA nevű kinetikai program használatával tudtam sebességi állandókat számolni.

PAPP MÁTÉ

Kémia
BSc, 7. félév
Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
Skodáné Dr. Földes Rita
egyetemi tanár, PE MK*

Hordozóhoz kötött palládium katalizátorok vizsgálata aminokarbonilezési reakciókban

Kulcsszavak: heterogenizálás; jódbenzol; ionfolyadék; amid; ketoamid

Az elmúlt években számos cikk jelent meg a hordozóhoz rögzített ionfolyadék katalizátorokkal kapcsolatban, de aminokarbonilezési reakciókat még nem vizsgáltak ilyen körülmények között. A Szerves Kémia Intézeti Tanszéken korábban végeztek aminokarbonilezési reakciókat ionfolyadékokban, azonban a termékek elválasztása és a katalizátor recirkulációja könnyebben megvalósítható, ha az ionfolyadékot szilárd hordozóhoz rögzítjük, és erre visszük fel a katalizátort. Munkám során tehát célul tűztem ki ilyen katalizátorok előállítását és tesztelését aminokarbonilezési reakciókban.

Az ionfolyadék hordozóhoz való rögzítése történhet fizikai adszorpcióval vagy kovalens kötések kialakításával. A katalizátorok előállítása során mindkét módszert alkalmaztam. Kiindulási anyagként Pd(0)- és Pd(II)-vegyületeket is használtam. Katalizátorokat készítettem további ligandumok hozzáadása nélkül és foszfán ligandumokkal is.

Az előállított katalizátorokat jódbenzol és morfolin karbonilezési reakciójában, CO-nyomás alatt, bázis jelenlétében teszteltem. Legjobb eredményeket az oldószer hozzáadása nélküli reakciók során értem el, ekkor a katalizátort 9-10 körön keresztül fel lehetett használni. Vizsgáltam a katalizátorok szelektivitását a reakciók során. Megállapítottam, hogy a reakciókörülmények megfelelő módosításával a mono- és kettős karbonilezett termékek aránya jelentős mértékben változtatható. Meghatároztam a palládium és az ionfolyadék kioldódását a reakciók során.

A hozamok megállapítása és a termékek szerkezetének tisztázása GC, illetve GC-MS alapján történt.

PETRI BALÁZS

Vegyészmérnöki BSc

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Dóbbé Sándor**egyetemi magántanár, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont,
Anyag- és Környezetkémiai Intézet**Farkas Mária**tudományos munkatárs, Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont,
Anyag- és Környezetkémiai Intézet***A levulinsav-etilészter és OH-gyök elemi reakciójának vizsgálata
direkt kinetikai módszer alkalmazásával**

Közismert, hogy a bioüzemanyagokat (pl. bioteanolt) alternatív megújuló üzemanyagként javasolják a fosszilis eredetű üzemanyagok felváltására, így csökkenthető a növekvő CO₂ koncentráció által okozott klímaváltozás. Újjonnan kerültek előtérbe az ún. második generációs (2G) bioüzemanyagok, nem élelmezési célokra használt cellulóz anyagokból állítanak elő. Diákköri kutatásaimban az egyik legígéretesebb 2G bioüzemanyag, a levulinsav-etilészter (ELA) reakciókinetikai vizsgálatával foglalkoztam. Az ELA OH-gyökkel végbenő reakciójának kinetikai vizsgálatát végeztem el, amely az egyik legfontosabb reakciója a légkörben és az égésekben egyaránt.



Céлом az (1) reakció sebességi együtthatójának meghatározása volt, mintegy kezdeti lépésként, szobahőmérsékleten végezve a vizsgálatokat. A kísérleteket az ún. direkt reakciókinetikai módszerek sorába tartozó impulzuslézer-fotolízissel végeztem, amelyet az OH-gyök koncentráció időbeli változásának követésére rezonancia-fluoreszcenciás detektálással kapcsoltam össze. Az OH-gyököt a salétromsav lézervillanófény fotolízisével állítottam elő (HNO₃ → OH + NO₂). Az OH-gyök időbeli változását a reaktáns ELA jelenlétében, a ms időskálán követtem nyomon. A kísérleteket pszeudo-elsőrendű körülmények között, nagy ELA feleslegben végeztem [ELA] >> [OH]₀ ≈ 5,5 × 10¹¹ molekula cm⁻³. A fenti ábrán egy jellemző kísérlet mérési eredményeit mutatom be. Az ábra beékelte részén az OH lecsengések láthatók féllogaritmusos ábrázolásban. Az ábra fő részén a lecsengések időállandója, a pszeudo-elsőrendű sebességi együtthatókat ábrázoltam az ELA koncentrációjának függvényében. Az egyenes meredeksége adja az (1) vizsgált reakció sebességi állandóját. A sebességi együttható meghatározását szobahőmérsékleten végeztem, széles tartományban változtatva az egyéb mérési paramétereket. Végeredményül k₁(298 K) = (3,43 ± 0,36) 10⁻¹² cm³ molekula⁻¹ s⁻¹ értéket kaptam, ami az első sebességi együttható érték a szakirodalomban.

RAUSCHER EVELIN

Kémia

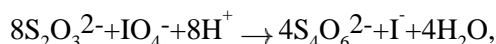
BSc, 7. félév

Pécsi Tudományegyetem

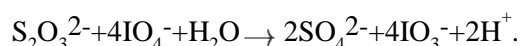
Természettudományi Kar

*Konzulens:**Dr. Horváth Attila**egyetemi docens, PTE TTK***A tioszulfát-perjodát reakció összetett kinetikája**

Tudományos diákköri dolgozatomban a tioszulfát-perjodát reakció kinetikáját spektrofotometriásan vizsgáltuk a 250-600 nm hullámhossztartományban, $25,0 \pm 0,1^\circ\text{C}$ hőmérsékleten, gyengén savas közegben (acetát-ecetsav puffer jelenlétében), állandó ionerősségen. Egy korábbi tanulmány eredményeit megerősítve azt találtuk, hogy a reakció nem jellemezhető egyetlen sztöchiometriai egyenlettel, a tetracionát- és a szulfátionok párhuzamosan keletkeznek a reakció során. Savasabb közegben a tetracionátion képződése preferált miközben a perjodátion jodidionig redukálódik



míg nagyobb pH-kon a sztöchiometria a szulfátion keletkezésének irányába tolódik el, miközben jodátion keletkezik



A vártnak megfelelően a reagensek bizonyos kezdeti koncentrációinál a reakció úgy viselkedik, mint egy klasszikus órareakció, ám a józ jellegzetes színe a megjelenés után a lassú tetracionát-jód reakció miatt fokozatosan eltűnik, nem állandósul. Kinetikai méréseink során igazoltuk, hogy a reakció kezdeti sebessége független a pH-tól, ám a további lépésekben jelentős pH-függés tapasztalható. A megfigyelés, hogy a reakció kezdeti szakasza, ahol a legjelentősebb folyamat maga az indítóreakció a két reaktáns között, egy korábbi tanulmánnyal -- amely a H^+ -ion "szuperkatalitikus" viselkedését feltételezi -- nincs összhangban. Megmutattuk azt is, hogy a mért abszorbancia-idő görbék 3 jól elkülöníthető szakaszból állnak, amelyek mindegyikét értelmezni tudtuk a javasolt 28 lépéses modellel.

A dolgozat során bemutatott munka az első olyan átfogó tanulmánynak tekinthető, amely megpróbálkozik ezen rendkívül bonyolult reakció kvantitatív leírására zárt rendszerben és pufferelt közegben. Az általunk felállított kinetikai modell azonban további finomításokra szorul, hiszen nem képes például értelmezni a reakció második kinetikai szakaszában tapasztalható jelentős pufferhatást. Ezért az effektusért nagy valószínűséggel az ezt a szakaszt irányító általános savkatalizált folyamatok (hipojódosav reakciói) a felelősek. A kutatás végső célja, hogy a jelen modell ésszerű egyszerűsítésével olyan relatívan egyszerű kinetikai modellt kapjunk, amely a tioszulfát-perjodát reakció CSTR-beli (folyamatosan kevert tankreaktor) oszcillációs viselkedését kvantitatívan értelmezni képes.

SUSÁNSZKI ANIKÓ

Vegyész Msc

MSc, 11. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Erdőhelyi András**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Tóth Mariann**tudományos segédmunkatárs, SZTE TTIK*

Etanol átalakításának vizsgálata különböző nanostrukturált TiO₂ hordozós Rh katalizátorokon

Napjainkban igen fontos feladat, környezetbarát, megújuló energiaforrások használata. Egy lehetséges jelölt a biomasszából nyert etanol. Az etanol katalitikus átalakításában a legaktívabbak a hordozós fémkatalizátorok [1]. A nanotechnológia gyors fejlődése maga után vonja, hogy nanostrukturált rendszereket alkalmazzunk hordozóként az előbb említett katalizátorokban. Tanszékünkön már sokat foglalkoztak az etanol bontásának és reformálásának vizsgálatával hagyományos hordozós fémkatalizátorokon. Mi elsősorban a nanostrukturált titanát nanocső, nanoszál és összehasonlításként TiO₂ (Degussa P25) hordozókat és hordozós Rh katalizátorokat vizsgáltunk az említett reakciókban. A méréseket áramlásos kvarc csőreaktorban végeztük, általában 330°C-on, a termékeket gázkromatográffal detektáltuk és bizonyos esetekben tömegspektrométert is használtunk.

A vizsgálatok során kiderült, hogy a különböző nanostrukturált hordozós Rh katalizátorok eltérően viselkednek, tehát a reakció termékeit és az etanol konverzióját a hordozó szerkezete befolyásolja [2]. Az etanol bontásában a fő termék minden esetben acetaldehid volt. A TiO₂ hordozós katalizátoroknál magas konverziókat mértünk (70 %), és az acetaldehid mellett hidrogént is detektáltunk. A nanostrukturált hordozós katalizátorok esetén jelentősen kisebb volt a konverzió (15-30 %). De a termékek között nem találtunk hidrogént. A titanát nanocső és nanoszál hordozós Rh katalizátorok viselkedése is eltérő a vizsgált reakciókban. Az etanol reformálása során termékként CO₂-t és H₂ kaptunk az acetaldehid mellett. A hordozó ezekben az esetekben is jelentősen befolyásolta a konverziót és a termékösszetételt. Ennek pontosabb feltérképezésének érdekében deuterált etanolt alkalmaztunk reaktánsként.

[1] A. Erdőhelyi J. Raskó, T. Kecskés, M. Tóth M. Dömök, K. Baán, Catal. Today. 116 (2006) 367 – 376

[2] Kukovecz Á, Pótári G, Oszkó A, Kónya Z, Erdőhelyi A, Kiss J (2011) Surf Sci 605:1048

TÓBIÁS ESZTER

Vegyészmérnök

BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

Konzulens:
Dr. Czégény Csilla Enikő
tudományos segédmunkatárs, MTA-DE Homogén Katalízis és Reakciómechanizmusok
Kutatócsoport

Szulfonált SIMes Rh(I)-N-heterociklusos karbén komplexeinek alkalmazása allil-alkoholok redox izomerizációjának katalízisében

Munkám során az allil-alkoholok redox izomerizációját hajtottam végre vízoldható Rh(I)-NHC karbén komplex alkalmazásával. Az okt-1-én-3-ol redox izomerizációját különböző körülmények között, vizes-szerves kétfázisú rendszerekben vizsgáltam az optimális reakciókörülmények elérése érdekében.

A vízoldható N-heterociklusos karbén prekuzort oléummal történő direkt szulfonálással állítottam elő az imidazolinium sóból kiindulva.

A mérések során az általam előállított [RhCl(sSIMes)(COD)] karbén komplex katalitikus hatását használtam ki az izomerizáció vizsgálatára. A reakciókat oxigén kizárásával, N₂ atmoszféra alatt Schlenk-technika alkalmazásával hajtottam végre. A termékarány megállapítását gázkromatográfiás analízissel végeztem.

[RhCl(sSIMes)(COD)] komplexet használva az izomerizáció során a konverzió mértéke alacsony, viszont a reakció szelektív. Vizsgáltam olyan reakciókat is, amikor az izomerizációt H₂ atmoszféra alatt hajtottam végre, ebben az esetben alkohol (18%) és keton (2%) is keletkezett termékként, azonban mindkettő csekély mennyiségben. Különböző foszfínok és a [RhCl(sSIMes)(COD)] komplex együttes alkalmazása esetén a reakció szelektív illetve megnövekedett az izomerizációs termék mennyisége.

A konverzió a reakcióidő függvényében növekszik, telítési görbét kapunk, a reakció 80 °C-on már egy óra alatt majdnem teljesen lejátszódik (97%). Vizsgáltam a reakció hőmérsékletfüggését is, azt tapasztaltam, hogy a hőmérséklet emelésével a konverzió nő.

Megállapítottam, hogy a katalizátor mennyiségéhez képest egy ekvivalens mennyiségű mtpms alkalmazása mellett a legnagyobb a konverzió mértéke.

Megvizsgáltam a katalizátor újrahasonosíthatóságát vizes-szerves kétfázisú rendszerben. Egymást követő három katalitikus ciklusban megfigyelhető ugyan a katalizátor aktivitásának csökkenése, azonban megállapítható, hogy eredményesen újrahasonosítható.

VARGA TAMÁS

Vegyész

MSc, 4. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

*Konzulensek:
Turányi Tamás
egyetemi tanár, ELTE TTK
Zsély István Gyula
adjunktus, ELTE TTK*

Etil-jodid pirolízis modelljének vizsgálata

Munkám során az etil-jodid hőbomlásának modelljét vizsgáltam a Prof. Matthias Olzmann (Karlsruhei Műszaki Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék) kutatócsoportjával együttműködésben. Az etil-jodidot általánosan használják lökéshullámcső-kísérletekben mint hidrogénatom-prekurzort. A TDK-munkám eredményei hozzájárulnak ahhoz, hogy az etil-jodid felhasználásával végzett lökéshullámcső-kísérleteket jobban meg lehessen tervezni, és eredményeiket hatékonyabban lehessen majd kiértékelni.

Elvégeztem az etil-jodid hőbomlása reakciókinetikai modelljének optimalizációját a Karlsruhei Műszaki Egyetemen végzett olyan lökéshullámcső-kísérletek alapján, amelyekben H-ARAS és I-ARAS detektálást használtak. A kísérleteket 900 – 1400 K hőmérséklettartományban, 1,3 – 1,8 bar nyomástartományban, argon hígítógáz mellett végezték. A feladatra az ELTE Reakciókinetikai Laboratóriumának munkatársaival közösen, az én közreműködésemmel is fejlesztett OPTIMA programot használtam.

A rendelkezésre álló lökéshullám-cső mérési adatok és független közvetlen sebességi együttható mérések alapján meghatároztam a R1: $C_2H_5I \rightarrow C_2H_5 + I$, R3: $C_2H_5I \rightarrow C_2H_4 + HI$, R4: $H + HI \rightarrow H_2 + I$ és R5: $C_2H_5I + H \rightarrow C_2H_5 + HI$ reakciók sebességi együtthatójának hőmérsékletfüggését.

A kapott sebességi együtthatók felhasználásával végzett szimulációk sokkal jobban írják le a kísérleti adatokat, mint a német együttműködő partnereink által korábban becsült értékeket használó modell. Meghatároztam az egyes reakciólépések Arrhenius-paramétereinek kovariancia mátrixát, aminek alapján kiszámítható a sebességi együtthatók hőmérsékletfüggő bizonytalansága. Mindegyik reakciólépés esetén a kapott sebességi együtthatók összeegyeztethetők az irodalomban fellelhető mérésekkel és az új értékeket sokkal kisebb bizonytalansággal határoztam meg, mint a korábbi irodalmi sebességi együtthatók becsült bizonytalansága.

Megmutattam, hogy paraméterbecslő eljárás során meghatározott sebességi együtthatók nagyon erősen korreláltak. Emiatt azok várható értéke és szórása nem értelmezhető a többi sebességi együtthatótól függetlenül.

Szerves kémia I tagozat

ÁBRAHÁM JANKA

Vegyészmérnök

MSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulensek:**Dr. Hazai László**egyetemi magántanár, BME VBK**Dr. Szántay Csaba**akadémikus, BME VBK*

Galanthamin intermedierek és származékok szintézise

A (-)-galantamin az Amaryllidaceae alkaloidok sorába tartozik. Szelektív acetilkolinészteráz inhibitor, a vegyületet világszerte az Alzheimer-kór kezelésében használják.

A galantamin élettani hatása kettős: az acetilkolin-észteráz enzim gátlásán és az agyban a nikotin receptorok modulációján alapul. Az Alzheimer-kór kialakulásában nagy szerepet játszik a csökkent acetilkolin szint, ezért a nikotin receptorok modulációjára kifejtett (még nem teljesen tisztázott) szerepe révén az acetilkolin felszabadulása lassíthatja a betegség progresszióját.

Munkánk során egy olyan új, egyszerű reakciókat alkalmazó flexibilis módszer kidolgozásával foglalkozunk, mely alkalmas lehet nemcsak a galantamin, hanem további származékainak szintézisére is. A kutatások során eljutottunk két kulcsintermedier spirohelyettesített benzo[c]azepinhez, melyek a galantamin prekursorának, a racém narwedinnel előállításában fontos szerepet töltenek be.

Ezenkívül vizsgáltuk a galantamin származékképzései közül a nitrálási reakciókat, melyek során új, érdekes származékokat sikerült izolálni.

BAJI ÁDÁM

Vegyész MSc

MSc, 8. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:
Dr. Frank Éva
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

1a-Triazolil-5a-androsztán származékok előállítása intermolekuláris Cu(I)-katalizált cikloaddícióval

Munkánk során négyféle szteránvázas 1alfa-azidot (11, 12, 13 és 14) állítottunk elő többlépéses szintézisúton, majd ezek terminális acetilén származékokkal (15a-h) történő cikloaddíciós reakciójával 27 különböző triazol vegyületet (16a-g, 17a-g, 18a-g, 19a, 19h, 20a, 20i, 21a, 21h) nyertünk. Az azonos körülmények között, CuI katalizátor jelenlétében végzett regioselektív átalakítások jó hozammal eredményezték a megfelelő termékeket, melyek in vitro citotoxikus hatásvizsgálatra kerültek.

BODNÁR BRIGITTA

Vegyész

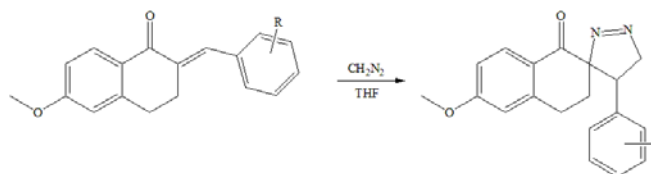
MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Wölfling János**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Dr. Mernyák Erzsébet**tudományos mkts., SZTE TTIK***Újszerű spiro-pirazolinek előállítása és szerkezetvizsgálata**

(E)-2-Benzilidén-6-metoxi-1-tetralonokból kiindulva, diazometánnal, tetrahydro-furán oldószerben, 1,3-dipoláris cikloaddícióval, regio- és sztereoselektív folyamatokban, jó hozammal 10 db 6-metoxi-4'-(szubsztituált)fenil-3,4,4',5'-tetrahydro-1H-spiro[naftalin-2-3'-pirazol]-1-ont állítottunk elő. A reagensként használt diazometánt N-metil-karbamidból kiindulva, N-metil-N-nitrozokarbamidon keresztül nyertük.

R = 2-Cl, 3-Cl, 4-Cl, 2-Br, 3-Me, 4-Me, 2-F, 3-F, 3-OMe, 3-NO₂

Az előállított vegyületek szerkezetét MS, ¹H-NMR, ¹³C-NMR, 2D-NMR (COSY, NOESY, HSCQ, HMBC) spektroszkópiával bizonyítottuk.

