

DEBRECENI EGYETEM



37.
ORSZÁGOS
TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI
KONFERENCIA

KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ
PROGRAMFÜZET



Kémiai és Vegyipari
Szekció



37. ORSZÁGOS
TUDOMÁNYOS
DIÁKKÖRI
KONFERENCIA
2025

OTDK'70

DEBRECEN, 2025. 04. 09 – 11.



TARTALOMJEGYZÉK

Dékáni köszöntő	3
Elnöki köszöntő	4
Szervezőbizottság	5
Segítők	6
Program	7
Biotechnológia és élelmiszerkémia	8
Elméleti kémia I.	9
Fizikai kémia I.	10
Környezeti kémia	11
Polimerkémia és -technológia	12
Anyagtudomány	13
Elméleti kémia II.	14
Fizikai kémia II.	15
Szerves kémia I.	16
Szerves kémia II.	17
Szervetlen és koordinációs kémia	18
Középiskolai tagozat	19
Analitikai kémia	20
Biokémia	21
Kémiai technológia	22
Kolloid- és makromolekuláris kémia	23
Szerves kémia III.	24
Szerves kémia IV.	25
A kémiai szaknyelv története lapról lapra: Az oktatástól az alkalmazott tudományig	26
MIT JELENT A KUTATÓI TEHETSÉG A VALÓ VILÁGBAN?	28
Roska Tamás bemutatása	29
Roska Tamás Tudományos előadás	30
ÖSSZEFOGLALÓK	31
Analitikai kémia	32
Anyagtudomány	46
Biokémia	56
Biotechnológia és élelmiszerkémia	71
Elméleti kémia I.	83

Elméleti kémia II.	93
Fizikai kémia I.	103
Fizikai kémia II.	116
Kémiai technológia	128
Kolloid- és makromolekuláris kémia	141
Környezeti kémia	155
Polimerkémia és -technológia	169
Szerves kémia I.	178
Szerves kémia II.	189
Szerves kémia III.	201
Szerves kémia IV.	212
Szervetlen és koordinációs kémia	223
AZ OTDK FŐVÉDNÖKEI.....	234
AZ OTDK VÉDNÖKE.....	234
AZ OTDK FŐTÁMOGATÓJA.....	234
AZ OTDK TÁMOGATÓI.....	234
A KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ FŐTÁMOGATÓI	235
A KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ TÁMOGATÓI.....	236
EGYÉB TÁMOGATÓK	237
FŐTÁMOGATÓK BEMUTATKOZÁSA	238
MOL Petrolkémia Zrt.	238
BorsodChem Zrt.	239
CATL Debrecen.....	240
Bogdány Petrol Kft.....	241
BMW Group Gyár Debrecen	242
EcoPro BM Hungary Zrt.	243
Richter Gedeon Nyrt.	244
Samsung SDI Magyarország Zrt.	245
TÁMOGATÓK BEMUTATKOZÁSA.....	246
Science Port Kft.	246
Semcorp Hungary Kft.	247
Magyar Vegyipari Szövetség (MAVESZ)	248
SPL Europe Kft.	249
Servier Hungária Kft.	250
Teva Gyógyszergyár Zrt.	251

Dékáni köszöntő

Tisztelettel köszöntöm a 37. Országos Tudományos Diákköri Konferencia Kémiai és Vegyipari Szekciójának valamennyi résztvevőjét a Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kara nevében. Karunk nemrégiben ünnepelte alapításának 75. évfordulóját, s most nagy örömmel látjuk vendégül azt a tudományos mozgalmat, amely szintén csak néhány évvel fiatalabb, és amely hosszú évtizedek óta inspirálja a tehetséges hallgatókat kutatási eredményeik bemutatására.



*Prof. Dr. Kun Ferenc
dékán, DE TTK*

A tudományos életbe való bekapcsolódás különleges lehetőséget nyújt a hallgatóknak: nemcsak előadásokon és laboratóriumi gyakorlatokon bővíthetik ismereteiket, hanem aktív kutatási munkájuk során is, amely egyéni felelősséget, kreativitást és kitartást követel. A Tudományos Diákköri munka során a hallgatók nemcsak szakmai tudásukat mélyítik el, hanem megtapasztalhatják a tudományos gondolkodás örömeit és az alkotás izgalmát.

A kutatási témák iránti elhivatottság gyakran szoros, inspiráló tanár-diák kapcsolatokat eredményez. A mentori segítség, az együtt gondolkodás és a közös tudományos munka által mindkét fél gyarapodik: a hallgató bátorságot nyer az önálló kutatáshoz, a témavezető pedig gyakran új nézőpontokat, friss gondolatokat kap diákjaitól. Az ilyen kölcsönös inspiráció tette a Tudományos Diákköri Konferenciákat azzá a rangos eseménnyé, amely ma is meghatározó szerepet játszik a tehetséggyondozásban.

Az OTDK nem csupán a tudományos teljesítmény megmérettetésének helyszíne, hanem inspiráló közösségi élményt is nyújthat. Az előadások és viták alkalmat teremtenek új szakmai kapcsolatok kialakítására, új együttműködések elindítására. Meggyőződésem, hogy a most bemutatott kutatási eredmények sok esetben hosszútávú hatással is lehetnek a tudomány fejlődésére.

Bízom benne, hogy az előttünk álló napok nemcsak szakmailag, hanem emberileg is gazdagítják a résztvevőket. Kiváló előadásokat, tartalmas vitákat, új inspirációkat, valamint kellemes időtöltést kívánok minden jelenlévőnek a Debreceni Egyetemen!

Elnöki köszöntő

Szeretettel köszöntjük a 37. Országos Tudományos Diákköri Konferencia Kémia és Vegyipari szekciójának résztvevőit a konferencia Ügyvivő Testülete és a Debreceni Egyetem Kémiai Intézete nevében. Az Országos Tudományos Diákköri Konferencia kerek évfordulóhoz érkezett, éppen 70 évvel ezelőtt tartották meg az első ilyen rendezvényt. A célja az volt, hogy a felsőoktatásban tanuló hallgatók figyelmét felkeltse a tudományos kutatás iránt, és ebbe bekapcsolódva lehetőségük legyen a saját kutatási eredményeiket bemutatni az intézményükben, illetve az országos fórumon is. Mind a mai napig ez a cél, de ma már nemcsak a felsőoktatásban, hanem a közoktatásban részt vevő diákok számára is lehetőség nyílik az Országos Tudományos Diákköri Konferencia rendezvényeibe bekapcsolódni.



**Prof. Dr. Várnagy
Katalin**
egyetemi tanár,
intézetigazgató,
DE TTK



**Prof. Dr. Kéki
Sándor**
egyetemi tanár,
dékánhelyettes,
DE TTK

Intézetünkben is igen kiterjedt, magas színvonalú kutatómunka folyik. Ezt jelzi az is, hogy a Debreceni Egyetem Kémiai Intézete elnyerte az MTA Kiváló Kutatóhely címet. Az intézményünkben folyó kutatásokban szép számmal vesznek részt vegyész, vegyészmérnök és kémia tanár szakos hallgatóink, de szívesen kapcsolódnak be a kutatásba biomérnök, környezettudomány és gyógyszerész szakon tanuló diákok is. Az országos konferencián résztvevők esetén még változatosabb ez a kép, hiszen a kémia, bio- és vegyészmérnöki, valamint más természettudomány mellett az orvos- és egészségügyi-, gyógyszerész-, agrár-, élelmiszertudomány területén kutatást folytató diákok is bemutatkoznak eredményeikkel a rendezvényünkön. A sokszínűséget jól jelzi, hogy 17 tagozatban több, mint 10 tudományterülethez tartozó témakörben szervezzük az előadásokat.

A határon belülről és határon túlról érkező diákok nagy száma azt mutatja, hogy továbbra is sokak számára fontos a szekcióhoz kapcsolódó kutatási területek művelése. Bízunk benne, hogy az Országos Tudományos Diákköri Konferencián tartott előadás, az azt követő vita, a sokféle területen elhangzó más előadások meghallgatása és a résztvevőkkel való beszélgetések, az esti előadás és a szabadidős programokon való részvétel mindenki számára maradandó és kellemes élményeket jelent majd, és azt erősítik meg mindenkiben, hogy érdemes folytatni a kutatást, fenntartani az érdeklődést a legújabb tudományos eredmények iránt.

Reméljük, hogy a konferencián szerzett élményeknek köszönhetően is sok fiatallal néhány éven belül más tudományos fórumon, konferencián is találkozni fogunk!

Természetesen ez a konferencia csak úgy valósulhat meg, hogy a diákok munkáját témavezető(k) segítik, irányítják; az elkészült dolgozatokat bírálók értékelik; a szekció előadásait a zsűritagok kísérik figyelemmel és értékelik az előadók diákköri munkáját. Így mind a hallgatók, mind a konferencia szervezését és lebonyolítását segítő sok-sok oktató, kutató és más munkatárs munkáját itt is megköszönjük.

A Kémiai Intézet és az Ügyvivő Testület nevében a konferencia minden résztvevőjének nagyon eredményes munkát, kellemes időtöltést kívánunk!

Szervezőbizottság

Ügyvezető elnök: **Prof. Dr. Várnagy Katalin**

Ügyvezető társelnök: **Prof. Dr. Kéki Sándor**

Ügyvezető titkár: **Dr. Lihi Norbert**

Ügyvezető társtítkárnő: **Dr. Lakatos Csilla**

Hallgatói képviselő: **Benedek Máté Benjámín**

Középiskolai koordinátor: **Dr. Juhász László**

Pénzügyi koordinátor: **Dr. Kozma-Tóth Katalin**

Segítők

Angyal Dávid

Dr. Baranyai Edina

Barta Roland

Béresné Nagy Zsuzsanna

Bonczidai-Kelemen Dóra

Dr. Borsi-Gombos Réka

Dr. Bunda Szilvia

Dr. Czégéni Csilla

Czuna Alexandra

Dékány-Adamoczkya Anita

Diószegi Róbert

Erdei Réka Pálma

Farkas László Bence

Dr. Forgács Attila

Dr. Herman Petra

Illyésné Dr. Czifrák Katalin

Dr. József János

Dr. Juhászné Dr. Tóth Éva

Dr. Kállay Csilla

Kapus István

Dr. Kathó Ágnes

Dr. Király Sándor Balázs

Kiss Eszter

Dr. Kordován Marcell

Kovács Nóra Ildikó

Kulcsár Andrea

Lakatos Gergő

Molnárné Horváth Ágnes

Nagy Balázs

Őzséné Fábrián Anette

Papp Vanda

Pardi-Tóth Veronika

Pércsi Dániel

Dr. Potorné Bozsó Orsolya

Ragyák Ágota

Rimóczi Aliz

Dr. Róth Gergő

Sajtos Gergő

Dr. Sajtos Zsófi

Sándor Balázs

Dr. Sebestyén Annamária

Dr. Simon Fruzsina

Dr. Szabó Mária

Szabó Ruben

Szilágyi Balázs

Vargáné Dr. Szalóki Dóra

Vári Judit

Program

	2025. április 9. szerda	2025. április 10. csütörtök	2025. április 11. péntek
6			
7		Reggeli 6:30–8:00 <i>Nagyerdei Étterem</i>	Reggeli 6:30–9:00 <i>Nagyerdei Étterem</i>
8		Tagozati előadások II. blokk 8:00–9:40 <i>Learning Center</i>	
9		Büfészünet 9:40–10:00 LC 1.12	
10	Regisztráció 10 órától <i>Learning Center</i>	Tagozati előadások II. blokk 10:00–12:00 <i>Learning Center</i>	Záróünnepség 9:00–13:00 <i>Főépület, 2. emeleti Aula</i>
11		Középiskolás poszterszekció 10:00–12:00 <i>Kémia Épület E320</i>	
12	Megnyitó 12:00–12:50 <i>Learning Center 0.14</i>	Ebéd 12:00–13:30 <i>Nagyerdei Étterem</i>	
13	Szünet 12:50–13:30		Szendvicsebéd 13:00–13:30 <i>Aula</i>
14	Tagozati előadások I. blokk 13:30–15:30 <i>Learning Center</i>	Tagozati előadások III. blokk 13:30–15:30 <i>Learning Center</i>	Középiskolás program 13:30–15:30 <i>Kémia Épület</i>
15	Büfészünet 15:30–15:50 LC 1.12	Büfészünet 15:30–15:50 LC 1.12	
16	Tagozati előadások I. blokk 15:50–18:10 <i>Learning Center</i>	Tagozati előadások III. blokk 15:50–18:30 <i>Learning Center</i>	
17			
18	Szünet 18:10–19:00	Szünet 18:30–19:00	
19		Dr. Szántay Csaba előadása 19:00–20:00 <i>ÉTK F015-016</i>	Főzsűri ülése 19:30-tól
20	Vacsora 19:00–22:30 <i>Nagyerdei Étterem</i>	Gálavacsora 20:00–22:30 <i>Nagyerdei Étterem</i>	
21			
22			


Tagozati előadások	Étkezés	Egyéb hivatalos program
Egyéb kulturális program	Zsűriprogram	Középiskolás program
	Szünet	

Biotechnológia és élelmiszerkémia

2025. 04. 09. (szerda), LC 0.06

Zsúri

Elnök:	Simonné Dr. Sarkadi Livia	<i>egyetemi tanár</i>	MATE
Tagok:	Kormosné Dr. Bugyi Zsuzsanna	<i>egyetemi docens</i>	SE
	Nyergesné Dr. Illés Erzsébet	<i>főiskolai docens</i>	SZTE


13:30	Kozma Bence Tamás	Rekombináns tesztfehérjék fejlesztése	Dr. Jankovics Hajnalka	PE
13:50	Laczkó Anna Orsolya	Mikotoxinok előfordulásának vizsgálata magyarországi kukoricamintákban	Dr. Czéh Árpád	PTE
14:10	Nagy Kristóf Bence	Elektrokémiai N- és P- visszanyerés abiotikus - és mikrobiális elektrolízis cellák felhasználásával	Dr. Koók László	PE
14:30	Orosz Csenge Sznopka Liliána Kata	Élelmi rost összetevők szerkezetalkító szerepének vizsgálata hajdina és köles alapú élelmiszermatrixokban	Dr. Németh Renáta	BME
14:50	Szeip Judit	Probiotikus kakaópor készítmény előállítása folyamatos üzemű granulálási technológiával	Dr. Szabó Edina Dr. Nagy Zsombor Kristóf Dr. Hirsch Edit	BME
15:10	Vonyó Viktória Zoltána	Streptomyces biofilm kialakítása kapilláris membrán bioreaktorban történő felhasználásra	Lajtai-Szabó Piroska	PE
15:30	Büfészünet			
15:50	Kiss Noémi	A nanoszűrő membrán hatékonysága a növényvédőszer vízből történő eltávolításban	Dr. Sörös Zita Jelena Šurlan	ÚE
16:10	Kratofil Zsóka	A búza alkalmazása a malátakészítésben	Dr. Sörös Zita Pribić Milana	ÚE
16:30	Szladek Laura	A mononátrium-glutamát hatása a növényekre	Dr. Vastag Gyöngyi	ÚE
16:50	Zrinyi Anna	Hisztidinjelölt enzimek szelektív rögzítési lehetőségeinek vizsgálata és optimalizálása	Dr. Bell Evelin Alács Bálint	BME
17:10	Gasparitcs Kata	Mélyhűtött sütőipari termékek minőségjavításának lehetőségei 	Dr. Tömösközi Sándor Dr. Jaksics Edina	BME

Elméleti kémia I.

2025. 04. 09. (szerda), LC 0.07

Zsúri

Elnök:	Dr. Hamza Andrea	<i>tudományos főmunkatárs</i>	HUN-REN
Tagok:	Dr. Vibók Ágnes	<i>egyetemi tanár</i>	DE
	Dr. Berta Dénes	<i>tudományos munkatárs</i>	BME

13:30	Fekete Csilla	Másodrendű kölcsönhatások vizsgálata organokatalizált foszfa-Michael-addícióban	Dr. Benkő Zoltán	BME
13:50	Gál Dorina Rebeka	$\text{Cl}^- + \text{NH}_2\text{I}$ reakció dinamikájának modellezése	Dr. Papp Dóra	SZTE
14:10	Gombás András	Pivot-invariant Knowles-partitioning at the multi-reference level 	Dr. Szabados Ágnes	ELTE
14:30	Horváth Ádám	Diels–Alder cikloaddíciók számításon kémiai vizsgálata: Hogyan lehet egy lépésből többlépés?	Dr. Surján Péter	BME
14:50	Horváth Tamás	Radioaktív stroncium dekorporáció vizsgálata alkáliföldfém ionok komplexképződésének számítógépes analízisén keresztül	Dr. Szóri Milán	ME
15:10	Molnár Balázs József	$\text{A SiH}_3\text{I} + \text{F}^-$ reakció dinamikájának elméleti modellezése	Dr. Rózsa Zsófia Borbála	SZTE
15:30	Büfészünet		Dr. Czakó Gábor Dékány Attila Ádám	
15:50	Rudner Csaba	$\text{A C}_2\text{H}_5\text{I} + \text{Cl}$ reakció feltérképezése különböző kvantumkémiai módszerek segítségével	Dr. Czakó Gábor	SZTE
16:10	Szabó András	Reakciók minimum energia útvonalának optimalizálása gépi tanulás felhasználásával	Gruber Balázs	ELTE
16:30	Tar-Pálfi Helga	Hazai mutáns transztiretin tetramerizációjának vizsgálata in silico módszerekkel a jobb terápiás stratégiáért	Dr. Daru János	ELTE
			Mészáros Bence Balázs	
			Dr. Perczel András	ELTE
			Bódy István Levente	
			Fazekas Zsolt	

Fizikai kémia I.

2025. 04. 09. (szerda), LC 1.05

Zsúri

Elnök:	Dr. Kunsági-Máté Sándor	<i>egyetemi tanár</i>	PTE
Tagok:	Dr. Kéri Mónika	<i>adjunktus</i>	DE
	Dr. Szilágyi András	<i>egyetemi docens</i>	BME

13:30	Biró Réka	Kisnyomású higanygőz és KrCl excimer lámpa hatékonyságának összehasonlítása UV/H ₂ O ₂ és UV/PDS eljárások során	Dr. Alapi Tünde	SZTE
13:50	Czuna Alexandra	A [$\text{RuCl}_2(\text{mtpm})_2$] ₂ -komplex által katalizált hangyasav bontás tanulmányozása	Dr. Papp Gábor Csaba	DE
14:10	Demcsák Norbert	Vízszám érték meghatározására alkalmas módszer továbbfejlesztése	Bejczy Rebeka Hartyányi Máté	PE
14:30	Gárdi Bálint	Kitozángyöngyök méretfüggő kollektív viselkedése	Dr. Tóth Ágota Dr. Horváth Dezső	SZTE
14:50	Hideg Ádám	Anódos vízbontás kinetikájának tanulmányozása forgó korongelektroddal	Kovács Noémi Dr. Vesztergom Soma	ELTE
15:10	Kapdos Ádám	A katódos hidrogénfejlődés vizsgálata kronopotenciometriával kombinált dinamikus elektrokémiai impedanciaspektroszkópiai mérésekkel	Dr. Vesztergom Soma	ELTE
15:30	Büfészünet			
15:50	Kondor Virág	Aromás karbodiimid katalitikus előállítás és a reakció kinetikájának vizsgálata	Dr. Viskolcz Béla Tóth Péter Dr. Boros Renáta Zsanett	ME
16:10	Ludézer-Vaskor Martin	Nanopórusok szelektivitásának modellezése aszimmetrikus ionkoncentrációkkal a membrán két oldalán	Dr. Valiskó Mónika Dr. Boda Dezső	PE
16:30	Lukács Panna	Fotoreaktorok kalibrálása különféle aktinometriás módszerekkel	Dr. Ósz Katalin	PTE
16:50	Szarvas János Bernát	Az ionmegoszlás vizsgálata rés, hengeres és üreges pórusokban Donnan Nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal	Dr. Valiskó Mónika Dr. Boda Dezső	PE
17:10	Tóth Ugyonka Helga	Imidazólium alapú ionos folyadékok felületének szerkezeti és dinamikai vizsgálata számítógépes szimulációk segítségével	Dr. Jedlovsky Pál	EKKE
17:30	Vidosits Péter Benjamin	Linearizált elektrokémiai modellek alkalmazása AISI 316L rozsdamentes acél korróziójának vizsgálatára különböző agresszivitású közegekben	Dr. Kristóf Tamás Lukács Zoltán	PE

Környezeti kémia

2025. 04. 09. (szerda), LC 1.13

Zsúri

Elnök:	Dr. Fábián István	<i>egyetemi tanár</i>	DE
Tagok:	Dr. Hoffer András	<i>tudományos főmunkatárs</i>	PE
	Dr. Kőrösi Márton	<i>adjunktus</i>	BME

13:30	Alberti Orsolya	Nikkel, kobalt- és mangán-ferrit típusú mágneses nanorészecskék antibakteriális hatásának és adszorpciós tulajdonságainak vizsgálata	Dr. Szóri-Dorogházi Emma	ME
13:50	András Bernadett	Székelyföldi ásványvízforrások kémiai, geokémiai és mikrobiológiai jellemzése	Dr. Zsigmond Andrea Rebeka Dr. Máthé István	EMTE
14:10	Báangi-Magyar Ignác	Aeroszol mozgékonyági spektrométerek összehasonlító vizsgálata és a mérési módszer optimalizálása	Dr. Salma Imre	ELTE
14:30	Fejes Bence	Izopropanol és hidrogénatomok reakcióinak kísérleti vizsgálata csillagközi körülmények között	Dr. Tarczay György	ELTE
14:50	Geréd Boglárka Szép Levente István	A kültéri levegő aeroszol koncentrációjának vizsgálata Csíkszeredában	Dr. Bodor Katalin Dr. Bodor Zsolt	EMTE
15:10	Illés Tamás	A légköri aeroszol higroszkópos tulajdonságai Budapesten különleges események alkalmával	Dr. Salma Imre Vörösmarty Máté	ELTE
15:30	Büfészünet			
15:50	Kecskés Karina	Cirkónium-pilléres montmorillonit mikroorganizmus-adszorpciós tulajdonságainak vizsgálata	Dr. Szóri-Dorogházi Emma	ME
16:10	Kovács Áron Boldizsár	Üzemi méretű szennyvíztisztító technológia léptécsökkentéséből adódó problémáinak kiküszöbölése laboratóriumi méretben	Harasztiné Hargitai Réka Pitás Viktória	PE
16:30	Petrici Magdolna	Egy szennyvíztisztító telep mikroműanyag terhelése a Dunára	Dr. Zárny Gyula Dr. Tatár Enikő	ELTE
16:50	Stromájer Keve Csanád	A csapvíz minőségi vizsgálata Somogy vármegye területén koloriméterrel és spektrofotométerrel	Dr. Stromájer-Rácz Tímea József Tibor	PTE
17:10	Sütő Máté	Vízszennyező helyi érzéstelenítők eltávolítása oldatadszorpciós módszerrel grafén-oxid adszorbensen	Dr. Szabó Tamás Sajdik Kadosa	SZTE
17:30	Szeberényi Péter	Fungicid nehézfém tartalmának felhalmozódása a talajban	Dr. Mészárosné Dr. Bálint Ágnes	OE
17:50	Székely Ákos Bendegúz	Permetyszer degradációja környezetbarát módszerrel	Dr. Zsirkáné Dr. Fónagy Orsolya Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet	PE

Polimerkémia és -technológia
2025. 04. 09. (szerda), LC 2.14

Zsűri

Elnök:	Dr. Marosi György	<i>professor emeritus, MTA levelező tagja</i>	BME
Tagok:	Dr. Varga Imre	<i>egyetemi docens</i>	ELTE
	Dr. Nagy Lajos	<i>egyetemi docens</i>	DE

13:30	Galbicsek Noémi Vanda	Polimer adalékanyagok szerepe elektrokémiai CO redukcióban	Dr. Endródi Balázs Dr. Kormányos Attila	SZTE
13:50	Heller Bence	3D nyomtatott áramlásos kémiai reaktormodulok tervezése és tesztelése	Dr. Bálint Erika	BME
14:10	Pallos Patrik József	Szálerezítettségű műanyag kompozitok előállítása vákuum infúziós eljárással	Dr. Pethő Dóra	PE
14:30	Pilter Lilla	A göcképző hatás szerkezeti magyarázatának modellezése	Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd	BME
14:50	Spátay Sára	Mikrotalcák PVDF-szűrőmembránjának kémiai funkcionálizálása	Dr. Tóth Tünde Dr. Golcs Ádám	BME
15:10	Büfészünet			
15:30	Stein Anna	Szerkezeti paraméterekkel tervezhető termoreszponzív viselkedésű poli(N-izopropil-(met)akrilamid-ko-poli(etilén-glikol)-(met)akrilát) kopolimerek	Sármezey Bence Kasza György Dr. Iván Béla	ELTE
15:50	Szabari Zalán	Hiperelágazásos poliglicidol alapú poliuretán térhálók előállítása, vizsgálata és in situ képződő, ezüst nanorészecskékkel alkotott, katalitikus hatású nanohibridjeik	Fecske Dóra Kasza György Dr. Iván Béla	ELTE
16:10	Takács Késa Róza	Innovatív nyomtatási módszerek kidolgozása strukturált folyadékok előállítására	Dr. Mészáros Róbert Kardos Attila	ELTE

Anyagtudomány

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 0.06

Zsúri

Elnök:	Dr. László Krisztina	<i>professor emerita</i>	BME
Tagok:	Juhászné Dr. Csapó Edit	<i>egyetemi docens</i>	SZTE
	Dr. Hernádi Klára	<i>egyetemi tanár</i>	ME





8:00	Bukta Balázs József	Rezorcín-formaldehid alapú aerogélek arany vegyületek szelektív megkötésére	Dr. Herman Petra Dr. Kalmár József	DE
8:20	Cseh Kitti	(Gua) ₃ Cu ₂ I ₅ vékonyrétegek fényemissziós sajátosságainak vizsgálata	Dr. Samu Gergely Ferenc Hajdu Cintia	SZTE
8:40	Ecsédi Bertold	Poliimid aerogélek hidratációjának vizsgálata	Dr. Kalmár József	DE
9:00	Fülöp Henrik	Termikus bontással előállított fémtartalmú nanoszerkezet ezüst-koordinációs polimerből kiindulva: A kialakulás vizsgálata in-situ technikákkal	Dr. Haspel Henrik	SZTE
9:20	Janik Bence Botond	Agyagásvány - vegyes fém-oxid kompozitok előállítása és felületi tulajdonságaik	Dr. Vágvölgyi Veronika	PE
9:40	Büfészünet			
10:00	Kónya Zsuzsanna	Réteges kettős hidroxid-alapú multifunkcionális nanokompozitok fejlesztése	Dr. Szilágyi István Szerlauth Adél	SZTE
10:20	Szayly Kata	Mukoadhézió jellemzése hidrogél felszínen húzó és nyíró igénybevétel alkalmazásával	Dr. Gyarmati Benjámin	BME
10:40	Tátrai Marcell	Boroszilikát-alginát kompozit aero- és xerogélek előállítása és felhasználása gyógyszerhordozóként	Dr. Kalmár József, Balogh Zoltán	DE
11:00	Zrinyi Anna	Szelektív szol-gél enzimrögzítési eljárások fejlesztése mágneses nanorészecskékre	Dr. Bell Evelin	BME

Elméleti kémia II.