A spiro-pirazolinek vastagbélráksejtekre gyakorolt antiproliferációs hatásának vizsgálata in vitro tesztekkel folyamatban van.

BOJTÁR MÁRTON

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Bitter István**Nyugalmazott egyetemi tanár, BME VBK*

Fluoreszcens nukleozid-polifoszfát receptorok szintézise és vizsgálata

Kulcsszavak: "molekuláris felismerés", "szenzorok", "ATP", "fluoreszcencia-spektroszkópia", "szupramolekuláris kémia"

Napjainkban a szupramolekuláris kémia, amely két vagy több molekula közötti gyenge kölcsönhatások, önszerveződési- és molekuláris felismerési folyamatok vizsgálatával foglalkozik, egyre nagyobb szerepet játszik biológiai rendszerek receptor-szubsztrát kölcsönhatásainak modellezésében és/vagy az ezekben résztvevő biogén molekulák in vivo detektálásában. Utóbbiak közül kiemelkedő fontosságúak a nukleozid-foszfátok. Kutatásunk célja az adenzin-5'-trifoszfátra (ATP), illetve más nukleozid polifoszfátokra szelektív fluoreszcens receptormolekulák szintézise és vizsgálata irodalmi analógiák alapján.

A szenzorok felépítésüket tekintve egy megfelelő spacer részből állnak, amihez két, a komplexképzésért felelős - egy vagy két öttagú heterociklusos kationt továbbá fluorofor jelzőcsoportot tartalmazó - kar csatlakozik (ld. ábra). A komplexképzés a foszfát anionok és az onium kationok közötti ionos, valamint =C-H...O típusú H-kötéses kölcsönhatásokon alapul. Az elkészült receptorok komplexképző tulajdonságait fluoreszcencia spektroszkópiás módszerrel vizsgáltuk adenzin-5'-tri-, di-, ill. monofoszfát (ATP, ADP, AMP) és guanozin-5'-monofoszfát (GMP) vendégmolekulákkal szemben. A kutatás eddigi eredményeként két új, fiziológiás pH-n működő, fluoreszcens nukleozid-polifoszfát szenzort állítottunk elő, melyek a felsorolt konkurrens mellett magas ATP-szelektivitással bírnak. A szenzorok anion-felismerő képességét NMR-spektroszkópiával is vizsgáltuk.

CSÁSZÁR ZSÓFIA

Kémia alapszak
BSc, 7. félév

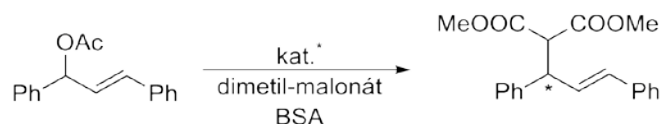
Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Bakos József
egyetemi tanár, PE MK
Farkas Gergely
PhD hallgató, PE MK

Kelátképző hibrid foszfán-foszfit ligandumok katalitikus vizsgálata aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban

Kulcsszavak: enantioszelektív katalízis, allil-helyzetű szubsztitúció, palládium, kelátgyűrűméret, királis P(III)-ligandumok

Az aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúció (Trost-féle AAA reakció) alkalmas szén-szén és szén-heteroatom (leggyakrabban O, N és S) σ -kötés enantioszelektív kialakítására. A Pd-katalizált reakció jelentőségét növeli az a tény, hogy a katalitikus ciklus intermedierjei spektroszkópiai módszerekkel könnyen vizsgálhatók, ami lehetővé teszi a mechanizmus részletesebb megismerését. A reakció előnyös tulajdonsága az, hogy sokkal enyhébb körülmények között megvalósítható, mint egy „hagyományos” alifás S_N1 vagy S_N2 reakció.



Munkám során királis hibrid foszfán-foszfit típusú ligandumokat vizsgáltam aszimmetrikus allil-helyzetű szubsztitúciós reakciókban. A katalitikus kísérletekben tanulmányoztam a különböző szerkezetű ligandumoknak a reakció optikai hozamára és aktivitására gyakorolt hatását, és ezen keresztül vizsgáltam a katalizátorok szerkezete és katalitikus tulajdonságai közötti összefüggést.

A vizsgálatok során bizonyítottam, hogy a kelátgyűrű mérete nagyban befolyásolja a komplex katalitikus tulajdonságait. Egyes reakciókban a hőmérséklet csökkentésével, valamint alkálifém-acetátok hozzáadásával szelektivitás-növekedést értem el. A ligandumokkal módosított katalizátor-komplexek aktivitását különböző oldószerekben is tanulmányoztam. Figyelemreméltó, hogy a reakció zöld oldószerekben az aktivitás és a szelektivitás csökkenése nélkül is megvalósítható. Megállapítottam, hogy az alkalmazott ligandumok kiemelkedően jó aktivitással szolgáltatják a kívánt terméket.¹

¹ Farkas G., Császár Zs., Szöllősy Á., Bakos J. Catal. Commun. (elküldve)

CSÓKÁS DÁNIEL

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

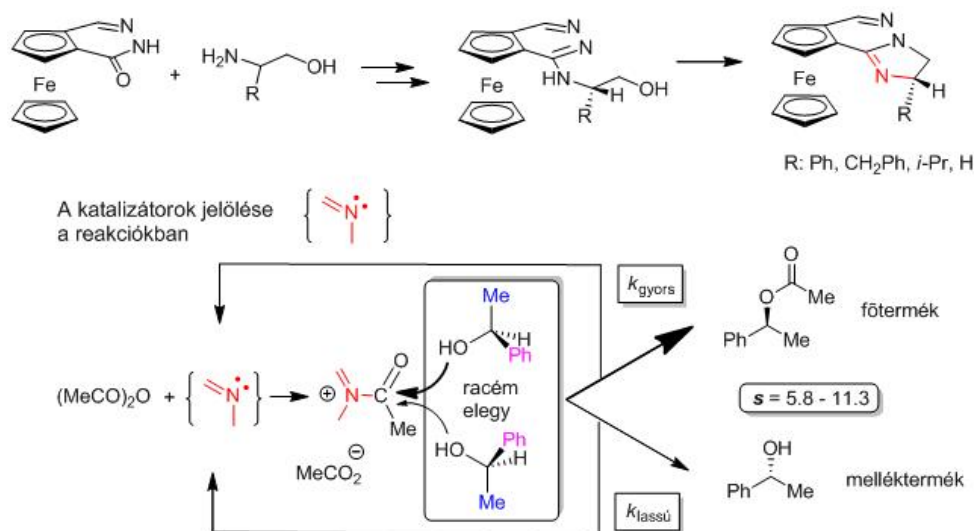
Természettudományi Kar

Konzulens:
Csámpai Antal
egyetemi docens, ELTE TTK

Új típusú, planáris- és centrális kiralitással rendelkező, ferrocénnel kondenzált heterociklusos organokatalizátorok kifejlesztése

A királis nukleofil-katalizátorok területe iránt az elmúlt években nagy érdeklődés mutatkozott, ugyanis működési mechanizmusuk felderítése nagy segíthet nyújthat annak megértésében, hogy miként is tudnak kis molekulák enzimekkel összevethető hatékonysággal és szelektivitással részt venni egy sor aszimmetrikus reakcióban. A szintetikus eljárások közül leginkább az acil-transzfer reakciók kerültek a kutatások középpontjába, melyeknek egy szűkebb csoportját, a szekunder alkoholok kinetikus rezolválását vizsgálták legkiterjedtebben.

Kutatásom során célul tűztük ki új, planáris kiralitással rendelkező, ferrocénnel kondenzált heterociklusok előállítását, mely új típusú katalizátorok családját jelenhetik a királisnukleofil katalízis területén. A ferrocénnel kondenzált heterociklusok előállítása és vizsgálata a csoportunkban már néhány éve megkezdett, aktív kutatási irány. Elsőként szintetizáltak piridazinonnal kondenzált planárisan királis ferrocénszármazékot. Feladatomat képezte centrális kiralitást hordozó aminoalkoholok beépítése a korábban szintetizált gyűrűrendszerbe, mellyel egy sor olyan kulcsintermedierhez jutottam, melyek ciklizációja összetettebb, ferrocénnel kondenzált, planáris- és centrális kiralitással rendelkező imidazo[2,1-a]piridazinhoz vezetett. Az általam szintetizált heterociklusokban a nukleofil centrum egy angulárisan kondenzált szerkezeten belül, szterikusan árnyékolt pozícióban foglal helyet, mely pl. acil-transzfer reakciókban még szubsztituenst nem hordozó Cp gyűrű mellett is hatékony kiralitás-transzfert eredményezhet.



FARAGÓ ZSOLT

vegyész

Osztatlan, 10. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Gulácsi Katalin**egyetemi adjunktus, DE TTK*

2-Szubsztituált 2H-kromének előállítása és átalakításuk pterokarpánokká

A flavonoidok egyik jelentős alcsoportját a pterokarpánok alkotják. A pterokarpánok cisz-kondenzált benzofuranil-benzopirán gyűrűt tartalmazó vegyületek. A természetben előforduló pterokarpánok optikailag aktív és racém formában egyaránt jelen vannak, azonban a növények többségben a (6aR, 11aR) abszolút konfigurációjú enantiomert állítják elő. A pterokarpánok között számos jelentős vírusellenes, rákellenes, gombaellenes, hatású vegyület található. TDK dolgozatom egyik célkitűzése volt a különböző 2-arilkromanonok előállítása 2'-hidroxi-acetofenonból és heteroaromás karbaldehidekből kiindulva, a megfelelő kalkon származékon keresztül. A 2-aril kromanonokat, vagy a kalkon típusú vegyületeket 2-aril-2H-kroméneké szándékoztuk alakítani, két külön reakcióúton, melyek ezt követően kiindulási anyagul szolgálnak a pterokarpánok előállítására. A 2-aril-2H-kromének Heck-oxiarilezési reakciójával racém 6-heteroaril pterokarpánokat, illetve regioizomerjeiket szándékoztam előállítani farmakológiai vizsgálatokra. Ennek keretében vizsgálni kívántam a C-2 heteroaril szubsztituens hatását a termékek minőségére és mennyiségére. A kalkonképzési reakciókat Claisen-Schmidt kondenzációjával valósítottuk meg és a kapott termékekből intramolekuláris oxa-Michael reakcióval kaptuk a megfelelő flavanon származékokat, melyeket NaBH₄-el redukálva a megfelelő kromán-4-ol származékot kaptuk. A kalkonképzési reakciók az acetofenon és a tiofén-2-karbaldehid között játszódtak le a legjobb kitermeléssel (65b 97,5%), míg a gyűrűzárási reakciók a piridin-3-il szubsztituens tartalmazó vegyület esetében működtek a legjobban (66f 72%). A redukciós reakciók minden esetben jó termelést mutattak, a kitermelés 70-97% között volt. A redukció után általánosan alkalmazott dehidratálási körülmények alacsony hozamot adtak a 68a és 68d vegyületekre, a többi esetben pedig a kívánt termék nem keletkezett. Egy friss közlemény szerint a gyűrűzárási és vízkilépési reakciót egy lépésben tudtuk megvalósítani CeCl₃, NaBH₄ és citromsav alkalmazásával. E reakciók feldolgozása során a C-2 piridin szubsztituens tartalmazó vegyületek esetében a terméket, nem sikerült izolálni, míg a többi vegyület esetében elfogadható hozamot sikerült elérni. Az így előállított 2H-kromén származékokból Heck-oxiarilezéssel történt a pterokarpánok előállítása és 69b esetében megfigyelhető volt a megfelelő regioizomerek képződése is.

FAZEKAS ESZTER

Vegyészmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

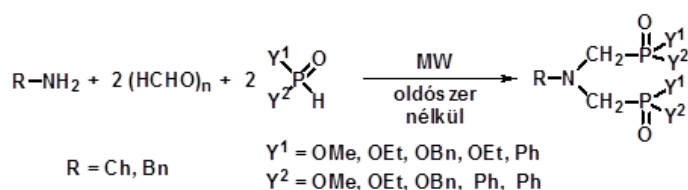
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulens:
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK

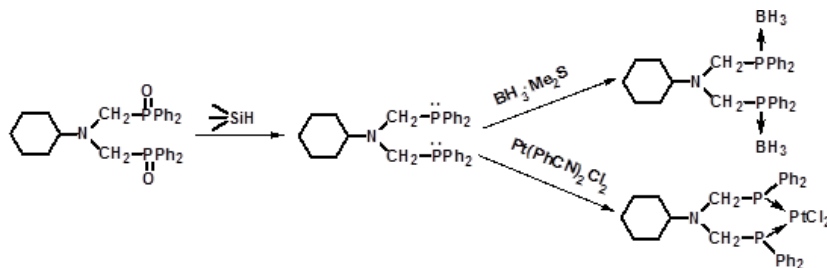
Bisz(>P(O)CH₂)-aminok szintézise kétszeres Kabachnik-Fields reakcióval; A termékek NMR tulajdonságai és felhasználásuk kétfogú P-ligandként

A kémiai kutatások egyik fontos célja manapság a reakciók „zöldebbé” tétele. Munkánk során egy háromkomponensű kondenzációs reakció, a kétszeres Kabachnik-Fields, vagy más néven bisz(foszfa-Mannich) reakció környezetbarát körülmények közötti megvalósíthatóságát tanulmányoztuk. Az egyre szélesebb körben terjedő mikrohullámú (MW) technika segítségével oldószer és katalizátor alkalmazása nélkül kívántuk végrehajtani az említett reakciót.

Kutatásaink során modellvegyületként különféle primer aminok szolgáltak. A reakciókat két ekv. paraformaldehid és két ekv. dialkil-foszfit, illetve difenilfoszfin-oxid jelenlétében végeztük el. Mivel nagyrészt új vegyületeket állítottunk elő, kellő hangsúlyt fektettünk a termékek NMR-es szerkezetigazolására. Az etoxi- és benziloxi-származékok esetében meglepő NMR tulajdonságokra lettünk figyelmesek.



Ezen kívül vizsgáltuk a képződő termékek felhasználhatóságát P-ligandumokként, ezért a bisz(difenilfoszfinoxidometil)-aminokból deoxigénezés után borán- és platina-komplexet képeztünk. Utóbbiak jelentős katalitikus aktivitást mutattak hidroformilezési reakciókban.



FECZKU GYULA

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Kurtán Tibor
egyetemi docens, DE TTK*

Oxigén-tartalmú heterociklusok előállítása domino reakcióval

A 4-hidroxikumarin váz számos természetes valamint szintetikus anyagban megtalálható, melyek számos képviselője, jelentős aktivitást mutat, például antikoaguláns rákellenes, vírusellenes és baktériumölő.

Kutatómunkánk céljából tűztük ki oxigén tartalmú heterociklusos vegyületek előállítását domino reakcióban, 4-hidroxikumarinból és 4-hidroxi-6-metil-2-pironból, mint C-nukleofilekből kiindulva telítetlen alifás aldehidekkel reagáltatva. A reakciók során vizsgáltuk, hogy milyen reakciókaszád megy végbe a reagensek és a reakciókörülmények változtatásával.

A 4-hidroxi-6-metil-2-piron (S)-citronellállal történő reakciója esetén a várt három gyűrűzárt termék közül csak a 61-es származékot tudtuk izolálni 39 %-os hozammal. Ebben az esetben az intramolekuláris hetero Diels-Alder reakció a C-4 oxigénnel volt preferált.

Hasonló mechanizmus szerint ment végbe a gyűrűzáródás a kiindulási vegyületeknek és a 2,6-dimetil-5-heptanallal és az intramolekuláris hetero Diels-Alder gyűrűzárási reakció eredményeként a D gyűrű öttagú lett. A kiindulási vegyülettel történő reakcióban melléktermékként a 69-es terméket is izoláltuk, melynél a lakton karbonil oxigén vett részt a gyűrűzárársban.

A citrál és annak dimetil-acetáljával történő gyűrűzárásában a karbonil szénhez α -helyzetben kapcsolódó szén-szén kettős kötés miatt elektro ciklizációval jön létre a tíztagú heterociklust tartalmazó termék.

A 4-hidroxi-6-metil-2-pironnak és etil-3-metil-4-oxokrotonátnak a reakciójával hetero Diels-Alder gyűrűzárással kiváló hozammal állítottuk elő a 75-ös terméket.

A gyűrűzárási reakciókat egyszerű, α,β -telítetlen aldehidekkel is elvégeztük és ezek esetében is a Knoevenagel kondenzációt hetero Diels-Alder reakció követte.

Azon esetekben, ahol a termék királis volt kísérletet tettünk a reakciók enantioszelektív tételére organokatalizátorok használatával.

Az organokatalitikus reakciókban közepes és alacsony hozammal a korábban azonosított termékeket kaptuk meg, de enantioszelektivitást nem sikerült elérnünk.

GŐZ VIKTÓRIA

Vegyész

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Konzulensek:
Pintér István
kutatóprofesszor, ELTE TTK
Zsoldosné Mády Virág
tudományos főmunkatárs, ELTE TTK

Amino-piranozil-karbonsav prekurzorok szintézise gyűrűs és nyíltláncú monoszacharidokon keresztül

Az ELTE-MTA Fehérjemodellező Kutatócsoportja az elmúlt években széleskörűen vizsgálta az Exendin-4 fehérje szerkezetének és funkciójának kapcsolatát. E fehérjében az ún. variálható szakasz helyettesíthető foldamer mimetikumokkal [1], melyek monomerjei α -, vagy β - aminosavak, ill. cukoraminosavak (SAA) lehetnek. Ezáltal az eredeti fehérjerészlettel analóg szerkezetet vehetnek fel e szerveződések, ellátva annak feladatát.

Munkám távlati célja a 2-amino-2-dezoxi-mannopiranozil-karbonsav (AMC) lehetséges foldamer monomer szintézise. Ehhez szükség van a D-mannózamin kiindulási vegyület nagyléptékű, gazdaságos előállítására. Ezt irodalmi leírások reprodukciójával [2] D-arabinózból kiindulva próbáltam megvalósítani, a célmolekulát azonban nem sikerült izolálnom jó termeléssel.

Továbbiakban egy új útvonal kidolgozását kezdtem el: 2-amino-2-dezoxi-hexóz származékok előállítását 4-nitro-fenilhidrazonokon keresztül. E vegyületekben a nitro-fenil-csoport aktiválja a C-2 atomot, így gyengébb nukleofilekkel is támadható. Ennek révén sikerült benzilamino-szubsztituenst beépítenem a penta-O-acetil-D-mannóz-, ill. penta-O-acetil-D-galaktóz-4-nitro-fenilhidrazon C-2 atomjára. A reakciókörülmények módosításával nem csak a reakciósebességét sikerült növelnem, hanem a reakció sztereoselektivitását is. Ezáltal az egyik új epimer képződését elősegítenem, és így egy tiszta, egységes terméket sikerült izolálnom. E vegyületek az irodalomban eddig nem ismertek, ezért az adott epimer szerkezetének egyértelmű azonosításához szintetizálok egy olyan referencia anyagot, melyben biztosan ismert a C-2 atom konfigurációja.

A remélt tetra-O-acetil-2-benzilamino-2-dezoxi-D-mannóz-4-nitro-fenilhidrazon tovább-alakításával elérhető az N-benzil-D-mannózamin, mely megfelelő kiindulási anyag lehet az AMC szintézisben.

A kész amino-cukorkarbonsav monomerből előállítható oligomerek részletes szerkezetvizsgálatával tisztázható, hogy a foldamer alkalmas-e másodlagos szerkezet kialakítására és így további felhasználásra.

[1] S. H. Gellman, Acc. Chem. Res. 31, (1998) 173

[2] J. C. Sowden; M. L. Oftedahl, Meth. in Carbohydr. Chem. I. Acad. Press., New York (1962) 235

GRECSÓ NÓRA

vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Péter Antal**egyetemi tanár, SZTE TTIK**Dr. Ilisz István**egyetemi adjunktus, SZTE TTIK*

**Izoxazolin gyűrűvel kondenzált 2-aminociklopentán karbonsav
analógok sztereoizomerjeinek elválasztása ligandumcserés királis
állófázison**

Az enantiomerek elválasztása egyre nagyobb jelentőséget kapott a gyógyszeriparban, tekintettel arra, hogy a királis gyógyszermolekulák esetében a biológiai hatás gyakran csak az egyik enantiomerhez (eutomer) rendelhető, míg a másik izomer (disztomer) ártalmatlan, semleges is lehet, de akár az eutomer hatását megakadályozhatja, vagy valamilyen nem kívánt mellékhatást, sőt toxikus hatást is kiválthat. Ebből következően fontos, hogy a keletkezett enantiomerek tiszta formában álljanak rendelkezésre, de a szerves szintézisek között ritka a 100%-os sztereospecifikus reakció, ezért szükség van egy hatékony analitikai módszerre, mely leggyakrabban a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia (HPLC).

Munkánk során a négy kiralitás centrummal rendelkező izoxazolin gyűrűvel kondenzált 2-aminociklopentán karbonsavak sztereoizomerjeinek elválasztásával foglalkoztunk. A nyolc modellvegyület analízisét fordított fázisú nagyhatékonyságú folyadékkromatográfias módszerrel végeztük, ligandumcserés szelektort tartalmazó, N-((R)-2-hidroxi-1-fenilettil)-N-undecilamino-acetát alapú királis állófázison.

Tanulmányozni kívántuk, hogy az eluensösszetétel, a hőmérséklet, a ligandumok mennyiségi és minőségi változtatása milyen hatást gyakorol a kromatográfias elválasztást jellemző paraméterekre. A mérésekből számolt termodinamikai adatok, $d(\Delta H^\circ)$, $d(\Delta S^\circ)$ és $d(\Delta G^\circ)$, az elválasztás entalpia illetve entrópiavezérelt voltára utaltak.

GYENESE JUDIT

Gyógyszervegyész-mérnöki Mesterszak
MSc, 2. félév

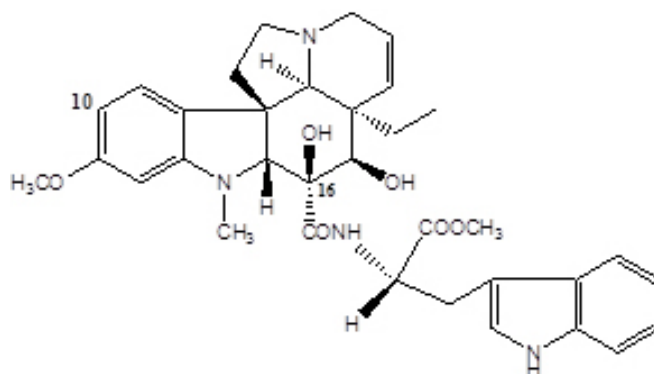
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Hazai László
egyetemi magántanár, BME VBK*

Halogénnel helyettesített vindolin-származékok reakciói

A kutatócsoportban korábban már szintetizálták a vindolin 16-os helyzetben aminosavakkal kapcsolt származékait. Ezek közül a 10-bromvindolin triptofánnal összekapcsolt származéka jelentős daganatellenes hatást mutatott.

A szerkezet-hatás tanulmányozása céljából feladatomban olyan új vindolin-származékok szintézise volt, melyek az aromás gyűrűn nem tartalmaznak halogén helyettesítőt. Ebből a célból kísérleteket végeztem a vindolin 10-es helyzetében védőcsoport-funkciót képviselő különféle halogén-helyettesítők eltávolítására.



A dolgozatban bemutatjuk a téma irodalmi háttérét, valamint beszámolunk a szintézis menetéről.

HADHÁZI ÁDÁM

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:
Dr. Borbás Anikó
egyetemi docens, DE GYTK*

Benzil-típusú védőcsoportok szelektív eltávolíthatóságának vizsgálata szénhidrátokon

A szénhidrátok legegyszerűbb átalakítása is védőcsoportok alkalmazását igényli. A szénhidrátkémiában általánosan alkalmazott éter-, észter- és acetálcsoportok közül nagyon gyakran használják a benziléter-típusú védőcsoportokat, mivel bázikus reakciókörülmények között stabilak, glikozilezési reakciókban növelik a reakcióképességet, és eltávolításuk nem igényel drasztikus körülményeket.

A kutatómunka célja monoszacharidok (1-naftil)metil-, és (2-naftil)metil-éter származékainak előállítása, és étercsoportok [(9-antraceni)metil-, (1-naftil)metil-, (2-naftil)metil-, p-klórbenzil-, difenilmetil-, p-metoxibenzil-] relatív stabilitásának vizsgálata N-metil-p-toluol-szulfonamid/trifluormetánszulfonsav (NMPTSA/TfOH) reagenskombináció, illetve 2,3-diklór-5,6-dicián-1,4-benzokinon (DDQ) alkalmazása mellett. Vékonyréteg-kromatográfiával követett tesztreakciókból egyértelműen látszott, hogy a difenilmetil- és p-metoxibenzilcsoport, akár 30 perc alatt teljesen eltávolítható primer és szekunder helyzetből egyaránt, míg az érdeklődésünk középpontjában lévő (1-naftil)metil- vs. (2-naftil)metil-származékok között nem adódott jelentős reaktivitásbeli különbség.

Reménykedésre adott okot, hogy egy ramnopiranoz származék vizsgálata esetén – gyenge hozammal ugyan – de képesek voltunk ¹NAP-csoportot szelektíven ²NAP-csoport mellől hasítani. Azonban hamar kiderült, hogy hidroxilcsoportok regenerációját követően, azok helyzetétől és az aglikon minőségétől függően, lehetőség nyílik 1,6-anhidro-vegyületek képzésére is NMPTSA/TfOH reagenskombináció jelenlétében. E kísérleti tapasztalat alapján feltételeztük, hogy az reagens felhasználható 1,6-anhidro-vegyületek előállítására. Sajnos, a vártakkal ellentétben a reakció nem játszódott le.

Egy új vegyület vizsgálata során világossá vált, hogy nincs számottevő különbség az ¹NAP- és a ²NAP-csoport NMPTSA/TfOH illetve PTSA/TfOH reagensekkel végzett eltávolításában. Ezt arra alapozzuk, hogy valamennyi esetben 1:1 arányban volt jelen a 4-OH és 6-OH termék. Végezetül elmondható tehát, hogy a reagens minőségének, ill. mennyiségének változtatása sem hozam, sem pedig konverziójavulást nem okoz, így a reakció ebben a formájában teljesen alkalmatlan mind az 1,6-anhidro-származékok előállítására, mind a (naftil)metil-csoportok konstitúciós izomériájából fakadó szerkezeti különbségek kiaknázására. Ugyanakkor az elvégzett vizsgálatok jelentős új eredményt is hoztak: a ²NAP-étert sikerült jó hozammal szelektíven eltávolítani DDQ-nal ¹NAP-csoport mellől.

IVANA KUZMINAC

Kémia

BSc, 5. félév

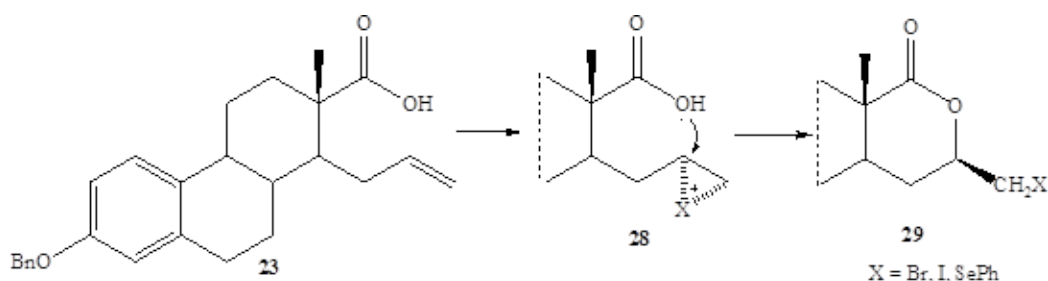
Ujvideki Egyetem

Természettudományi-matematikai Kar

*Konzulens:
Dr. Marija Sakač
e. tanár, ÚE*

Synthesis of potential antitumor steroid derivatives

Starting from (16E)-3 β ,17 β -dihydroxy-16-hydroxyiminoandro-5-ene (1) 3,6-dioxo-16,17-secoandro-4-ene-16,17a-dinitrile (2) was synthesized in several steps. First, the Beckmann fragmentation of D ring was conducted and 16,17-seco-16-cyano-17-aldehyde 3 was obtained, the acetylation of which gave 3 β -acetoxy derivative 4. The reaction of compound 4 with NaBH₄ in ethanol afforded secocyano alcohol 5. Further esterification carried out with 4-toluenesulfonyl chloride and substitution with potassium cyanide gave 16,17a-dicyano derivative 7. After transesterification of compound 7 and oxidation of 5-en-3 β -ol steroid 8 into corresponding 4-ene-3,6-dione using Jones reagent compound 2 was obtained.



Compounds 2 and 8 were screened for antitumor activity against human breast adenocarcinoma ER⁺, MCF-7; human breast adenocarcinoma ER⁻, MDA-MB-231; prostate cancer AR⁻, PC-3; human cervix carcinoma, HeLa; and colon cancer, HT-29 cells; as well as one human non-tumor cell line, MRC-5. Compounds 2 and 8 exhibited significant antitumor activity against HeLa cells; while 2 also showed strong cytotoxicity against MDA-MB-231. Both compounds 2 and 8 were not toxic to healthy MRC-5 cells.

Szerves kémia II tagozat

ILKEI VIKTOR

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Kalaus György**professor emeritus, BME VBK*

**A (-)-bannucin és a (-)-5'-epibannucin első szintézise. A szén-szén
kötés egyszerű kialakítása.**

A BME Szerves Kémia Tanszékén (ma: Szerves Kémia és Technológia Tanszék) működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban évtizedek óta foglalkoznak aszpidoszpermánvázas alkaloidok és rokonvegyületeik szintézisével. Ezen kutatási területhez kapcsolódik TDK-dolgozatom témája, a bannucin nevű alkaloid ((-)-1) első szintézisének a kidolgozása. A természetben előforduló molekulában a vindolin 10-es helyzetéhez 2-pirrolidon egység kapcsolódik. Munkánk során megvalósítottuk a nevezett alkaloid (-)-vindolinból ((-)-2) kiinduló egyszerű, egy lépésben történő előállítását. Reagensként a 3 α -amidokarbinol funkciót tartalmazó vegyületet választottuk, melyből az in situ keletkező gyűrűs N-acilimíniumionon keresztül lejátszódó aromás elektrofil szubsztitúció során jó termeléssel jutottunk el a célként megjelölt alkaloidhoz ((-)-1) és az 5'-epimerjéhez ((-)-5'-epi-1).

KÁLMÁN NOÉMI

gyógyszerész

Osztatlan, 6. félév

Debreceni Egyetem

Gyógyszerésztudományi Kar

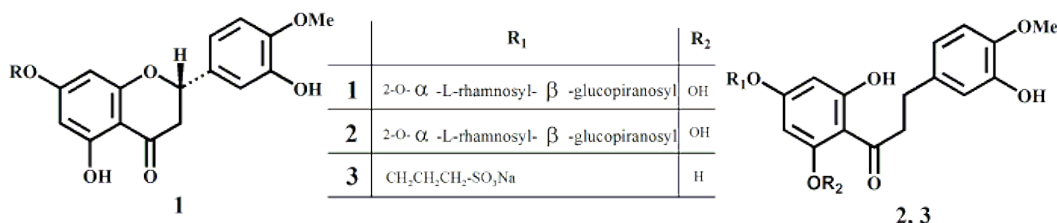
Témavezető:

Dr. Antus Sándor

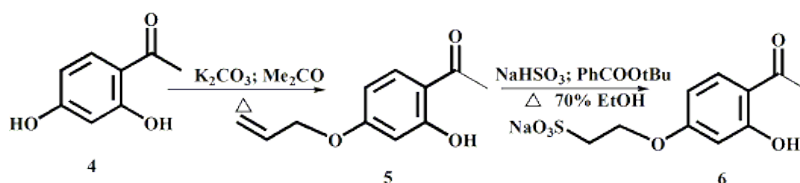
akadémikus, kutatócsoportvezető, DE TTK

Kísérletek dihidrokalkon-vázis kalóriamentes mesterséges édesítőszer előállítására

Az egészségtudatos életmód – mint ismeretes – fontos szerepet tölt be egészségünk megőrzésében, hiszen a kalóriadús táplálkozás, valamint a mozgásszegény életmód kiváltó okként számos betegség, pl. a diabetes mellitus kialakulásában tetten érhető. Az egészségünk megővése érdekében ezért célszerűnek látszik a szénhidrátokkal történő napi kalória bevitt kalóriamentes mesterséges édesítőszer használatával is csökkenteni. 1963-ban Horowitz és Gentili arról számolt be, hogy a narancs héja számos flavanoid származékot tartalmaz, mint pl. neohesperidint (1), amely két lépésben a szacharóznál 1500-szor édesebb és lassabban kialakuló ízhatással rendelkező dihidrokalkonná (2, DHC) alakítható át. Ezen kívül azt találták, hogy ez a vegyület nemigen használható ételadalekanyagként.



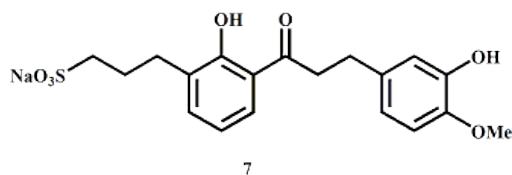
Ezen eredmények alapján a MTA. Flavanoidkémiai kutatócsoportja a CHINOIN Gyógyszergyárral együttműködve egy új kalóriamentes édesítőszer (3, CH-401) fejlesztett ki 1974-ben. Ez molekula a vizsgálatok alapján teljesen kalóriamentes, vízben jól oldódik, kémiai és termikus is stabil, nem toxikus, és 1220-szor édesebb, mint a szacharóz 1%-os vizes oldata. Jóllehet ez a vegyület (3) egy ígéretes mesterséges édesítőszer volt, a gyakorlatban azonban nem került bevezetésre, mivel a kiindulási anyagként szereplő propán-szulton igen toxikus, továbbá a molekula igen magas előállítási költségekkel rendelkezik. Diákköri munkám célja az volt, hogy a 3 egy gazdaságosabb és környezetbarátabb szintézisét valósítsam meg, valamint a szerkezet-hatás összefüggéseket tanulmányozva új származékokat állítsak elő, és új módszert dolgozzak ki a 3-szulfopropiloxi csoport bevezetésére.



A 3 szintézisének első lépésében a rezacetofenont (4) allil-bromiddal regioselektíven alkileztük, így nyertük az 5 allil-származékot, majd ezt egy további reakcióban 4-O-szulfopropil-származékká (6) alakítottuk át 58%-os nyeredéssel, a korábban Yoshikawa és munkatársai által közzétett módon. Ily módon a propán-

szulton felhasználást mellőztük. A 6 molekula 3-má történő átalakítását két lépésben a Chinoin-féle eljárással állítottuk elő.

Azért, hogy a H_2 felhasználást a 3 szintézisének utolsó lépésében kiküszöböljük a megfelelő kalkonszármazék katalitikus hidrogénezését ammónium-formiáttal végezve tanulmányoztuk. A 3 hatás-szerkezet összefüggésének tanulmányozásához a 7 új kalkonszármazékot 2'-hidroxi-acetofenből kiindulva 5 lépésben jó termeléssel állítottuk elő.



KELEMEN ZSOLT

vegyésmérnöki MSc

MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Hollóczki Oldamur**posztdoktor, Mulliken Elméleti Kémiai Központ Fizikai és Elméleti Kémiai Intézet Bonni Egyetem*

Egy sokoldalú organokatalitikus ionos folyadék szén-dioxid redukció?

Kutatócsoportunkban az 1-etil-3-metilimidazólium-acetát (EMIM-Ac) ionos folyadék gőzében a kationról anionra történő protonátmenettel keletkező karbének jelenlétét korábban már igazolták. E kísérleti tapasztalat alapján felmerül a kérdés, hogy vajon a fenti ionos folyadékban jelen lehet-e a karbén akkora koncentrációban, hogy e vegyületekre jellemző katalitikus hatást figyelhessünk meg, egyesítve ezzel a karbének és az ionos folyadékok előnyös tulajdonságait.

A fenti kérdést megválaszolando két EMIM-Ac ionpárból álló rendszer lehetséges izomereit kvantumkémiai módszerek segítségével vizsgáltam, számításaim alapján a karbén keletkezésének nem kedvez több ionpár jelenléte, köszönhetően a szomszédos ionok ionos szerkezeteket stabilizáló hatásának. Számítások ismeretében a kísérleti munkám során karbének egyik legjellemzőbb organokatalitikus reakcióját, a benzaldehid benzoinná történő kondenzációját vizsgáltam. A reakció jó kitermeléssel végbe ment (67%) inert atmoszférában, azonban érdekes módon a reakciót levegőn, vagy szén-dioxid atmoszférában végrehajtva az ábrán látható, általunk feltételezett mechanizmussal több reakció is végbe megy. Érdekes módon e folyamatban a szén-dioxid az oxidáló szer, aminek a melléktermékét, a szén-monoxidot IR spektroszkópia segítségével sikerült detektálni. Az EMIM-Ac e reakciói tehát nem csak preparatív szempontból érdekesek, de a szén-dioxid hatékony megkötését tehetik lehetővé.

KÓKAI ESZTER

Gyógyszer-vegyészmérnök szakirány
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Porcs-Makkay Márta
laborvezető, EGIS Gyógyszergyár Nyrt., Kutatási Főosztály, 1475 Budapest 10 Pf. 100*

A 3-as helyzetben szubsztituálatlan oxindol-1-karboxamidok előállítása aminolízissel

Az antireumatikus és gyulladásgátló hatású oxindol-származékok közül kiemelkedett a Pfizer cég által fejlesztett (Z)-3-[1-hidroxi-1-(2-tienil)metilén]-5-klóroxindol-1-karboxamid (tenidap), amelyre a 90-es években az Egis Gyógyszergyárban új gyártó eljárást dolgoztak ki. A tenidap klinikai vizsgálataiban azonban olyan mellékhatást találtak, mely miatt a Pfizer nem forgalmazta a készítményt. Az Egis Gyógyszergyárban ezután az oxindol-származékok kutatását más irányban folytatták.

Az irodalomban kevés tanulmány foglalkozik a 3-as helyzetben szubsztituálatlan oxindol-1-karboxamidokkal, amelyek fontos építőkövei lehetnek a 3-as helyzetben különféle szubsztituenseket hordozó N-szubsztituált, illetve N,N-diszubsztituált-1-karboxamidoknak. Az előzetes kutatási eredményekből kiindulva, sikerült egy one-pot eljárást kidolgoznunk, mellyel közepes és magas hozammal állítottunk elő 1-karboxamidokat. Modellvegyületként 5-klóroxindolból kiindulva jutottunk el egy N,O-diacil-oxindol származékhoz, amely a one-pot eljárás kulcs intermediere és amely primer, szekunder, és gyűrűs aminokkal reagáltatva a célvegyülethez vezetett. Az eljárást kiterjesztettük szubsztituálatlan, illetve 6-klór-, 5/6-fluor-, 5-nitro- valamint 5-metoxi-oxindolra is. Kísérleteink során megállapítottuk, hogy az amidálási reakció végbemenetelét érzékenyen befolyásolja az alkalmazott aminok jellege.

A szintézis lehetővé teszi az N,N-diszubsztituált 1-karboxamidok előállítását, mely korábban az irodalomban ismertetett izocianátos módszerrel nem volt lehetséges.