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 0.07

Zsűri

Elnök:	Dr. Stirling András	<i>egyetemi tanár</i>	EKKE
Tagok:	Dr. Bende Attila	<i>tudományos főmunkatárs</i>	INCDTIM
	Dr. Tajti Attila	<i>tudományos munkatárs</i>	ELTE

8:00	Bitó Patrik	Biológiai membránok megfestésére alkalmas fluoreszcens festékek gerjesztési tulajdonságainak vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel	Dr. Szőri Milán	ME
8:20	Ecséri Gábor András	Quantum mechanical calculation of reaction rate coefficients 	Dr. Fábri Csaba Dr. Császár Attila Géza	ELTE
8:40	Erdei Laura Csenge	A $F^- + PH_2I$ reakció dinamikájának modellezése saját fejlesztésű ab initio potenciálisenergia-felületen	Dr. Czakó Gábor Dr. Papp Dóra	SZTE
9:00	Gál Dorina Rebeka	A $Cl + CH_3X$ (X= F, Cl, Br, I) reakciók lehetséges útvonalainak nagypontosságú kvantumkémiai feltérképezése	Dr. Papp Dóra Dr. Czakó Gábor	SZTE
9:20	Gyimesi Réka Sára	A $F^- + NH_2I$ reakció analitikus potenciálisenergia-felületének kifejlesztése és mechanizmusainak részletes vizsgálata	Dr. Papp Dóra Dr. Czakó Gábor	SZTE
9:40	Büfészünet			
10:00	Haffner Ádám Balázs	Fémklaszter-katalizált szén-dioxid elektroredukciós folyamatok szimulációja	Dr. Höltzl Tibor	BME
10:20	Kígyósi Máté	Benchmarking ab initio protocols for high throughput cluster calculations 	Dr. Daru János	ELTE
10:40	Rácsai Balázs	Regularized relativistic corrections for molecular systems 	Dr. Mátyus Edit	ELTE
11:00	Szabó András	Accelerating coupled cluster molecular dynamics of condensed phase aqueous systems using cluster-based delta-learning protocols 	Dr. Daru János Mészáros Bence Balázs	ELTE

Fizikai kémia II.

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 1.05

Zsúri

Elnök:	Dr. Joó Ferenc	<i>professor emeritus, MTA rendes tagja</i>	DE
Tagok:	Vargáné Dr. Beck Andrea	<i>tudományos főmunkatárs</i>	HUN-REN
	Dr. Vesztergom Soma	<i>adjunktus</i>	ELTE

8:00	Antal Balázs	Szén-dioxid hidrogénezés gallium-nikkel klasztereken	Dr. Hözl Tibor	BME
8:20	Biczók Brigitta	CO ₂ hidrogénezési reakciók szelektivitásának hangolása különböző anionokkal dópolt réteges kettős hidroxid katalizátorokkal	Dr. Sági András	SZTE
8:40	Drágity Deján	Hangolható szén-monoxid redukciós szelektivitás polianilin/réz nanokompozit elektrokatalizátorokon	Dr. Endródi Balázs Dr. Kormányos Attila	SZTE
9:00	Gulyás Ferenc	Átmenetifémekkel módosított Cd _{0,5} Zn _{0,5} S fotokatalizátor hidrogénfejlesztő hatékonyságának vizsgálata	Dr. Fodor Lajos	PE
9:20	Kecskés Karina	Természetes alapú részecskék mikroorganizmus adszorpciós képességének vizsgálata	Dr. Szóri Dorogházi Emma	ME
9:40	Büfészünet			
10:00	Klonka Áron	Elektrokatalitikus reakciók viselkedésének feltérképezése erős külső mágneses térben	Dr. Haspel Henrik	SZTE
10:20	Kondor Virág	Aromás karbodiimid foszgénnel alkotott addíciós termékének előállítása és termikus stabilitásának vizsgálata	Dr. Viskolcz Béla Tóth Péter	ME
10:40	Nagy Csenge	Szénhordozós katalizátorok előállítása és alkalmazása anilin szintézisében	Dr. Prekob Ádám Dr. Sikora Emőke	ME
11:00	Orosz Nándor	Ni(II)-ionokkal módosított Cd _x Zn _{1-x} S fotokatalizátorok előállítása Na ₂ S ₂ O ₃ termikus bontásával	Dr. Fodor Lajos	PE
11:20	Sajósi Benedek	Propilén-oxid hidrogénatommal való reakciójának vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával	Dr. Tarczay György Dr. Góbi Sándor	ELTE
11:40	Szirmai Adrienn	Nyers glicerin elektrokatalitikus oxidációja nemesfém és nem nemesfém katalizátorokon	Dr. Endródi Balázs Dr. Kormányos Attila	SZTE

Szerves kémia I.

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 1.13

Zsúri

Elnök:	Dr. Borbás Anikó	<i>egyetemi tanár</i>	DE
Tagok:	Dr. Nagy József	<i>habilitált egyetemi docens</i>	BME
	Dr. Kálai Tamás	<i>egyetemi tanár</i>	PTE

8:00	Bogner Marcell Márk	Egy fotokapcsolható molekuláris áramkörü elem tervezése és szintézise	Dr. London Gábor Dr. Hegedüs László	BME
8:20	Cseh Orsolya Zsuzsanna	Ciklodextrinhez rögzített szénhidrátalapú koronaéterek szintézise	Dr. Rapi Zsolt	BME
8:40	Gerő Viktória	(1,2,3-Triazol-4-il)metil-foszforamidát-származékok előállítása azid-alkin-cikloaddícióval	Dr. Bálint Erika	BME
9:00	Gémes Gergő	Organo-fotokatalitikus rendszerek alkalmazása C-alkilezési reakciók fejlesztésére	Dr. Kupai József	BME
9:20	Görög Ladislav	A piridin szerepe az orvosi kémiában és az új, biológiailag aktív anyagok tervezésében	Dr. Slávka Hamul'aková	UPJS
9:40	Büfészünet			
10:00	Györfi Sára	Exo szelektív Diels-Alder reakció fahéjaldehid és származékainak felhasználásával	Dr. Soós Tibor Dr. Bölskei Hedvig Forman Ferenc Sándor Hegedüs Kristóf	BME
10:20	Herczegh Attila Richárd	Katalitikus átalakítások vizsgálata biotenzid oldatokban	Dr. Novák Zoltán	ELTE
10:40	Kapdos Ádám	Réz katalizált elektrokémiai dekarboxilatív borilezés fejlesztése	Dr. Novák Zoltán	ELTE
11:00	Kis Dávid	Egy új, természetes alapú oldószer alkalmazása palládiumkatalizált kapcsolási reakciókban	Dr. Kupai József	EKKE
11:20	Máriás Attila	6-Jód- és 8-jód-imidazo[1,2-a]piridin származékok előállítása és aminokarbonilezése heterogén palládium katalizátor jelenlétében	Skodáné Dr. Földes Rita	PE

Szerves kémia II. 

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 1.03

Zsúri

Elnök:	Skodáné Dr. Földes Rita	<i>egyetemi tanár</i>	PE
Tagok:	Dr. Kurtán Tibor	<i>egyetemi tanár</i>	DE
	Dr. Mernyák Erzsébet	<i>tudományos munkatárs</i>	SZTE

8:00	Benedikti Anna	Rodaminok új megvilágításban: kiemelkedően hatékony fotolabilis vegyületek szintézise és vizsgálata	Dr. Bojtár Márton Gáspár	ELTE
8:20	Gergely Kristóf Tamás	Egyszerű módszer propellán elektrofil aktiválására savakkal	Dr. Tolnai Gergely László	ELTE
8:40	Hornyánszky Ágnes	Pirazolszármazékok szintézise dehidroecetsavból	Dr. Kovács Péter Dr. Keserű György Miklós Dr. Ábrányi-Balogh Péter	BME
9:00	Kószegi Kristóf András	Mechanokémiai aszimmetrikus Michael-addíciók maleimidekre heterogén királis organokatalizátor használatával	Dr. Szöllősi György Dr. Szabados Márton	SZTE
9:20	Lam Thi Da Thao	Innovative and Sustainable Electrocatalytic Oxidation of Amines for Synthesis of Imines and Nitriles 	Dr. Kovács Ervin Dr. Hegedűs László	BME
9:40	Büfészünet			
10:00	Nagy Dorka	Butil-fenil-H-foszfinát szintézisének vizsgálata és hasznosítása α -aminofoszfonátok előállításában	Dr. Keglevich György	BME
10:20	Németh Áron Soma	Spirooxindol-dihidropiridin-biszfoszfónátok és analógjainak előállítása	Dr. Bálint Erika Rávai Bettina	BME
10:40	Németh Dávid Dorián	Tuning the conformational properties of dithienylbenzene photoswitches for solid-state applications 	Dr. London Gábor Dr. Kunfi Attila	ELTE
11:00	Szabó Zita	Királis P ₂ NP-ligandumok előállítása és alkalmazása ketonok réz-katalizált aszimmetrikus hidrogénezési reakciójában	Dr. Farkas Gergely Császárs Zsófia	PE
11:20	Tar-Szilágyi Sarolta	Foszfinsavszármazékok mikrohullámmal segített "klórmentes" szintézise	Dr. Keglevich György	BME
11:40	Unyi Zsombor	Aktiválható, makrociklusos tetrazinok szintézise	Dr. Cserép Balázs Gergely	BME

Szervetlen és koordinációs kémia

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 2.14

Zsűri

Elnök:	Dr. Horváth Ottó	<i>egyetemi tanár</i>	PE
Tagok:	Dr. Buglyó Péter	<i>egyetemi tanár</i>	DE
	Dr. Csire Gizella	<i>adjunktus</i>	EKKE

8:00	Balogh Marcell János	Karboranil-szilolok fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata – két AIE-aktív csoport egy csárdában?	Dr. Kelemen Zsolt	BME
8:20	Bartek Máté	Erős vagy gyenge, egyáltalán létezik? Heterobimetallikus kölcsönhatás vizsgálata κ^3 -bisz(donor)ferrocén-átmenetifém komplexekben	Dr. Kelemen Zsolt	BME
8:40	Ferencz Orsolya	Fém-szulfiddal módosított grafitserű szén-nitrid fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata	Dr. Fodor Lajos	PE
9:00	Gátszegi Gerda Tímea	2-formilpiridin-guanilhidrazon-származékok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redox tulajdonságai: a morfolin és piperazin szubsztitúciók hatása	Dr. Enyedy Éva Anna	SZTE
9:20	Kun Emese	Az OPDMA ligandum előállítása és koordinációs kémiai vizsgálata	Dr. Bunda Szilvia Dr. Kálmán Ferenc Krisztián	DE
9:40	Büfészünet			
10:00	Olasz Márk	Reakciók sztöchiometriájának meghatározása Job-módszerével: csapadékreakciók	Dr. Schuszter Gábor	SZTE
10:20	Szabó Mira	Antioxidáns tulajdonságú réz(II)-komplexek előállítása és vizsgálata	Dr. Lihi Norbert	DE
10:40	Takács Aletta	Rákellenes hatású pirazolcsoportot tartalmazó (tio)szemikarbazonok és réz(II)komplexeik oldategyensúlyi jellemzése	Dr. Enyedy Éva Anna Gátszegi Gerda Tímea	SZTE
11:00	Török Dóra Viktória	Szalan típusú vegyületek átmenetifémionokkal való kölcsönhatása	Dr. Kállay Csilla	DE
11:20	Vincze Bálint	Aldehydekek Fe-katalizált H_2O_2 -oxidációs reakciói	Dr. Kaizer József	PE

Középiskolai tagozat

2025. 04. 10. (csütörtök), Kémiai Épület, E320

Zsúri

Elnök:	Dr. Farkas Etelka	<i>professor emerita</i>	DE
Tagok:	Dr. Somsák László	<i>professor emeritus</i>	DE
	Dr. Sóvágó Imre	<i>professor emeritus</i>	DE

10:00	Dékány Patrik, Dobos Kamilla, Nyeste Balázs	Az Algopyrin	Makai Tímea Kamilla	SzSzC-PVT
10:15	Zombori Dávid	Energia	Makai Tímea Kamilla	SzSzC-PVT
10:30	Biró Alexandra Adrienn, Nagy Kornélia Anna, Pigler Korinna Petra	HPV	Makai Tímea Kamilla	SzSzC-PVT
10:45	Gusztafik Ferenc, Kiss Szabolcs	Metán	Makai Tímea Kamilla	SzSzC-PVT
11:00	Csiki Vivien Madlen, Szabó Zsófia	Nyerjünk energiát	Tóthné Dr. Illyés Tünde Zita	DRKG
11:15	Fejes Viktória, Szénási Rebeka	Oltóanyagok	Makai Tímea Kamilla	SzSzC-PVT
11:30	Petrikó Patrícia, Komáromi Zsombor	A kémia szerepe az élelmiszeriparban és a mezőgazdaságban	Csupász-Szabó Hanna Judit	DSzC-VT
11:45	Halápi Zete	Táplálékkiegészítők	Makai Tímea Kamilla	SzSzCPVT

Analitikai kémia

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 0.06

Zsúri

Elnök:	Dr. Ilisz István	<i>egyetemi tanár</i>	SZTE
Tagok:	Dr. Szántay Csaba	<i>egyetemi magántanár, tudományos főtanácsadó</i>	BME RG
	Dr. Szalai István	<i>egyetemi tanár</i>	ELTE
	Dr. Horváth Krisztián	<i>egyetemi docens</i>	PE


13:30	Csondor Luca	Különböző érettségű csipkebogyó (<i>Rosa canina</i>) karotinoid tartalmának minőségi és mennyiségi meghatározása	Dr. Böddi Katalin Dr. Petz Andrea	KDOSZ
13:50	Jávor Bálint	Mikrotálca rendszeren alapuló, nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációs eljárás kidolgozása	Dr. Tóth Tünde Dr. Golcs Ádám Dr. Huszthy Péter	BME
14:10	Karvaly Krisztián Márk	Szilárdfázisú extrakciós (SPE) tisztítási módszerek optimalizálása kis mennyiségű komplex biológiai minták proteomikai és foszfoproteomikai alkalmazására	Bugyi Fanni Dr. Turiák Lilla	ELTE
14:30	Kállai Balázs Zsolt	Potenciometriás ionszelektív mikroelektrodok fejlesztése vízminták baktériumtartalmának meghatározására	Dr. Gyurcsányi E. Róbert Dr. Papp Soma	BME
14:50	Kiss Beatrix	Agyszövet N-glikozilációjának vizsgálata kapilláris elektroforézissel	Dr. Járvas Gábor Török Rebeka	PE
15:10	Kis-Tót Bálint	Kovalensen módosított mikrotálca alapú fluoreszcens optoszenzor fejlesztése cink- és ólomionok nagy áteresztőképességű analizésére	Dr. Tóth Tünde Dr. Golcs Ádám	BME
15:30	Büfészünet			
15:50	Lemle Ákos	Method development for the simultaneous identification of acidic and basic drugs of abuse in blood 	Dr. Hidvégi Előd Dr. Vasánits Anikó Éva	ELTE
16:10	Márkus Eszter	Ioncsérés kromatográfias oszlopok minősítése és adalimumab fehérje tisztításának optimalizálása	Dr. Hirsch Edit	BME
16:30	Mezey Kinga - Noémi	UV-sugárzás elleni védelem: A fényvédők elemzése spektrofotometriás módszerrel	Dr. Muntean Norbert - Thomas	BBTE
16:50	Molnár Alexandra	Alternatív proteomikai mintaelőkészítési módszerek különböző biológiai minták vizsgálatához	Dr. Turiák Lilla Balbisi Mirjam	BME
17:10	Sebők Noémi Regina	Sterigmatocisztin tisztítása új, költséghatékony elválasztástechnikai módszerrel	Dr. Szekeres András	SZTE
17:30	Ujvári Kamilla	A biofilm képződésben szerepet játszó jelátvivőmolekulák antimikrobiális peptidokkal képzett szupramolekuláris asszociátumai	Dr. Szigyártó Imola Csilla Dr. Beke- Somfai Tamás	BME
17:50	Veréb Zsolt	Antioxidánsok és bomlástermékek kimutatása folyadékkromatográfias módszerrel étolajból	Dr. Fejes Zsolt Dr. Mentés Dóra	ME

Biokémia

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 0.07

Zsúri

Elnök:	Dr. Hudecz Ferenc	<i>egyetemi tanár, MTA rendes tagja</i>	ELTE
Tagok:	Dr. Gyémánt Gyöngyi	<i>egyetemi tanár</i>	DE
	Dr. Jankovics Hajnalka	<i>tudományos főmunkatárs</i>	PE

13:30	Bogya Benedek	Dihidropirimidin – dehidrogenáz enzim radioizotópos aktivitás mérésének fejlesztése kemoterápiában részesülő daganatos betegeknél prognosztikai célból	Dr. Ditrói Tamás Dr. Nagy Péter	ELTE
13:50	Dörgő Daniella	Hydrogen sulfide mediated deCoAlation of CoAlated Peroxiredoxin 6 	Dr. Nagy Péter	ELTE
14:10	Emódi Nikolett	Az onkogén KRas fehérjék kölcsönhatásainak vizsgálata	Dr. Nyíri Kinga	BME
14:30	Erdélyi Viktor	A Hsf-1 transzkripciós faktor és az ER-stressz kapcsolatának vizsgálata emlős sejtvonalakban	Dr. Deák Veronika	BME
14:50	Fógel Benjámin	Nukleáris Faktor I fehérje DNS kötő doménjének előállítása és kölcsönhatása DNS-sel	Dr. Gyuresik Béla Dr. Zeyad H. Nafae	SZTE
15:10	Horváth Virág Nikolett	Extracelluláris vezikulák glikomikai karakterizálása	Dr. Turiák Lilla Balbisi Mirjam	BME
15:30	Büfészünet			
15:50	Iván Réka Boglárka	Az NDST3 heparán szulfát bioszintézis enzim N-szulfotranszferáz doménjének előállítása és biokémiai vizsgálata	Dr. Nagy Gergely Nándor	BME
16:10	Kozma Bianka	A dUTPáz fehérje-kölcsönható partnereinek azonosítása és szerepének vizsgálata egér embrió modellben	Dr. Vértessy G. Beáta	BME
16:30	Kutás Adriána	Pirofoszfát sók, mint lehetséges meszesedést megelőző gyógyszerek in vivo tesztelése	Dr. Mucsi Zoltán Dr. Pomozi Viola	ME
16:50	Mócza Levente András	Kemoterápiás szerekkel indukált mutagenézis kimutatása 3D-PCR-rel	Dr. Békési Angéla Holub Eszter	BME
17:10	Szajkó Milda Blanka	Genomi uracilmintázatok jellemzése: szenzorfejlesztés és funkcionális elemzés embrionális fejlődési modellben	Dr. Békési Angéla	BME
17:30	Szentirmai Anna	Oxidatív stressz kiváltotta sejthalál útvonalak vizsgálata tumoros sejtekben	Dr. Szarka András	BME
17:50	Tar Andrea-Viktória	Sugárérzékenység mérése cervix tumoros betegeknél, a RILA módszer finomhangolása	Dr. Sándor Gyöngyvér Orsolya Dr. Jurányi Zsolt Dr. Sveiczter Ákos	BME
18:10	Tóth Máté	A sejtciklus során stabil mRNS expresszióval rendelkező referenciagének azonosítása	Dr. Vértessy G. Beáta	BME

Kémiai technológia

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 1.05

Zsűri

Elnök:	Dr. Volk Balázs	<i>hatóanyagfejlesztési igazgató</i>	EGIS
Tagok:	Dr. Vanyorek László	<i>egyetemi docens</i>	ME
	Dr. Nagy Tibor	<i>egyetemi docens</i>	DE

13:30	Bánrévi Zoltán	Tabletták vizsgálata gépi látási rendszerrel a hatóanyag-tartalom tekintetében	Dr. Nagy Zsombor Kristóf Dr. Galata Dorián László	BME
13:50	Benczúr Máté Gergő	Porkeverékek összetételének és komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának vizsgálata valós időben gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével	Dr. Galata Dorián László	BME
14:10	Diószegi Anna	Tabletták felületi hibáinak felismerése és mechanikai tulajdonságainak becslése mesterséges intelligenciával	Dr. Galata Dorián László	BME
14:30	Fekete Dániel	Mesterséges neurális háló alapú modell fejlesztése granulátumok nedvességtartalmának in-line nyomon követésére	Dr. Nagy Zsombor Kristóf	BME
14:50	Gyöngyössy Ádám	Heterociklusos kapszaicinoidok előállítása áramlások kémiai rendszerekben	Dr. Bálint Erika	BME
15:10	Hegyi Mihály	Félfolyamatos neutrális hidrolitikus eljárás fejlesztése PET kémiai újrahasznosítására	Dr. Székely Edit	BME
15:30	Büfészünet			
15:50	Kálnai Áron	Porkeverék komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának meghatározása gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével	Dr. Galata Dorián László	BME
16:10	Képes Bence	Epoxi gyanta félfolyamatos üzemű, szelektív hidrotermális bontása	Dr. Székely Edit	BME
16:30	Lőrincz Zsolt	Folyamatos heterogén kristályosítás fejlesztése hatóanyagmorfológia javítására	Dr. Pataki Hajnalka Stoffán György Nimród	BME
16:50	Majtán Márton	Modell bio-olaj észterezésének vizsgálata módosított mesterséges zeolit katalizátorokon	Dr. Miskolczi Norbert	PE
17:10	Mohácsi Zsombor Márton	Dihidropiridin származékok biomimetikus oxidatív átalakulásainak vizsgálata	Dr. Decsi Balázs Dr. Balogh György Tibor	BME
17:30	Szász Adrienn	Kristályos hányad meghatározásának jelentősége nagy hatóanyag-tartalmú szálak fejlesztésénél	Dr. Szabó Edina Dr. Nagy Zsombor Kristóf	BME

Kolloid- és makromolekuláris kémia

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 1.13

Zsűri

Elnök:	Dr. Tombáczi Etelka	<i>egyetemi tanár</i>	PE
Tagok:	Dr. Kalmár József	<i>egyetemi docens</i>	DE
	Dr. Molnár Kristóf	<i>egyetemi docens</i>	SE

13:30	Áder Liza Lídia	Anionos tenziddel társított kitozánbevonatok felületi és tömbi tulajdonságainak vizsgálata	Dr. Hórvölgyi Zoltán Márton Péter	BME
13:50	Borbás Balázs	Felkonvertáló nanorészecskék kompozit vékonyrétegei: emissziós intenzitás és energiaátadási folyamatok jellemzése	Dr. Hórvölgyi Zoltán	BME
14:10	Budai Eszter Anna	Újszerű, poli(dimetilsziloxán) alapú nanoszerkezetű amfifil kotérhálók	Dr. Iván Béla Dr. Szanka István Petróczy Anna	ELTE
14:30	Bors Adrienn Márta	Ag-adalék hatása fényátersztést növelő, mezopórusos TiO ₂ szol-gél bevonatok fotokatalitikus hatására	Dr. Albert Emőke	BME
14:50	Demény Petra	Cu- és Cu ₂ O-nanorészecskékkel adalékolt TiO ₂ szol-gél bevonatok előállítására és fotoaktivitásuk vizsgálata	Dr. Hórvölgyi Zoltán Dr. Tegze Borbála	BME
15:10	Kókai Kata Panna	Makromolekulák alkotta biokolloidok kialakítása változó oldhatóságú vegyületek formulálására	Juhászné Dr. Csapó Edit	SZTE
15:30	Büfészünet			
15:50	Maklári Cintia	Elektrokémiai funkcionizálás hatása grafén-oxid diszperziók kolloidstabilitására	Dr. Szabó Tamás Nagy Péter	SZTE
16:10	Péter Tamás	Poroszkék nanorészecskék kolloidstabilitása és antioxidáns aktivitása közötti összefüggések különböző szeretlen sók jelenlétében	Dr. Szilágyi István Takács Dóra	SZTE
16:30	Torma Bianka	Új összetételű, szérumfehérje és hialuronsav alkotta kolloidális hatóanyag hordozó részecskék tervezése	Juhászné Dr. Csapó Edit	SZTE
16:50	Varga Szilárd	Heterogenizált antioxidánsok szinergikus hatása	Dr. Szilágyi István	KDOSZ
17:10	Viczián Dániel	Elektrolitok és polielektrolitok hatása CeO ₂ nanozyme részecskék kolloidstabilitására és enzimutánzó aktivitására	Dr. Szilágyi István	SZTE
17:30	Vörös Attila	Többféle enzimaktivitással rendelkező nanozyme kolloid rendszerek fejlesztése	Dr. Szilágyi István Dr. Varga Viktória	SZTE
17:50	Bimbó Levente Péter	Frakcionált agyagásvány-részecskékkel felületmódosított szűrőrétegek alkalmazása sók és szerves szennyezők membránszeparációja céljából 	Dr. Szabó Tamás Dr. Varga Viktória	SZTE

Szerves kémia III. 