Kulcsszavak: one-pot eljárás, acilezés, dimetilaminopiridin, hidrolízis, alkil-izocianát

Porcs-Makkay, M.; Volk, B.; Kókai, E.; Simig, Gy., Tetrahedron 2012, 68, 1427-1435

KOMJÁTI BALÁZS

gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

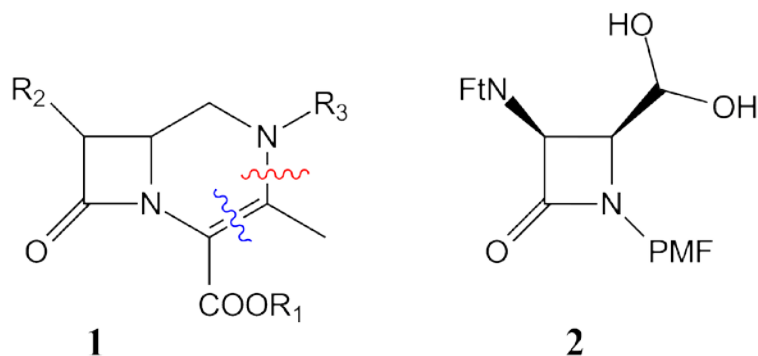
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulens:
Dr. Nagy József
egyetemi docens, BME VBK

A 2-izo-2-azacefém váz néhány lehetséges intermedierjének előállítása. Védőcsoport stratégiák elemzése.

A β -laktám származékok a legnagyobb forgalmú antibiotikumok (pl.: Augmentin: amoxicillin és klavulánsav kombinációja), ám számos baktérium képes ezeket β -laktamáz enzimeikkel hatástalanítani. Fontos tehát az új származékok, illetve hatásos β -laktamázgátlók előállítása.

A Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén is foglalkozunk a vegyületesaláddal, már több enyhén antibiotikus és laktamázgátló molekulát sikerült előállítani. Jelenleg az 2-izo-2-azacefémváz kialakítására próbálunk C-C kapcsolással végbemenő eljárást kidolgozni. A célmolekula retroszintetikus analízisével megterveztem két lehetséges C-C gyűrűzáráson alapuló szintézist és egy klasszikus sémát követő C-N gyűrűzárást.



Kutatómunkám során a négytagú β -laktám gyűrű kialakításához az ún. Staudinger-szintézist alkalmaztam, ami egy savkloridból származó ketén és egy imin 2+2 cikloaddíciós reakciója. Az (1) biciklus hattagú gyűrűjének kialakítására olyan módszert próbáltam kidolgozni, amit eddig irodalomban nem alkalmaztak gyűrűzárásra.

Megfigyeltem egy váratlan stabil geminális diol (2), azaz aldehid-hidrát képződését. Szerkezetét 2D korrelációs NMR módszerekkel sikerült megfejteni. Tanulmányoztam a vegyület termoanalitikai tulajdonságait.

A kutatómunka során sikerült a 2-izo-2-azacefémváz előállításához szükséges intermedierek szintézisét kidolgoznom.

KOVÁCS DÁNIEL

Gyógyszervegyész mérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Molnár-Tóth Judit**kutató, Servier Gyógyszerkutató Intézet*

Anellált pirazolo-kinazolinok előállítása

Tudományos Diákköri Munkám során anellált pirazolo-kinazolin származékokat állítottam elő. Ezek a molekulák egy titkossági okokból meg nem nevezhető farmakológiai hatásterületen végzett HTS-ből kapott „hit” molekula analogonjai, melyeket a Servier párizsi központjában vizsgáltak. A molekulák vázszerkezete több ponton változtatható, mely diverzitását a felhasznált reagensekkel bevitt újabb szubsztituensekkel tovább növeltem.

A vázszerkezet 2-hidrazino-benzoésavak, ill. 2-hidrazino-benzoésav-metilészterek és α -cianoketonok tandem kondenzációja során jött létre, mely redukcióját követően jutottam el a kívánt tetraciklusos vegyületekhez. A kondenzációs reakcióhoz szükséges 2-hidrazino-benzoésavakat és 2-hidrazino-benzoésav-metilésztereket különböző antranilsavak diazotálásával, majd redukálásával állítottam elő.

Munkám során a rövid és hatékony szintézisúton 3 új heterociklusos rendszert hoztam létre, melynek eredményeképpen 27 db új biológiailag aktív vegyületet állítottam elő. Ezen vegyületek előnyös polifunkciós vázszerkezettel rendelkeznek, így további funkcionálásukra van lehetőség.

KOVÁCS LENKE

vegyész

MSc, 10. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulens:
Dr. Szöllősi György
tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK*

Tetrahidrokinolon származékok enantioszelektív előállítása heterogén katalitikus reakcióval

Az ipar több területén kiemelkedő fontosságú az optikailag tiszta vegyületek előállítása és használata. A királis nitrogén tartalmú heterociklusos vegyületek széles körű gyógyszeripari alkalmazása a szerves kémiai kutatások előterébe helyezte ezen építőelemek sztereoszelektív előállítását. Gazdaságossági és környezetvédelmi szempontok alapján ezek a kutatások főleg a heterogén katalitikus, több reakció egyidejű megvalósítását is biztosító, úgynevezett dominó-reakciók kidolgozásának irányába fejlődtek.

Munkám célja a Reissert indolszintézis melléktermékeként keletkező 3-hidroxi-1,2,3,4-tetrahidro-2-kinolon származékok aszimmetrikus heterogén katalitikus előállítása volt [1], cinkona alkaloidokkal módosított Pt katalizátoron végrehajtott dominó-reakcióval. Erre a célra kilenc különböző módon szubsztituált 2-nitrofenilpiroszólósav-etilésztert állítottam elő. A reakciókörülmények megválasztásához 2-nitrofenilpiroszólósav-etilésztert és egy metil-szubsztituált származékot használtam. A legjobb eredményeket toluol/ecetsav oldószerkeletben és dihidrocinkonidin-metiléter módosító használatával, 10 atmoszféra hidrogénnyomáson értem el. A különböző származékok reakcióiban kapott adatokat összehasonlítottam a nem szubsztituált vegyület esetében elért eredményekkel. Általánosságban elmondható, hogy a nitrocsoport melletti szubsztituensek kedvező hatást gyakoroltak a reakciókra, viszont a más helyzetben szubsztituált vegyületek esetében vagy a termék szelektivitása vagy az enantioszelektivitás csökkent.

Munkám során bebizonyosodott, hogy heterogén katalitikus dominó-reakcióval, enantioszelektív módon gyakorlati szempontból jelentős királis 3-hidroxi-1,2,3,4-tetrahidro-2-kinolon származékok nagy kitermeléssel és kiváló optikai tisztaságban, gazdaságosan előállíthatók.

[1] Suzuki, H., Gyoutoku, H., Yokoo, H., Shinba, M., Sato, Y., Yamada, H., Murakami, Y., Synlett, 1196-1198 (2000)

LACZKÓ KINGA

Vegyészmérnöki szak

BA, 6. félév

Babeş-Bolyai Tudományegyetem

Kémia és Vegyészmérnöki Kar

*Konzulens:
dr. Lovász Tamás
tanársegéd, BBTE*

Pirido[2,3-b] indolizinek szintézise mikrohullámú reaktor felhasználásával

Kulcsszavak: piridinium-sók, kalkonok, gyűrűzáródás, mikrohullámú aktiválás, szerkezetvizsgálat

Az indolizinek a heteroaromás vegyületek azon csoportjába tartoznak, amelyek egy 5 illetve egy 6 tagú kondenzált gyűrűt tartalmaznak és a köztük hídát képező N atomot [1,2]. A szakirodalomban megtalálható indolizin származékok közül ismertek jelentős biológiai aktivitást mutató vegyületek, amelyek a gyógyászatban alkalmazást nyertek, mint gyulladáscsökkentő, antibakteriális, antivirális [3], antitumorális vagy rákellenes gyógyszerek [4]. Biológiaiilag aktív indolizin származék két kereskedelmi forgalomban lévő gyógyszer is, a ZolimidinTM, amely gyomorfekélyelleni készítmény és a ZolpidemTM, amely nyugtató [3]. Új pirido-indolizin származékok előállítása két módszer alapján lehetséges: egy megfelelően szubsztituált indolizin származékból kiindulva a piridin gyűrű kiépítésével vagy piridinium-sók és kalkonok (1,3-diaril-propenonok) reakcióival.

A pirido[2,3-b] indolizin gyűrűrendszer kialakítása az említett második módszer alapján történt környezetbarát reakciókörülmények alkalmazásával: etanol-víz oldószerkelegyen, mikrohullámú aktiválás felhasználásával. A dolgozat tartalmazza különböző 2,4-diaril-pirido-indolizin származékok szintézisének vizsgálatát, az alkalmazott módszerek összehasonlítását és az előállított vegyületek szerkezetének jellemzését, melyet MS, IR és NMR spektroszkópiai módszerek alkalmazásával végeztünk.

További céljaink közé tartozik az előállított vegyületek biológiai aktivitásának vizsgálata. Minden általunk előállított indolizin származék tartalmaz nitril-csoportot, amely könnyen karboxil-csoportá alakítható, ezáltal növelhető a vizsgált vegyületek vízoldhatósága.

[1] J. W. Wiench, L. Stefaniac, G. A. Webb, J. Mol. Stuct., 605, 2002, 33-39

[2] G. S. Singh, E. E. Mmatli, Eur. J. Med. Chem., 64, 2001, 5237-5257

[3] F. Proenca, M. Costa, Tetrahedron, 66, 2010, 4542-4550

[4] Y. Liu, H.-Y. Hu, Q.-J. Liu, H.-W. Hu, J.-H. Xu, Tetrahedron, 63, 2007, 2024-2033

LUKÁCS NORBERT

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva
egyetemi tanársegéd, DE TTK*

5-, 7- és 8-Brómkumarinok előállítása és Pd-katalizált aminálási reakcióik tanulmányozása

Az utóbbi évtizedben számos (hetero)aromás halogén származék és különböző nitrogén tartalmú vegyületek (aminok, amidok vagy más N-tartalmú heterociklusok) között lejátszódó átmenetifém katalizált kapcsolási reakciót fejlesztettek ki, melyek közül az egyik legjelentősebb, modern keresztkapcsolási reakció a Pd-katalizált Buchwald-Hartwig reakció.

A Buchwald-Hartwig reakció alkalmazására az irodalomban eddig mindössze néhány példa található O-tartalmú heterociklusok körében[60], ezért munkánk során célul tűztük ki a különböző helyzetben szubsztituált brómkumarinok előállítását, majd ezen származékok különféle aminokkal lejátszódó Pd-katalizált kapcsolási reakciójának tanulmányozását.

A 3-, 4- és 6-brómszalicilaldehidek (46, 48, 49) az 5-, 7- és 8-helyzetben bróm szubsztituenst tartalmazó kumarinok (58-60) kiindulási anyagaiként szolgáltak, melyek irodalmi módszerek alapján történő előállítását követően[61,62] – szintén irodalmi módszert alkalmazva[64] – a megfelelő szubsztituáltságú brómkumarinok szintézisét végeztük.

Ezután az 5-brómkumarint (58) a 63a-d aromás és alifás, primer és szekunder aminokkal reagáltattuk megfelelő körülmények között. A kapott eredményekből látható, hogy a kapcsolt 64a-d származékokat gyenge és közepes hozammal (14-43 %) izoláltuk. A gyengébb hozamok egyik lehetséges oka szterikus gátlás lehet, amit alátámasztani látszik, hogy az elektronikusan hasonló helyzetű 7-brómkumarin (59) esetében sokkal jobb kitermeléseket kaptunk.

Kísérleteinket kiterjesztettük a 7-brómkumarinra (59) is. Az 5-brómkumarin (58) azonos körülmények között végzett kapcsolási reakcióihoz képest a várt 65a-g kapcsolt származékokat sokkal jobb hozammal (41-95 %) izoláltuk. A kapott adatokból megállapíthatjuk, hogy az amin szerkezete kevésbé befolyásolja a reakció lejátszódását, a kapcsolás alifás vagy aromás, primer, illetve szekunder aminok esetében egyaránt végbemegy. A hozam eltérésekért elsődlegesen az aminok forráspontjának különbsége, illetve a kapott termék izolálhatósága a felelős.

A C-N kapcsolási reakciókat a 8-brómkumarinra (60) is kiterjesztettük. Az alkalmazott reakciókörülmények az előzőekben említettekkel megegyeztek. A várt 66a-g aminokumarinokat általában közepes és jó (43-72 %) hozammal izoláltuk, bár az anilin esetében (63a) a kitermelés gyenge (28 %) volt. Ezek a hozamadatok elfogadhatóak annak fényében, hogy a reagáló aromás centrumhoz képest orto-helyzetben egy erősen elektronküldő szubsztituens helyezkedik el, amely destabilizálja az organopalládium intermediert és ezáltal gátolja a reakciót.

Munkám összefoglalásaként megállapíthatjuk, hogy a Buchwald-Hartwig kapcsolási reakció alkalmas aromás gyűrűjűben aminocsoportot tartalmazó kumarinok széles körének előállítására, ezáltal célkitűzésünknek megfelelően a reakció teljesítőképességét feltérképeztük.

MATUZ ANDREA

Kémia alapszak
BSc, 4. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulensek:
Dr. Kaizer József
egyetemi tanár, PE MK
Dr. Speier Gábor
egyetemi tanár, PE MK*

Flavonol- és kinolin-származékok vaskatalizált dioxigénezési reakciója

Az egymagvú FeIII(O-bs)(salen) (salenH₂= 1,6-bis(2-hidroxifenil)-2,5-diaza-hexa-1,5-dién; O-bsH= O-benzoilszalícilsav) komplex előállítása szintetikus enzim-depside modellként történt, jellemzőit spektroszkópai módszerekkel (IR, UV-VIS) és röntgen krisztallográfiával adtuk meg, összetételét elemanalízissel igazoltuk. A flavonol (flaH) és a 3-hidroxi-4-kinolin (kinH₂) származékok dioxigénezési reakciója a fent említett komplex felhasználásával történt, amelyet katalizátorként alkalmaztunk a heterociklikus gyűrű oxidatív bomlási folyamatában. A reakció termékeként a megfelelő O-benzoilszalícilsav és antranilsav származékot, valamint szénmonoxidot kaptunk. A részletes reakciókinetikai mérések eredményeként kapott mechanizmus alapján a vastartalmú flavonol és a kofaktor-függő 3-hidroxi-4(1H)-kinolin 2,4-dioxigenáz enzim funkcionális modelljeihez jutottunk.

MÉSZÁROS ÁDÁM

gyógyszervegyészmérnök

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Novák Zoltán**egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

2-(Ariletinil)-pivalanilidek előállítása és felhasználása rézkatalizált gyűrűzárási reakciókban

Kulcsszavak: Sonogashira; jodónium só; rézkatalízis; gyűrűzáras; benzoxazin

A közvetlen, egy lépéses gyűrűzárási reakciók intenzíven kutatott területe a kémiának. Ezen reakciók segítségével olyan heterociklusok egy lépéses előállítása valósítható meg, amelyek más úton való szintézise nehézkes lenne. Ezeket a vegyületeket széles körben felhasználják a gyógyszeriparban, ahol manapság már a gyógyszerek nagy részének alapvázát ilyen természetes vegyületek adják.

Kutatómunkám során az irodalomban már létező benzoxazinok szintézisére talált új szintézisút tanulmányozásával foglalkoztam.

A kiindulási anyagként szolgáló 2-(ariletinil)-pivalanilidek szintézisét az irodalomban ezekre a vegyületekre még nem leírt módon valósítottam meg. Összehasonlítottam a 2-jód-pivalanilidből TMS-acetilén ill. 2-metilbut-3-in-2-ol kapcsolásán, majd azt követő védőcsoport eltávolításán keresztül történő szekvenciális Sonogashira kapcsolásokat. Eközben 14, az irodalomban még nem leírt vegyületet állítottam elő.

Az irodalomban már ismert módszerek alapján előállítottam szimmetrikus, ill. később aszimmetrikus jodónium sókat.

Az előzetesen előállított kiindulási pivalanilideket és diaril-jodónium sókat egy, az irodalomban leírt meta-szelektív arilezési reakciók körülményei között reagáltattam.

Így egy feltehetően 6-exo-dig gyűrűzárási reakció során különböző arilezett benzoxazin származékokhoz jutottam.

NÉMETH TAMÁS

Gyógyszervegyész-mérnöki Mesterszak, MSc
MSc, 2. félév

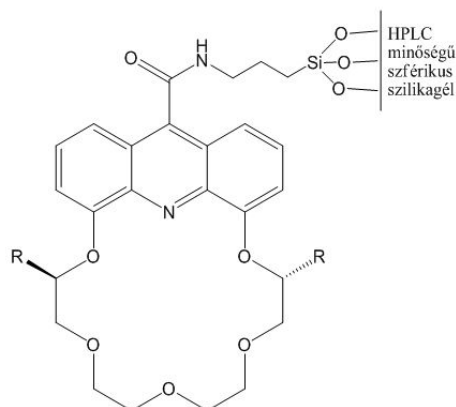
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Konzulensek:
Dr. Huszthy Péter
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Tóth Tünde
egyetemi adjunktus, BME VBK

Enantiomertiszta akridino-18-korona-6-éter szelektort tartalmazó királis állófázisok előállítása és vizsgálata

A koronaéter alapú királis állófázisok sikeresnek bizonyultak protonált primer aminok, aminosavak és származékaik mind analitikai, mind preparatív méretű elválasztására. Feladatom a kereskedelemből könnyen beszerezhető és viszonylag olcsó alapanyagokból kiindulva akridin egységet tartalmazó, enantiomertiszta (a királis centrumain metil-, illetve izobutilcsoportot tartalmazó) királis koronaéterek szintézise és felhasználásuk vizsgálata.

TDK munkám során 2 új, akridin egységet tartalmazó enantiomertiszta koronaéter szelektormolekula alapú királis állófázist (Ábra), valamint ezek szintézise közben több új enantiomertiszta koronaétert állítottam elő.



Szám	R
(R,R)-CSP-1	Me
(R,R)-CSP-2	iBu

Ábra

Az (R,R)-1 és (R,R)-2 királis állófázisokkal jó szelektivitással és hatékonyan választottuk el a különböző királis vendégmolekulák (1-NEA, 2-NEA, PEA, Br-PEA, NO₂-PEA) enantiomerjeit. A szintézisek kidolgozása során az akridin egységet tartalmazó prekursorok előállításának egyes lépéseiben módosításokat hajtottam végre a termelés javítása céljából, illetve a környezetet kevésbé terhelő, olcsóbb reagenseket használtam. A HPLC méréseket a Richter Gedeon Nyrt-ben végezték. A kutatást az OTKA PD71910 és K81127 pályázatok támogatták.

PÁL DÁVID

vegyésmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Huszthy Péter
egyetemi tanár, BME VBK*

Fentiazin egységet tartalmazó szenzormolekulák szintézise és anionfelismerő-képességük vizsgálata

A szupramolekuláris kémia egyik ága, az anionreceptorok kutatása az utóbbi évtizedben gyors fejlődésnek indult. A természetben is megfigyelhető molekuláris felismerés jelenségét kihasználva számos anionszelektív szenzor- és szelektormolekula alkalmas anionok érzékelésére és elválasztására.

Az anionszenzorok egy széles csoportját képviselik a semleges, viszonylag savanyú NH-csoportot tartalmazó receptormolekulák. Ezek a molekulák hidrogénkötéssel képesek anionok komplexálására, bázikus anionok esetében pedig deprotonálódásuk is megfigyelhető.

Munkám során fentiazinból kiindulva új akirális és optikailag aktív anionszenzorokat állítottam elő. A fentiazin alkilezését, nitrálását és oxidálását követően katalitikus hidrogénezéssel jutottam az 1 diaminoszármazékhoz, majd e kulcsintermediert felhasználva karbamid, tiokarbamid és szulfonamid típusú termékeket nyertem (2–9).

A 2, 3 és 8 szenzormolekulák komplexképző tulajdonságait acetonitril oldószerben UV-látható spektroszkópiai módszerrel vizsgáltuk. Az akirális gazdamolekulák (2 és 3) fluorid-, klorid-, bromid-, jodid-, nitrát-, hidrogén-szulfát-, dihidrogén-foszfát- és acetáttal szemben mutatott viselkedésének tanulmányozása közben egyes esetekben deprotonált komplex megjelenését is igazoltuk. A 8 tetracetil-glükopiranozil egységet tartalmazó királis receptormolekula és N-védett fenilglicin tetrabutilammónium-sók kölcsönhatása esetén tanulmányoztuk a fenilglicin aminocsoportján lévő védőcsoport térkitöltésének az enantioselektivitásra gyakorolt hatását.

Szerves kémia III tagozat

MÓTYÁN GERGŐ

vegyész

MSc, 10. félév

Szegedi Tudományegyetem

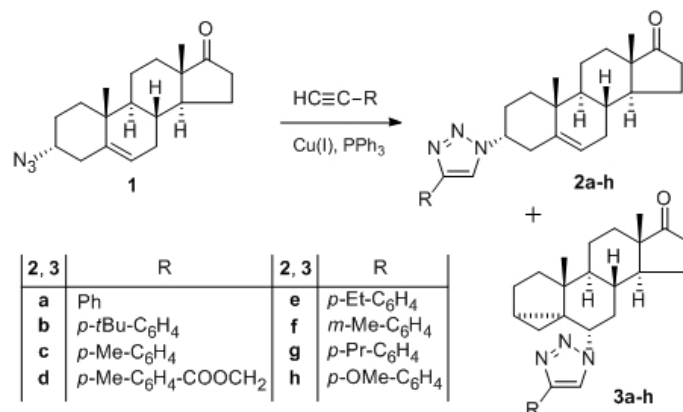
Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Wölfling János**tanszékvezető egyetemi tanár, SZTE TTIK**Dr. Schneider Gyula**professor emeritus, SZTE TTIK***Triazol gyűrűt tartalmazó dehidroepiandroszteron származékok
szintézise 1,3-dipoláris cikloaddícióval**

Az elmúlt időszakban a farmakológiai kutatások során felismerték, hogy a heterociklusos szteránvázis vegyületek jó antitumor hatással rendelkezhetnek különböző rákos sejtvonalakon.

Kutatásunk során a szintézisút dehidroepiandroszteronra (DEA) épült, mely az emberi szervezetben az androgén és az ösztrogén hormonok prekuzora, számos élettani folyamatban jelentős szerepet tölt be. A DEA és származékai részt vesznek egyes biológiai funkciók szabályozásában, többek között a sejtproliferációban, ám hatásuk nagymértékben függ a térszerkezetüktől, telítetlenségük mértékétől és a 3-as és 17-es, illetve egyéb helyzetben lévő funkciócsoportjaik minőségétől. Ezen paraméterek mind hozzájárulnak és befolyásolják az egyes receptorokhoz történő kötődésüket.

Munkánk első lépéseként a DEA 3 β helyzetű hidroxil funkcióját tozilátra cseréltük, majd a kapott terméket nátrium-aziddal 3 α -aziddá (1) alakítottuk. Az azidoszteroidon elvégeztük a réz(I)-katalizált 1,3-dipoláris alkin-azid cikloaddíciót (CuAAC) különböző terminális acetilén-származékokkal, és így 1,2,3-triazolszármazékhoz jutottunk (2a–h, 3a–h). Az irodalomban jól ismert „CuAAC-reakció” nagy hatékonysága és szelektivitása – a szteránváz specifikus sajátosságai miatt – nem teljesült. Minden esetben egy izomer termékpár keletkezését tapasztaltuk, mely során megfigyeltük az azidoszteroid i-szteroid/retro-i-szteroid átrendeződésre való képességét a B gyűrű Δ -5-ös rendszerének szomszédcsoport részvételével. Az előállított származékok szerkezetét ^1H - és ^{13}C -NMR spektroszkópiai és tömegspektrometriai módszerekkel igazoltuk.



A farmakológiai hatásvizsgálatokat négy humán adherens ráksejtvonalon végeztük. MTT assay alkalmazásával mértük a citosztatikus hatást, és sejtproliferáció gátlás % értékeket határoztunk meg, melyek egyes vegyületek esetében jónak, míg három vegyület esetén kiválónak mondhatók. Ezen három vegyülettel megismételtük a vizsgálatot egy kibővített 1 μM -os és 3 μM -os koncentráció tartományban is és IC_{50} értékeket határoztunk meg az egyes sejtvonalakon: HELA: méhnyakrák, MCF-7: mellrák, A431: bőrlaphám rák és A2780: petefészekrák, az eredmények biztatóak.

	HeLa, IC_{50} (μM)	MCF-7, IC_{50} (μM)	A431, IC_{50} (μM)	A2780, IC_{50} (μM)
2h	2,72	2,37	2,71	1,45
3h	-	5,04	2,73	3,09
3g	1,79	5,14	2,35	2,94

NAGY DÁVIDNÉ

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Keglevich György**tanszékvezető egyetemi tanár, BME VBK*

Optikailag aktív P-heterociklusok előállítása és hasznosítása szintézisekben

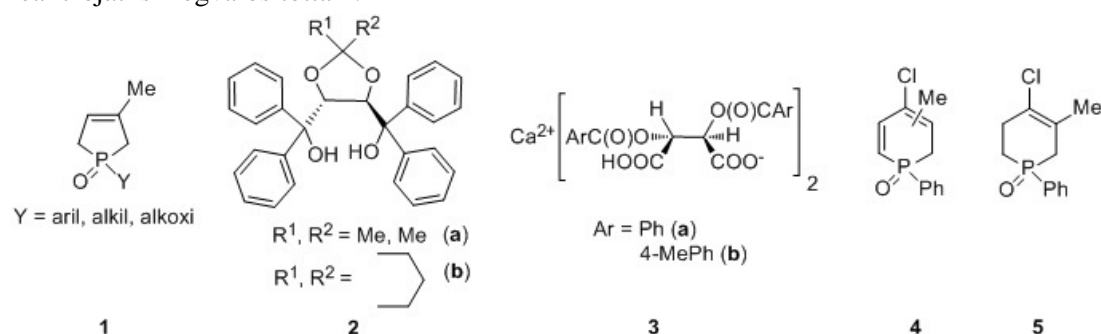
A szintetikus szerves kémiában elterjedten alkalmaznak optikailag aktív foszforvegyületeket, amelyeket rezolválással és aszimmetrikus szintézissel lehet előállítani.

A tanszéki kutatócsoportban sikerült eredményes módszert kidolgozni az 1-szubsztituált-3-metil-3-foszfolén-1-oxidok (1) optikai izomerjeinek elválasztására TADDOL-származékokat (2), illetve O,O'-dibenzoil-borkósav (3a) és O,O'-di-p-toluoil-borkósav savanyú Ca^{2+} sóit (3b) alkalmazva rezolválóágensként.^{1,2}

Ennek a munkának a folytatásaképpen TDK munkám során a korábban nem rezolvált propoxi-szubsztituált foszfolén (1) rezolválását végeztem el.

A kutatócsoport által kidolgozott rezolválási eljárást kiterjesztve optikailag aktív 3- és 5-metil-1-fenil-4-klór-1,2-dihidrofoszfinin-1-oxidokat (4) és 1-fenil-4-klór-5-metil-1,2,3,6-tetrahidrofoszfinin-1-oxidot (5) állítottam elő. Emellett vizsgáltam, hogy az 1-fenil-3-metil-3-foszfolén-1-oxidból (1) kiinduló többlépéses szintézis során, melyik reakciólépés után érdemes rezolválni, hogy optikailag aktív hattagú foszforheterociklust állítsunk elő.

A kutatómunka során több optikailag aktív öttagú P-heterociklus borán- és platina-komplekxképzési reakcióját is megvalósítottam.



1. Ujj, V.; Schindler, J.; Novák, T.; Czugler, M.; Fogassy, E.; Keglevich, Gy. *Tetrahedron: Asymmetry* 2008, 19, 1973-1977.

2. Ujj, V.; Bagi, P.; Schindler, J.; Madarász, J.; Fogassy, E.; Keglevich, Gy. *Chirality* 2010, 22, 699-705.

OLÁH MÁRK

Gyógyszervegyész-mérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

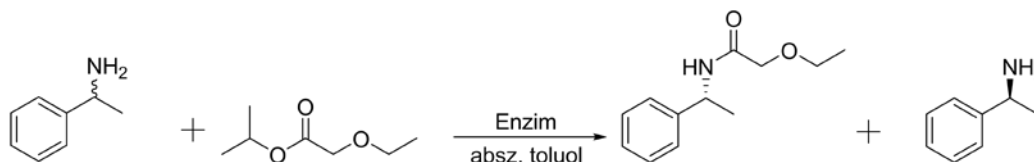
Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:
Dr. Poppe László
egyetemi tanár, BME VBK*

Pseudozyma aphidis lipáz aktivitásának vizsgálata racém aminok enzimkatalizált kinetikus rezolválásában

TDK munkám célja a *Pseudozyma aphidis* lipáz termelőképességének vizsgálata. A különböző összetételű táptalajokon termelt lipáz(oka)t közvetlenül a fermentációs elegyekből a kutatócsoport által fejlesztett szilikagél alapú adszorbensekkel nyertem ki. A nyers készítmények összehasonlításához az (1-feniletíl)-amin enantioszelektív enzimkatalizált kinetikus rezolválását választottam, mivel a távlati cél ilyen jellegű reakciók enzimkatalizált megvalósítása szakaszos és folytonos, átfolyásos bioreaktorokban.



Az (1-feniletíl)-amin a legegyszerűbb aromás oldalláncú, királis amin, így modellként optimális enantioszelektív reakciók megvalósítására. Az acildonor kiválasztásához teszt sorozatokat végeztem a leghatékonyabb acilezőszer kiválasztásához. Az általánosan amin acilezésre használt etil-acetát mellett teszteltem az izopropil-acetátot, illetve előállítottam az etoxiacetsavat és ennek etil- és izopropil-alkohollal képzett észtereit. A vizsgált észtereket három racém amin [(1-feniletíl)-amin, 4-fenilbután-2-amin, 1,2,3,4-tetrahidronaftalin-1-amin] különböző módon rögzített *Candida antarctica* B lipáz által katalizált kinetikus rezolválásában hasonlítottam össze. A leghatékonyabb acildonornak az izopropil-2-etoxiacetát adódott (~20-szoros aktivitásnövekedés az etil-acetáthoz képest), ezért a *Pseudozyma aphidis* lipáz enzimmészítmények aktivitásának és szelektivitásának vizsgálatához ezt használtam. A kinetikus rezolválási reakciókat királis állófázisú gázkromatográfiával követtem.

PETHŐ BALINT

Vegyész

MSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

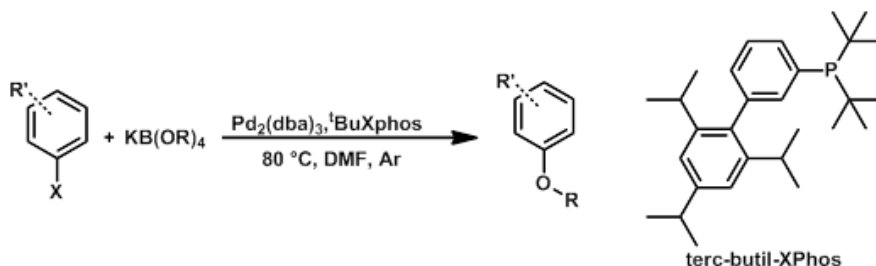
*Konzulens:
Novák Zoltán
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

Szén-oxigén kötés kialakítása palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókban

A szintetikus kémia egyik kiemelkedő fontosságú reakciótípusa az éterkötés kialakítása, ezen belül is az aril-metil éterek szintézise. A kis szénatomszámú alkoxi-csoportok beépítése akár gyógyszermolekulák, akár fluoreszcens festékek előállításakor fontos reakciólépés lehet.

Napjainkban egyre inkább meghatározó szerepet töltenek be az átmenetifém-katalizált keresztkapcsolási (cross-coupling) reakciók. Ezt jól mutatja a témában egyre növekvő publikációk száma, ipari jelentőségük növekedése is.

Kutatásunk során célunk egy új, palládium-katalizált alkoxilálási eljárás kifejlesztése volt. A módszer egy új keresztkapcsolási reakció segítségével állítja elő a kívánt aromás étert a megfelelő aromás halogenid, leginkább klorid, és kálium tetraalkil-borát sók felhasználásával.



1. ábra: A szintézis általános reakcióegyenlete

Az eljárás katalitikus mennyiségű (2 mol%) Pd(0)-vegyületet, illetve foszfán alapú ligandumot (4 mol%) igényel, melyekből in situ képződik a katalitikus aktivitással rendelkező palládium-komplex.

A szintézis a klasszikus eljárásokkal szemben nem igényel rendkívül magas hőmérsékletet, vagy erősen bázikus közeget, ezáltal alkalmas lehet érzékenyebb molekulák átalakítására is a racemizáció, vagy bomlás veszélye nélkül.

[1] Miyaura, N., Suzuki, A., Chem. Rev., 95 (7), 2457–2483 (1995)

SZABÓ JOHANNA

Vegyész

MSc, 9. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Konzulens:

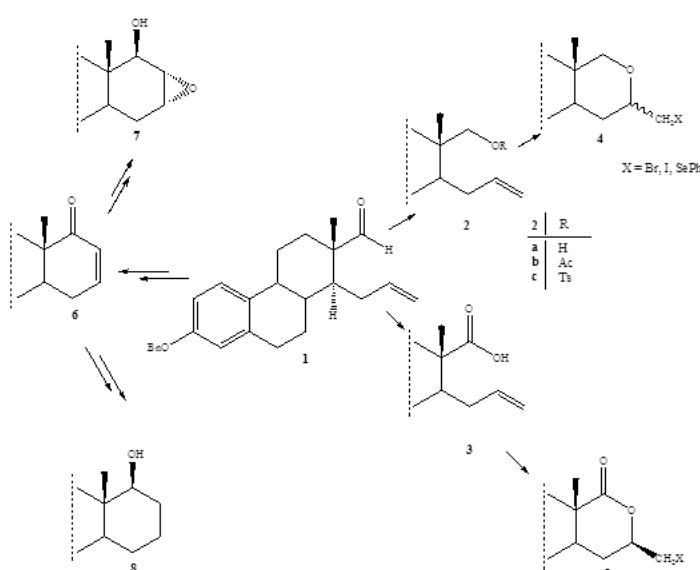
Dr. Mernyák Erzsébet

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Új oxigén- és halogéntartalmú ösztronszármazékok szintézise és antiproliferációs vizsgálata

Munkánk során a 3-as helyzetben benzil-védőcsoportot tartalmazó ösztránvázás D-szekoaldehidből (1) kiindulva különböző gyűrűzárási reakciókkal oxigén- (6, 7, 8), halogén- és szeléntartalmú (4, 5) D-homoösztronokat nyertünk. A tetrahidropirán-származékok (4) kiindulási anyagaként alkalmazott D-szekoalkoholt (2a) három helyen módosítottuk: eltávolítottuk a 3-as helyzetű védőcsoportot, telítettük a propenil-oldalláncot és acileztük a 17-es alkoholos hidroxil-funkciót.

Az újonnan előállított D-szeko- és D-homoszármazékok antiproliferatív hatásának vizsgálatát az SZTE Gyógyszerhatástani és Biofarmáciai Intézetében végezték in vitro MTT-módszerrel különböző humán reprodukciós rákos sejtvonalakon. Néhány vegyület (2a, 2b, 6, 7, 8) kiemelkedő antiproliferatív hatást mutatott, alacsony IC₅₀ értékkel. Munkánk egyik jelentőségét az adja, hogy az irodalomban ilyen hatékony antitumor vegyület (2a) a D-szekoösztron sorban még nem ismeretes. Továbbá sikerült olyan D-homoösztron-származékokat (6, 7, 8) előállítanunk, amelyek szelektíven gátolják egyes rákos sejtek osztódását.



SZÉKELY ANNA

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Novák Zoltán
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

Hipervalens jódvegyületek alkalmazása rézkatalizált oxidatív kapcsolási reakciókban

A szerves kémiai szintézisekben fontos szerepet tölt be a szén-szén kötés létrehozása, azon belül az arilezési reakciók kiemelt jelentőséggel bírnak, hiszen ezekkel előállíthatók természetes vegyületek, gyógyszermolekulák, illetve katalizátorok ligandumai is. Az utóbbi években a keresztkapcsolási reakciók kutatásával, alkalmazásával egyre többet foglalkoznak, ugyanis a katalizátorok és megfelelő reagensek segítségével elérhető, hogy a kiindulási vegyületek preaktiváció nélkül hatékonyan és szelektíven kapcsolódjanak egymáshoz.

A katalízis során a leggyakrabban használatos átmeneti fémek a palládium, nikkel, irídium, arany illetve réz, valamint vegyületeik. Ezek szelektivitásával kiemelten foglalkoznak, ugyanis a publikációk számának a növekedésével egyre inkább megfigyelhető az a tendencia, hogy a palládium-katalizált reakciók orto- és para-irányításúak, míg a réz-katalizált reakciók meta-irányításúak. Az irányítás jellege természetesen függ a kiindulási molekulák felépítésétől, valamint az alkalmazott reagensektől.

Kutatási témáinkban réz-katalizált, hipervalens jódvegyületeket felhasználó szintézisek vizsgálatával foglalkoztunk. Kutatócsoportunk korábban kifejlesztett egy olyan könnyen kezelhető, regenerálható réz-katalizátort [[1]], melyet ugyancsak használhatunk az általunk vizsgált reakciókban.

Tudományos diákköri munkám egyik témája a rézkatalizált meta-irányítású aromás arilezési reakció [[2]] megvalósíthatóságának vizsgálata heterogén katalitikus körülmények között. A reakciók vizsgálata során nem sikerült a kívánt átalakítást teljes konverzióval elvégezni (az átlagos konverzió 93%). Ez felkeltette az érdeklődésünket, ugyanis azt találtuk, hogy a szakirodalomban leírt reakciónál sem lehet nagyobb konverziót elérni. Kutatásunk tehát a gátló tényező azonosítására irányult, hogy a későbbiekben kiküszöbölhessük azt.

A másik téma egy szén-nitrogén kialakításával járó gyűrűzárási reakció vizsgálata, amelyben akridinon vázat építhetünk fel C-N kötés kialakulása közben oxidatív körülmények között, C-H aktiválás segítségével. Ennek a vizsgálatához is réz-katalizátort alkalmaztunk, valamint olyan jodóniumsókat állítottunk elő, amelyek feltételezhetően elősegítik a gyűrűzárási lépést.

[[1]] Kovács, Sz.; Novák, Z. *Org. Biomol. Chem.* 2011, 9, 711

[[2]] R.J. Phipps, M.J. Gaunt, *Science*, 2009, 323, 1593.

SZTANKOVICS ANDREA

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Konzulens:**Dr. Juhász László**egyetemi adjunktus, DE TTK*

Természetes eredetű glikogén foszforiláz gátló analogonjainak szintézise

A természetes eredetű biológiailag aktív vegyületek számos esetben szolgáltak gyógyszerhatóanyagok kidolgozásánál vezérmolekulaként. Furukawa és munkatársai az No.138354 gombából izolálták az FR258900 (14) jelű molekulát, amely hatékonyan gátolja az emberi májból (hlGP) és a nyúl vázizomból (rmGP) izolált glikogén foszforiláz enzimeket.