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 1.03

Zsúri

Elnök:	Dr. Hegedűs László	<i>habilitált egyetemi docens</i>	BME
Tagok:	Dr. Katona Gabriel	<i>egyetemi docens</i>	BBTE
	Dr. London Gábor	<i>tudományos főmunkatárs</i>	HUN-REN

13:30	Bese Cintia	α -Hidroxi-benzilfoszfonátok reakciója dialkil-acetiléndikarboxiláttal	Dr. Keglevich György	BME
13:50	Fajka Lilla	Fotoaktiválható fragmensek előállítása és gyógyszerkémiai alkalmazása	Dr. Orgován Zoltán Dr. Ábrányi-Balogh Péter	ELTE
14:10	Gacov Donát Adrián	Oxazolidinon származékok előállítása szén-dioxid C1 építőelemként történő felhasználásával ionfolyadék oldószerben	Dr. Ispán Dávid Skodáné Dr. Földes Rita	PE
14:30	Garami Kristóf	Kovalens inhibitorok fejlesztése H3 receptorra fragmens alapú megközelítéssel	Dr. Ábrányi-Balogh Péter	BME
14:50	Halmai Mónika	Sejtosztódásgátló hatású, foszfintartalmú vindolin- és krizinszármazékok előállítása	Dr. Keglevich Péter Dr. Hazai László	BME
15:10	Nemeskéri Dániel	Hosszú szénláncú kontakt feromonok iteratív sztereoszelektív szintézise	Dr. Soós Tibor Szobota András	ELTE
15:30	Büfészünet			
15:50	Rábai Károly Tamás	HER2-pozitív emlőtumor célzására alkalmas biokonjugátumok fejlesztése	Dr. Mező Gábor	ELTE
16:10	Szabó Bence	Fotoaktiválható idegnövekedési faktor mimetikumok szintézise és fotokémiai vizsgálata	Dr. Cseri Levente Dr. Kupai József	BME
16:30	Szeip Judit	Hipoxia aktivált fényérzékeny védőcsoportok tervezése és szintézise	Dr. Bell Evelin Dr. Németh Krisztina Dr. Cserép Gergely Dr. Kele Péter	BME
16:50	Tóth Szigfrid Boldizsár	Hidroxi-biszfoszfonát típusú vegyületek szintézise Pudovik-reakcióval	Dr. Keglevich György Szalai Zsuzsanna	BME

Szerves kémia IV.

2025. 04. 10. (csütörtök), LC 2.14

Zsúri

Elnök:	Dr. Csámpai Antal	<i>egyetemi tanár</i>	ELTE
Tagok:	Dr. Kónya Krisztina	<i>adjunktus</i>	DE
	Dr. Rapi Zsolt	<i>egyetemi docens</i>	BME

13:30	Babcsányi István János	Alkil-tiantréniumsók újszerű szintézise és továbbalakításaik	Sóvári Bence Dr. Varga Szilárd	ELTE
13:50	Hegedűs Márton	[2]katenán - Együtt vagy külön?	Bogner Marcell Márk Tóth Imre	KDOSZ
14:10	Jakab Máté	Monobenzo-pentalén kromofórok szerkezeti hangolása fotovoltikus alkalmazásokhoz	Dr. London Gábor Meiszter Enikő	BME
14:30	Kis Anna Sára	α -Hidroxi-alkilfoszfonátok szintézise, rezolválása és reakciói	Dr. Keglevich György Szalai Zsuzsanna	BME
14:50	Kisfaludi Péter	Egy bisz(akridino)-koronaéter a spermin bioszintézis oligoaminjainak felismerésére	Dr. Tóth Tünde Dr. Golcs Ádám	BME
15:10	Babcsányi István János	Tiantréniumsók oxidatív aktiválása és reaktivitásuk vizsgálata	Dr. Varga Szilárd	ELTE
15:30	Büfészünet			
15:50	Kugler Valentin	Carbonylation reactions of aryl-dihalides with mixed nucleophiles 	Dr. Pongrácz Péter	PTE
16:10	Peleskei Zsófia	1-C-Szubsztituált-2-jódglükál származékok Sonogashira kapcsolási reakcióinak optimalizálása	Dr. Juhász László Dr. Homolya Ágnes	DE
16:30	Petrilla Brigitta	N-B-OH egységet tartalmazó fluoreszcens policiklusos azaborin kromofórok előállítása és spektroszkópiai vizsgálata	Dr. Mucsi Zoltán Dr. Kupai József Csomos Attila	BME
16:50	Steinsits Dániel	3,3-Diszubsztituált oxindolok előállítása és a termékek felhasználhatóságának vizsgálata	Dr. Bálint Erika Rávai Bettina	BME

A kémiai szaknyelv története lapról lapra: Az oktatástól az alkalmazott tudományig

A magyar tudományos nyelv fejlődése szorosan összefonódott a hazai tudományos élet megerősödésével és a nemzetközi tudományos eredmények magyar nyelvre való átültetésével. A kémia területén ez különösen izgalmas folyamat volt, hiszen a szaknyelv megalkotása és pontosítása, a tudományos terminológia kialakítása, valamint a nemzetközi nomenklatura magyarosítása egyaránt kihívást jelentett a tudósok számára. Kiállításunk átfogó képet nyújt erről a folyamatról bemutatva azokat a műveket és tudósokat, akik hozzájárultak a magyar nyelvű kémiai ismeretek terjesztéséhez.

A 18. és 19. század tudósai rendkívüli szellemi küzdelmet folytattak annak érdekében, hogy a kémiát magyar nyelven közvetíthessék. A kiállított kötetek tanúságot tesznek e folyamatról bemutatva azt az elszánt munkát, amelynek során a magyar nyelv bizonyította alkalmazhatóságát a tudományos gondolatok pontos és árnyalt kifejezésére. Kováts Mihály munkásságának köszönhetően megszülettek az első magyar kémiai szakkifejezések, és olyan alapfogalmak honosodtak meg, mint a *kísérlet* és az *anyag*, amelyek máig élnek a szaknyelvünkben. Azonban nem csupán tudománytörténeti dokumentumokról van szó: ezek a könyvek a nemzeti öntudat különleges lenyomatai is. A szabadságharc előtti időszakban a magyar kémiai műnyelv egyfajta néma tiltakozásként szolgált a Habsburg-uralom ellen, a tudósok merész kísérleteket tettek a tudományos terminológia magyarítására. Így születtek olyan egyedi elnevezések, mint a *köenny* (hidrogén) vagy az *éleny* (oxigén), amelyek később a nemzetközi kémiai nomenklatura térhódításával háttérbe szorultak.

A magyar kémiai nyelv fejlődése szorosan összekapcsolódott a kémia tudományának előrehaladtával. A gyűjtemény végigkíséri ezt a folyamatot a természeti jelenségek tudományos vizsgálatának kezdetétől a kémiai alapelvek megismerésén át egészen a tudomány gyakorlati alkalmazásáig. A látogatók betekintést nyerhetnek abba, hogyan kapcsolódott a kémia a mezőgazdasághoz, a gyógyászatához és az iparhoz, miközben a kémia oktatása egyre szélesebb körűvé vált az elemi iskolától a felsőoktatásig. Than Károly, Zemplén Géza és más jelentős tudósok munkája révén a kémiai szaknyelv folyamatosan fejlődött alkalmazkodva az egyre bővülő tudományos ismeretanyaghoz, és egyenrangú félként illeszkedett a nemzetközi tudományos diskurzusba.

Kováts Mihály szavaival élve: „A' magyarnak mind a nyelve, mind az esze alkalmas a'ra, hogy a' tudományokat magyarul tsepegtesse kedves magzatjainak az elméjékbe.” Ez a kiállítás ennek az üzenetnek állít méltó emléket, bemutatva, hogyan vált a kémia tudományterülete a magyar nemzeti kultúra részévé.

A KÉMIAI SZAKNYELV TÖRTÉNETE LAPRÓL LAPRA

Az oktatástól
az alkalmazott tudományig

D

E

Debreceni Egyetem
Egyetemi és Nemzeti Könyvtár, Kutatóterem
2025. április 7. - június 1.

MIT JELENT A KUTATÓI TEHETSÉG A VALÓ VILÁGBAN?



Prof. Dr. Szántay Csaba

az MTA doktora, egyetemi magántanár (BME),
tudományos főtanácsadó (RG),
egészségügy- és oktatástámogatási vezető (RG)
Richter Gedeon Nyrt. 1103 Budapest, Gyömrői út 19-21.

Vajon miben rejlik a sikeres kutatók tehetségének titka?; elég „tehetséges” vagyok-e a sikeres kutatói életpályához?; pontosan milyen felkészültségű és egyéb kompetenciákkal bíró kutatókra vagy pályakezdőkre van szüksége egy kutatóhelynek (az ipari, illetve akadémiai szférában)?; vajon megfelelő oktatást nyújt-e ebből a szempontból a közoktatás és az egyetem?; milyen előnyöket jelent (ha jelent) a PhD megszerzése?; mi kell egy sikeres kutatói állásinterjúhoz? Gyógyszeripari kutatóként és vezetőként, továbbá egyetemi oktatóként is számos kollégámmal együtt az a tapasztalatom, hogy bár az ilyen és ehhez hasonló kérdések igencsak súlyosak, tudatos átgondolásuk és elemzésük meglehetősen hiányos az érintett egyének és intézmények részéről egyaránt. Továbbá számos olyan sztereotípiát és egysíkú, a valóságtól elrugaszkodott mítosz uralkodik a kutatói tehetség fogalma kapcsán, aminek komoly elvi és gyakorlati következményei vannak e kérdések vonatkozásában. A tehetség fogalmának jobb megértése és tudatosabb kezelése kritikusan fontos (lenne) az egyéni életpályák és az intézményi szintű sikeresség szempontjából egyaránt.

Több évtizednyi alap- és célzott ipari és egyetemi kutatási tapasztalatból kiindulva igyekszem az előadásban ezt a problémakört feszegetni, és a kutatói tehetség problematikáját talán meglepő és remélhetően inspirálóan új megvilágításba helyezni. Igyekszem rávilágítani arra, hogy az intellektuális képességek, illetve a szakmai tudás mellett az ún. „attitűdkompetenciák” milyen döntő jelentőségűek abból a szempontból, hogy kiből lesz „jó kutató”. Jelentőségükhöz képest ezek a kompetenciák általában magukban a kutatókban sem kellően tudatosak, és fejlesztésükre is kevés figyelmet szentelünk a napi gyakorlatban csakúgy, mint a köz- és felsőoktatásban. Habár az előadásban a gyógyszeripari kutatói lét perspektívájából próbálok kiindulni, a lényegi üzenetek nem szakmaspecifikusak, és az élet sok más területére is vonatkoznak. [1,2,3]

1. Cs. Szántay; Magyar Kémikusok Lapja, 71, 266-276 és 301-311.
2. Cs. Szántay, The philosophy of anthropic awareness in scientific thinking. In: Cs. Szántay, Ed.: *Anthropic Awareness: the human aspects of scientific thinking in NMR spectroscopy and mass spectrometry*. New York: Elsevier, 2015. pp. 3-93.
3. Szántay Csaba: Hát, ez furcsa... Lexica kiadó, (Magyar Tudósok Sorozat), 2021.

Az előadás időpontja és helyszíne: **2025. 04. 10. 19:00, DE Élettudományi Központ F015-016**

Roska Tamás bemutatása

„Énekeljetek az elmétekkel”

A „Roska Tamás Tudományos Előadás” bevezetéseként próbáljuk meg felidézni, ki volt ő, mire tanít életpéldája?

Nem véletlen, hogy ezt a rangos díjat Roska Tamásról nevezték el. Roska Tamás Széchenyi- és Bolyai-díjas akadémikus, professzor, a celluláris hullámszámítógép architektúrájának megalkotója, a Pázmány Péter Katolikus Egyetem Információs Technológiai és Bionikai Karának alapító dékánja, a hazai bionikai képzés megteremtője. Tudományos tevékenységét számtalan hazai és nemzetközi díjjal ismerték el. A száraz adatok ugyanakkor nem adják vissza az embert, a tudóst, aki fiatalok generációit indította el a világszínvonalú kutatómunka felé.

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

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

Mindig meglátta a lehetőséget a fiatal tehetségekben és teret adott nekik, hogy kibontakoztat-hassák a bennük rejlő képességeket. Fontosnak tartotta, hogy „olyan kutató legyen, akinek kaland egy új minőség létrehozása”. „Közben bent van az ember a világ élvonalának a történeteiben.”

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

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

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

Roska Tamás Tudományos előadás

Cinkujj fehérjék kölcsönhatása esszenciális és toxikus fémionokkal, DNS-sel, alkalmazási lehetőségek

A cinkujj fehérjék képesek specifikusan felismerni DNS szekvenciákat, így a természetben gének átíródását szabályozzák. Ebből adódóan megfelelő működésük elengedhetetlen az eukarióták (pl. emberek) életben maradásához. Moduláris felépítésűek, így az alegsúlyok sorrendjének megváltoztatásával szinte bármely DNS szakasz specifikusan megcélózható. Ebből adódóan nagy figyelem irányul a cinkujj fehérjékre, mivel akár daganatos megbetegedések kezelésére, génszerkesztésre is használhatónak ígérkeznek.



Dr. Hajdu Bálint

Egy cinkujj fehérje csak abban az esetben képes felismerni DNS célszekvenciáját, ha Zn(II)-t köt meg. Így fontos ismerni a fehérje Zn(II)-affinitását. Továbbá az élő szervezetekben végbe mehetnek kompetíciós reakciók a holo cinkujj fehérje és egyéb (toxikus) fémionok között, ami csökkentheti, megszüntetheti, vagy módosíthatja a fehérje eredeti funkcióját.

Kutatásaink során mindkét szempont mentén átfogó vizsgálatokat folytattunk *in vitro* és sejtekben is. Kísérleteztünk cinkujj fehérje-alapú mesterséges nukleázok kifejlesztésével, tanulmányoztuk cinkujj fehérjék kölcsönhatását endogén és exogén fémionokkal, és olykor a témák között nemvárt kapcsolódási pontokat is találtunk, amelyek új alkalmazási lehetőségeket kínáltak.

Megállapítottuk, hogy a cinkujj fehérjék DNS-kötése extra stabilizációs hatással bír azok Zn(II)-kötésére, ami megmagyarázza, hogyan képesek olyan sejtbeli körülmények között is működni, ahol fehérjék Zn(II)-affinitásuk alapján már nem lennének funkcionálisak. Elsőként igazoltuk, hogy a manapság egyre gyakrabban alkalmazott ezüst nanorészecskékből felszabaduló Ag(I) ionok képesek meggátolni a cinkujj fehérjék működését a Hg(II)-hoz hasonlóan.

Rávilágítottunk, hogy a Ni(II) nem képes versengeni a Zn(II)-vel, azonban lehetséges specifikus hidrolízist elérni a segítségével, amennyiben a fehérjeszekvenciában található egy (S/T)XH motívum. Ez a hidrolízis alkalmassá teszi a reakciót natív fehérjék előállítására, nukleázok kialakítására és akár szabályozására is.

Az előadás időpontja és helyszíne: **2025. 04. 11. 9:00, DE Főépület 2. emeleti Aula – Záróünnepség.**

ÖSSZEFOGLALÓK

Analitikai kémia

CSONDOR LUCA
Középiskolai hallgató

Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziuma és
Kollégiuma

Témavezetők:
Dr. Böddi Katalin
egyetemi adjunktus, PTE ÁOK
Dr. Petz Andrea
gimnáziumi tanár, Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziuma és Kollégiuma

Különböző érettségű csipkebogyó (*Rosa canina*) karotinoid tartalmának minőségi és mennyiségi meghatározása

Kulcsszavak: Karotinoidok, Érettség, Rosa canina, Csipkebogyó

A minket körülvevő természet szemet gyönyörködtető színvilágának vörös, sárga és narancssárga komponenseiért többek között a karotinoidok a felelősek. Kiemelt szerepük létfontosságú a fotoszintézisben is. Az emberi szervezetben legismertebb képviselője a lutein származéka, a szem sárgafoltjában fordul elő. Első sorban sárgarépában, sütőtökben és sok más növényben találkozhatunk velük nagy mennyiségben. Egyik ilyen, hazánkban is elterjedt növényt, a csipkebogyót választottam kutatásom témájául.

A csipkebogyó, a vadrózsa (*Rosa canina*) áltermése, melynek antioxidáns tartalma régebb óta bizonyított. A népgyógyászatban már idősámításunk előtt is használták. Teáját immunerősítő és roboráló hatása miatt az influenza megelőzésére és tüneteinek enyhítésére, illetve náthás megbetegedések kezelésekor alkalmazzák. Olaját érzékeny, sérült vagy rozáceára hajlamos bőrre ajánlják a szakemberek.

Kutatásunk célja volt, hogy az általunk begyűjtött 3 különböző érettségi csoportba sorolt csipkebogyómintákból kiderítsük, melyik érési fázisban a legoptimálisabb betakarítani a termést, vagyis mikor a legmagasabb a karotinoid-koncentráció. Ezenfelül célul tűztük ki, hogy beazonosítsuk a bogyóink által tartalmazott karotinoidokat, hogy összevethessük eredményeinket más szerzők által publikált adatokkal. Egy előre meghatározott eljárás alapján kivontuk bogyóinkból a karotinoidokat, majd azokat felszabadítottuk észtereikből az elszappanosítás során. Ezt követően minőségi meghatározást végeztünk HPLC-készülék segítségével. A mennyiségi meghatározást spektrofotométerrel végeztük. A kutatásban a bogyók szedésével, válogatásával, a karotinoidok extrakciójával és azok mennyiségi meghatározásához szükséges spektrofotometriás mérésekkel vettem részt.

Eredményeink az alábbiak:

HPLC-készülékkel 8 féle karotinoidot sikerült azonosítanunk: lutein, zeaxantin, α -kriptoxantin, α -karotin, β -karotin, (9Z)- β -karotin, likopin, (Z)-likopin. A mennyiségi meghatározás végeztével kiderült, hogy a legmagasabb érték az élénkpiros, érett gyümölcsökben van. A kissé éretlen bogyók ehhez képest 27%-kal, a túlérett bogyók pedig 15%-kal tartalmaztak kevesebb karotinoidot. A különböző érettségű bogyók karotinoid-összetétele nagymértékben nem tért el egymástól.

JÁVOR BÁLINT
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Tóth Tünde
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Golcs Ádám
egyetemi adjunktus, SE GYTK
Dr. Huszthy Péter
egyetemi tanár, BME VBK

Mikrotálca rendszeren alapuló, nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációs eljárás kidolgozás

Kulcsszavak: Enantiomerdúsítás; Szelektormolekula; Folyadékmembrán; HTS

Kutatómunkánk során olyan enantiomerelválasztási módszert terveztünk, amely hozzájárul az automatizált, kisléptékű, szintetikus módszerekkel előállított királis molekulák nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációjához. Könnyen hozzáférhető rezolválószeres lipofil észtereit állítottuk elő és folyadékmembránként használtuk őket egy mikrotálca indifferens PVDF polimerfelületén. A királis modellvegyületet racém keverékük vizes oldataiból kiindulva inkubáltuk ezáltal dúsítva az adott szelektormolekulából készített membrán által kevésbé preferált enantiomerjüket. Az enantiomerelválasztás azáltal következett be, hogy a folyadékmembránok belsejében a lipofil enantiomertiszta gazdamolekulák eltérő stabilitású diasztereomer koordinációs komplexeket képeztek a királis molekulák enantiomerjeivel. Ez az enantiomerfelismerés az előnyben részesített izomer nagyobb megoszlási arányát eredményezte a membránfázisban, így az eljárás lehetővé teszi a membránon kívül a kevésbé preferált konfigurációjú enantiomer felhalmozódását. Jelen dolgozat egy új, mikrotálccával integrált sztereoselektív membrándúsítási technikáról számol be, amely lehetővé teszi a rokon szerkezetű vegyületek preparatív lépték alatti párhuzamos, automatizálható enantiomerdúsítását.

KARVALY KRISZTIÁN MÁRK

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Bugyi Fanni

tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Dr. Turiák Lilla

tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK

Szilárdfázisú extrakciós (SPE) tisztítási módszerek optimalizálása kis mennyiségű komplex biológiai minták proteomikai és foszfoproteomikai alkalmazására

Kulcsszavak: szilárdfázisú extrakció, proteomika, foszfoproteomika, HPLC-MS, foszfopeptid

A fehérjék poszttranszlációs módosulásai (pl. foszforiláció) alapvetően meghatározzák a fehérjék funkcióit, így vizsgálatuk nélkülözhetetlen a biológiai folyamatok megértésében. Kis mennyiségű komplex biológiai minták vizsgálata során a nanoHPLC-MS/MS mérés előtt elengedhetetlen a minta tisztítása. Célunk olyan szilárdfázisú extrakciós (SPE) módszerek optimalizálása volt, melyek alkalmasak kis mennyiségű (0,5-1 µg) komplex biológiai minták peptidjeinek és foszfopeptidjeinek hatékony tisztítására.

A peptidok tisztítására alkalmas proteomikai SPE módszeroptimalizáláshoz HeLa sejtvonal triptikus emésztményét használtuk fel, mellyel 4 állófázis (Thermo C₁₈ Column és C₁₈ Spin Tips, Affinisep Disks Tips C₁₈ és Disks Tips HLB) és 5 oldószerrendszer kombinációjával összeállított 8 módszert hasonlítottunk össze. Módszerenként 5 párhuzamos mintát, és kontrollként 5 párhuzamos tisztítatlan mintát használtunk. A foszfopeptidek tisztítására alkalmas foszfoproteomikai módszeroptimalizáláshoz formalin-fixált paraffinba ágyazott tüdőrákos szövetet használtunk. A foszfopeptidek dúsítását követően a proteomikai módszerfejlesztéshez is használt 4 állófázis és 3 oldószerrendszer kombinációjával összeállított 5 SPE módszert hasonlítottunk össze, továbbá 5 párhuzamos tisztítatlan mintát alkalmaztunk kontrollként. A nanoHPLC-MS/MS mérést Waters nanoAcquity HPLC-vel kapcsolt Bruker Maxis II tömegspektrométerrel végeztük. A peptid/foszfopeptid és a fehérje azonosításához a Byonic szoftvert használtuk.

Mindkét optimalizálás során megvizsgáltuk a párhuzamosokban azonosított fehérjék, (foszfo)peptidek számának átlagát, a legalább egyszer azonosított (foszfo)peptidek számát, a foszforiláció helyének és számának eloszlását, valamint a (foszfo)peptidek hidrofobicitásának és savasságának eloszlását. A proteomikai módszeroptimalizálás során a legtöbb módszer hasonlóan teljesített. A legnagyobb hatékonyságot trifluoecetsavas mintafelviteli puffert és Affinisep Disks Tips C₁₈ állófázist használva érték el. Így 8,3%-kal több peptidet tudtunk azonosítani, mint a kontrollban. A foszfoproteomikai módszeroptimalizálás során a módszerek szelektivitása hasonlóan bizonyult, ugyanakkor a párhuzamosokban azonosított peptidok számának átlagát tekintve a Thermo Pierce C₁₈ Spin Tip bizonyult a leghatékonyabbnak, mellyel 21,2%-kal több foszfopeptidet tudtunk azonosítani a kontrollhoz képest.

Az optimalizált módszereket sikeresen alkalmaztuk prosztata szövetek mintaelőkészítéséhez proteomikai és foszfoproteomikai vizsgálat céljából.

KÁLLAI BALÁZS ZSOLT
Vegyésmérnöki mesterképzési szak
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Gyurcsányi E. Róbert
tanszékvezető egyetemi docens, BME VBK
Dr. Papp Soma
egyetemi adjunktus, BME VBK

Potenciometriás ionszelektív mikroelektrodok fejlesztése vízminták baktériumtartalmának meghatározására

Kulcsszavak: szenzor; elektrokémia; koliform; környezeti minták; E. coli

A különböző vízminták (felszíni vizek, esővizek) ionos összetételéhez számos fontos minőségi jellemző (pH, keménység, sótartalom és nitráttartalom) kapcsolható. A folyamatos monitorálás és mérés gyakorlatilag minden releváns ionra megvalósítható rendkívül költséghatékonyan és egyszerűen potenciometriásan ionszelektív elektrodokkal. Ugyanakkor a vizek egyéb minőségi jellemzőit, mint például a kiemelt jelentőségű bakteriális szennyezettség vizsgálatát a helyszínen jellemzően költségesen vagy relatíve hosszabb idő alatt (~ 48 óra) lehet meghatározni, tipikusan az ún. koliform baktériumok (pl. kólibaktérium - *Escherichia coli*) mennyiségének mérésén keresztül. Különösen előnyös lenne egy olyan multiplex mérési platform kialakítása, amely lehetővé teszi az ionos összetétellel kapcsolatos tulajdonságok mérése mellett a baktériumok gyors meghatározását is ionszelektív elektrodokkal. Ennek megfelelően kutatásom során célul tűztem ki az *E. coli* baktériumok potenciometriás detektálási lehetőségének vizsgálatát.

A koliform baktériumok esetén gyakran alkalmazott kimutatási technika a β -galaktozidáz (GAL) enzimtartalom mérése. Kutatómunkámban a GAL ezim méréséhez a 6,8-difluoro-4-metilumbelliferil- β -D-galaktopiranozid (DIFMUG) szubsztrátot választottam, amelyből az enzim hatására olyan lipofil anion keletkezik, amely szelektíven meghatározható potenciometriás anioncserélő elektróddal hidrofil szerves anionok jelenlétében is.

Első lépésben anionszelektív elektrodokat fejlesztettem, hogy alkalmazhatóak legyenek az enzimreakcióban keletkezett DIFMU anionok mérésére. Az anionszelektív membrán összetételének optimalizálását követően az ionszelektív elektrodok miniaturizálását dolgoztam ki, ami lehetővé tette, hogy a méréseket rendkívül kis mintatérfogatban (~ 200 μ l) végezhessem. A mikroelektrodok lehetőséget adtak az enzimreakciók folyamatos időbeli nyomon követésére is és alkalmasak voltak β -galaktozidáz tartalmú oldatokban az enzim aktivitás meghatározására akár 0,02 mU szintig. Ezt követően valós baktérium mintákon teszteltem a rendszert. Az enzimaktivitás méréséhez ki kellett dolgoznom a baktériumok lizálását oly módon, hogy az megvalósítható legyen helyszíni mérés során, valamint kompatibilis legyen a potenciometriás mérési módszerrel. A lízis optimalizálását követően a mikroelektrodokat sikerrel alkalmaztam baktériumok jelenlétének kimutatására valós *E. coli* mintából, valamint egy kereskedelmi forgalomban kapható probiotikumból (LXR Mikrobiom Komplex kapszula) is.

KISS BEATRIX
Biomérnök
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Járvás Gábor
tudományos főmunkatárs, PE MK
Török Rebeka
szakmai asszisztens, PE MK

Agyszövet N-glikozilációjának vizsgálata kapilláris elektroforézissel

Kulcsszavak: N-glikán; Alzheimer-kór; biomarker; kapilláris elektroforézis; humán agyszövet

Napjainkban egyre nagyobb szerepet kapnak a különböző megbetegedések korai felismerésére és kezelésére alkalmas vizsgálati módszerek. Ehhez olyan biokémiai jelzőanyagokra van szükség, amelyekkel pontosan meghatározhatók az eltérő betegségek és azok különböző klinikai stádiumai. Az 1960-as évek óta a glikánok, mint biomarkerek fontos szerepet játszanak a diagnosztikai kutatásokban, mint például a daganatos megbetegedések (prosztatarák), a gyulladáshoz vezető folyamatok (diabétesz), és a neurológiai betegségek esetében. Ez utóbbi, azaz a neuropszichiátria problémák jelentős betegellátási költséget (hosszú távú kezelési és rehabilitációs terhet) jelentenek az egészségügyi rendszerre világszerte. A World Health Organization (WHO) adatai alapján közelítőleg 55 millió ember szenved demenciában. A betegség progresszív jellegű, tehát az öregedő népességgel arányosan várhatóan egyre gyakoribb lesz a jövőben. A demencia egyik leggyakoribb formája az Alzheimer-kór, mely körülbelül 60-70%-a az összes demenciás esetnek. Munkám során különböző neuropszichiátriai rendellenességben elhunyt páciensek autopsziás agymintáiból, - mint például demencia, schizofrenia és depresszió - származó szövetek glikán profilját analizálom lézer indukált fluoreszcens detektálással kapcsolt kapilláris elektroforézis (CE-LIF) módszerrel. Ezáltal releváns képet kaphatok az agyszövet különböző területeire specifikus cukorszerkezetekről, amely segítségével nagy felbontással, úgynevezett glikán mapping megközelítésben feltérképezhetjük az agyszövet szénhidrát profilját. Kutatásom első lépésében sertés agyszövet N-glikán profilját vizsgáltam, amely során optimalizáltam a mintaelőkészítési paramétereket, különös tekintettel a zsírtalanítási lépések megvalósítására, a mintaelőkészítési protokoll reprodukálhatóságára és robusztusságára a minták esetén. Munkám további célja, hogy a humán agyszöveteket az általam optimalizált módszerrel feldolgozzam és a kapott információk alapján specifikus glikomikai térképet hozzak létre a különböző neurológiai betegségekhez kapcsolódva, hangsúlyt helyezve az Alzheimer-kórra. További célunk, hogy egy olyan klinikailag releváns adatbázist hozzunk létre, mellyel glikomikai szempontból nyernénk betekintést a humán agy molekuláris folyamataiba. Ezzel lehetőséget teremtünk új biomarkerek azonosítására, amelyek a jövőben hozzájárulhatnak a neurológiai betegségek, például az Alzheimer-kór korai diagnosztizálásához és potenciálisan új terápiás megközelítések fejlesztéséhez.

KIS-TÓT BÁLINT
Biomérnöki
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Tóth Tünde
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Golcs Ádám
posztdoktor, BME VBK

Kovalensen módosított mikrotálca alapú fluoreszcens optoszenzor fejlesztése cink- és ólomionok nagy áteresztőképességű analizésére

Kulcsszavak: UV-elnyelés; kémiai érzékelés; mikrotálca; cink; ólom

A Zn^{2+} -ionok nagy jelentőséggel bírnak mind a környezet, mind az élő szervezetek számára. Az Pb^{2+} -ionok mellett ugyanezen területeken komoly veszélyt jelentenek erős toxicitásuk miatt. Dolgozatomban bemutatok egy nagy áteresztőképességű optokémiai módszert ezen ionok környezeti- és szennyvízmintákból történő kimutatására. Ezentúl bemutatásra kerül egy új és általánosan alkalmazható 3 lépéses eljárás mikrotálcák kémiai funkcionálizálására, mely atmoszférikus plazmakezelést, linkermolekula rögzítést és fotokatalitikus kopolimerizációt foglal magába. A kereskedelmi forgalomban elérhető 96 cellás cikloolefin kopolimer mikrotálcák felületét elsőként atmoszférikus levegő-plazmával polarizáltam, majd a cellák aljára metakrilát tartalmú monomolekuláris réteget vittem fel. Utolsó lépésként az előzetesen kezelt cellákba fotokatalitikus polimerizációval bisz(akridino)-koronaéter típusú szenzormolekulát rögzítettem kovalens kötéssel keresztül. Az elkészült optoszenzor eszköz típustól függetlenül alkalmazható mikrotálca olvasókban, valamint integrálható bármely automatizált folyadékkezelő platformmal és lehetőséget teremt óránként több, mint ezer minta monitorozására, mindössze 20 μ l mintaigény mellett, Zn^{2+} - és Pb^{2+} -ionok esetében rendre $8,0 \times 10^{-9}$ és $3,0 \times 10^{-8}$ mol/dm³ kimutatási határérték felett.

LEMLE ÁKOS
vegyész
MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Hidvégi Előd
osztályvezető, Nemzeti Szakértői és Kutató Központ
Dr. Vasanits Anikó Éva
egyetemi adjunktus, ELTE TTK

Method development for the simultaneous identification of acidic and basic drugs of abuse in blood

Kulcsszavak: kábítószeres, módszerfejlesztés, GC-MS, származékképzés, kvantitatív

Some people use illegal drugs to cope with their discomfort, which often leads to more problems rather than solving them. Therefore, it is crucial to prevent drug abuse and help people address their underlying problems. Illicit drug identification and quantification are typically performed using instrumental analysis, which traditionally requires lengthy sample preparation.

In my research, I developed a Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS) method that can simultaneously identify acidic and basic drugs of abuse in blood samples. For derivatization, isobutyl chloroformate was used, which can react with the analytes in an aqueous matrix, allowing efficient extraction of the derivatized components without the need for solid-phase extraction. The method was developed for the determination of THC and its two metabolites (THC-OH and THC-COOH), as well as some of the most common stimulants: N-ethyl-norpentadron, N-ethyl-norpentadrol, amphetamine, methamphetamine, MDA, MDMA, mephedrone, and 3-CMC. The retention times and specific fragments were determined, and after numerous experiments, an optimal sample preparation method was established.

The quantitative capabilities of the method were evaluated through calibration curves, stability testing, and repeatability assessments. Blood samples from detained individuals were analyzed using this procedure, and the results were compared with official results determined by experts at the Hungarian Institute for Forensic Sciences.

The study demonstrated that the carboxylic group of THC-COOH can be derivatized in two ways: in an ester form and an anhydride form, depending on the catalyst. Through two-step derivatization, it can also be transformed into an amide group.

The method meets several general analytical criteria. The calibration curves exhibit the required correlation coefficients with no more than two outlier points, and the LOD values are sufficient for all the compounds except N-ethyl-norpentadrol.

Future work will focus on improving the repeatability of parallel samples and conducting simultaneous sample preparations using both the developed method and officially used procedures to obtain comparable results.

MÁRKUS ESZTER
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Hirsch Edit
tudományos munkatárs, BME VBK

Ioncserés kromatográfiás oszlopok minősítése és adalimumab fehérje tisztításának optimalizálása

Kulcsszavak: monoklonális antitest; módszerfejlesztés; downstream; ioncserés kromatográfia

Az antitestek olyan fehérjemolekulák, amelyeket az immunrendszer termel annak érdekében, hogy felismerje és elősegítse az idegen anyagok (antigén) eltávolítását a szervezetből, amely lehet baktérium, vírus vagy toxin. Az első monoklonális antitestet tartalmazó készítmény forgalmazását 1986-ban hagyta jóvá az Amerikai Gyógyszerhatóság, amelyet számos területen sikerrel alkalmaztak, mint például szív- és érrendszeri, légzőrendszeri, rákos megbetegedésekre, illetve asztma kezelésére is.

A humán szervezetben alkalmazható biogyógyszereknek kiemelten magas tisztasági követelményeknek kell megfelelniük, az esetleges mellékhatások elkerülése érdekében. A tisztítási folyamat hatékonyságának javítása érdekében új típusú ioncserés kromatográfiás oszlopok kerülnek forgalomba, amelyek optimális vizsgálati módszerei még nem kidolgozottak, ezért szükséges ezen oszlopokat alkalmazó analitikai módszer fejlesztése. Ezért munkám célja egy hatékony anioncserés kromatográfiás módszer kidolgozása volt az Adalimumab antitestek tisztítására. Először a minta pH-ját, az elúció mennyiségének optimalizálását végeztem el, amelyek alapján meghatároztam a megfelelő módszert a három pH-n is vizsgált sógradiens optimalizálásához. Megvizsgáltam különböző beállítási paraméterekkel végzett tisztítások során gyűjtött minták fehérjetartalmát, méreteloszlását, valamint szennyezők mennyiségének meghatározását. Az eredmények alapján sikerült egy optimális anioncserés kromatográfiás módszert kifejlesztenem, amely biztosítja a megfelelő fehérjekoncentrációt, miközben jelentősen csökkenti a szennyezők mennyiségét. Az általam kifejlesztett módszer lehetőséget biztosít a biogyógyszerek tisztításának hatékonyabbá tételére, ezáltal növelve a gyártási folyamat megbízhatóságát és biztonságát, hozzájárulva a humán alkalmazásra szánt készítmények minőségének javításához.

MEZEY KINGA - NOÉMI

Kémia

BSc, 5. félév

Babeş-Bolyai Tudományegyetem

Témavezető:

*Dr. Muntean Norbert - Thomas
egyetemi adjunktus, RO BBTE*

UV-sugárzás elleni védelem: A fényvédők elemzése spektrofotometriás módszerrel

Kulcsszavak: spektrofotometria; UV-sugárzás; fényvédő termékek; UV szűrők;

A bőr termális szabályozóként működik. Az UV-sugárzás károsíthatja a bőrt felépítő struktúrákat. Több mint egy évszázada fényvédő krémeket használunk az UV-sugárzás elleni védelemre. Két típusú fényvédő létezik. A kémiai fényvédő, mely szerves UV-szűrőket (pl. avobenzon, benzofenon) és oktokrilént tartalmaz, ezek bejuthatnak a véráramba lipofil jellemük miatt. A második a fizikai vagy ásványi fényvédő, mely jellemzően szervesetlen UV szűrőket (pl. TiO_2 , ZnO) tartalmaz, amelyek visszaverik és szétszórják a napfényt. A kutatás témája a naptejek és napolajok UV védő hatásának vizsgálata spektrofotometriás módszerek segítségével, kvantitatív és kvalitatív jellemzőket megfigyelve. A téma aktualitását az egyre gyakoribb, a Nap UV sugarai miatt kialakuló betegségek szolgáltatják, legyenek ezek a használatuk hiánya által okozva (melanoma, napfoltok, ráncosodás) vagy a használatuk által kialakulva (komponensek felhalmozódása miatti allergia, fotoszenzitivitás). A kutatás által felhívjuk a figyelmet a megfelelő napvédő használatára a minden napokban. A Nap visszafordíthatatlan károsodást okozhat a népesség bőrében, súlyos betegségeket tudnánk megelőzni, ha szélesebb körökben lenne ismert a fényvédők hatékonysága. A legelső naptej 1932-ben látott napvilágot, H.A. Milton Blake alkotta fenil-szalicilát 10%-os koncentrációjú UV-szűrő alkalmazásával. Azóta sokat fejlődtek a napvédők formulái, kijáratlan kutatási utakat jelent hogyan mérhetjük hatékonyságát in vitro, etikailag korrekt módszerekkel. A cél egy olyan in-vitro módszert kidolgozni, amellyel egyértelműen lehet sorrendet felállítani a különböző termékek hatékonysága között.

MOLNÁR ALEXANDRA
Vegyésmérnök MSc
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Turiák Lilla
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK
Balbisi Mirjam
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Alternatív proteomikai mintaelőkészítési módszerek különböző biológiai minták vizsgálatához

Kulcsszavak: fehérje; peptid; HPLC-MS/MS; módszerfejlesztés; paramágneses gyöngyök

A proteomika a biológiai rendszerek fehérjekészletének átfogó vizsgálatával foglalkozó tudomány, és célja a fehérjék szerkezetének, funkcióinak és biológiai rendszerek irányításában betöltött szerepének vizsgálata. Egy sikeres proteomikai vizsgálat kivitelezéséhez a teljes munkafolyamat optimalizálása szükséges. Ennek elengedhetetlen része többek között a megfelelő mintaelőkészítési módszerek alkalmazása, OTDK munkám során mintaelőkészítési módszerek tesztelésével foglalkoztam.

A proteomikai mintaelőkészítések általános problémái, hogy az elterjedten alkalmazott oldatban történő tripszines emésztés, majd C_{18} oszlopon történő tisztítás összetett többlépéses folyamat, mely időigényes és jelentős mintavesztéssel járhat. Ígéretes alternatívát nyújtanak az irodalomban található egy edényben történő mintaelőkészítések, melyek közül az SP3 és az SP2 paramágneses gyöngyök használatán, az SP4 oldószeres kicsapáson alapul, azonban ezen módszereknek is vannak korlátai.

A kutatómunkám célja volt, hogy eltérő biológiai eredetű minták (sejtlizátum, vérplazma, membrán és szövet) proteomikai elemzése teszteljem az SP2, SP3 és SP4 módszereket, valamint két saját fejlesztésű módszert (SPy és SPx), és összehasonlítsam az általánosan használt mintaelőkészítési eljárással. A mérések kiértékelése során elemeztem az egyes módszerekkel azonosított peptidek és fehérjék számát, vizsgáltam a protokollok szelektivitását a fehérjék/peptidek izoelektromospontja, mérete és hidrofilitása szerint, valamint tanulmányoztam a fehérjék relatív mennyiségeit a referencia eljáráshoz (C_{18}) képest.

Az eredmények alapján azok a következtetések vonhatók le, hogy az eltérő típusú biológiai minták esetében különböző módszerek szolgáltatták a legtöbb azonosított fehérjét és peptidet. Azonban egy protokoll jósága csupán a fehérjeszám alapján nem eldönthető, fontos megvizsgálni többek a kromatogramok tisztaságát, és értékelní a módszerek időhatékonyságát és gazdaságosságát. A dolgozatban tárgyalt eljárások közül a saját fejlesztésű SPy módszer bizonyult optimálisnak a legtöbb biológiai minta proteomikai célú feldolgozására. Mivel a módszer nem csak egyszerűbb és költséghatékonyabb alternatívát kínál a hagyományos, oldatban történő tripszines emésztésen és C_{18} tisztítási protokollon alapuló mintaelőkészítéshez képest, de hozzájárulhat bizonyos biológiai minták proteomjának részletesebb feltérképezéséhez, és a bennük lezajló sejtbiológiai/biokémiai folyamatok mélyebb megértéséhez.

SEBŐK NOÉMI REGINA
Biológus
MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:
Dr. Szekeres András
egyetemi docens, SZTE TTIK

Sterigmatocisztin tisztítása új, költséghatékony elválasztástechnikai módszerrel

Kulcsszavak: Mikotoxin, Aspergillus creber, folyadék-folyadék kromatográfia, CPC, rizs

A sterigmatocisztin egy poliketid mikotoxin, melyet az *Aspergillus* nemzetségbe tartozó fonalas gombák termelnek. A nemzetségnek tagjai széleskörben ismertek kozmopolita elterjedésük miatt, valamint élelmiszeripari, biotechnológiai hasznosíthatóságuk révén. Az általuk termelt mikotoxinok azonban jelentős élelmiszerbiztonsági és egészségügyi kockázatot is jelentenek. Ezen kockázatok felméréséhez, továbbá a kimutatásukhoz jelentős mennyiségű és nagy tisztaságú vegyületekre van szükség, melyet főként a gombatenyészetek fermentumából érdemes kinyerni. Kutatásaink során egy olyan új, folyadék-folyadék kromatográfias alapú módszeregyüttes kidolgozását valósítottuk meg, mely segítségével lehetőség nyílik a sterigmatocisztin nagy mennyiségű, tiszta formában történő előállítására. Az eddig ismert sterigmatocisztin termelők közül az *A. creber* fajok képviselői szintetizálják legnagyobb mennyiségben ezt a mikotoxint, ezért a termeltetést egy ebbe a fajba tartozó törzssel végeztük szilárd fázisú fermentációval. A vegyület kimutatásához HPLC-UV módszert fejlesztettünk, melyet eredményesen alkalmaztunk az extrakciók optimalizálásához, az oldószerrendszerek tesztelésének folyamatában csakúgy, mint a folyadék-folyadék kromatográfias frakcionálás nyomon követéséhez. A kifejlesztett többlépcsős tisztítási eljárás két oldószeres extrakcióval indul, melyet két folyadék-folyadék kromatográfias elválasztás követ. A kiindulási nyers extraktumban a vegyület területszázalékos aránya a HPLC-UV mérések alapján 1% alatti volt, míg a végső tisztított frakciók 60% feletti feldúsulást mutattak. A vegyületek azonosítását és tisztaság-ellenőrzését a tisztítási folyamatot követően HPLC-MS mérésekkel is ellenőriztük. A fejlesztett módszer előnye, hogy a célvegyület elválasztása gyorsabban, és a folyadék állófázisnak köszönhetően költséghatékonyabban megvalósítható a szilárd fázisú módszerekhez képest.

UJVÁRI KAMILLA
Vegyésmérnök MSc
MSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Szigyártó Imola Csilla
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Beke- Somfai Tamás
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK

A biofilm képződésben szerepet játszó jelátvivőmolekulák antimikrobiális peptidekkel képzett szupramolekuláris asszociátumai

Kulcsszavak: biofilm képződés; quorum érzékelés; antimikrobiális rezisztencia; antimikrobiális peptidek; cirkuláris dikroizmus spektroszkópia

Az antibiotikum rezisztens kórokozók egyre nagyobb veszélyt jelentenek nemcsak az emberi egészségre nézve, hanem a teljes élővilágra. A szakértők szerint 2050-re az antibiotikum rezisztencia lesz a vezető halálozási ok, évente akár 10 millió halálesetet okozva.^[1] A bakteriális fertőzések jelentős hányadánál biofilm képződés is fellép, ami nehezebben kezelhetővé teszi a fertőzést, valamint elősegíti a rezisztencia kialakulását.^[2] Az antimikrobiális peptidek használata ígéretes megközelítést jelenthetnek a biofilmmel kapcsolatos fertőzések kezelésére, a sejtek közti kommunikáció megakadályozásával. Ezt a kommunikációs folyamatot quorum érzékelésnek (QS) nevezzük, melynek során a baktériumok jelátvivő molekulákkal képesek szabályozni a biofilm méretét, az alkotó sejtek fenotípusát, a populáció számot és virulencia faktorokat. Elővizsgálatainkban kimutattuk, hogy a humán LL-37 antimikrobiális peptid komplexet képez a pszeudo-kinolon jelzőmolekulával (PQS).^[3] Vizsgálatainkat kiegészítettük további természetes és mesterséges eredetű membránaktív peptid és QS-ben szerepet játszó jelzőmolekulák kölcsönhatásának tanulmányozásával. A jelátvivő molekulák királis asszociátumokat képeztek a peptidekkel, melynek jellemzésére cirkuláris dikroizmust és infravörös spektroszkópiát, valamint az aggregátumok jelenlétének bizonyítására dinamikus fényszórást és transzmissziós elektronmikroszkópiát alkalmaztunk. Az ígéretes kombinációkat említsük és baktérium sejtmembrán modelleken tovább vizsgáltuk a biofilm átjárhatóság mechanizmusának megértésére. Vizsgálataink során azt találtuk, hogy a PQS királis aggregátumokat képez az FK-16 és Dhvar4 peptiddel is. Háromkomponensű rendszerek esetén az indukált jel szintén kialakul, de annak intenzitását az összekeverés sorrendje befolyásolja.