A munkám célja volt a szerkezet-hatás összefüggés vizsgálatok kiterjesztéséért a természetes vegyület a C-2/C-3 szubsztituenseknek a kötődésre és ez által az inhibícióra gyakorolt hatásának a vizsgálata. E cél érdekében a természetes vegyület olyan analogonjainak a szintézisét terveztük, melyekben a C-2 hidroxilcsoport hiányzik, így tanulmányozhatjuk ezen szubsztituens hiányának hatását a kötődésre, inhibícióra.

Az analogonok előállításához szükséges 3-hidroxi-pentándisav (15) a kereskedelemben nem volt kapható, azonban a 20 dietil észter származék lúgos hidrolízissel laktonizáció nélkül jó hozammal (68%) a 15 dikarbonsavvá alakítható.

15 dikarbonsavat a benzofenon-hidrazonból (21) in situ generált difenildiazometánnal (22, DPDAM) reagáltatva közepes hozammal (38%) a 23 észter származékká alakítottuk.

A 22 karbonsavszármazék szabad hidroxilcsoportját különböző fahéjsav származékokkal (16 - 19) történő acilezéssel kívántuk átalakítani. Ehhez a fahéjsav (16) kivételével a 4-hidroxi-fahéjsav (17) és a ferulesav (18) és a kávéssav (19) fenolos hidroxilcsoportjait metoxikarbonil csoporttal védjük, és az így nyert származékokból (16, 24-26) előállított sav-kloridokkal (27-30) acileztük a 23 karbonsavszármazékokat. A kívánt termékeket kiváló (33: 89%), jó (31: 65%) és alacsony hozammal (32: 27%; 34: 31%) izoláltuk. E két utóbbi esetben a reakciókörülmények további optimalizálásával előreláthatólag növelhető a reakciók kitermelése.

A 31 - 33 vegyületek védőcsoportjainak eltávolításával előállított származékok (35, 38, 39) és a hozzájuk vezető intermedierek az irodalomban eddig nem ismert vegyületek, melyeknek új, és hatékony szintézismódszerét dolgoztuk ki.

Vegyületeink glikogén foszforiláz inhibitor aktivitását a Debreceni Egyetem Orvosi Vegytani Intézetében vizsgálták. A végtermékeknél (35, 38, 39) azt tapasztalták, hogy 625 M koncentrációban sem gátolják jelentősen az enzim aktivitását. Feltételezésünk szerint ennek a szubsztituensnek nem a szubsztrátnak az enzimhez való közvetlen kötődésében van szerepe, hanem a szubsztrát aktív konformációjának a kialakításában. Ezen kérdés eldöntése csak további vizsgálatokkal lehetséges. A szubsztrát konformációs viszonyainak tanulmányozása molekulamodellezéssel, konformáció eloszlás vizsgálatával lehetséges.

TAJTI ÁDÁM

Vegyészmérnök

BSc, 7. félév

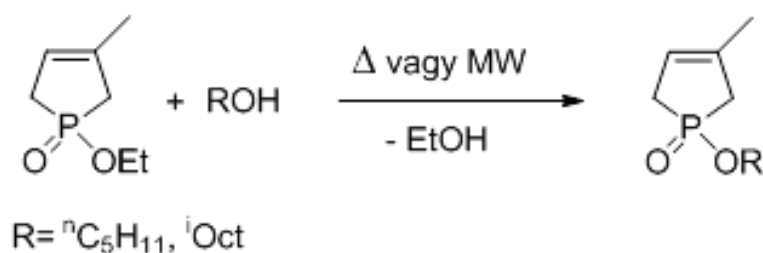
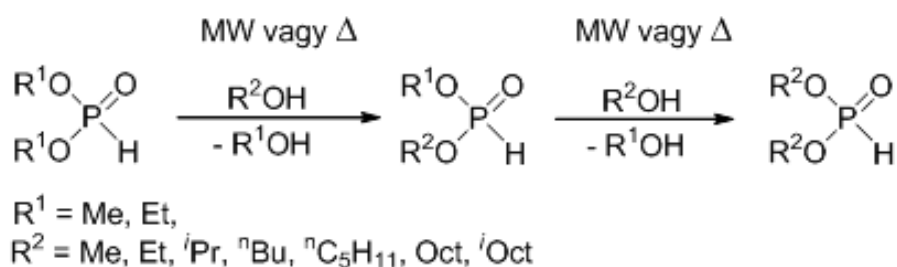
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Keglevich György**tanszékvezető egyetemi tanár, BME VBK***Foszfónátok és foszfinátok alkoholízise mikrohullámú körülmények között**

A „zöldkémiai” kutatások egyik fontos célja környezetbarát szintézismódszerek kidolgozása. Ezen célok megvalósításához megfelelő eszköz lehet a mikrohullámú technika (MW), hiszen alkalmazásával a kémiai átalakítások gyorsabbá és szelektívebbé tehetők, illetve elkerülhető az oldószerek és katalizátorok használata. Munkánk során különböző dialkil-foszfítok (H-foszfónátok) és gyűrűs foszfinátok alkoholízisét vizsgáltuk, melyek fontos kiindulási anyagok a foszfororganikus kémiában. Modellvegyületként különféle dialkil-foszfítok (dietil-és dimetil-foszfít), illetve gyűrűs foszfinátok (1-etoxi-3-foszfólén-oxidok és 1-etoxi-3-foszfólán-oxidok) szolgáltak. Az alkoholíziseket feleslegben vett alkoholokkal végeztük el, katalizátor nélkül MW körülmények között. A dialkil-foszfítok alkoholízise két lépésben játszódik le. A körülményektől függően a vegyes származékok domináltak, vagy a teljesen átésztereződött termék képződött. A vegyes dialkil-foszfítok különösen értékes intermedierek.



TAKÁCS JUDIT

vegyészmérnök Bsc

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

*Konzulens:**Dr. Keglevich György**tanszékvezető egyetemi tanár, BME VBK*

Foszfa-Michael-reakciók mikrohullámú körülmények között

A Michael-addíció az egyik leghasznosabb módszer C-C (C-P) kötés enyhe körülmények között történő kialakítására. Ebből kifolyólag munkám során különböző foszforvegyületek Michael-addícióját vizsgáltam telítetlenséget tartalmazó szerves vegyületekre mikrohullámú körülmények között. Modellvegyületként a maleinsavanhidrid, az N-metil- és az N-fenil-maleimid szolgál. P-speciesként dialkil-foszfítokat, difenilfoszfin-oxidot, illetve etil-fenil-foszfinátot alkalmazunk. A reakciókat oldószer és katalizátor alkalmazása nélkül kívántuk megvalósítani.

TÓTH BALÁZS LÁSZLÓ

Vegyész

MSc, 1. félév

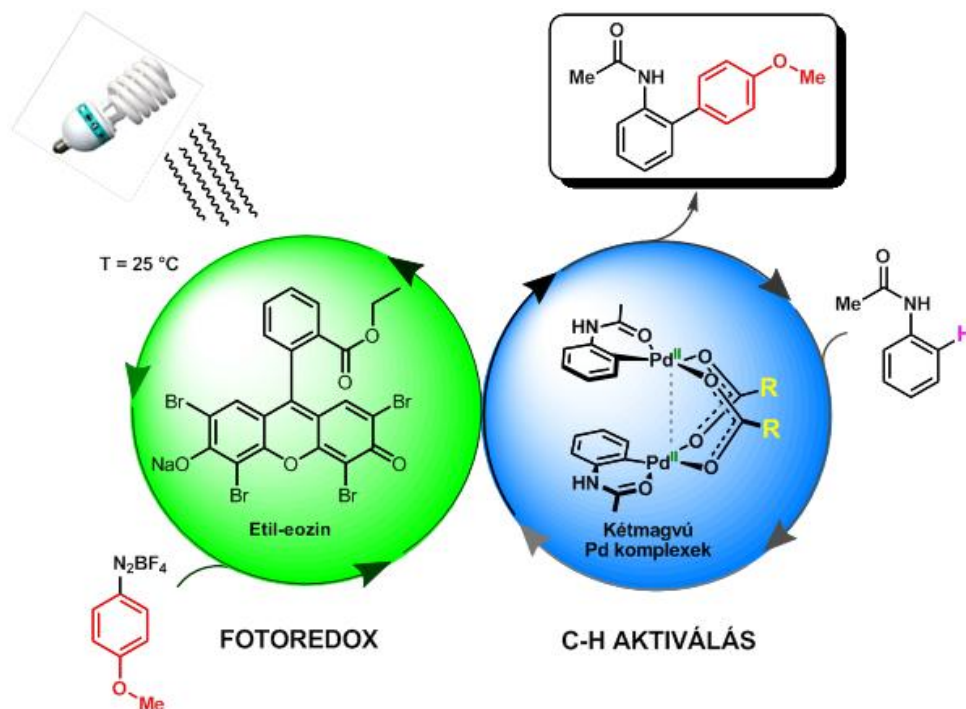
Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Konzulens:
Novák Zoltán
egyetemi adjunktus, ELTE TTK*

Szén-szén kötés kialakítása palládium centrumon végbemenő látható fény fotoredox katalízis alkalmazásával

Tudományos diákköri dolgozatomban a szintetikus kémia egy új, érdekes és gyorsan fejlődő ágával, a C-H aktiválással foglalkoztam. A C-C kötés kialakítását szerves fotoérzékenyítő molekulák és palládium-katalizátorok jelenlétében látható fényvel történő besugárzás segítségével valósítottam meg.



Laboratóriumi munkám során előállítottam 3 új, az irodalomban még nem ismert palládium-komplexet, és szerkezetvizsgálatukon kívül az elemi C-H aktiválási lépés és katalitikus aktivitásuk tanulmányozását is célul tűztem ki.

TÖRÖK ZSOLT

Gyógyszerész

Osztatlan, 7. félév

Debreceni Egyetem

Gyógyszerésztudományi Kar

*Témavezető:**Prof. Dr. Herczegh Pál**tanszékvezető egyetemi tanár, DE GYTK*

Teikoplanin pszeudoaglikon izoindol származékainak szintézise

Napjainkban a kórházi és klinikai osztályokon jelentős veszélyforrást jelentenek a meticillin rezisztens *Staphylococcus aureus*, a vankomicin rezisztens *Enterococcus faecalis* és más, a klinikumban jelenleg alkalmazott szerekkel szemben ellenálló baktérium fajok. Kutatásom célja olyan antibiotikumok-származékok előállítása, melyek hatékonyak bizonyulnak multi-rezisztens baktériumokkal szemben. A kísérlet középpontjában egy glikopeptid antibiotikum, a teikoplanin áll. A kiindulási molekula a teikoplaninból előállított pszeudoaglikon. Ezen aglikont felhasználva szintetizáltam az új származékokat, egy régóta alkalmazott háromkomponensű reakció révén.

A származékok tervezésekor változatos szubsztitúciós mintázatú kémiai szerkezetek kialakítására törekedtem. A közös szerkezeti pontja az összes vegyületnek a (benz)izoindol váz, melyhez a primer aminos csoportot a teikoplanin pszeudoaglikon N-terminálisa biztosítja. Az előállított származékok számos fajra kiterjedő antibakteriális vizsgálata nem várt adatokat eredményezett. A kapott eredmények értelmében felmerül az a kérdés, hogy milyen összefüggés van a kialakított molekularészek és hatás/hatástalanság között?

URBÁN BÉLA

Vegyész
MSc, 2. félév
Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Konzulens:
Skodáné Dr. Földes Rita
egyetemi tanár, PE MK*

Aril-jodidok Heck reakciójának vizsgálata átfolyásos mikroreaktorban

Az utóbbi időben a folyamatos átáramlásos reaktorok használata egyre nagyobb teret hódít a szintetikus szerves kémiában. A módszer alkalmazásának több előnye is lehet: a reakció körülményei pontosabban szabályozhatók és gyorsan változtathatók, gyakran nő a szelektivitás a szakaszos kísérletekhez képest. A homogén katalitikus reakciók szokásos katalizátorai helyett azonban heterogén katalizátorokat kell alkalmazni. Így a palládium-katalizált kapcsolási reakciók esetében a katalizátort szilárd hordozóhoz kell rögzíteni. A rögzítés egy lehetséges módja a SILP (supported ionic liquid phase) technika, ahol a katalizátort egy szilárd hordozó felületére vitt ionfolyadékban oldják. Ezt a módszert gyakran alkalmazták már Heck reakció katalizátorának rögzítésére, a katalizátorokat azonban csak szakaszos reaktorokban tesztelték.

Tudományos diákköri munkám során feladatom különböző SILP technikával készült Pd tartalmú katalizátorok elkészítése volt. A katalizátorokat jódbenzol és metil-akrilát - átáramlásos mikroreaktorban lejátszódo - Heck reakciójában teszteltem.

A különböző módon elkészített katalizátorokat először szokásos körülmények között, szakaszos reaktorban hasonlítottam össze, majd ezek után azokat a katalizátorokat, amelyek jó aktivitást mutattak, a folyamatos reaktorban is vizsgáltam.

Tanulmányoztam a rögzítés módjának hatását a katalizátor aktivitására, szelektivitására és stabilitására. Meghatároztam a palládium-katalizátor lemosódásának mértékét.

Megállapítottam, hogy a kiválasztott katalizátor alkalmas jódbenzol és különböző aril-jodidok Heck reakciójának átáramlásos reaktorban történő kivitelezésére. A katalizátor akár 30 órán át is megtartja aktivitását, így jól használható különböző szubsztrátumok reakciójának gyors tesztelésére.

VARGA GÁBOR

Vegyész

MSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

*Konzulensek:**Dr. Pálinkó István**egyetemi docens, SZTE TTIK**Csendes Zita**PhD hallgató, SZTE TTIK*

Klórpropilezett szilikagélen kovalens kötéssel immobilizált Mn(II)– és Ni(II)–védett aminosav komplexek szintézise, szerkezetvizsgálata és katalitikus aktivitása

Kulcsszavak: heterogén katalizátor, IR spektroszkópia, SOD aktivitás, ciklohexén oxidálása

A természet leghatékonyabb katalizátorai az enzimek, szelektivitásuk és aktivitásuk kiemelkedő, azonban csak az élő szervezetben jelenlévő körülmények között működőképesek, így laboratóriumi és ipari alkalmazásuk legfeljebb korlátozottan lehetséges. Problémát jelent továbbá az is, hogy az enzimek homogén katalizátorok, ezért a reakcióelegyből való visszanyerésük nagyon nehéz.

A katalizátorkutatás egyik fő irányvonala olyan anyagok létrehozása, melyek az enzimekhez hasonló tulajdonságokkal rendelkeznek, de sokkal változatosabb reakciókörülmények között képesek kifejteni hatásukat. Ez kétféleképpen valósítható meg: (i) rögzíthetjük magát az enzimet egy szilárd hordozón az aktivitás és szelektivitás megőrzése mellett, vagy (ii) az enzim szerkezeti vagy funkcionális modelljét immobilizáljuk egy hordozón [1].

Munkám célja a szuperoxid dizmutáz (SOD) enzimek aktív centrumához hasonló szerkezetű Mn(II)– és Ni(II)–C–védett aminosav (hisztidin, cisztein és cisztin) komplexek immobilizálása volt klórpropilezett szilikagélen, kovalens kötéssel.

A kialakult felületi komplexek lehetséges szerkezetét közép/távoli infravörös és Raman spektroszkópia, valamint a Mn(II)-tartalmú minták esetén ESR spektroszkópia, a Ni(II)-tartalmú anyagoknál UV/VIS diffúz reflektancia spektroszkópia felhasználásával határoztam meg. A spektroszkópai vizsgálatok azt mutatták, hogy a fémion–aminosav komplexek előállítására minden esetben sikeres volt.

A rögzített komplexek SOD aktivitását a Beauchamp-Fridovich módszeren alapuló riboflavin-metionin-NBT tesztreakcióval mértem meg [2]. Feladatomból volt még a kialakított felületi komplexek katalizátorként történő felhasználása a ciklohexén oxidálása során, különböző körülmények között. Minden szintetizált anyag mutatott aktivitást.

[1] Kirby, A.J., *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, (35) 707-724 (1996)

[2] Beauchamp, C., Fridovich, I., *Anal. Biochem.*, (44) 276-287 (1971)

Előadók névsora

<u>ÁRENDÁS PÉTER</u>	- 97 -
<u>ÁBRAHÁM JANKA</u>	- 219 -
<u>BABOS KATALIN</u>	- 145 -
<u>BACSO ANDRÁS</u>	- 68 -
<u>BAGI NÁRCISZ MÁRIA</u>	- 203 -
<u>BAJI ÁDÁM</u>	- 220 -
<u>BAJUSZ DÁVID</u>	- 204 -
<u>BALI KRISZTINA</u>	- 69 -
<u>BALOGH ÁGNES</u>	- 205 -
<u>BALOGH ATTILA</u>	- 146 -
<u>BALOGH RIA KATALIN</u>	- 70 -
<u>BARANYI ATTILA</u>	- 206 -
<u>BATKI JÚLIA</u>	- 71 -
<u>BAZSÓ FANNI LAURA</u>	- 129 -
<u>BEDNÁR ANDRÁS</u>	- 72 -
<u>BENDA ZSUZSANNA</u>	- 98 -
<u>BENDES ÁBRIS ÁDÁM</u>	- 73 -
<u>BERKI PÉTER</u>	- 159 -
<u>BERTA DÉNES</u>	- 99 -
<u>BIHARI ZSOLT</u>	- 171 -
<u>BODNÁR BRIGITTA</u>	- 221 -
<u>BOGÁTH DÁNIEL</u>	- 207 -
<u>BOGDÁNDI VIRÁG</u>	- 208 -
<u>BOHNER BÍBORKA</u>	- 130 -
<u>BOJTÁR MÁRTON</u>	- 222 -
<u>BORSOS KATALIN</u>	- 172 -
<u>BRUSZEL BELLA</u>	- 74 -
<u>CAPÁRI DÁNIEL</u>	- 51 -
<u>CSÁSZÁR ZSÓFIA</u>	- 223 -
<u>CSEH BORBÁLA</u>	- 147 -
<u>CSIMBÓK ERVIN</u>	- 205 -
<u>CSIPAK BRIGITTA</u>	- 75 -
<u>CSIRE GIZELLA</u>	- 173 -
<u>CSÓKÁS DÁNIEL</u>	- 224 -
<u>DABÓCZI MÁTYÁS</u>	- 160 -

<u>DANCS ÁGNES</u>	- 76 -
<u>DANICS NÓRA</u>	- 148 -
<u>DEZSŐ GYÖRGY</u>	- 149 -
<u>DITRÓI TAMÁS</u>	- 131 -
<u>DOBOSY PÉTER</u>	- 187 -
<u>DOBRÁDI ANITA</u>	- 161 -
<u>DUDÁS ERIKA</u>	- 77 -
<u>ECSEDI ANITA BEATRIX</u>	- 113 -
<u>ÉRSEK GÁBOR</u>	- 162 -
<u>FARAGÓ ZSOLT</u>	- 225 -
<u>FARKAS ATILA</u>	- 35 -
<u>FARKAS ISTVÁN</u>	- 36 -
<u>FAZEKAS ESZTER</u>	- 226 -
<u>FECZKU GYULA</u>	- 227 -
<u>FEHÉR PÉTER</u>	- 100 -
<u>FILOTÁS DÁNIEL</u>	- 37 -
<u>FODOR MELINDA ANNA</u>	- 174 -
<u>FÓNAGY ORSOLYA</u>	- 150 -
<u>FÓRIZS BALÁZS</u>	- 52 -
<u>FÖLDES TAMÁS</u>	- 101 -
<u>FÖLDESI MARCELLA</u>	- 151 -
<u>FÖLDESI TAMÁS</u>	- 152 -
<u>FÜLÖP GERGŐ</u>	- 163 -
<u>GÁL ISTVÁN</u>	- 114 -
<u>GARDA ZOLTÁN</u>	- 175 -
<u>GERGELY MÁTÉ</u>	- 209 -
<u>GŐZ VIKTÓRIA</u>	- 228 -
<u>GRECSÓ NÓRA</u>	- 229 -
<u>GUBICZA KRISZTINA</u>	- 115 -
<u>GYENESE JUDIT</u>	- 230 -
<u>GYEVI-NAGY LÁSZLÓ</u>	- 102 -
<u>HADHÁZI ÁDÁM</u>	- 231 -
<u>HÁMORNIK GÁBOR BENCE</u>	- 78 -
<u>HANCSÁKNÉ DUDÁS CSILLA</u>	- 176 -
<u>HARANGI SÁNDOR</u>	- 38 -
<u>HAVASI VIKTOR</u>	- 53 -
<u>HEGYESI NÓRA</u>	- 164 -
<u>HOLCZER ESZTER</u>	- 165 -