Referenciák:

¹ Murray, C. J., Ikuta, K. S., Sharara, F., et.al, (2022). Global burden of bacterial antimicrobial resistance in 2019: a systematic analysis. *The Lancet*, 399(10325), 629–655.

[https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(21\)02724-0](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(21)02724-0)

² Galdiero, E., Lombardi, L., Falanga, A., et.al, (2019). Biofilms: Novel strategies based on antimicrobial peptides. In *Pharmaceutics* (Vol. 11, Issue 7). MDPI AG.

<https://doi.org/10.3390/pharmaceutics11070322>

³ Zsila, F., Ricci, M., Szigyártó, I. C. et.al, (2021). Quorum Sensing Pseudomonas Quinolone Signal Forms Chiral Supramolecular Assemblies With the Host Defense Peptide LL-37. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 8. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2021.742023>

VERÉB ZSOLT
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyésmérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Fejes Zsolt
egyetemi docens, ME AVK
Dr. Mentés Dóra
tudományos munkatárs, ME AVK

Antioxidánsok és bomlástermékeik kimutatása folyadékkromatográfiai módszerrel étolajból

Kulcsszavak: antioxidáns, HPLC, bomlás vizsgálat, mintaelőkészítés, étolaj

Tudományos diákköri munkám során étolaj antioxidáns tartalmának meghatározására alkalmas mintaelőkészítési módszert dolgoztam ki, amelyben a vonatkozó szabvány által előírt klasszikus extrakciós technika helyett egy kevésbé idő- és oldószerigényes, ultrahangos–centrifugás extrakciós módszert alkalmaztam. A kísérletek során három különböző extrahálószer hatékonyságát is megvizsgáltam. A módszer reprodukálhatósága a hat vizsgált antioxidáns, valamint a vizsgált két bomlástermék esetében is elfogadható. A visszanyerési értékek egyes komponensek esetében nem bizonyultak kielégítőnek, viszont a jó reprodukálhatóság szorzófaktorok alkalmazását teszi lehetővé a kiértékeléskor. A munka folyamán összehasonlítottam kétféle antioxidáns (BHT és TBHQ) termikus és fotostabilitását is, étolajban. Ezen mérések során is a mennyiségi meghatározást az általam kifejlesztett ultrahangos–centrifugás módszerrel végeztem. A bomlásvizsgálat eredményei azt mutatták, hogy a BHT fényre kisebb mértékben érzékeny, mint a TBHQ, és hő hatására is kevésbé gyorsan kezd bomlani.

Anyagtudomány

BUKTA BALÁZS JÓZSEF
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők:
Dr. Herman Petra
egyetemi adjunktus, DE TTK
Dr. Kalmár József
egyetemi docens, DE TTK

Rezorcín-formaldehid alapú aerogélek arany vegyületek szelektív megkötésére

Kulcsszavak: aranyvisszanyerés; aerogél; szorpció; rezorcín-formaldehid; zselatin

A kutatómunkám során zselatintartalmú rezorcín-formaldehid aerogéleket fejlesztettem, amelyek kiemelkedő szelektivitással és nagy szorpciós kapacitással képesek Au(III)-ionokat kötni vizes közegben. A szintetizált aerogélek szerkezetét és szorpciós tulajdonságait részletesen vizsgáltam. A SEM-felvételek szerint az aerogél vázát 200-400 nm-es gömb alakú részecskék alkotják. Az FT-IR mérések során készített spektrumok alapján azonosítottam a rezorcín-formaldehid alapvázra és a zselatinra jellemző sávokat, amelyek a szintézis sikerességét igazolták.

Az Au(III)-ionok iránti affinitást kevert reaktoros kísérletekkel igazoltam, az elemkoncentrációk pontos meghatározását ICP-OES technikával végeztem. Kísérleteim szerint a zselatin-tartalmú aerogélek kiváló szelektivitást mutatnak az Au(III)-ionok iránt 11 másik fémion jelenlétében is, pH=2,0 értéken. A Langmuir-modell illesztésével kapott szorpciós kapacitás a legnagyobb megkötési affinitással rendelkező aerogél esetében $S = 672 \pm 14$ mg/g-nak adódott. Kinetikai mérések alapján több kötőhely meglétét feltételezem, ugyanis egy kezdeti gyors szakaszt követően viszonylag lassú növekedést figyeltem meg a szorbeált Au(III) mennyiségében. Igazoltam, hogy a 2-es körüli pH a leginkább optimális az Au(III) megkötésére, valamint a hőmérséklet növelésével arányosan nő a megkötött Au(III) mennyisége.

FT-IR méréseket végeztem a kötési mechanizmus vizsgálatára. A spektrumokban történő változások alapján arra következtettem, hogy a zselatin aminosav oldalláncainak amid kötései, valamint az RF-váz fenolos -OH csoportjai együttesen játszanak szerepet az Au(III) megkötésében. Spektrofluorimetria mérésekkel bizonyítottam, hogy a rezorcín-formaldehid alapú aerogélek nagy intenzitással fluoreszkálnak 200 nm-es gerjesztés mellett. Igazoltam, hogy az Au(III)-ionok megkötését követően a kibocsátott fluoreszcencia intenzitás egyre csökken a kontaktidő elteltével, tehát az Au(III)-ionok megkötődése fluoreszcencia kioltást eredményez. Az eredményeim megmutatták, hogy viszonylag kis Au(III) koncentráció (kb. 50 mg/l) már elegendő a fluoreszcencia teljes kioltásához, amiből arra következtettem, hogy a fluoreszcencia-kioltásért felelős kötőhelyekből kevesebb áll rendelkezésre.

Összességében a zselatin-tartalmú rezorcín-formaldehid aerogélek kiválóan alkalmasak Au(III)-ionok szelektív és nagy kapacitású megkötésére vizes oldatokból, lehetőséget teremtve az arany visszanyerésére és a hulladékból termelésbe történő visszaforgatására.

(Gua)₃Cu₂I₅ vékonyrétegek fényemissziós sajátosságainak vizsgálata

Kulcsszavak: szerves-szervetlen réz-halogenid; lumineszcencia; termokromizmus; optoelektronika; sáv szerkezet

A nulladimenziós szerkezetű, háromkomponensű, réz-halogenid szerkezeti motívumokat tartalmazó vegyületek változatos összetétellel rendelkező félvezető anyagok. A pszeudo-perovszkitok anyagcsaládjába tartozó $A_3Cu_2I_5$ (ahol A: egyértékű szerves vagy szervetlen kation) összetételű anyagok kedvező fénykibocsátási tulajdonságaik (nagy kvantumhatásfok, elhanyagolható önabszorpció), valamint környezeti tényezőkkel szemben mutatott stabilitásuk miatt különböző optoelektronikai alkalmazásokban (fotodetektorok, fénykibocsátó diódák, töltéssel rendelkező részecske- vagy röntgenszcintillátorok) kerülnek felhasználásra. A jelenlegi kutatások középpontjában a szerves-szervetlen kationt vegyesen tartalmazó vegyületek is egyre növekvő figyelmet kapnak. A hibrid vegyületek esetén a réz-halogenidek kristályrácsába megfelelő méretű, egyszerűen pozitív töltésű szerves kationok beépítésével lehetőség adódik a különböző optoelektronikai sajátosságok finomhangolására.

Munkánk során guanidínium-réz-jodid ((Gua)₃Cu₂I₅) pszeudo-perovszkit, vékonyrétegeket állítottuk elő oldatporlasztásos technikával. A rétegek minőségéről, homogenitásáról és felületi érdességéről profilometria és optikai mikroszkópos felvételekkel nyertünk információt. Az anyagtudományi karakterizáláshoz Raman spektroszkópiát és röntgen-diffrakciós méréseket végeztünk. Az így előállított vékonyrétegek esetén termokromizmus jelenségét figyeltük meg, melyet az anyag két különböző kristályszerkezetével lehet magyarázni. Az „alfa” (kék emitter) vagy „béta” (sárga emitter) kristályszerkezetű (Gua)₃Cu₂I₅ kialakulását a szintézis körülményeinek megfelelő megválasztásával kontrolláltuk, így mindkét módosulat esetén sikeresen állítottunk elő nagy kvantumhatásfokkal rendelkező vékonyrétegeket. A fényemissziós tulajdonságok jellemzéséhez meghatároztuk a vékonyrétegek abszolút kvantumhatásfokát, rögzítettünk statikus fotolumineszcenciás spektrumaikat és megvizsgáltuk a fényemissziós folyamatok élettartamát. A fotolumineszcencia élettartamának hullámhossz függéséből pedig sikeresen meghatároztuk az öncsapdázott exciton emissziós energiaszintek relatív tiltottsávbeli pozícióját.

ECSÉDI BERTOLD
Vegyész MSc
MSc, 1. félév

Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető:
Dr. Kalmár József
egyetemi docens, DE TTK

Poliimid aerogélek hidratációjának vizsgálata

Kulcsszavak: polimer; nedvesedés; NMR spektroszkópia; karakterizálás

Kutatómunkám során két hasonló kémiai szerkezetű és hasonló fizikai tulajdonságokkal rendelkező, térhálósított, poliimid alapú aerogél (PI1 és PI2) nedvesedését vizsgáltam különböző NMR technikák segítségével. A hidratáció vizsgálata mellett a száraz aerogélek jellemzését is bemutattam, amit kutatócsoportunk más tagjai végeztek el.

Az aerogélek karakterizálása során FT-IR spektroszkópiás mérések segítségével megbizonyosodtunk az előállított anyagok kémiai szerkezetéről. Pásztázó elektronmikroszkópiás felvételeket készítettünk az aerogélek felszínéről, illetve N₂ szorpciós porozimetria segítségével meghatároztuk ezen anyagok fajlagos felületét és pórusméret-eloszlását. Az elvégzett vizsgálatok azt mutatták, hogy ezek szálas szerkezetű, pórusos anyagok.

¹H MAS NMR és ¹³C CP-MAS NMR mérések segítségével megállapítottuk, hogy víz hatására a PI1 aerogélt alkotó polimerszálak konformációja kismértékben megváltozik. A PI2 aerogél esetén hasonló molekuláris változásokra utaló jelet nem tapasztaltunk. Ezt a különbséget a keresztükötő anyagok kémiai összetételükben megnyilvánuló eltérések okozzák.

Az NMR relaxometriás vizsgálatok azt bizonyítják, hogy a két aerogél hidratációja között nincs jelentős különbség. A vízmolekulák egy kis hányada először a nanoszálakba oldódik. Már kis víztartalomnál a vízmolekulák elkezdik beborítani a nanoszálak felszínét. Végül a fókuszpontokban nanométeres cseppek jelennek meg.

Az NMR diffúziometriás mérések során meghatároztuk a pórusok különböző részeiben található vízmolekulák diffúziós együtthatóját. A PI1 aerogél esetén külön-külön láthatók a nanoszálak felszínén és a cseppeket alkotó vízmolekulák diffúziós állandói. Azonban a PI2 aerogél esetén csupán ezek átlagát tudtuk detektálni.

Végül NMR krio-porozimetria segítségével meghatároztuk a nedves aerogélekben található vízcseppek alakját és méreteloszlását. A PI1 aerogél pórusaiban fellelhető nanocseppek gömbszerű geometriával rendelkeznek. Ezzel ellentétben a PI2 aerogélben található cseppek alakja kis víztartalom esetén hengeres, míg nagyobb víztartalom esetén a gömbszerű, illetve hasábszerű cseppek is megjelennek. A vízcseppek méreteloszlása is azt mutatja, hogy a PI1 aerogél makro-, a PI2 aerogél mezopórusos anyag.

Víz hatására a PI2 aerogél nem megy keresztül jelentős morfológia változásokon, míg a PI1 aerogél szerkezete kismértékű változásokon megy keresztül, ami a molekuláris szerkezet ugyancsak kismértékű megváltozásával összhangban történik.

FÜLÖP HENRIK
Gyógyszerész
Osztatlan, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:
Dr. Haspel Henrik
tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK

**Termikus bontással előállított fémtartalmú nanoszerkezet ezüst-koordinációs polimerből
kiindulva: A kialakulás vizsgálata in-situ technikákkal**

Kulcsszavak: koordinációs polimer; szerves fémkoordinációs vázszerkezet, termikus bomlás; katalizátor; in-situ vizsgálati technikák

A szerves fémkoordinációs vázszerkezetek háromdimenziós térhálói potenciálisan felhasználhatók katalizátorként, illetve katalizátorok prekurzoraiként (Metal Organic Framework, MOF). A munkám során egy ezüsttartalmú koordinációs polimert (Ag Coordination Polymer, Ag-CP) állítottam elő. Az Ag-CP kristályok termikus átalakulását követtem inert és redukzív környezetben termikus módszerekkel és in-situ anyagvizsgáló technikákkal. Termogravimetriás (TG) és differenciális pásztázó kalorimetriás (DSC) mérésekkel vizsgáltuk az anyag termikus stabilitását és az átalakulás egyes lépéseinek hőmérsékletét. Megállapítottuk, hogy a bomlás két lépésben megy végbe, és bár a bomlási lépések közötti hőmérséklet-különbség nem, maguk az átalakulási hőmérsékletek függenek az alkalmazott atmoszférától. Hidrogéntartalmú redukzív atmoszférában a bomlás közel 30°C-kal alacsonyabb hőmérsékleteken következik be. Az in-situ Raman-spektroszkópiás és in-situ röntgendiffrakciós (XRD) vizsgálatokkal részletesebb képet nyertünk a szerkezet lebomlásáról, valamint a kristályos fázis átalakulásáról. A kiindulási kristályok és a termikus bomlás során kialakult ezüstréteg morfológiáját pásztázó elektronmikroszkópiával vizsgáltuk (SEM). A kezdeti szálas morfológiájú Ag-CP-ből nagyfelületű pelyhes, pórusos ezüstréteg alakult ki.

JANIK BENCE BOTOND

Anyagmérnök

BSc, 6. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

Témavezető:

*Dr. Vágvölgyi Veronika
egyetemi docens, PE MK*

Agyagásvány - vegyes fém-oxid kompozitok előállítása és felületi tulajdonságaik

Kulcsszavak: Fotokatalízis; Agyagásvány; Vegyes-oxid; Kompozit; Katalizátor

Mai világunkban jelentős probléma vizeink szennyezettsége. A vizek tisztítása nehéz folyamat, különösképpen a tisztítási folyamat során hátramaradó szerves szennyezők miatt. Ezek a szennyezők eltávolítása extra lépéseket követel, amire környezetbarát megoldást jelenthetnek a természetes forrásból származó agyagásvány katalizátorok. A halloysit és kaolinit jelentős mennyiségben kerül felhasználásra ipari területeken, aminek háttérében kedvező kémiai, illetve fizikai tulajdonságai állnak akár fejlesztési alapként való használatra is. Kutatásom célja, hogy egy korábban elkezdett munkában meghatározott felületmódosító fém-oxid arány mellett (10% CuO – 90% ZnO) az optimális halloysit-felületmódosító arányt meghatározzam. Ehhez különböző arányú halloysit adagolást alkalmaztam (30% - 40% - 50% - 60%) A felhasznált anyagrendszer halloysit hordozóra felvitt ZnO/CuO vegyesoxid felületmódosító. A vegyesoxid kialakítása közvetlenül a halloysit felületén történt meg csapadékképzéses eljárással nitrát prekursor sókból lúgos közegben. Munkám során különböző összetételben állítottam elő katalizátorokat, valamint az elkészült minták fotokatalitikus aktivitását kumarin gyökbefogó segítségével emissziós spektrofotométerrel, termikus stabilitását termogravimetriával, a preparátum tisztaságát, valamint a tervezett vegyesoxidok kialakulását röntgendiffrakcióval és a kompozitok fajlagos felületét nitrogén-abszorpciós (BET) módszerrel mértem. Kísérletet tettem az optimális összetételű halloysit-vegyesoxid rendszer meghatározására, ahol a célfüggvény nem csak a nagyobb bontási hatékonyság, de a jobb pórusszerkezet, és oxid diszperzitás.

KÓNYA ZSUZSANNA

kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Szilágyi István

egyetemi docens, SZTE TTIK

Szerlauth Adél

PhD hallgató, SZTE TTIK

Réteges kettős hidroxid-alapú multifunkcionális nanokompozitok fejlesztése

Kulcsszavak: LDH; tannin; papain; antioxidáns aktivitás; proteáz aktivitás

Antioxidánsokat és proteáz enzimeket a legkülönbözőbb ipari szektorok évtizedek óta alkalmaznak, azonban előnytelen tulajdonságaik (pl.: hő-, pH-, fényérzékenység, csekély vízdoldhatóság, fokozott reaktivitás) korlátozhatják felhasználásukat. A felsorolt hátrányok kiküszöbölésére a molekulák hordozón való rögzítése jelenthet megoldást, melyre a réteges szerkezetű, biokompatibilis, és változatos összetétellel előállítható réteges kettős hidroxidok (LDH-k) megfelelő jelölteknek bizonyulnak. Munkánk során tannint (TA) és papaint (PPN) rögzítettünk LDH-k felületén a molekulák stabilizálása és egy kombinált hatású, antioxidáns és proteáz aktivitással rendelkező nanokompozit előállítása érdekében. A két biomolekula immobilizációja céljából Mg/Al LDH-t állítottunk elő együttes lecsapással, a termék szerkezeti tulajdonságait porröntgen diffraktometriás mérésekkel határoztuk meg. Ezt követően elektroforetikus- és dinamikus fényszórás mérésekkel vizsgáltuk a részecskék töltését és hidrodinamikai sugarát változó TA- és PPN-koncentrációk mellett. A pozitív többlettöltésű LDH-részecskék felületén először a TA-t rögzítettük, majd az így áttöltött, negatív töltésű felületen immobilizáltuk a PPN-t elektrosztatikus kölcsönhatások révén. A ζ -potenciálok és a hidrodinamikai sugár változásából számítható stabilitási arányok alapján meghatároztuk a kolloidstabilitás szempontjából ideális TA- és PPN-dózist, mely 200 mg/g volt mindkét esetben. Az immobilizáció sikerességének igazolására UV-Vis és Raman-spektroszkópiás méréseket alkalmaztunk. Az előállított LDH-ről és LDH/TA/PPN nanokompozitról transzmissziós elektronmikroszkóppal készítettünk felvételeket, melyek segítségével vizsgáltuk a két rendszer morfológiai tulajdonságait. Az antioxidáns és hidrolitikus aktivitást DPPH- és proteáz-tesztel vizsgáltuk, melyet megismételtünk az 50°C-on hőkezelt mintákkal is, illetve összehasonlítottuk az oldatbeli és az immobilizált rendszerekkel kapott adatokat. Eredményeink hozzájárulhatnak kettős hatású antioxidáns-proteáz rendszerek fejlesztéséhez, melyek a kozmetikai- és élelmiszeripar egyes területein nagy érdeklődésre tarthatnak számot.

SZAYLY KATA
Vegyésmérnöki mesterképzés
MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Gyarmati Benjámín
egyetemi docens, BME VBK

Mukoadhézió jellemzése hidrogél felszínen húzó és nyíró igénybevétel alkalmazásával

Kulcsszavak: polimer tablettá; gélméchanika; viszkoelaszticitás; nyálkahártya-analóg; reológia

Mukoadhezív, azaz nyálkahártyára tapadó tablettákkal és tapaszokkal a hagyományos gyógyszerformákhoz képest a hatóanyag jelentősen nagyobb biohasznosulása érhető el, emellett betegbarát módon megvalósítható helyi és szisztémás gyógyszeradagolás is. A mukoadhézió folyamata azonban összetett, és megértése, így szabályozási lehetőségei is hiányosak. Az ex-vivo mukoadhéziós tesztek állati nyálkahártyákon végzik, melyek kiértékelése nehézkes a minták természetes diverzitása miatt. Ezen természetes nyálkahártyák viszkoelasztikus és tapadási tulajdonságai azonban magas víztartalmú, reprodukálható szerkezetű hidrogélekkel a szakirodalmi előzmények alapján jól modellezhetők lehetnek. Így az ezen hidrogéleken végzett mérések jelentősen hozzájárulhatnak a mukoadhézió részfolyamatainak megértéséhez. Ezen a területen jelenleg elsősorban nagy áteresztőképességű, húzási igénybevételre épülő tapadási tesztek alkalmaznak, melyek fiziológiás relevanciája korlátozott. Az eddig kevésbé alkalmazott nyírási tesztek jobb modelljei lehetnek a szervezetben lejátszódó terheléseknek, és a rotációs, illetve oszcillációs nyírási mérések fontos kiegészítői lehetnek a hagyományos tapadási mérések eredményeinek. A Lány Anyagok Kutatócsoport mesterséges poli(vinil-alkohol) (PVA) és mucin-PVA nyálkahártya-analóg hidrogéleket fejlesztett ki a mukoadhézió reprodukálható modellezésére. Saját kutatómunkám lényegi része ezen hidrogélek viszkoelasztikus tulajdonságainak jellemzése, a gélek felületén szilárd polimer tabletták tapadásának jellemzése, valamint a tapadást befolyásoló tényezők felderítése volt, többféle típusú mechanikai igénybevétel alkalmazásával. A készített PVA és mucin-PVA nyálkahártya-analógokon tablettázási segédanyagként elterjedten alkalmazott polimerekből (poliakrilsav, hidroxipropil-metilcellulóz, kitozán) előállított tablettákkal jellemeztem az adhéziót; húzásra épülő tapadási tesztek, valamint új, általam fejlesztett nyírási módszereket (rotációs és oszcillációs) is alkalmaztam. Az eredményeket összehasonlítva komplex következtetéseket tudtam levonni a mukoadhézió összetett folyamatával kapcsolatban.

Az EKÖP-24-2-BME-120 számú és a TKP-9-8/PALY-2021 számú projektek a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2024-2.1.1-Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Program pályázati program és a TKP2021-EGA pályázati program finanszírozásában valósult meg.

TÁTRAI MARCELL
Vegyészmérnök
BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők:
Dr. Kalmár József
egyetemi docens, DE TTK
Balogh Zoltán
PhD hallgató, DE TTK

Boroszilikát–alginát kompozit aero- és xerogélek előállítása és felhasználása gyógyszerhordozóként

Kulcsszavak: aerogél; xerogél; nikotinsav; gyógyszerhordozó; hatóanyag-leadás

Az aerogélek a világ legkisebb sűrűségű szilárd anyagai, amik nyitott és összefüggő mezopórusos szerkezettel rendelkeznek. 2022-ben az IUPAC által közzétett „Top Ten Emerging Technologies in Chemistry” listáján bekerültek a 10 legígéretesebb feltörekvő kémiai technológia közé. Ennek oka, hogy számos felhasználási területen innovatív megoldást kínál az alkalmazásuk. Ezek közé tartoznak az űrkutatás, építőipar, és az orvosi biológiai alkalmazási területek. [1] Kutatómunkánk során sikeresen szintetizáltunk boroszilikát-alginát kompozit géleket, amikből különböző szárítási módszerekkel xerogéleket és aerogéleket állítottunk elő. Ezekbe a mintákba különböző impregnálási stratégiákkal sikeresen vittünk be nikotinsav modellhatóanyagot. Vizsgáltuk a szilárd gélek kémiai összetételét infravörös spektroszkópiával (IR), a morfológiájukat pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) és N₂ adszorpciós-deszorpciós porozimetriával, továbbá XRD mérések segítségével kristályosságukról is információt szereztünk. Megállapítottuk, hogy a különböző formulálási technológiákkal más-más eredmény érhető el az aero-/xerogélek gyógyszerhordozó-rendszerekként való alkalmazásában. Aerogél esetében a hatóanyag amorf formában impregnálható, ami a nagyméretű pórusokkal kiegészülve gyors és nagy hatékonyságú leadást eredményez, amely vízben rosszul oldódó hatóanyagok esetén kedvező lehet. Az acetontól szárított xerogélekből elnyújtottabb és gátoltabb a leadás. Előnye, hogy a gélben nincsenek visszamaradt szennyezők az acetonnal végzett oldószercseré miatt. Az anyalúgból szárított xerogélben értük el a legnagyobb hatóanyag dózist, illetve a kristályos hatóanyagforma és a xerogél tömörebb szerkezete az elnyújtott leadást segíti. Hátránya ennek a módszernek az, hogy anyalúgból visszamaradt szennyezőket tartalmazhat a minta.

[1] Gomollón-Bel, F., IUPAC Top Ten Emerging Technologies in Chemistry 2022: Discover the innovations that will transform energy, health, and materials science, to tackle the most urgent societal challenges and catalyse sustainable development. *Chemistry International*, 2022. 44(4): p. 4-13.

ZRINYI ANNA
Vegyésmérnöki
BSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Bell Evelin
egyetemi adjunktus, BME VBK

Szelektív szol-gél enzimrögzítési eljárások fejlesztése mágneses nanorészecskékre

Kulcsszavak: Biokatalízis, enzimrögzítés

TDK munkám célja egy olyan eljárás kifejlesztése, mellyel transzamináz enzimek gyors és szelektív rögzítése valósítható meg. Ezt mágneses nanorészecskén (MNP-n) kívántam megvalósítani, aminek felülete szelektivitásért felelős fémionokat tartalmaz. A rögzítési folyamat első felében a hisztidinjelölt transzamináz komplexet képez az átmenetifémionnal, mely etilén-diamin-tetraecetsav-dianhidriddel kapcsolódik az MNP felületéhez. A célenzim tisztítása nem szükséges a komplexképzési folyamathoz, a rögzítés közvetlenül a fermentációs közegből megvalósítható. Ezt követően az MNP és a rögzített enzim köré szol-gél mátrixot alakítottam ki utólagos stabilizálás céljából. Ez azért szükséges, mert az enzim könnyedén kiszorulhat a komplexből a felhasználás során. A mátrix kialakításához optimalizáltam a prekursor komponensek mennyiségét és arányát. Így a térháló szerkezete lehetőséget ad arra, hogy a szubsztrát és a termék könnyen átjusson rajta, viszont az enzim ne szivárogjon. A rögzítési folyamatot *Vibrio fluvialis* (S)-szelektív transzamináz enzimmel végeztem el. Az elkészült biokatalizátorokat alfa-metilbenzilamin átalakításában vizsgáltam, amelyből keletkező acetofenon spektrofotométerrel UV-ban jól detektálható. A reakcióban szol-gél mátrixba zárt és utólagos stabilizálás nélküli katalizátorok aktivitását is vizsgáltam.

Biokémia

BOGYA BENEDEK

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Ditrői Tamás
tudományos munkatárs, OOI, MITO
Dr. Nagy Péter
tudományos igazgató, OOI, MITO

Dihidropirimidin – dehidrogenáz enzim radioizotópos aktivitás mérésének fejlesztése kemoterápiában részesülő daganatos betegeknél prognosztikai célból

Kulcsszavak: Kemoterápia; Daganatok; Dihidropirimidin-dehidrogenáz

A malignus, azaz a rosszindulatú daganatok kialakulásához a normális sejtosztódás és a sejtpusztulás közötti bonyolult, szabályozott egyensúly felborulása vezet, amely túlzott osztódást eredményez [1]. Számos módszer elérhető daganatos betegségek kezelésére, mint a sebészeti beavatkozások, sugárkezelés, célzott immunterápiák vagy a gyógyszeres kezelések, azaz a kemoterápiák [1,2]. Az 5-fluoruracil (5-FU) az egyik legszélesebb körben alkalmazott kemoterápiás gyógyszer. Ezek a gyógyszerek citotoxikus és citosztatikus tulajdonsággal rendelkeznek, tehát sejthalált idéznek elő vagy gátolják a sejtek szaporodását. Emiatt nagyon fontos, hogy a szervezet le tudja bontani és ki tudja üríteni, felhalmozódásuk ugyanis káros a teljes szervezetre, hiszen az egészséges sejtekre is kifejti hatásukat. A dihidropirimidin – dehidrogenáz (DPD) enzim a fluorpirimidin alapú gyógyszerek, mint az 5-FU első és sebességmeghatározó lebontó lépését katalizáló enzime. Ennek az enzimnek a csökkent vagy hiányzó aktivitását nevezzük DPD deficienciának, amely egy recesszíven öröklődő anyagcsere rendellenesség. A DPD diszfunkcióval rendelkező betegek, akik így nem képesek az 5-FU megfelelő mértékű lebontására, fokozottan érzékenyek a kezelés káros mellékhatásaira és súlyos toxicitást is elszenvedhetnek, ezért ajánlott a kezelés előtt az DPD deficiencia vizsgálata. Magyarországon egyedül az Országos Onkológia Intézet Biokémia Osztálya végez ilyen jellegű szűrést a DPD enzimaktivitás radioizotópos mérésével. Célunk a jelenleg alkalmazott módszer érzékenységének, megbízhatóságának és reprodukálhatóságának a fejlesztése a patológiai tartományban, azaz amikor csökkentett DPD aktivitásról beszélünk. Az alacsony, patológiai tartományban különösen fontos a megbízható mérés, mivel ekkor egyéb, nem fluoropirimidin alapú terápiák alkalmazására van szükség a mellékhatások elkerülése végett. Az enzimaktivitás meghatározása a betegtől származó limfocitákból történik, amihez egy ^{14}C jelzett radiofarmakont adunk és az enzimreakciót majd fordított fázisú HPLC elválasztást követően egy szcintillációs detektor segítségével monitorozzuk az aktív izotóppal jelzett metabolitokat. A munka során a vérből történő limfocita szeparálás, az enzimreakció és az alkalmazott kromatográfiás módszer legfontosabb paramétereit vizsgáljuk meg.

[1] Polgár Csaba – Onkológia és Sugárterápia, Semmelweis Kiadó, Budapest 3-4., 68-75 (2018)

[2] Tulassay Zsolt, Matolcsy András – Az Onkológia tankönyve, Semmelweis Kiadó 3-5 (2011)

DÖRGŐ DANIELLA
Vegyész
MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Nagy Péter
tudományos igazgató, OOI

Hydrogen sulfide mediated deCoAlation of CoAlated Peroxiredoxin 6

Kulcsszavak: redox biológia; peroxidáz; koenzim A; perszulfidáció; oxidatív stressz

In recent years, studying the biological role of hydrogen sulfide (H_2S) has become a major field within redox biology. H_2S may exert its biological effect through protein persulfidation (Protein-SSH) which is the covalent modification of the oxidized thiol derivatives of cysteine-containing proteins. The oxidative post-translational modifications (oxPTMs) of redox-active thiol proteins, such as protein-persulfidation, may alter their reactivity and/or functionality. Another important oxPTM is protein CoAlation, which means a disulfide bond formation between a coenzyme A (CoA) molecule and the thiol group of a cysteine-containing protein (Protein-S-S-CoA). It seems to be a reversible, regulatory cysteine side chain-specific and oxidative stress-induced process. Among the cysteine-containing proteins, there is an important enzyme family, namely peroxiredoxins (Prdxs) which are often called the redox sentinels of the cell. They rapidly react with hydrogen peroxide (H_2O_2) thus preventing the accumulation of oxidative compounds. Prdxs together with other endogenous reducing agents are key defense factors against oxidative stress. Prdx persulfidation may provide protection against oxidative-stress-induced irreversible Prdx overoxidation and inhibition.

The goal of our collaborative project is to investigate the molecular mechanism and biochemical significance of the CoAlation of peroxiredoxin 6 (Prdx6-SH), a member of the Prdx enzyme family and to explore the potential role of H_2S in the reverse process, namely the deCoAlation of Prdx6-S-S-CoA. This can serve as an alternative catalytic cycle for Prdx6, potentially preserving its antioxidant activity after oxidative processes. As a 1-Cys Prdx, Prdx6 is unable to form homodimers, unlike 2-Cys Prdxs. Instead, it relies on forming heterodimers with other endogenous thiol-containing compounds to maintain its activity. Within the proposed model, after H_2O_2 -induced Prdx6 oxidation, Prdx6-SOH reacts with a CoA molecule, forming a disulfide bond (Prdx6-S-S-CoA). Subsequent reducing reactions with H_2S (deCoAlation) may yield both the thiol and the persulfide forms of Prdx6 (Prdx6-SH or Prdx6-SSH, respectively). My research focuses on the potential Prdx6 persulfidation reaction in the redox cycle of Prdx6 through the deCoAlation of Prdx6-S-SCoA. My thesis successfully established that upon the reactions of Prdx6-S-SCoA with H_2S , the primary deCoAlation product is Prdx6-SSH, which may protect Prdx6 from overoxidation.

EMŐDI NIKOLETT
Biotechnológia
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Nyíri Kinga
egyetemi adjunktus, BME VBK

Az onkogén KRas fehérjék kölcsönhatásainak vizsgálata

Kulcsszavak: molekuláris biológia; kölcsönhatásvizsgálat; daganatterápia; enzimkinetika; bioréteg interferometria

A humán daganatos megbetegedések jelentős hányadát a Ras gén funkcióvesztéssel járó mutációi okozzák. A Ras fehérjecsald tagjai, köztük a KRas fehérjék, GTPáz aktivitásuk révén szabályozzák a jelátviteli útvonalakat. Működésüket segítik a GAP (GTPase activating protein) fehérjék, melyek nagyságrendekkel képesek megnövelni a GTP GDP-vé történő hidrolízisét. A KRas fehérjék aktív centrumában történt mutáció esetén azonban a KRas-GAP közti kölcsönhatás legyengül, ami gátolja a sejtfolyamatok megfelelő működését, így az kontrollálatlan sejtosztódáshoz és daganatos megbetegedések kialakulásához vezet. A közelmúltban felfedezték, hogy az RGS3 fehérje képes a mutáns KRas fehérjékhez is kötődni és a GAP-nál nagyobb mértékben aktiválni azokat, azonban fiziológiás működést ez sem képes visszaállítani.

A KRas jelátvitel helyreállítására már több megközelítéssel is törekednek, az inaktív GDP-kötött állapotot rögzítő kismolekulás terápiát már alkalmazzák is az orvosi gyakorlatban. Azonban a kezdeti tapasztalatok azt mutatják, hogy ezen kezelés hatására viszonylag gyorsan rezisztencia alakul ki a daganatokban. Ezért a KRas mutációt hordozó sejtek működésének helyreállításához további kutatások és új megközelítések szükségesek. A KRas mutánsok és a GAP, illetve RGS3 fehérjék kölcsönhatásának vizsgálatával új hatásmechanizmusú KRas jelátvitelt szabályozó molekulák fejlesztethetők. Kutatásom során ezeket a kölcsönhatásokat vizsgáltam.

Kulcsfontosságú szerepe ellenére a KRas GAP katalizálta hidrolízisének mechanizmusa még jelenleg sem tisztázott. Egy kollaboráció keretén belül munkatársaim in silico QM/MM szimulációkkal felállítottak egy modellt, amelynek segítségével szisztematikusan olyan GAP mutánsokat terveztek, amik képesek voltak aktiválni a leggyakrabban előforduló KRas mutánsokat (G12C és G12D). Annak érdekében, hogy ezt a modellt a gyakorlatban is próbára tegyem bakteriális expresszióval előállítottam a KRas G12D fehérjét, illetve a szimulációval kapott legígéretesebb GAP variánsokat (L902E, L902Q, R903A és R903Q). A segédfehérjék hidroláz aktivitásra gyakorolt hatását MESG-PNP enzimaktivitásmérő esszé segítségével követtem nyomon. Emellett kölcsönhatásukat bioréteg interferometriás módszer segítségével vizsgáltam. Kutatásom részét képezte az RGS3, GAP-jellegű fehérje KRas G12D-re gyakorolt hatásának vizsgálata. Az enzimaktivitásmérést szintén bioréteg interferometriás módszerrel végeztem. Kísérletet tettem továbbá a KRas-RGS3 fehérje komplex kristályosítására.

ERDÉLYI VIKTOR
Biomérnök MSc
MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Deák Veronika
egyetemi adjunktus, BME VBK

A Hsf-1 transzkripció faktor és az ER-stressz kapcsolatának vizsgálata emlős sejtvonalakban

Kulcsszavak: UPR; HSF1; HEK293; endoplazmatikus retikulum

A sejtekben lejátszódó önvédelmi mechanizmusok napjainkban egyre szélesebb körben vizsgált folyamatok, mivel olyan általános, sok embert érintő problémák, betegségek lehetséges terápiájához, felismeréséhez vezethet ezeknek a mechanizmusoknak az alapos feltérképezése, amelyekre jelenleg vagy nem rendelkezünk hatékony gyógymóddal, vagy kívánatos lenne a jelenleg használt módszer kiváltása. Jelen munkánkban humán sejtek stresszhatásra adott válaszreakcióit igyekszünk alaposabban feltérképezni.

Megfigyelték, hogy különböző stresszhatásokra a sejtekben megnő a hibás térszerkezetű fehérjék mennyisége, mely akár a sejt elpusztulásához is vezethet. Ebben a folyamatban fontos szerephez jut a sejt endoplazmás retikuluma, hiszen itt zajlik a fehérjék érése. A HSF1 (hősokk-faktor 1, heat-stress factor 1) napjaink egyik igen intenzíven kutatott transzkripció mester-regulátora, mely részt vesz a sejt plazmából induló hősokk válaszban. Témám ennek a kapcsolatnak az új szemszögből történő vizsgálatával foglalkozik. Szeretnénk felderíteni, hogy a HSF1 – jól ismert funkcióin túl – vajon szerepet játszik-e az endoplazmás retikulumból kiinduló UPR (unfolded protein response, hibás térszerkezetű fehérje válasz) szabályozásában. Kutatásaink során három marker gén mRNS transzkripcióján keresztül vizsgáljuk az UPR választ: Hsp-4 humán ortológ binding immunoglobulin protein (BiP), C/EBP homológ protein (CHOP) és a hasított X-box kötő fehérje-1 (spliced XBP1) expresszióját mérjük. Kooperációs partnerünk kutatócsoportjában bizonyos UPR-komponensek aktivációjának HSF1-függését mutatták ki *Ceanorhabditis elegans* fonalféreg modellben. Célul tűztük ki a kérdés vizsgálatát humán eredetű sejtenyészetekben (HT1080, HEK293).

A projekt során igazoltuk, hogy valóban beindul az irodalomban már jegyzett HSF1-függő hősokk válasz az általunk vizsgált humán sejtvonalakban (HEK-293T és HT-1080). Megfigyeltük, hogy hősokkot követően az XBP1s szintje a HT-1080 esetében jelentősen megnőtt, aktiválódik az UPR_{ER} IRE1 függő útvonala. Amikor gátoltuk a HSF1 aktivitását, az XBP1s expresszió jelentősen csökkent, ami egy eddig a szakirodalomban nem publikált jelenség: az XBP1 mRNS hasítása is HSF1 függő, vagyis kapcsolat áll fent az ER stressz válasz (UPRER) és a citoszolikus hősokk válasz mester regulátora, a HSF1 transzkripció faktor között. Ezen feltételezésünket sikerült megfigyelni a HEK-293T sejtvonalban is. Eredményeink hozzájárulhatnak a HSF1 regulátor-funkciójának jobb megértéséhez.

FÓGEL BENJÁMIN
Vegyész
MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Gyurcsik Béla
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Zeyad H. Nafae
posztdoktor, SZTE TTIK

Nukleáris Faktor I fehérje DNS kötő doménjének előállítása és kölcsönhatása DNS-sel

Kulcsszavak: Nukleáris Faktor I; DNS-kötő domén; I-block kísérlet

A génterápiában a mesterséges nukleázok ígéretes eszközök lehetnek. Azonban fontos tudni, hogy a ma ismert mesterséges nukleázoknak citotoxikus hatásuk is van. A gyógyászatban való alkalmazáshoz elengedhetetlen, hogy a nukleáz specifikusan végezze a hasítást, azaz további optimalizálás szükséges. Ezért egy specifikus fehérje, a Nukleáris Faktor I DNS-kötő doménjének előállítását és vizsgálatát tűztük ki célul.

A Nukleáris Faktor I a helyspecifikus DNS-kötő fehérjék családjába tartozik, és szerepet játszik mind az emlősöknél a transzkripcióban, mind az adenovírus replikációjában. Ez egy 47 kilodalton (kDa) nagyságú fehérje, amit nem fertőzött humán eredetű, ún. HeLa sejtek nukleáris kivonataiból tisztítottak és izoláltak.

A Nukleáris Faktor I DNS-kötő doménjének a DNS kötő sajátságait a munkám során kétféleképpen tanulmányoztam. Az egyik a közvetlen módszer, amikor a fehérjét előállítjuk, kitisztítjuk és ennek a kölcsönhatását vizsgáljuk meg. A másik egy szenzoron keresztül történő vizsgálat, az I-block kísérlet. Ezt továbbvittem és mikrolemez olvasóval (Plate Reader) is megvizsgáltam.

HORVÁTH VIRÁG NIKOLETT
Egészségügyi mérnök MSc
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Villamosmérnöki és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Turiák Lilla
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK
Balbisi Mirjam
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Extracelluláris vezikulák glikomikai karakterizálása

Kulcsszavak: tüdőrák; tömegspektrometria; proteomika; N-glikoproteomika; GAGomika

Az extracelluláris vezikulák (EV-k) lipidekkel határolt részecskék, melyek kulcsfontosságú szerepet játszanak az intercelluláris kommunikációban. A változatos biomolekulákat tartalmazó kisméretű extracelluláris vezikulák (sEV-k) az EV-k egy alcsoportja, melyek kardinális szerepet töltenek be a rák kialakulása során, emiatt vizsgálatuk rendkívül fontos.

Munkám célja az A549 tüdő adenokarcinóma sejtvonalból, valamint a BEAS-2B nem tumoros sejtvonalból izolált sEV fehérjék glikozilációs poszt-transzlációs módosulásainak karakterizálása volt. A kétféle sejtvonal sEV-inek izolálásához 72 óra tenyésztést, valamint centrifugálási és szűrési lépést követően mini méretkizárásos kromatográfiát végeztem saját készítésű oszlopokon. A sEV-kben gazdag frakciókat betöményítettem, oldószercserét végeztem, majd fagyasztási-olvasztási ciklusokkal tártam fel a sEV-eket. A 6-6 párhuzamosban izolált vezikulákból a feltárást követően a mintákat tripszinnel, illetve kondroitináz ABC-vel emésztettem meg. A triptikus emésztményből az N-glikopeptideket acetonos kicsapás segítségével dúsítottam. Tisztítás után nanoUHPLC-MS(MS)-sel analizáltam a minták N-glikopeptid és CS diszacharid összetevőit.

A proteomikai vizsgálatok megerősítették a nagy tisztaságú EV-k jelenlétét, amelyek alapvető referenciaként szolgáltak a vezikulák későbbi glikomikai elemzéseikhez. A CS diszacharidok és az N-glikoproteomikai eredmények alapján mind a főkomponens-analízis, mind a hierarchikus klaszterezés alapján egyértelműen elkülönült a két mintacsoport. Az N-glikoproteomikai analízis során az A549-hez tartozó mintáknál 220 db N-glikopeptidet sikerült azonosítani 60 db N-glikoproteinből, a BEAS-2B-hez tartozó mintáknál pedig 244 db N-glikopeptidet sikerült azonosítani 62 db N-glikoproteinből. Az azonosított N-glikopeptidek többsége komplex típusú volt. Mindkét csoportban jelen voltak olyan glikozilált marker fehérjék, mint pl. a tromboszpondin-1, ill. a galektin-3 kötő fehérje, ezenkívül sok proteoglikán vázfehérje N-glikozilációja is jellemezhető volt. A statisztikai elemzések során szignifikáns változások voltak kimutathatók a két mintacsoport között a CS diszacharidok összmenyiségei, az egyszerűen szulfatált CS diszacharidok relatív mennyiségei, valamint a 6S/4S arányok között. Eredményeim egyértelműen rávilágítanak a kétféle sejtvonal közötti biokémiai különbségekre, amelyek a későbbiekben kulcsfontosságúak lehetnek akár új gyógyszeres támadáspontok felfedezésében.

IVÁN RÉKA BOGLÁRKA
biomérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Nagy Gergely Nándor
egyetemi tanársegéd, BME VBK

Az NDST3 heparán szulfát bioszintézis enzim N-szulfotranszferáz doménjének előállítás és biokémiai vizsgálata

Kulcsszavak: heparán szulfát, N-dezacetiláz/N-szulfotranszferáz; enzimaktivitás; fehérjemérnökség

A heparán szulfátok (HS) lineáris sejt felszíni poliszacharidok, melyek fontos szereppel bírnak számos biológiai folyamatban, beleértve a sejtek közötti kommunikációt, sejt felszíni jelátvitelt, kötőszöveti mátrix stabilitást, valamint patogén-gazdasejt kölcsönhatásokat. A HS lánc molekuláris kölcsönhatásait döntően befolyásolja negatív töltésmintázata, melyet glükuronsav/iduronsav egységein túl változatos szulfát módosításai határoznak meg. A szulfatáció kialakítását a HS lánc polimerizációját követően a bifunkciós N-dezacetiláz/N-szulfotranszferáz (NDST) enzimek kezdik meg, a glükózamin egységek N-dezacetilációja és szulfatációja révén. Ezen módosítások azonban nem egységesekek a HS lánc mentén, emiatt a négy humán NDST izoenzim (NDST1-4) eltérő glükózamin mintázatokat alakít ki. Mivel az NDST enzimátikus módosítások templátként szolgálnak a további HS szulfatációt és epimerizációt katalizáló enzimek számára, az NDST izoenzimek működése alapvetően határozza meg az érett HS szerkezetét és kölcsönhatásait. Az idegszövetekben kifejeződő NDST3 a többi NDST izoenzimhez képest kisebb szulfotranszferáz aktivitással rendelkezik, ennek molekuláris háttere az NDST3 részletes enzimátikus jellemzése híján azonban jelenleg nem tisztázott.

Kutatómunkám célja az NDST3 enzim egyedi szulfotranszferáz aktivitásának jellemzése volt. Ehhez irodalmi és fehérjemérnökségi megfontolások alapján kialakítottam egy olyan módszer folyamatot, mely révén hőstabil és enzimátikusan aktív NDST szulfotranszferáz domén fehérje konstrukciókat tudtam rekombinánsan termelni *E. coli* expressziós rendszerben. A sikeres fehérjetermeléshez megvizsgáltam az alkalmazott fehérje domén határokat, azonosítottam a fehérje termelést és tisztítást legjobban elősegítő fúziós fehérje konstrukciót, valamint optimalizáltam a fehérje előállítás folyamatát. A módszerrel előállítottam az NDST3 és az NDST1 szulfotranszferáz fehérjéket, és egy fluorimetriás csatolt enzim esszé alkalmazásával jellemeztem az NDST3 izoenzim NDST1-nél kisebb szulfotranszferáz enzimátikus aktivitását.

Összességében a fehérjetermelés és enzimaktivitás módszerek optimalizálása révén munkám egy kísérletes rendszert alapoz meg az NDST1-4 enzimek szulfotranszferáz aktivitásának összehasonlító jellemzésére, mely hozzásegíthet ezen izoenzimek eltérő működésének és HS bioszintézisben betöltött szerepének értelmezéséhez.

KOZMA BIANKA
Biotechnológia
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

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

A dUTPáz fehérje-kölcsönható partnereinek azonosítása és szerepének vizsgálata egér embrió modellben

Kulcsszavak: dUTPáz; sejtosztódás; embrionális fejlődés; coIP-MS; immunitokémia

A DNS stabilitása kritikus fontosságú a genomi integritás megőrzése és a sejtek normális működésének szempontjából. Ennek érdekében a sejtekben számos mechanizmus működik, melyek közül a dUTPáz enzim fontos szerepet játszik a preventív hibajavításban. Az enzim a dUTP hidrolízisét katalizálja, ezáltal megelőzi az uracil timin helyetti hibás beépülését a DNS-be, valamint biztosítja a sejtek számára a dTTP nukleotid de novo bioszintéziséhez szükséges dUMP prekuzort.

Csoportunk azonban korábban rámutatott, hogy a régóta ismert funkcióján túl az enzim a sejtosztódás és az embrionális fejlődés kritikus folyamataiban is részt vehet. Kutatásaim célja ezen folyamatok részletes tanulmányozása volt az egér korai embrionális fejlődés során. Ehhez immunfluoreszcens festés segítségével vizsgáltam a dUTPáz enzim lokalizációját 3,5, 4,5 és 6,5 napos blasztociszta állapotú egér embriókban. Eredményeim alapján a dUTPáz citoplazmás és sejtmagi eloszlása az embriók fejlődési korától függően változott, amelynek magyarázata lehet a különböző embrionális sejtípusok eltérő mitotikus aktivitása.

Ezenkívül a dUTPáz enzim és az tubulin között egyértelmű kolokalizációt mutattam ki egyrészt a korai stádiumú blasztociszták osztódó sejtjeiben a mitotikus és a centrális orsón, másrészt a késői stádiumú embriók trofektodermájában a mikrotubuláris hálózaton. Eredményeim alapján valószínűsíthető, hogy a dUTPáz kölcsönhat a folyamatosan alakuló mikrotubuláris hálózattal, amely további kísérletek elvégzését indokolta. Ennek érdekében ko-immunprecipitációval kapcsolt LC-MS/MS eljárás segítségével azonosítottam a humán dUTPáz enzim potenciális kölcsönható partnerei közül az α - és β -tubulint, valamint a TRiC komplex több alegységét is.