<u>HOMOLYA LEVENTE</u>	- 210 -
<u>HÜSE DÁNIEL</u>	- 177 -
<u>ILKEI VIKTOR</u>	- 235 -
<u>IVANA KUZMINAC</u>	- 232 -
<u>KÁLMÁN NOÉMI</u>	- 236 -
<u>KALMÁR SZABOLCS</u>	- 54 -
<u>KÁNNÁR DÁNIEL</u>	- 132 -
<u>KAVICZKI ÁKOS</u>	- 133 -
<u>KECENOVIC EGON</u>	- 55 -
<u>KECSKEMÉTI ÁDÁM</u>	- 80 -
<u>KELEMEN ZSOLT</u>	- 238 -
<u>KINDNER ILDIKÓ</u>	- 39 -
<u>KIRÁLY ANDRÁS</u>	- 188 -
<u>KIRÁLY ANNA</u>	- 134 -
<u>KIRSCHWENG BALÁZS</u>	- 56 -
<u>KISS MARIANN</u>	- 83 -
<u>KISS MELITTA PATRÍCIA</u>	- 211 -
<u>KISS-SZEMÁN ANNA</u>	- 84 -
<u>KOCZOR -BÁLINT</u>	- 136 -
<u>KÓKAI ESZTER</u>	- 239 -
<u>KOMJÁTI BALÁZS</u>	- 240 -
<u>KONKOLY BENJÁMIN</u>	- 189 -
<u>KONTOS JÁNOS</u>	- 137 -
<u>KORMÁNYOS ATTILA</u>	- 138 -
<u>KOVÁCS ÁDÁM</u>	- 99 -
<u>KOVÁCS BERTALAN</u>	- 85 -
<u>KOVÁCS DÁNIEL</u>	- 241 -
<u>KOVÁCS LENKE</u>	- 242 -
<u>KOVÁCS RÓBERT</u>	- 139 -
<u>KOZMÉR ZSUZSANNA</u>	- 40, 140 -
<u>KREKUSKA HAJNALKA</u>	- 86 -
<u>KRICSFALUSI NIKOLETTA</u>	- 135 -
<u>KUGYELA NÁNDOR</u>	- 57 -
<u>KUNSÁGI-MÁTÉ ÉVA</u>	- 141 -
<u>KUTUS BENCE</u>	- 178 -
<u>LACZKÓ KINGA</u>	- 243 -
<u>LANKÓ JÁCINTA</u>	- 116 -
<u>LEHÓCZKI TÍMEA</u>	- 41 -

<u>LENGYEL ATTILA</u>	- 179 -
<u>LIHI NORBERT</u>	- 180 -
<u>LOVÁSZ KRISZTINA</u>	- 87 -
<u>LŐRINCZ ÁRON</u>	- 42 -
<u>LŐRINCZ LÁSZLÓ</u>	- 157 -
<u>LÖVEI ALIDA</u>	- 135 -
<u>LUDÁNYI ANDRÁS</u>	- 154 -
<u>LUKÁCS DIÁNA</u>	- 190 -
<u>LUKÁCS NORBERT</u>	- 244 -
<u>MÁRKUS MÁRIA</u>	- 117 -
<u>MÁTÉFFY KORNÉL</u>	- 191 -
<u>MATUZ ANDREA</u>	- 245 -
<u>MEGYERI GÁBOR</u>	- 192 -
<u>MERÉNYI ANNA</u>	- 193 -
<u>MÉSZÁR ETELKA ZSUZSANNA</u>	- 194 -
<u>MÉSZÁROS ÁDÁM</u>	- 246 -
<u>METZINGER ANIKÓ</u>	- 43 -
<u>MEZEI PÁL DÁNIEL</u>	- 103 -
<u>MOLNÁR TÍMEA</u>	- 58 -
<u>MOLNÁR ZSÓFIA</u>	- 118 -
<u>MÓTYÁN GERGŐ</u>	- 251 -
<u>MURÁTH SZABOLCS</u>	- 59 -
<u>MÜLLER JUDIT</u>	- 88 -
<u>NAGY FLÓRA</u>	- 119 -
<u>NAGY DÁNIEL</u>	- 149 -
<u>NAGY DÁVIDNÉ</u>	- 253 -
<u>NAGY GÁBOR</u>	- 181 -
<u>NAJBAUER ESZTER ÉVA</u>	- 142 -
<u>NÉMETH ANASZTÁZIA</u>	- 120 -
<u>NÉMETH GABRIELLA</u>	- 121 -
<u>NÉMETH TAMÁS</u>	- 247 -
<u>NÉMETH ZOLTÁN</u>	- 195 -
<u>OLÁH MÁRK</u>	- 254 -
<u>ORGOVÁN ZOLTÁN</u>	- 89 -
<u>PÁL DÁVID</u>	- 248 -
<u>PÁLFY GYULA</u>	- 90 -
<u>PÁLLAI ZOLTÁN</u>	- 143 -
<u>PAPP DÓRA</u>	- 104 -

<u>PAPP IBOLYA ZITA</u>	- 60 -
<u>PAPP MÁTÉ -</u>	212 -
<u>PAPP TAMARA</u>	- 105 -
<u>PARAJDI-LOSONCZI PÉTER LÁSZLÓ</u>	- 182 -
<u>PATALENSZKI JÁNOS</u>	- 183 -
<u>PÉTER NÓRA</u>	- 61 -
<u>PETHŐ BÁLINT</u>	- 255 -
<u>PETRI BALÁZS</u>	- 213 -
<u>POKORNYI GÁBOR</u>	- 122 -
<u>PÓS ESZTER SAROLTA</u>	- 106 -
<u>RÁCZ ANITA</u>	- 44 -
<u>RAICS MÁRIA</u>	- 91 -
<u>RAUSCHER EVELIN</u>	- 214 -
<u>RÉTFALVI NÓRA</u>	- 155 -
<u>SÁGI DÁNIEL</u>	- 147 -
<u>SÁGI GYURI</u>	- 196 -
<u>SAMU GERGELY FERENC</u>	- 166 -
<u>SCHILLI GABRIELLA KRISZTINA</u>	- 92 -
<u>SCHÖFFER MÓNIKA</u>	- 197 -
<u>SIMON JÓZSEF</u>	- 45 -
<u>SOLTI KATALIN</u>	- 167 -
<u>SUSÁNSZKI ANIKÓ -</u>	215 -
<u>SZABADOS MÁRTON</u>	- 62 -
<u>SZABÓ JOHANNA</u>	- 256 -
<u>SZABÓ SÁNDOR</u>	- 123 -
<u>SZÉKELY ANNA</u>	- 257 -
<u>SZEKERES LEVENTE ISTVÁN</u>	- 184 -
<u>SZEREMI ZSOLT RÓBERT</u>	- 198 -
<u>SZILÁGYI BARNABÁS ÁRON</u>	- 168 -
<u>SZILVÁSI DÁVID SZILVIÓ -</u>	185 -
<u>SZLUKA NIKOLETTA</u>	- 63, 199 -
<u>SZTANKOVICS ANDREA</u>	- 258 -
<u>SZTERNÁCSIK KLAUDIA</u>	- 124 -
<u>SZUNYOG GYÖRGYI</u>	- 200 -
<u>TÁBOROSI ATILA</u>	- 107 -
<u>TAJTI ÁDÁM</u>	- 259 -
<u>TAKÁCS GERGELY</u>	- 93 -
<u>TAKÁCS JUDIT</u>	- 260 -

<u>TASI ÁGOST GYULA</u>	- 46 -
<u>TEREJÁNSZKY PÉTER</u>	- 47 -
<u>TIEGER ESZTER</u>	- 48 -
<u>TOBAK TEODÓRA</u>	- 125 -
<u>TÓBIÁS ESZTER</u>	- 216 -
<u>TÓBIÁS ROLAND JÓZSEF</u>	- 108 -
<u>TÓTH BALÁZS</u>	- 201 -
<u>TÓTH BALÁZS LÁSZLÓ</u>	- 261 -
<u>TÓTH ESZTER</u>	- 172 -
<u>TÓTH VIKTOR</u>	- 64 -
<u>TÓTH ZSUZSANNA</u>	- 109, 110 -
<u>TÖRÖK JUDIT</u>	- 156 -
<u>TÖRÖK ZSOLT</u>	- 262 -
<u>UNGOR DITTA ANITA</u>	- 169 -
<u>URBÁN BÉLA</u>	- 263 -
<u>ÜVEGES ZSUZSANNA</u>	- 49 -
<u>VARGA DÁNIEL</u>	- 153 -
<u>VARGA GÁBOR</u>	- 264 -
<u>VARGA TAMÁS</u>	- 217 -
<u>VINCZE OTÍLIA</u>	- 126 -
<u>VÖRÖS TAMÁS</u>	- 65 -
<u>ZSÓKA PÉTER</u>	- 127 -
<u>ZSÓTÉR SOMA</u>	- 94 -

Témavezetők és konzulensek névsora

Adamov, Jasna, egyetemi tanár, Újvidéki Egyetem	- 191 -
Alapi Tünde, egyetemi tanársegéd, SZTE	- 140 -
Antus Sándor, egyetemi tanár, DE	- 236 -
Arany Eszter, PhD hallgató, SZTE	- 140 -
Árus Dávid, PhD hallgató, SZTE	- 76 -
Bakonyi Péter, Ph.D. hallgató, PE	- 116 -
Bakos József, egyetemi tanár, PE	- 223 -
Baladincz Péter, PhD hallgató, PE	- 154 -
Balogh György Tibor, c. egyetemi docens, Richter Gedeon Nyrt,	- 88 -
Baranyai Péter, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 141 -
Barkács Katalin, egyetemi adjunktus, ELTE	- 187 -
Barta Zsolt, egyetemi tanársegéd, BME	- 115 -
Bélafiné Bakó Katalin, egyetemi tanár, PE	- 72 -
Bitter István, nyugalmazott egyetemi tanár, BME	- 222 -
Boda Dezső, egyetemi docens, PE	- 139 -
Bodor Andrea, egyetemi adjunktus, ELTE	- 77, 90 -
Borbás Anikó, egyetemi docens, DE	- 231 -
Boros Zoltán, PhD hallgató, BME	- 117 -
Braun Mihály, egyetemi adjunktus, DE	- 38 -
B. Tóth Szabolcs, adjunktus, EKf	- 114, 118, 122, 123 -
Buglyó Péter, egyetemi docens, DE	- 171, 177, 181, 182, 183 -
Bugris Valéria, PhD hallgató, SZTE	- 62 -
Csámpai Antal, egyetemi docens, ELTE	- 224 -
Császár Attila, egyetemi tanár, ELTE	- 97 -
Csay Tamás, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 196 -
Csendes Zita, PhD hallgató, SZTE	- 264 -
Cséfalvay Edit, egyetemi adjunktus, BME	- 188 -
Csonka Gábor István, egyetemi tanár, BME VBK	- 103 -
Czégéni Csilla Enikő, tudományos segédmunkatárs, MTA-DE	- 216 -
Dallos András, egyetemi docens, PE	- 51,- 121, 137 -
Daru János, PhD hallgató, ELTE TTK	- 98 -
Deák András, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 163 -
Dibó Gábor, egyetemi docens, ELTE TTK	- 155 -
Dóbe Sándor, tudományos tanácsadó, MTA TTK	- 213 -

TÉMAVEZETŐK NÉVSORA

Dömötör Orsolya, PhD hallgató, SZTE	- 69 -
Eke Zsuzsanna, egyetemi adjunktus, ELTE	- 49 -
Elek János, ügyvezető, Science Port Kft.	- 44 -
Endrődi Balázs, PhD hallgató, SZTE	- 138, 166 -
Enyedy Éva Anna, egyetemi adjunktus, SZTE	- 69, 74 -
Erdőhelyi András, egyetemi tanár, SZTE	- 215 -
Farkas Gergely, PhD hallgató, PE	- 223 -
Farkas Mária, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 213 -
Fejes Dóra, PhD hallgató, SZTE	- 55 -
Felinger Attila, egyetemi tanár, PTE	- 45 -
Forgó Péter, főiskolai tanár, EKF	- 126 -
Földes Enikő, tudományos tanácsadó, MTA TTK	- 56 -
Frank Éva egyetemi adjunktus, SZTE	- 220 -
Furtenbacher Tibor, tudományos munkatárs, ELTE	- 97 -
Fürjes Péter, tudományos főmunkatárs, MTA TTK	- 165 -
Gajda Tamás, egyetemi tanár, SZTE	- 76 -
Galbács Gábor, egyetemi docens, SZTE	- 43 -
Gáspár Attila, egyetemi docens, DE	- 80 -
Gergely Szilveszter, egyetemi adjunktus, BME	-42, 48 -
Gráczer Éva Laura, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 68 -
Grün Alajos, egyetemi adjunktus, BME	- 152 -
Gulácsi Katalin, egyetemi adjunktus, DE	- 225 -
Győri Zoltán, PhD hallgató, SZTE	- 53, 57 -
Gyurcsányi Ervin Róbert, egyetemi docens, BME	- 47 -
Gyurcsik Béla, egyetemi adjunktus, SZTE	- 40, 70, 75, 86, 92, 172, 184 -
Hajós Péter, egyetemi docens, PE	- 190 -
Harmat Veronika, egyetemi adjunktus, ELTE	- 84, 89 -
Halász János, c. egyetemi tanár, SZTE	- 156 -
Hancsók Jenő egyetemi tanár, PE	- 145, 147, 154 -
Haspel Henrik, tudományos segédmunkatárs, SZTE	- 134 -
Hazai László, egyetemi magántanár, BME	- 219, 230 -
Herberth Balázs, tudományos főmunkatárs, EGIS Gyógyszergyár Nyrt.	- 78 -
Herczegh Pál, egyetemi tanár, DE	- 262 -
Hernádi Klára, egyetemi tanár, SZTE	- 55, 61, 143, 159 -

Hollóczki Oldamur, posztdoktor, Bonni Egyetem	- 238 -
Homonnay Zoltán, egyetemi tanár, ELTE	- 196 -
Horváth András, tudományos segédmunkatárs, MTA TTK	- 71 -
Horváth Attila, egyetemi docens, PTE	- 214 -
Horváth Dávid, PhD hallgató, PE	- 149 -
Horváth Dezső, egyetemi docens, SZTE	- 130 -
Horváth Krisztián, egyetemi adjunktus, PE	- 190 -
Horváth Ottó, egyetemi tanár, PE	- 174, 211 -
Horváth Viola, tudományos főmunkatárs, BME	- 113 -
Hórvölgyi Zoltán, egyetemi docens, BME	- 160 -
Huszthy Péter, egyetemi tanár, BME	- 247, 248 -
Ilisz István, egyetemi adjunktus, SZTE	- 229 -
Iván Béla, egyetemi magántanár, ELTE	- 162 -
Janáky Csaba, egyetemi tanársegéd, SZTE	- 138 -
Jancsó Attila, egyetemi adjunktus, SZTE	- 70, 184 -
Jákli Imre, tudományos főmunkatárs, ELTE	- 85 -
Járvás Gábor, tudományos segédmunkatárs, PE	- 137 -
Jedlovszky Pál, egyetemi magántanár, ELTE	- 194 -
Joó Ferenc, egyetemi tanár, DE	- 210 -
Juhász László, egyetemi adjunktus, DE	- 258 -
Juhászné Tóth Éva, egyetemi tanársegéd, DE	- 244 -
Jurecska Laura, PhD-hallgató, ELTE	- 187 -
Kaizer József, egyetemi tanár, PE	- 185, 207, 245 -
Kalaus György, professzor emeritus, BME VBK	- 235 -
Karancsiné Menyhárd Dóra, tudományos főmunkatárs, ELTE	- 84, 89 -
Kasza Tamás, technológus, MOL Nyrt.	- 145 -
Kaufmanné Bojti Erzsébet, fejlesztő analitikus, EGIS Gyógyszergyár Nyrt.	- 78 -
Kazinczyné Vas Mária, tudományos tanácsadó, MTA TTK	- 68 -
Kállay Csilla, tudományos főmunkatárs, DE	- 91 -
Kégl Tamás, tudományos főmunkatárs, PTE	- 105 -
Keglevich György, egyetemi tanár, BME	-152, 226, 253, 259, 260 -
Kiss Attila, főiskolai tanár, EKF	- 120, 189 -
Kiss Éva, egyetemi tanár, ELTE	- 161 -
Kiss Violetta, fejlesztőmérnök, Zentiva	- 42, 48 -
Kollár László, egyetemi tanár, PTE	- 209 -

TÉMAVEZETŐK NÉVSORA

Kónya Zoltán, egyetemi tanár, SZTE	- 57 -
Korózs Marietta, tudományos segédmunkatárs, EKF	126 -
Kovács Barna, egyetemi docens, PTE	- 39 -
Kovács József, egyetemi adjunktus, PE	- 197 -
Kózelné Székely Edit, egyetemi docens, BME	153, 157 -
Kozma Gábor, tudományos segédmunkatárs, SZTE	- 60 -
Kristóf Tamás, egyetemi docens, PE	- 133 -
Kubinyi Miklós, egyetemi tanár, BME	- 141 -
Kukovecz Ákos, egyetemi docens, SZTE	- 53, 57, 60, 62, 134 -
Kurdi Róbert, egyetemi adjunktus, PE	- 107 -
Kurtán Tibor, egyetemi docens, DE	- 227 -
Kuzmann Ernő, egyetemi magántanár, ELTE	- 179 -
Láng Győző, egyetemi tanár, ELTE	- 129 -
Lente Gábor, egyetemi docens, DE	- 131, 135, 204, 205, 208 -
Lovász Tamás, tanársegéd, BBTE	- 243 -
Madarász Ádám, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 99 -
Marosi György, egyetemi tanár, BME	- 35, 36, 125, 127, 146 -
Mernyák Erzsébet, tudományos munkatárs, SZTE	- 221, 256 -
Mika László Tamás, egyetemi docens, BME	- 151, 155 -
Milen Mátyás, kutató, Egis Gyógyszergyár Nyrt.	- 152 -
Molnár-Tóth Judit, kutató, Servier Gyógyszerkutató Intézet	- 241 -
Nagy Géza, egyetemi tanár, PTE	- 37 -
Nagy József, egyetemi docens, BME	- 240 -
Nagy Livia, tudományos főmunkatárs, PTE	- 37 -
Nagy Zsombor, egyetemi tanársegéd, BME	- 146 -
Nemestóthy Nándor, tudományos munkatárs, PE	- 72, 116, 192 -
Németh Zoltán, PhD hallgató, SZTE	- 143, 159, -
Novák Zoltán, egyetemi adjunktus, ELTE	246, 255, 257 -
Ősz Katalin, egyetemi adjunktus, DE	- 41 -
Pallagi Attila, tudományos munkatárs, SZTE	- 46 -
Pap József Sándor, egyetemi adjunktus, PE	185, 208 -
Papp Gábor, tudományos munkatárs, DE	- 206 -
Patonay Katalin, tudományos segédmunkatárs, EKF	- 120 -
Pálinkó István, egyetemi docens, SZTE	- 59, 62, 64, 176 -