Eredményeim arra utalnak, hogy a dUTPáz enzim túlmutat az eddig ismert preventív szerepén, és kölcsönhatásba lép a mikrotubulusokkal a sejtosztódás és a sejt differenciálódás azon szakaszaiban, ahol a sejtek aktív citoskeletális átrendeződést végeznek. A dUTPáz enzim élő szervezetekben betöltött szerepének pontos megismerése és ennek megfelelő sikeres gátlása ígéretes terápiás célpont lehet daganatos megbetegedések kezelésében.

KUTÁS ADRIÁNA
Vegyésmérnöki
MSc, 2. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyésmérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Mucsi Zoltán
egyetemi tanár, ME AVK
Dr. Pomozi Viola
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK

Pirofoszfát sók, mint lehetséges meszesedést megelőző gyógyszerek in vivo tesztelése

Kulcsszavak: meszesedés, in vivo vizsgálat, pirofoszfát, orális alkalmazás, dózismeghatározás

A lágyszöveti meszesedés társadalmunk jelentős részét érintő egészségügyi probléma. A kalcifikáció egy fiziológiai folyamat, amely kulcsfontosságú a csont - és fogképződés során, azonban a lágyszöveteket érintő ektópiás meszesedés egy patológiás folyamat. Az ektópiás meszesedés leggyakrabban a bőrön, vesékben, ízületekben, valamint a kardiovaszkuláris szövetekben jelentkezik. Kialakulhat öregedéskor, cukorbetegség esetén, illetve egyes genetikai betegségek következtében. Utóbbiak, mint modellbetegségek lehetőséget nyújtanak a jelenség vizsgálatára. A kalcifikáció természetes gátlószere a pirofoszfát (PPi), amelynek szintje számos meszesedési tünetekkel járó betegségben csökken. Kutatócsoportunk az utóbbi években különböző pirofoszfát sók felszívódását és funkcionális hatását vizsgálta egy meszesedési betegség egér modelljében.

Dolgozatomban négyféle PPi só farmakokinetikai sajátosságait és az Abcc6^{-/-}, meszesedési tüneteket mutató egér modellen végzett in vivo funkcionális teszteket mutatok be, amelyek során jobban megismertük a PPi sók tulajdonságait, valamint eredményeink elősegíthetik humán klinikai vizsgálatok és terápiás kezelések indítását is.

MÓCZA LEVENTE ANDRÁS
Vegyésmérnök
BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Békési Angéla
tudományos munkatárs, BME VBK
Holub Eszter
PhD hallgató, HUN-REN TTK

Kemoterápiás szerekkel indukált mutagenézis kimutatása 3D-PCR-rel

Kulcsszavak: mutáció; kemoterápiás szer; DNS; PCR; elektroforézis

Munkám során kezeletlen és timidilát szintázt gátló kemoterápiás szerekkel (5FdUR) kezelt vastagbélrák sejtvonalakból izolált genomi DNS-mintákkal dolgoztam. Célom egy, az 5FdUR hatására megjelenő C->T átmenetek detektálására alkalmas PCR alapú módszer beállítása volt, kihasználva, hogy ez a változás csökkenti a DNS-szakasz denaturációs hőmérsékletét (AT között kevesebb H-híd). Ezt az ún. 3D-PCR-rel próbáltam elérni, amely gradiens hőmérsékleti intervallumot létrehozva, a denaturációs lépésben más-más hőmérsékletre melegíti az egyes mintákat, lesz ahol nem, illetve ahol feljön a termék, a C->T átmenetet elszenvedő mutáns szakaszok jelenlétének mértékétől függően. A genomszekvenálási adatok alapján kiválasztott három pozitív és négy negatív szakaszra primereket terveztünk, ezek specifitását PCR-rel és gélelektroforézissel ellenőriztem. A megfelelő specifitásúakkal nagyobb méretben megismételtem a műveletet, majd a termékeket gélből izoláltam. A tisztított kezeletlen termékeket templátként használva minden szakaszra meghatároztam a limitáló denaturációs hőmérséklet tartományát. Ezt a kezelt mintákkal is elvégeztem, és az elektroforézis képek alapján meghatároztam a limitáló hőmérséklet eltolódását a kezeletlenekéhez viszonyítva. Ez a különbség nem volt szignifikáns, feltehetően a sokszoros hígítási pontatlanság és a végtermék koncentrációjára szorítókozó detektálás miatt. Ezért a módszert kvantitatív PCR-re (qPCR) adaptáltuk. Ez élő képet ad a termék koncentrációról egy, a termék szerkezetébe interkalálódó és fényt emittáló festékanyag segítségével. Kezelt és kezeletlen mintákból egy negatív és egy pozitív DNS-szakaszt vizsgáltunk meg, amelyeket a primerek hatékonyságának és specifitásának ellenőrzése alapján választottunk ki. Így pontosabb képet kaptunk a PCR termék keletkezésének mértékéről, és a megengedő hőmérsékleten mért reakcióval korrigálni tudtuk a hígítási pontatlanságot. A legígéretesebb mintákkal a qPCR-t a megengedő és a numerikusan meghatározott restriktív hőmérsékleten megisméltük. A megengedő hőmérsékletre képest a restriktív hőmérsékleten az 5FdUR kezelt minták termékei hamarabb jöttek fel. Hogy bebizonyítsam, hogy ennek a C->T átmenet az oka, gélelektroforézisnek vettem alá a mintákat. A restriktív hőmérsékleten reagált minták nem voltak specifikusak, de a főtermékek azonos hosszúságúak voltak a megengedő hőmérsékleten keletkező termékekkel. Ezzel, ha nem is teljes bizonyossággal, de sikerült kimutatni az 5FdUR hatását, a C->T pontmutációt.

SZAJKÓ MILDA BLANKA

Biomérnök

MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:

Dr. Békési Angéla

egyetemi adjunktus, BME VBK

Genomi uracilmintázatok jellemzése: szenzorfejlesztés és funkcionális elemzés embrionális fejlődési modellben

Kulcsszavak: zebrahal; funkcionális genomika; szenzorfejlesztés; uracildetektálás; genomi uracil

Az uracil a DNS-ben alapvetően hibaként értelmezett bázis, amely az uracil DNS-glikozilázok által elindított báziskivágásos javítómechanizmussal jellemzően eltávolításra kerül. Ugyanakkor számos kutatás alátámasztja, hogy a DNS-beli uracilnak lehet biológiai szerepe is. A kutatócsoportunkban zebrahal embriók korai fejlődési stádiumában magas genomi uracilszintet mutattak ki. Ennek jelentőségét alátámasztja, hogy ha ezt az állapotot dUTP-t bontó enzim mikroinjektálásával megzavarták, komoly fejlődési rendellenességeket tapasztaltak. U-DNA-Seq eljárással a genomi uracilmintázatot is meghatározták 2,5 órás zebrahal embriókban.

A kutatásom célja közelebb kerülni a DNS-ben található uracil biológiai szerepének megértéséhez. Ehhez először bioinformatikai elemzéseket végeztem a genomi uracilosodással korreláló funkcionális genomikai adatok feltérképezéséhez. A kutatásom második felében uracil-DNS-glikoziláz alapú, DNS-beli uracil (U-DNS) detektálására alkalmas szenzorok fejlesztésén dolgoztam. A GEO adatbázisból releváns funkcionális genomikai adatokat gyűjtöttem, melyekből a folyamatos lefedettségű görbéket a Segway genomszegmentációs analízissel, az intervallumfájlokat pedig a GIGGLE programcsomag segítségével hasonlítottam a 2,5 órás embriók genomi uracilosodási mintázatához. Az U-DNS szenzor fejlesztése során a korábbi tapasztalatok alapján stabil konstruktok C'-terminálisát bővítettem in vitro biotinilálható AviTaggel. Az új konstruktok U-DNS kötését elektroforetikus mobilitási esszével vizsgáltam. Az erős és specifikus biotin-szteptavidin kölcsönhatáson alapuló U-DNS detektálást csepp bloton teszteltem.

A funkcionális genomikai elemzés során azt találtam, hogy az uracilosodott régiók jelentősen átfednek bizonyos szatellitákkal és epigenetikai faktorokkal, amelyek szerepet játszanak a kromatinszerveződésben és a transzkripció szabályozásban a zigotikus génaktiváció (ZGA) során. Továbbá olyan U-DNS szenzorokat fejlesztettem, amelyek könnyebb előállításuk és jobb stabilitásuk mellett nagyobb specificitást és érzékenységet mutattak. Eredményeim alapján feltehető, hogy a DNS-beli uracil szerepet játszhat a ZGA során zajló kromatinátrendeződésben. A továbbfejlesztett szenzorok pedig alkalmasak lehetnek alacsony uraciltartalmú vagy nehezen izolálható DNS-minták vizsgálatára, ill. in situ kísérletekre is.

SZENTIRMAI ANNA

**Biomérnöki
MSc, 2. félév**

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

*Témavezetők:
Dr. Szarka András
egyetemi tanár, BME VBK
Varga Dóra
PhD hallgató, BME VBK*

Oxidatív stressz kiváltotta sejthalál útvonalak vizsgálata tumoros sejtekben

Kulcsszavak: ROS; biokémia; terápia; ferroptózis; apoptózis

A redox homeosztázis fenntartása elengedhetetlen a normál sejtfunciók fenntartásához. Amennyiben a reaktív oxigén származékok (ROS) termelődése meghaladja a sejtek antioxidáns kapacitását, a fellépő oxidatív stressz különböző működési zavarokhoz, végül sejthalálhoz vezethet. A túlzott mennyiségben keletkezett ROS többféle módon is károsíthatja a sejtek makromolekuláit. Lipidekben a telítetlen zsírsavak támadása révén lipidperoxidációhoz, fehérjékben a peptidkötések felhasadásához vezethet. Megtámadhatja a nukleinsavakat, ezáltal elősegítve a bázisok és cukorrészek módosulását, lánc törések kialakulását. Számos sejthalál típus aktiválódását hozták már összefüggésbe oxidatív stresszel, ezen útvonalak pontos mechanizmusa azonban még nem teljesen tisztázott.

Kutatásunk célja a farmakológiai aszkorbát, rezveratrol, klorokin, menadion és az RSL3 citotoxikus hatása mögött álló molekuláris mechanizmusok felderítése. Ehhez szerettük volna vizsgálni, hogy a különböző kezelőszerek külön-külön és együttesen alkalmazva milyen mechanizmussal okoznak sejthalált, melyek a hasonlóságok és különbségek a kiváltott folyamatok során, és melyik programozott sejthalál típusnak van szerepe az egyes esetekben. Ehhez alapvető molekuláris biológiai módszereket alkalmaztunk. Rákos sejt vonalakat kezeltünk a fent említett, potenciális terápiás szerekkel, majd ezek citotoxikus hatását MTT életképességi assay segítségével elemeztük. A kiváltott DNS károsodást Western-blot technikával mutattuk ki, míg a sejtek energiaszintjét a NAD^+ és az ATP mennyiségének HPLC-UV/Vis technikával való meghatározásával mértük. Áramlásos citométerrel követtük nyomon a sejtekben kialakuló oxidatív stresszt különböző oxidációra érzékeny fluoreszcens festékekkel, valamint az okozott sejt ciklus-megállást FxCycle reagenssel. Végül a kaspáz enzimaktivitást egy fluoreszcens szubsztrátot tartalmazó kit alkalmazásával vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy mind az öt kezelőszer okoz DNS károsodást, és a klorokin kivételével emelkedett ROS szintet, de lipidperoxidációt csak a farmakológiai aszkorbát és a menadion váltott ki. Az aszkorbáton kívül mindegyik hatására megakadt a sejt ciklus, bár eltérő fázisokban. Kaspáz aktivitást csak a rezveratrol esetén tudtunk kimutatni. Mindezek alapján elmondhatjuk, hogy ezek a kezelőszerek részben hasonló, részben eltérő módon fejtik ki hatásukat, a háttér folyamatok ismerete révén kiaknázhatjuk a köztük lévő szinergikus hatást egy megfelelő koterápia megtervezéséhez.

TAR ANDREA-VIKTÓRIA

Biomérnöki

BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:

Dr. Sándor Gyöngyvér Orsolya

biológus, OOI, SE

Dr. Jurányi Zsolt

osztályvezető, OOI, SE

Dr. Sveiczler Ákos

egyetemi docens, BME VBK

Sugárérzékenység mérése cervix tumoros betegekben, a RILA módszer finomhangolása

Kulcsszavak: sugárérzékenység, cervix tumor, limfociták, áramlási citométer, apoptózis

A sugárterápia a betegek különböző sugárérzékenysége miatt az esetek 5-10%-ban súlyos mellékhatásokat okoz. Jelenleg nincs olyan módszer, amivel vizsgálni lehetne a sugárérzékenységet. A Radiation Induced Lymphocyte Apoptosis (RILA) azonban ígéretes klinikai módszernek tűnik a sugárérzékenység kimutatására. A módszer hátránya, hogy a határértékek betegcsoportonként és centrumonként változhatnak, ezért TDK munkám során céлом volt a módszer határértékének beállítása, a munkafolyamatok hatékonyságának javítása és klinikai validálása cervix tumoros betegekben.

84 definitív radiokemoterápiára előjegyzett beteg vérmintájának mérési eredményét dolgoztam fel, hogy mekkora a sugárzás (8 Gy) okozta apoptózis mértéke CD8⁺ és CD4⁺ fehérvérsejtek esetében. Jelenlegi határértékeim -0,03% CD8⁺ limfocitákra és 0,28% a CD4⁺ fehérvérsejtekre. Egyetlen inkubációs idő sem befolyásolta a RILA értékét a CD8⁺ RILA értékekre nézve, azonban CD4⁺ RILA esetében a posztirradiációs idő növekedése változtatott a RILA értékén. Teszteltem a módszer régóta vitatott CO₂-os tenyésztési lépésének szükségességét. Folyamatban van az úgynevezett preirradiációs idő elhagyásának tesztelése, és így a teljes teszt 4 napról 3 napra való rövidítése, annak érdekében, hogy a módszert könnyebb legyen klinikai gyakorlatba emelni. Eddigi eredményeim alapján a módszer hasonló eredményeket mutat, mint a historikus kontroll (7,4% CD8⁺ RILA). Azonban a mellékhatásokkal való validálás fog választ adni a felhasználhatóság kérdésére. Vizsgáltam a sugárkezelés kiváltását bleomycinnel, hogy ne vegye el a vizsgálat a besugárzók gépidejét a betegek kezelésétől, illetve, hogy olyan laborok is átvehessék a vizsgálatot, akiknek nincs módjukban besugarazni a vérmintákat.

Kísérleteim eredményeként megállapítottam a határértékeket cervix tumoros betegek esetében. Bizonyítottam, hogy elhagyható a CO₂ a limfociták tenyésztése során, és hogy a RILA eredményeket nem befolyásolják a különböző inkubációs idők CD8⁺ limfociták esetében. Továbbá ígéretesnek tűnik a bleomycin 70 és 80 µg/ml koncentrációban (5 órán át alkalmazva 24 órával a minták feldolgozása előtt) a minták besugárzásának kiváltására. Eredményeimet azonban még validálni kell a mellékhatásokkal, ami a kétéves nyomon követés végén lehetséges.

TÓTH MÁTÉ
Biomérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

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

A sejtciklus során stabil mRNS expresszióval rendelkező referenciagének azonosítása

Kulcsszavak: qPCR, referenciagének, sejtciklus, U937, MOLT4

A reverz transzkripcióval kapcsolt kvantitatív PCR napjaink egyik leggyakrabban alkalmazott molekuláris biológiai módszere. Széles körben használják tudományos kutatások, valamint orvosdiagnosztikai eljárások során (Kubista et al. 2006). Az mRNS expresszió meghatározásához megfelelő referenciagéneket kell alkalmazni, ezek megtalálása azonban komoly kihívást jelent (Kozera and Rapacz 2013). A kutatócsoportban már sikeresen azonosítottak különböző humán sejtvonalak között jól alkalmazható referenciagéneket (Rác et al. 2021). Munkám során két humán rákos sejtvonalon (U937, MOLT4) vizsgáltam a korábban már alkalmazott referenciagének (RPL30, SNW1, PUM, ACTB, TBP, HNRNPL, CNOT4, PPIA, GAPDH, UBC, PCBP1, IPO8) mRNS expresszióját a sejtciklus során RT-qPCR technikával. Ahhoz, hogy információt szerezhessenek az adott sejtciklus fázisra jellemző expressziós mintázatokról a sejteket szinkronizálnom kellett, majd eltérő időpontokban vizsgálni a mintákat. A szinkronizálás sikerességét FACS módszerrel ellenőriztem. Az RT-qPCR mérésekből nyert adatokat három különböző, egymástól független módszerrel értékeltem ki, melyek az összehasonlító deltaCt módszer, a BestKeeper és a NormFinder szoftverek voltak. Célom volt olyan referenciagének azonosítása, amelyek expressziója stabil marad a teljes sejtciklus alatt, így segítve a sejtciklusfüggő folyamatok vizsgálatát, amelynek jelentős szerepe van a rákkutatásban. Mindkét sejtvonalon esetén sikerült megfelelő referenciagéneket azonosítanom, a MOLT4 sejtvonalon a CNOT4, TBP, GAPDH géneket, míg az U937 sejtvonalon az SNW1, TBP és RPL30 géneket. Az eredmények összegzése alapján sikeresen találtam mindkét sejtvonalon stabil expresszióval rendelkező referenciagéneket is, amelyek az SNW1 és GAPDH gének. Az elért eredmények nagy segítséget jelentenek a sejtciklus-függő génexpressziós vizsgálatok tervezésében. Kutatómunkám továbbá arra is felhívja a figyelmet, hogy minden sejtvonalon esetén kritikus a referenciagének stabilitásának ellenőrzése.

A minták és mérési pontok nagy száma miatt a kísérleteket többen végeztük. Én minden alfeladatban részt vettem, a szinkronizálási és legyűjtési kísérletekben, mintaelőkészítésben, eredmények elemzésében, azonban a legtöbbet a qPCR mérések során dolgoztam.

Biotechnológia és élelmiszerkémia

KOZMA BENCE TAMÁS
Vegyésmérnöki
MSc, 4. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Jankovics Hajnalka
tudományos főmunkatárs, PE MK

Rekombináns tesztfehérjék fejlesztése

Kulcsszavak: Nyugat-nílusi láz, egydoménes antitest, APEX2, immunanalitika, laterális áramlási teszt

A Nyugat-nílusi láz (West Nile Fever, WNF) olyan szúnyogcsípéssel terjedő vírusos megbetegedés, amely nagyon elterjedt meleg éghajlatokon. Napjainkban azonban a klímaváltozásnak köszönhetően a mérsékelt éghajlaton, így hazánkban is egyre gyakrabban mutatható ki. A WNF elsősorban embereket, lóféléket, illetve egyes madarakat betegít meg, és a fertőzés kimenetele az emberekesetében egészen a halálos meningoencephalitisig (az agyvelő és az agyhártya együttes gyulladása) is terjedhet. A halálozási ráta az életkor növekedésével emelkedik, illetve mivel nem létezik ellene védőoltás, fontos a korai diagnózis felállítása. Az immunanalitikai eljárások napjainkban jelentősége egyre nagyobb, mind az orvosi diagnosztikában, mind a molekuláris biológiai kutatásokban. Ezek a módszerek a specifikus molekulafelismerésen alapulnak, melyre a fehérjék kiválóan alkalmasak. Az egydoménes antitestek (sdAb) egyetlen polipeptid láncból álló stabil antitestek, amelyek baktériumokban gazdaságosan állíthatók elő, genetikailag könnyedén módosíthatók, a sejtfalon áthatolnak, illetve hozzáférhetnek rejtett kötőhelyekhez is. Az egydoménes antitestek lehetséges orvosi alkalmazásainak feltérképezése egy jelenleg is intenzíven kutatott terület. Az immunanalitikai eljárások kolorimetriás detektálására gyakran alkalmaznak peroxidáz enzimeket. Közülük a szója-aszkorbát-peroxidáz APEX2 enzim nagy előnye, hogy akkor is megtartja funkcionális aktivitását, ha redukáló környezetben (pl.: baktérium citoszolban) fejeződik ki a sejtben belül, mivel nem tartalmaz diszulfidhidat, így könnyebb előállítani. Munkám során olyan antitest-peroxidáz fúziós fehérjét hoztam létre, mellyel a vírus detektálására egyszerűsített immunanalitikai eljárások fejleszthetők.

LACZKÓ ANNA ORSOLYA
Biológia
BSc, 3. félév

Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Czéh Árpád
tudományos munkatárs, PTE TTK

Mikotoxinok előfordulásának vizsgálata magyarországi kukoricamintákban

Kulcsszavak: fonalas gombák; mikotoxinok; klímaváltozás; immunanalitika; kukorica

A klímaváltozás miatt a penészgombák terjedésére lehet számítani a Kárpát-medencében és egész Európában. Jelen tudásunk szerint a penészgombák több, mint 300 különböző hatású mikotoxint termelnek, amelyek kutatása az élőkre gyakorolt súlyos és káros hatásai miatt rendkívül nagy jelentőséggel bír. Dolgozatom készítése során magyarországi kukoricamintákból határoztam meg a legfontosabb mikotoxinok – úgy, mint aflatoxinok (AFB1, AFB2), ochratoxin-A, deoxinivalenol, T2-toxin, zearalenon, fumonizin B1+B2+B3 – koncentrációját analitikai módszerrel és elemeztem ezen koncentrációértékek határértékekhez való viszonyát. A mérések kivitelezése MycoFossTM módszerrel történt, amely képes az érdeklődésünk tárgyát képező hat mikotoxin egyidejű vizsgálatára. A vizsgált mintákban legalább három mikotoxin jelent meg egyidejűleg, a minták döntő többsége viszont mind a hat mikotoxint tartalmazta. A kapott eredményekből megállapíthattuk, hogy legnagyobb arányban az ochratoxin-A, valamint a fumonizin B1+B2+B3 fordult elő az élelmezési határértéket meghaladó mennyiségben. Ezen eredmények fényében a multimikotoxinok együttes hatásának veszélyéről beszélhetünk, mivel a klímaváltozás olyan penészgombafajok szaporodását teszi lehetővé, amelyek eddig nem, vagy csak kisebb mértékben voltak jellemzőek hazánkra. A mikotoxin szennyezés így egyre nagyobb méreteket ölt, ezért a jelenség jövőbeli vizsgálata egyre fontosabbá válik. Mindezek miatt olyan vizsgálati módszerek fejlesztése és alkalmazása válik szükségessé, amelyek képesek a multimikotoxin hatás detektálására és monitorozására.

NAGY KRISTÓF BENCE
Vegyésmérnök
MSc, 4. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Koók László
egyetemi adjunktus, PE MK

Elektrokémiai N- és P- visszanyerés Abiotikus - és Mikrobiális Elektrolízis Cellák felhasználásával

Kulcsszavak: karbamid, foszfát, mikrobiális elektrolízis cella, elektrokémiai stabilizáció, ureáz

Az elmúlt évtizedekben egyre jelentősebbé vált az ún. Mikrobiális Elektrolízis Cellák (MEC) alkalmazása és kutatása. Ezeket a cellákat eredetileg a hidrogén szennyvízből történő előállítására fejlesztették ki, hiszen a hagyományos biológiai eljárásokhoz képest képes átlépni azok termodinamikai korlátait, nagyobb elméleti hidrogén hozamra képes viszonylag enyhe körülmények között. A szennyvíz alkalmazása azért lehetséges, mert a MEC képes a szerves anyagok széles körét hasznosítani szubsztrátként. A jelen munkában kationcserélő membránnal ellátott abiotikus elektrolízis és mikrobiális elektrolízis cellát vizsgálunk szimulált vizeletből történő nitrogén és foszfor visszanyerésre. A karbamid egy szerves vegyület, melyet az iparban és gyógyászatban széleskörben felhasználnak. Az ipari előállítása egy hosszú és kifejezetten energiaigényes folyamat, mely magas hőmérsékletet és nyomást igényel. Ehhez képest az emlősök szervezete a nitrogén tartalmú vegyületek metabolizmusa során karbamidot állít elő, mely a vizelettel együtt a szervezetből képes kiürülni. A vizelettel kibocsátott karbamid hasznosítását limitálja a környezetben csaknem mindenhol előforduló karbamid-bontó enzim, az ureáz, amely karbamidot ammóniára és szén-dioxidra bontja. A (bio)elektrokémiai cellákban a szimulált vizeletet katolitiként alkalmazva a katódreakció során jelentkező pH-növekedés felhasználható a karbamid (vizeletben található fő N-forrás) stabilizálására az ureáz karbamid-bontó enzim inhibíciója által. Mindemellett a P-tartalom az oldatból szilárd fázisú csapadék formájában nyerhető vissza. A stabilizált karbamidos oldat és a szilárd formában kinyert foszfát széleskörű ipari felhasználási potenciállal bír, pl. a műtrágya előállítás terén. A munkában vizsgálom az abiotikus és bioelektrokémiai rendszerek közti különbségeket, különös tekintettel a hatékonyságra, befektetett energia igényre, és a stabilizált oldatok tulajdonságaira. Az eredmények egyértelműen megmutatták, hogy az abiotikus elektrokémiai módszerek mellett a kisebb áramsűrűségeken üzemelő MEC rendszerek is képesek hatékony karbamid stabilizációra, illetve foszfor visszanyerésre.