Pápai Imre, tudományos tanácsadó, MTA TTK	- 101 -
Peintler Gábor, egyetemi docens, SZTE	- 178 -
Peintler-Kriván Emese, egyetemi tanársegéd, SZTE	169 -
Peles-Lemli Beáta, egyetemi adjunktus, PTE	- 132 -
Perczel András, egyetemi tanár, ELTE	- 85, 104 -
Péter Antal, egyetemi tanár, SZTE	- 229 -
Pintér István, kutatóprofesszor, ELTE	- 228 -
Plánkáné Szabó Terézia, egyetemi docens, SZTE	- 172 -
Pohl Gábor, tudományos segédmunkatárs, ELTE	- 104 -
Poppe László, egyetemi tanár, BME	- 117, 119, 254 -
Porcs-Makkay Márta, laborvezető, EGIS Gyógyszergyár Nyrt	- 239 -
Purgel Mihály, tudományos segédmunkatárs, DE	- 100 -
Renner Károly, tudományos munkatárs, MTA TTK	- 54 -
Réti Balázs, PhD hallgató, SZTE	- 61 -
Rohonczy János, egyetemi docens, ELTE	- 136 -
Róna Gergely, PhD hallgató, MTA TTK	- 94 -
Sakač, Marija, egyetemi tanár, Újvidéki Egyetem	- 232 -
Salma Imre, egyetemi tanár, ELTE	- 195 -
Schneider Gyula, professzor emeritus, SZTE	- 251 -
Sija Éva Ilona, PhD hallgató, SZTE	- 74 -
Simándi Béla, egyetemi tanár, BME	- 124 -
Sipiczki Mónika, Ph.D hallgató, SZTE	- 64 -
Sipos Pál, egyetemi docens, SZTE	- 46, 59, 176, 178 -
Skodáné Földes Rita, egyetemi tanár, PE	- 212, 263 -
Speier Gábor, egyetemi tanár, PE	- 203, 245 -
Stirling András, tudományos tanácsadó, MTA	- 98 -
Sveiczler Ákos, egyetemi docens, BME	- 87 -
Szabados Ágnes, egyetemi adjunktus, ELTE	- 109, 110 -
Szabó Ákos, tudományos segédmunkatárs, MTA TTK	- 162 -
Szabóné Bárdos Erzsébet, egyetemi adjunktus, PE	- 150 -
Szakácsné Földényi Rita, egyetemi docens, PE	- 193 -
Szalay Péter, egyetemi tanár, ELTE	- 106 -
Szántay Csaba, akadémikus, BME	- 219 -
Szilágyi András Ferenc, egyetemi adjunktus, BME	- 164, 167, 168 -
Szilágyi Imre Miklós, tudományos munkatárs, BME	- 52 -

TÉMAVEZETŐK NÉVSORA

Szilágyiné Puskás Erzsébet, laborvezető, DE	- 200 -
Szórád Endre, gimnáziumi tanár, Bolyai Tehetséggondozó Gimnázium, Zenta	- 191 -
Szöllősi György, tudományos főmunkatárs, SZTE	- 242 -
Takács Erzsébet, tudományos tanácsadó, MTA TTK	- 196 -
Tarczay György, egyetemi docens, ELTE	- 65, 106, 142 -
Tasi Gyula, egyetemi docens, SZTE	- 102, 108 -
Tircsó Gyula, egyetemi adjunktus, DE	- 175 -
Tollár Ágnes Nikolett, PhD hallgató, PE	- 121 -
Tóth Ágota, egyetemi docens, SZTE	- 130 -
Tóth Csaba, egyetemi tanársegéd, PE	- 147 -
Tóth Mariann, tudományos segédmunkatárs, SZTE	215 -
Tóth Tünde, egyetemi adjunktus, BME	- 247 -
Tukacs József Márk, PhD-hallgató, ELTE	- 151 -
Turányi Tamás, egyetemi tanár, ELTE	- 217 -
Ujvári Mária, egyetemi tanársegéd, ELTE	- 129 -
Valicsek Zsolt, egyetemi adjunktus, PE	- 211 -
Varga Csilla, egyetemi adjunktus, PE	- 58, 63, 198, 199, 201 -
Varga Zoltán, egyetemi docens, PE	- 148 -
Várnagy Katalin, egyetemi docens, DE	- 83, 93, 173, 180 -
Vértessy G. Beáta, egyetemi tanár, BME	- 71, 73, 94 -
Virág Diána, tudományos asszisztens, EKF	- 189 -
Visy Csaba, egyetemi tanár, SZTE	- 138, 166, 169 -
Voronova Krisztina, PhD hallgató, DE	- 210 -
Wojnárovits László, tudományos tanácsadó, MTA TTK	- 140 -
Wölfing János, egyetemi tanár, SZTE	- 221, 251 -
Zsély István Gyula, egyetemi adjunktus, ELTE	- 217 -

A konferencia résztvevőinek szállása:

Hallgatóknak:	EKF Leányka úti campus kollégiumai	[A]
Zsűritagoknak és SZB tagoknak:	Hotel Flóra	[B]

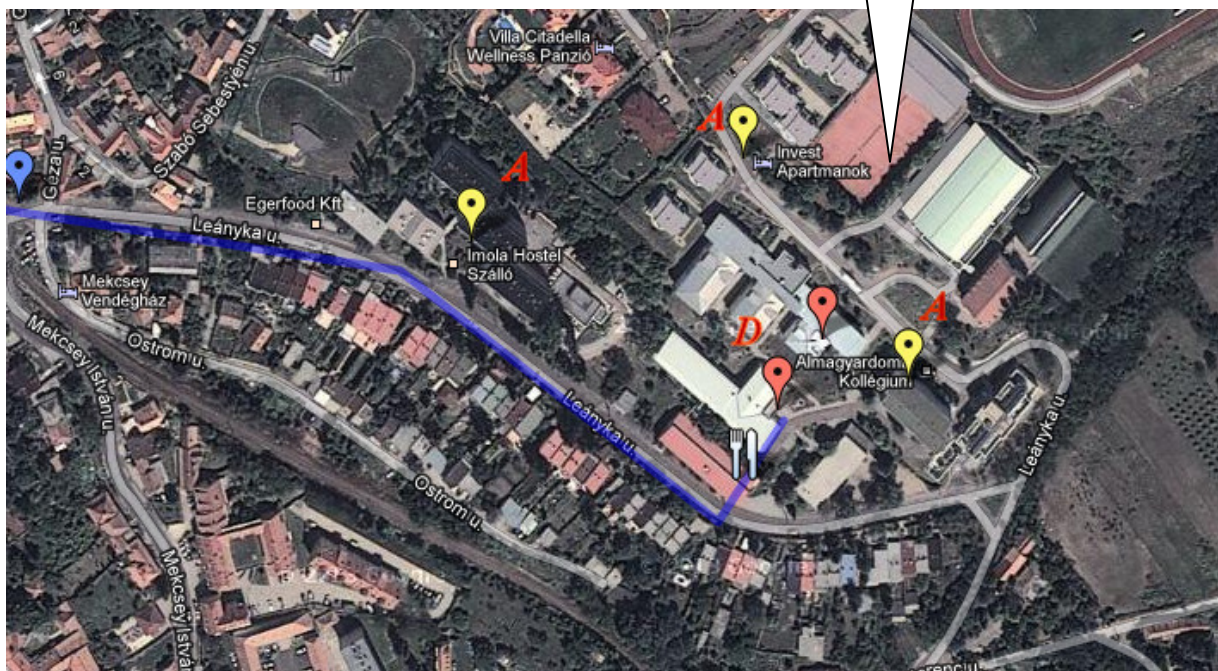
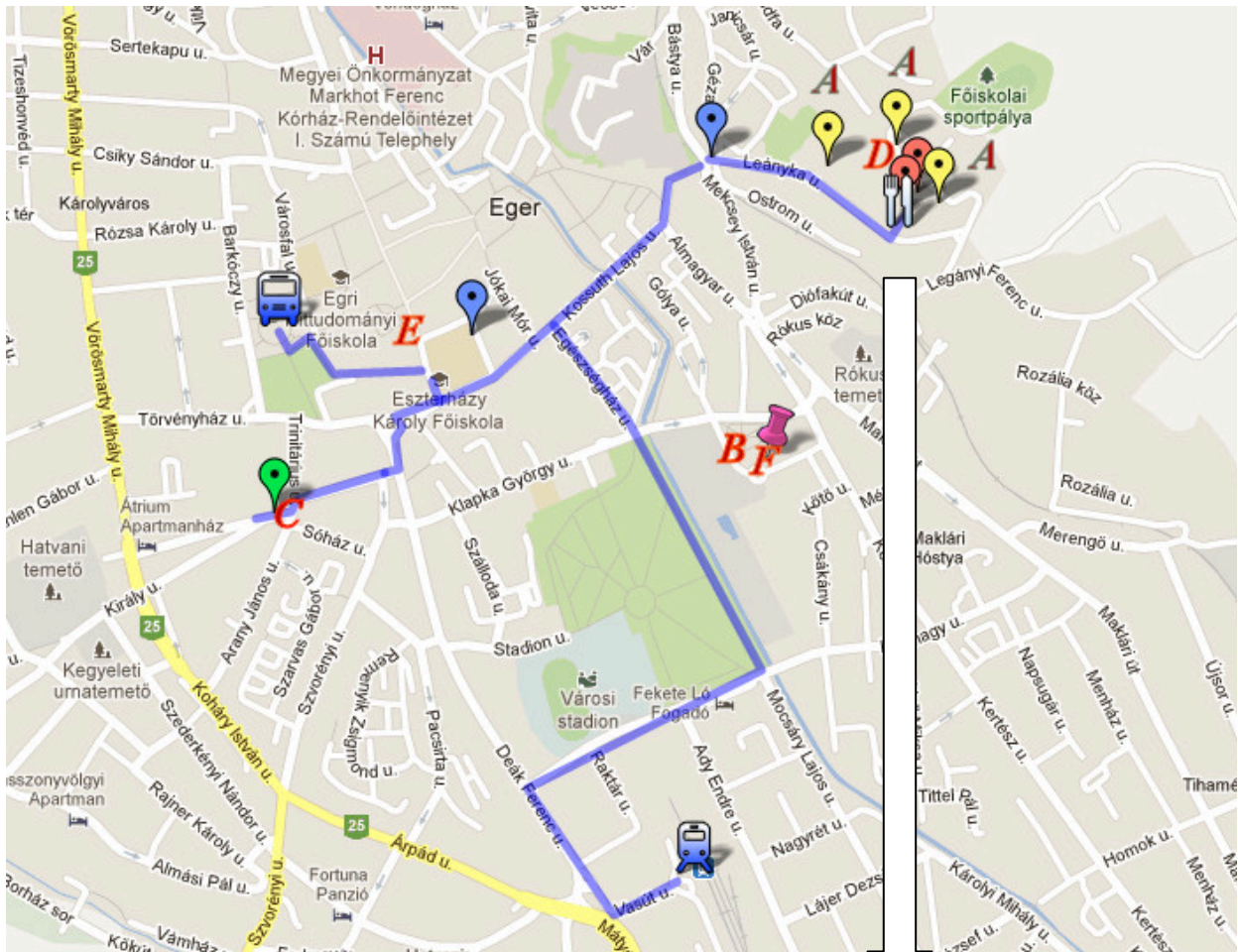
A konferencia helyszínei:

EKF Gyakorló Iskola:	Bartók tér 4	[C]
EKF TTK	Leányka utca 6	[D]
EKF Líceum	Esztrházy tér 1	[E]
Hotel Flóra	Fürdő utca 5	[F]

Az intézmények rövidítései:

BBTE	Babes-Bolyai Tudományegyetem
BCE	Budapesti Corvinus Egyetem
BME	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
DE	Debreceni Egyetem
EKF	Eszterházy Károly Főiskola
ELTE	Eötvös Loránd Tudományegyetem
KDOSZ	Kutató Diákok Országos Szövetsége
MTA TTK	Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont
PE	Pannon Egyetem
PTE	Pécsi Tudományegyetem
SZTE	Szegedi Tudományegyetem
SE	Semmelweis Egyetem

Térképek



		április 4. csütörtök			
Elméleti kémia és kémiai informatika		Analitikai kémia	Biokémia I	Koordinációs kémia	Szerves kémia I
C106		C121	C124	C208	D117
13.30-13.45	Árendás Péter	Farkas Attila	Bacsó András	Bihari Zsolt	Ábrahám Janka
13.45-14.00	Benda Zsuzsanna	Farkas István	Bali Krisztina	Borsos Katalin, Tóth Eszter	Baji Ádám
14.00-14.15	Berta Dénes, Kovács Ádám	Filotás Dániel	Balogh Ria Katalin	Csire Gizella	Bodnár Brigitta
14.15-14.30	Fehér Péter	Harangi Sándor	Batki Júlia	Fodor Melinda Anna	Bojtár Márton
14.30-14.45	Földes Tamás	Kindner Ildikó	Bednár András	Garda Zoltán	Császár Zsófia
14.45-15.00	Gyevi-Nagy László	Kozmér Zsuzsanna	Bendes Ábris Ádám	Hancsákné Dudás Csilla	Csókás Dániel
15.00-15.15	Mezei Pál Dániel	Lehóczki Tímea	Bruszel Bella	Hüse Dániel	Faragó Zsolt
15.15-15.30	Papp Dóra	Lőrincz Áron	Csipak Brigitta	Kutus Bence	Fazekas Eszter
15.30-16.00	Szünet	Szünet	Szünet	Szünet	Szünet
16.00-16.15	Papp Tamara	Metzinger Anikó	Dancs Ágnes	Lengyel Attila	Feczku Gyula
16.15-16.30	Pós Eszter Sarolta	Rácz Anita	Dudás Erika	Lihí Norbert	Göz Viktória
16.30-16.45	Táborosi Attila	Simon József	Hámornik Gábor Bence	Nagy Gábor	Grecsó Nóra
16.45-17.00	Tóbiás Roland József	Tasi Ágost Gyula	Kecskeméti Ádám	Parajdi-Losonczy Péter László	Gyenesé Judit
17.00-17.15	Tóth Zsuzsanna "Alsó kortár..."	Terejvánszky Péter		Patalenszki János	Hadházi Ádám
17.15-17.30	Tóth Zsuzsanna "Gerjesztési..."	Tieger Eszter		Szekeeres Levente István	Ivana Kuzminac
17.30-17.45		Üveges Zsuzsanna		Szilvási Dániel Szilvió	

április 5. péntek					
Kémiai technológia	Környezetkémia és környezettechnológia	Biokémia II	Reakciókinetika és katalízis	Szerves kémia II	
C106	C121	C124	C208	D117	
8.30-8.45	Babos Katalin	Dobosy Péter	Kiss Mariann	Bagi Nárcisz Mária	Ilkei Viktor
8.45-9.00	Balogh Attila	Király András	Kiss-Szemán Anna	Bajusz David	Kálmán Noémi
9.00-9.15	Cseh Borbála, Sági Dániel	Konkoly Benjámin	Kovács Bertalan	Balogh Ágnes, Csimbók Ervin	Kelemen Zsolt
9.15-9.30	Danics Nóra	Lukács Diána	Krekuska Hajnalika	Baranyi Attila	Kókai Eszter
9.30-9.45	Dezső György, Nagy Dániel	Mátéfy Kornél	Lovász Krisztina	Bogáth Dániel	Komjáti Balázs
9.45-10.00	Fónagy Orsolya	Megyeri Gábor	Müller Judit	Bogdándi Virág	Kovács Dániel
10.00-10.15	Földesi Marcella	Merényi Anna	Orgován Zoltán	Gergely Máté	Kovács Lenke
10.15-10.30	Földesi Tamás	Mészár Eleika Zsuzsanna	Pály Gyula	Homolya Levente	Laczkó Kinga
15.00-11.00	Szünet	Szünet	Szünet	Szünet	Szünet
11.00-11.15	Varga Dániel	Németh Zoltán	Raics Mária	Kiss Melitta Patrícia	Lukács Norbert
11.15-11.30	Ludányi András	Sági Gyuri	Schilli Gabriella Krisztina	Papp Máté	Matusz Andrea
11.30-11.45	Réttalvi Nóra	Schöffer Mónika	Takács Gergely	Petri Balázs	Mészáros Ádám
11.45-12.00	Török Judit	Szeremi Zsolt Róbert	Zsótér Soma	Rauscher Evelin	Németh Tamás
12.00-12.15	Lórincz László	Szluca Nikolett		Susánszki Anikó	Pál Dávid
12.15-12.30		Szunyog Györgyi		Tóbiás Eszter	
12.30-12.45		Tóth Balázs		Varga Tamás	

április 5. péntek					
	Anyagtudomány és szervetlen kémia	Kolloid- felület- és makromolekuláris kémia	Élelmiszerkémia és biotechnológia	Fizikai kémia	Szerves kémia III
	C106	C121	C124	C208	D117
13.30-13.45	Capári Dániel	Berki Péter	Ecsedi Anita Beatrix	Bazsó Fanni Laura	Mótyán Gergő
13.45-14.00	Fórizs Balázs	Dabóczi Mátyás	Gál István	Bohner Biborka	Nagy Dávidné
14.00-14.15	Havasi Viktor	Dobrádi Anita	Gubicza Krisztina	Ditrői Tamás	Oláh Márk
14.15-14.30	Kalmár Szabolcs	Érsek Gábor	Lankó Jácinta	Kánnár Dániel	Pethő Bálint
14.30-14.45	Kecenovic Egon	Fülöp Gergő	Márkus Mária	Kaviczki Ákos	Szabó Johanna
14.45-15.00	Kirschweg Balázs	Hegyesi Nóra	Molnár Zsófia	Király Anna	Székely Anna
15.00-15.15	Kugyela Nándor	Holczer Eszter	Nagy Flóra	Kírcstalusi Nikoletta, Lövei Alida	Sztankovics Andrea
15.15-15.30	Molnár Tímea	Samu Gergely Ferenc	Németh Anasztázia	Koczor Bálint	Tajti Ádám
15.30-16.00	Szünet	Szünet	Szünet	Szünet	Szünet
16.00-16.15	Muráth Szabolcs	Solti Katalin	Németh Gabriella	Kontos János	Takács Judit
16.15-16.30	Papp Ibolya Zita	Szilágyi Barnabás Áron	Pokorny Gábor	Kormányos Attila	Tóth Balázs László
16.30-16.45	Péter Nóra	Ungor Ditta Anita	Szabó Sándor	Kovács Róbert	Török Zsolt
16.45-17.00	Szabados Márton		Sztrénacsik Klaudia	Kozmér Zsuzsanna	Urbán Béla
17.00-17.15	Szluka Nikoletta		Tobak Teodóra	Kunsági-Máté Éva	Varga Gábor
17.15-17.30	Tóth Viktor		Vincze Ottília	Najbauer Eszter Éva	
17.30-17.45	Vörös Tamás		Zsóka Péter	Pállai Zoltán	

A kiadvány az Emberi Erőforrások Minisztériuma megbízásából az Oktatókutató és Fejlesztő Intézet és az Emberi Erőforrás Támogatáskezelő által meghirdetett NTP-XXXI. OTDK-M-12 kódszámú pályázati támogatásból valósult meg.



Kiadó:

*Eszterházy Károly Főiskola
Kémia, Borászati Kémia és Borászat Tanszék
A kiadásért felelős
az Eszterházy Károly Főiskola rektora*

*Készült az Eszterházy Károly Főiskola
Informatikai Szolgáltató Centrum és Digitális Nyomdájában
Felelős vezető: Kérészy László*

Szerkesztette:

B. Tóth Szabolcs

2013