OROSZ CSENGE
Vegyésmérnöki alapképzési szak
BSc, 9. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

SZNOPKA LILIÁNA KATA
Vegyésmérnöki mesterképzési szak
MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Németh Renáta
egyetemi adjunktus, BME VBK

Élelmi rost összetevők szerkezetalakító szerepének vizsgálata hajdina és köles alapú élelmiszermatrixokban

Kulcsszavak: arabinoxilán; béta-glükán; gluténmentes; rost-fehérje kölcsönhatás; mikroszerkezet

Az élelmi rostok fontos szerepet töltenek be táplálkozásunkban, köszönhetően számos előnyös, részben tudományosan is alátámasztott egészségügyi hatásuknak. Fő forrásaik közé tartoznak a különféle gabonafélék, melyek technológiai és táplálkozástani szempontból legjelentősebb rostösszetevői az ún. arabinoxilánok (AX) és a β -glükánok (BG). Ezen rostalkotók hatását számos tanulmányban vizsgálták már sikérfehérjéket (glutén) tartalmazó búza és rozs alapú matrixokban, azonban gluténmentes rendszerekre nézve kevés információ áll rendelkezésre az irodalomban. Kutatásunk célja AX és a BG adagolásának és/vagy inkorporációjának vizsgálata hajdina és köles alapú gluténmentes matrixokban, annak érdekében, hogy mélyebb betekintést nyerjünk az élelmi rostok szerkezetalakító szerepébe sikérfehérjék hiányában. A dagasztási tulajdonságokat micro-doughLAB készülékkel, a viszkózus tulajdonságok alakulását pedig gyors viszkoanalizátorral (RVA) vizsgáltuk. A technológiai vizsgálatok eredményeit fehérjeösszetételi (SDS-PAGE), elektronmikroszkópos és ferulasav tartalom mérésekkel egészítettük ki. A dagasztási tulajdonságok vizsgálatok a BG tartalom növelése mind a köles-, mind a hajdina esetén konzisztencia növekedést okozott, míg a csirizedési tulajdonságok vizsgálatok jelentős különbség mutatkozott a két matrix viselkedésében. Hasonlóan, eltérő viselkedés mutatkozott a hajdina és köles matrixokban AX inkorporáció esetén, melyet redukció és reoxidáció alkalmazásával végeztünk. Az AX képes lehet oxidatív körülmények között keresztkötések létrehozására ferulasav oldalláncain keresztül a fehérjék tirozin aminosavaival, így feltételezhetően síkterületű polimer szerkezet létrehozására. Az eltérő viselkedés a két alapanyag makromolekuláris összetételének, különösen a fehérjeösszetétel különbözőségével magyarázható. Az SDS-PAGE vizsgálat eredményei részben igazolták az AX molekulák és a fehérjék közötti kölcsönhatásokat, ellentétben a szabad ferulasav tartalom változásával. Eredményeink rámutattak arra, hogy a rostkomponensek jellemzői mellett a vizsgált matrix tulajdonságait is figyelembe kell venni a rostok funkcionalitásának vizsgálatokor.

Kutatásunk a Kulturális és Innovációs és Minisztérium ÚNKP-22-4-II-BME-129 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. A kutatás kapcsolódik továbbá A TKP2021-EGA-02 számú projekt szakmai céljainak megvalósításához.

SZEIP JUDIT
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Szabó Edina
tudományos munkatárs, BME VBK
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Hirsch Edit
tudományos munkatárs, BME VBK

Probiotikus kakaópor készítmény előállítására folyamatos üzemű granulálási technológiával

Kulcsszavak: folyamatos üzemű granulálás; granulátumok; probiotikum; Lactobacillus acidophilus; kakaópor készítmény

A probiotikus készítmények jelentősége folyamatosan nő napjainkban. A szervezet mikrobiomjának megfelelő egyensúlyban tartásával megelőzhetőek különböző betegségek, ezért érdemes olyan jótékony baktériumokat bejuttatni a szervezetünkbe, amelyek támogatják a bélflóra egészséges működését. A probiotikumok beviteléhez azonban célszerű olyan készítményeket fejleszteni, melyek akár gyermekek számára is könnyen alkalmazhatók. Ilyen termékek lehetnek például a kakaópor alapú probiotikum-tartalmú készítmények. Az instant kakaóitalok nagy népszerűségnek örvendenek a gyors és egyszerű elkészítésüknek köszönhetően, főleg a gyermekek körében. Ezeknek a készítményeknek a legalapvetőbb összetevője a kakaópor, ami azonban a benne található kakaóvaj és egyéb hidrofób összetevők miatt nagyon rosszul oldódik vízben és tejben egyaránt, ezért az instant kakaóitalok gyártási technológiája során a kakaópor nedvesíthetőségén és oldhatóságán javítani kell. Másrészt a kakaópor rossz porfolyási tulajdonságait is fontos kiküszöbölni az egyszerűbb adagolhatóság elősegítése végett. A hatékony gyártás megvalósításához és a porfolyási tulajdonságok javításához a granulálás egy ígéretes módszer lehet, mely egy gyakran alkalmazott, folyamatos üzemmódban is megvalósítható technológia. Ennek egyik típusa a nedves granulálás, ahol valamilyen folyadékot használnak kötőanyagként a szemcsék összetapasztására, az agglomerátumképzésre. Ez a módszer alkalmas lehet arra, hogy kakaópor alapú probiotikum-tartalmú készítményeket gyártsunk, így a gyermekek számára fejlesztett probiotikumok palettája bővíthetővé válhat. Kutatómunkám célja ezért egy probiotikus kakaópor előállítása volt. Céлом eléréséhez egy olyan baktérium integrációját végeztem el a kakaóporba, amely segíti a bélflóra működését. A kiválasztott törzs a *Lactobacillus acidophilus* volt, ami egy jótékony hatású baktérium, hozzájárul a bélflóra egyensúlyának fenntartásához. Tejsavat termel, ezzel csökkentve a bélrendszer pH-ját, gátolva a káros mikroorganizmusok elszaporodását, továbbá elősegíti az emésztést, csökkenti a puffadást. A baktériumot a granuláló folyadékba szuszpendálva végeztem el a kakaópor granulálását, így kapva probiotikus kakaó granulátumokat.

VONYÓ VIKTÓRIA ZOLTÁNA
Vegyéssz mérnök
MSc, 1. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Lajtai-Szabó Piroska
PhD hallgató, PE MK

Streptomyces biofilm kialakítása kapilláris membrán bioreaktorban történő felhasználásra

Kulcsszavak: inokulálás; sejtdhézió; membrán gradosztat reaktor;

A természetben fellelhető mikroorganizmusok számos metabolit előállítására képesek. Ezek közül a szekunder metabolitok különleges figyelmet érdemelnek. Antibakteriális, vírusellenes és egyéb, a gyógyszeripar számára hasznos tulajdonságuk miatt fontos alapanyagok. A biotechnológia ennek érdekében az ipar számára különböző módszereket, technológiákat fejleszt.

Egy ígéretes megoldást jelenthet az általában szakaszos üzemű technológiákat alkalmazó gyógyszeripar számára az úgynevezett membrán gradosztat reaktor (MGR). Ez a bioreaktoroknak egy speciális típusa, mely lehetővé teszi a másodlagos anyagcsere-termékek folyamatos üzemű termelését. A reaktor központi elemeként szolgáló membrán felületére rögzül a termelő törzs által alkotott, egybefüggő biofilm. Ennek a kialakítása, vagyis a membrán inokulálása nagy kihívást jelent.

Munkám során a *Streptomyces coelicolor* baktériummal végeztem vizsgálatokat. Ez a faj egy aktinorodin nevű másodlagos anyagcsere-terméket állít elő, amely vírus-, tumorellenes és antibakteriális hatásairól ismert. Feladatom közé tartozott egy olyan kísérleti berendezés kidolgozása, amely jól reprezentálja az MGR reaktor működését, összeállítása viszonylag egyszerű, több párhuzamos mérés végezhető el vele, és jól nyomon követhető a biofilm állapota. Az összeállított berendezés egy kémcsőből és a benne elhelyezett kapilláris szálból állt, a betáplálás a kémcsőhöz rögzített fecskendőn keresztül valósult meg. Emellett a biofilm rögzítését segítő anyagokat teszteltem, melyek befolyásolták a sejteknek a membrán felületére történő megtapadását. A vizsgált paraméterek közé tartozott a kötőanyagok típusa – agar, tween 80 és cellulózgumi, vagyis CMC – és azok különböző koncentrációjának alkalmazása. A biofilmek eltérő fejlődését (biofilm vasta godása, szín változása) fotózással dokumentáltam, a fényképeket számítógépes program segítségével analizáltam.

A kísérletek azt bizonyítják, hogy a biofilm segédanyag nélkül és annak alkalmazásával is kialakul. Viszont az egyes beállítási pontok eltérést mutatnak a biofilm vastagságában és fejlődésének ütemében, valamint a membrán borítottságában.

A NANOSZŰRŐ MEMBRÁN HATÉKONYSÁGA A NÖVÉNYVÉDŐSZEREK VÍZBŐL TÖRTÉNŐ ELTÁVOLÍTÁSÁBAN

Kulcsszavak: peszticidek; tisztítás; karbofurán; propikonazol; acetamiprid

A mezőgazdaságban való túlzott használat következtében a peszticidek jelenléte a környező vizekben egyre gyakoribbá vált. [1] A környezetre és az emberi egészségre gyakorolt negatív hatásuk miatt a vízből való hatékony eltávolításuk szükséges. A tanulmány célja egy poliamid nanoszűrő membrán hatékonyságának kivizsgálása volt három peszticid eltávolítási folyamatában. A szűrési folyamat dead-end szűrőberendezéssel ment végbe, a nyomás értéke pedig 3 bár volt. A poliamid nanoszűrő membrán pórusainak áteresztő mérete - nagysága molekulatömegben (MWCO - Molecular Weight Cut Off) kifejezve 400 Da. A kiválasztott peszticidek a karbofurán, acetamiprid és propikonazol voltak, sorban 221,25 Da, 222,67 Da és 342,22 Da molekulatömeggel. A legnagyobb molekulatömegű peszticid, a propikonazol, a permeátumban nem volt kimutatható, ezért az eltávolítási hatékonysága a legmagasabb volt. Az alacsonyabb molekulatömegű peszticideknél azonban, kisebb szintű eltávolítását figyelhettünk meg a vízből. A nanoszűrő membrán magas MWCO értéke miatt, a karbofurán és az acetamiprid molekulatömegéhez képest ezeknek a peszticideknek a kiválasztódási aránya 85%, illetve 70% körül volt.

Ez a tanulmány a TwiNSol-CECs, 101059867 számú projekt keretén belül készült, amelyet a Horizon Europe program támogat. (<https://twinsol-cecs.com/>)

[1] Saleh, I. A., Zouari, N., & Al-Ghouti, M. A. (2020). Removal of pesticides from water and wastewater: Chemical, physical and biological treatment approaches. *Environmental Technology & Innovation*, 19, 101026.

A BÚZA ALKALMAZÁSA A MALÁTAKÉSZÍTÉSBNEN

Kulcsszavak: árpa; sör; komló; malátázás; enzim

A sörmaláta előállítása során a fő technológiai műveletek alapját a gabonában lévő anyagok biokémiai változásai képezik, amelyek a csírázás során, valamint a maláta szárítása során következnek be. A malátázás fő célja az enzimek kinyerése. A csírázás feladata csak az, hogy olyan terméket kapjunk, amelyben a lehető legtöbb enzim található. A malátázás során az árpa egy „tökéletlen” csírázási folyamaton megy keresztül, amely enzimeket szabadít fel vagy aktivál, hogy lebontsák az endospermium sejtfalát, és keményítőszemcséket szabadítsanak fel az endospermium mátrixból. A búza az árpához hasonló módon malátázható. Fontos, hogy a szemek ne sérüljenek meg, jó csírázásúak legyenek, és ne fertőzzék meg őket mikroorganizmusok. Magasabb viszkozitást ad a sörnek, a magas molekulatömegű fehérjéknek köszönhetően javítja/stabilizálja a habot, befolyásolja a sör aromáját, ízstabilitását és színét. Munkám során az őshonos búzából előállított maláta tulajdonságait vizsgáltam a hagyományos sörárpából készült malátához viszonyítva annak érdekében, hogy meghatározzam alkalmas-e a sörgyártásban való felhasználásra. Az újvidéki Növény- és Zöldségtermelő Intézet kínálatába tartozó, 2023-ban betakarított őshonos búzafajtát vizsgáltam meg. Elvégeztük a natív, valamint a malátázott búza elemzését, amely a szem mechanikai, élettani és kémiai tulajdonságainak meghatározását tartalmazza. Továbbá elvégeztem a búzamalátából előállított komlós sörlé minőségellenőrzését majd az ezután következő erjedés során kapott fiatal sör minőségellenőrzését is. A vizsgált búzamaláta megfelel a meghatározott kritériumoknak, ami azt jelzi, hogy a csírázás elég hosszú ideig tartott, és a kapott malátát az áztatás során megfelelő mértékben beáztatták. A búzamalátából kapott cefre színe, a komlóforralás után kapott sörlé és az erjesztés után kapott fiatal sör színe alapján megállapítható, hogy a vizsgált őshonos búzafajta felhasználható világos sör előállításához. Valamennyi analitikai meghatározás standard EBC és/vagy MEBAK elemzési módszerek szerint történt (Analytica - EBC, 2008; MEBAK, 2011).

A MONONÁTRIUM-GLUTAMÁT HATÁSA A NÖVÉNYEKRE

Kulcsszavak: Búza; Műtrágya; Összehasonlítás;

A kutatásban a mononátrium-glutamát hatásai voltak megfigyelve növényekre alkalmazva. A kérdés az volt, hogy tényleg lehet-e műtrágyaként használni növénygondozásra. Két kísérlet készült, mindkettő otthoni körülmények között. Mind a kettő kísérlet búzán lett végezve. Az első kísérletben kettő pohárban lett elvetve egy-egy maréknyi búza, és három héten át voltak növesztve. Az egyikhez mononátrium-glutamátos vizes oldat lett készítve, amellyel az egyik búza volt kezelve egyszer hetente. A kísérlet végén az MSG pozitív hatása volt megfigyelhető a búzára, mivel az MSG-vel kezelt búza jobban kifejlődött a másiknál, amelyik csak vízzel volt öntözve. A másik kísérletben már öt pohárban volt búza növesztve, amiből három lett MSG-vel kezelve. Mindegyik pohárba 50 búzaszem lett elvetve. Szintén három héten át volt követve a növekedés. Ezúttal is készítve lett egy mononátrium-glutamátos vizes oldat. Egy szórófejes palackba 100mL vízre 5g MSG lett téve. Az első búza csak vizet kapott. A második búza heti egyszer, a harmadik heti háromszor, a negyedik pedig heti ötször volt az MSG oldattal fűjva. Az ötödik búza hagyományos műtrágyát kapott. A kísérlet lefolytával az volt látható, hogy az NPK műtrágyával kezelt búza fejlődött leginkább. Szorosan mögötte volt fejlődésben a vízzel locsolt búza. Az MSG-vel kezelt búzák nem mutattak nagy fejlődést, de az elmondható, hogy az a búza, amelyik legtöbb MSG-t kapott fejlődött a legkevesebbet. Ezáltal elmondható, hogy túl nagy mennyiségben nem ajánlatos használni a mononátrium-glutamátot, viszont kis mennyiségben pozitív fejlődést tud előidézni növényeknél.

ZRINYI ANNA
Vegyésmérnöki
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Bell Evelin
egyetemi adjunktus, BME VBK
Alács Bálint
doktoráns, BME VBK

Hisztidinjelölt enzimek szelektív rögzítési lehetőségeinek vizsgálata és optimalizálása

Kulcsszavak: Biokatalízis, enzimrögzítés

TDK munkám során célom volt a Kutatócsoportban korábban alkalmazott szelektív enzimrögzítési módszerek részletesebb vizsgálata. A szelektív enzimrögzítés során hisztidinjelölt enzimeket rögzítettünk kevert felszínű polimer hordozókon. Korábban a csoportban végeztek már optimalizálási kísérleteket melyek során egy kereskedelmi epoxicsoportokat tartalmazó szilárd polimert módosítottak aminok és biszaminok keverékével, majd a biszaminokon keresztül fémionok komplexálására alkalmas csoportokat alakítottak ki. Ezt a munkát folytatva kiterjesztettem az alkalmazott felületmódosító ágensek körét és eddig egy enzimmel, a fodros metéllő petrezselyemből származó fenilalanin ammónia-liázzal vizsgáltam a felületmódosítás hatását a kapott rögzített enzimkészítményekre.

Az enzimrögzítési módszer lényege, hogy a hisztidin jelöléssel ellátott rekombináns fehérjék szelektíven komplexet képeznek a felületen rögzített fémionnal, majd ezt követően kovalensen kapcsolódnak a hordozó epoxicsoportjain keresztül. A rögzítés során minden esetben kobaltionkat alkalmaztam a fém-fehérje komplex kialakításához. A rögzítést követően a biokatalizátorokat a fenilalanin ammóniaeliminációs reakciójában vizsgáltam. Az eredmények alapján elmondható, hogy míg a biszaminok minősége alig befolyásolta az aktivitást, addig a monoaminok jelentős hatással voltak a végső biokatalizátor aktivitásra.

Mélyhűtött sütőipari termékek minőségjavításának lehetőségei

Kulcsszavak: elősütött-sokkolt termék; módszerfejlesztés; reológiai tulajdonságok; bélzetállomány; fehérje- és szénhidrát összetétel

A sokkolással készült mélyhűtött sütőipari termékek jelentősége az utóbbi évtizedekben rengeteget nőtt. Ennek okai, az eltarthatósági-, és minőségmegőrzési idő növelése és a készre sült termékek gyors előállításának lehetősége. Nem megfelelő alapanyag, technológia, eljárás alkalmazásakor, azonban a sikérszerkezet károsodhat, az élesztő vagy a kovász enzimeinek aktivitása csökkenhet, a tárolás során az amilopektin retrogradációja játszódhat le. Mindezek a frissen készült termékekhez képest kedvezőtlenebb élvezeti értékű, kisebb fajlagos térfogatú és keményebb bélzetű termékeket eredményezhetnek. A kedvezőtlen hatások kiküszöbölésére az ipar jelenleg többféle megoldást alkalmaz, mint például adalékanyagok használata, a gyorsítás folyamatának optimalizálása, a gyártás automatizálása a termékminőség standardizálása céljából. Ugyanakkor az alapanyag (a lisztek, gabonaőrlemények) termékminőségre gyakorolt hatása, annak elméleti összefüggései, az irodalomban is csak részben feltártak. Különösen igaz ez az egészségesebb, rostokban gazdag sütőipari termékekre.

Munkám alapvető célja az őrlemény alapanyagok összetételi és reológiai tulajdonságai és az elősütött sokkolt, mélyhűtve tárolt termékek minősége közötti összefüggések vizsgálata, valamint speciális búzarostfrakciók alkalmazási lehetőségeinek tanulmányozása. Mivel ehhez sem laboratóriumi technika, sem vizsgálati módszertan nem állt korábban rendelkezésre, munkám első fázisában ezek megteremtésén dolgoztam. Ezt követően vált lehetségessé az eltérő fehérje (siker) és szénhidrátösszetételű és rosttartalmú alapanyagok vizsgálata. Vizsgáltam az őrlemények összetételét, reológiai tulajdonságait, a végtermékminőséget és mindezt összehasonlítottam a fagyasztási technológiai nélkül előállított termékek tulajdonságaival.

Eredményeim alapján egyértelmű, hogy az alaplisztek jelentős eltérést mutatnak a reológiai tulajdonságok tekintetében – vagyis ezek megfelelőnek tűnnek a tervezett cél elérése szempontjából. A keveréssel megváltoztatott szénhidrát és rostösszetételű őrlemények tulajdonságai részben nem várt módon, eltérő irányban változtak, összességében az alapanyagok közötti eltéréseket csökkentették. Ugyanakkor a végtermék minőség változása nem egyirányú – ismét ráirányítva a figyelmet az összetétel-reológia-végtermékminőség közötti bonyolult viszonyokra. A jelenségek értelmezése folyamatban van. Dolgozatomban az új kutatási terület elért eredményeit összegzem. Kutatómunkám kapcsolódik a TKP2021-EGA-02 számú projekthez.

Elméleti kémia I.

FEKETE CSILLA
vegyészmérnöki
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Benkő Zoltán
egyetemi docens, BME VBK

Másodrendű kölcsönhatások vizsgálata organokatalizált foszfa-Michael-addícióban

Kulcsszavak: kvantumkémia; mechanizmus; DFT-számítások; katalizátor; hidrogénhid

Az organokatalitikus reakciók tervezése és hatékonyságuk fejlesztése során szükséges megérteni a másodrendű kölcsönhatásokat (pl. hidrogénhidak, diszperziós kölcsönhatások stb.), amelyek jelentős szerepet játszanak a sebességmeghatározó lépés átmeneti állapotának stabilizálásában. Napjainkban számításon alapuló kémiai módszerekkel már megfelelő pontossággal tanulmányozhatóak a nemkovalens kölcsönhatások, és ezen módszerek igen hasznos eszközzé váltak a katalizátortervezésben.

Korábbi munkám során metil-akrilát és bisz-(2,4,6-trimetilbenzoil)-foszfán tetrametil-guanidin által katalizált reakcióját tanulmányoztam kvantumkémiai módszerekkel, amely reakciót kísérletileg együttműködő partnereink vizsgálták (Grützmacher-csoport, ETH Zürich). Különböző reakcióutakat derítettem fel, amely esetén szobahőmérsékleten végbemehet a reakció a kísérleteknek megfelelően. A reakció nemcsak metil-akrilát, hanem más Michael-akceptorok esetén is végbement. TDK munkám során kvantumkémiai módszerekkel vizsgáltam a bisz-(2,4,6-trimetilbenzoil)-foszfán és különböző elektrofilicitással, illetve szerkezettel rendelkező Michael-akceptorok reakcióját tetrametil-guanidin katalizátor jelenlétében, illetve hiányában. Tanulmányoztam továbbá az aktiválási gátak és különböző elektrofilicitást leíró deskriptorok kapcsolatát, illetve a katalizátor és a reagensek által kialakított másodrendű kölcsönhatások, hidrogénhidak jelenlétét, erősségét. A választott DFT-funkcionál pontosságának ellenőrzése céljából proton lecsatolt ³¹P-NMR kísérleteket is végeztem el néhány Michael-akceptor esetében, mely kísérletekből meghatározható volt a sebességmeghatározó lépés aktiválási gátja.

GÁL DORINA REBEKA

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Papp Dóra

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Czakó Gábor

egyetemi docens, SZTE TTIK

Cl⁻ + NH₂I reakció dinamikájának modellezése

Kulcsszavak: nitrogén központ; bimolekuláris nukleofil szubsztitúció; reakciódinamika; átmeneti állapot; kvázi-klasszikus szimuláció

Dolgozatomban a Cl⁻ + NH₂I reakción keresztül vizsgáljuk a nitrogén központú bimolekuláris nukleofil szubsztitúciós (S_N2) reakciók viselkedését. A tárgyalt reakció típus részletes dinamikájának tanulmányozása a 20. század végén kezdődött [1]. Kutatócsoportunk 2018 óta foglalkozik N központi atomot tartalmazó S_N2 reakciókkal [2,3,4]. A többféle rendszerre elvégzett számítások eredményeinek összehasonlításán keresztül tanulmányozhatjuk, hogy hogyan hatnak a különböző nukleofilek és távozó ionok a reakciók kimenetelére és mechanizmusaira. Elsődleges célunk egy teljes dimenziós analitikus ab initio potenciálisenergia-felület (potential energy surface, PES) fejlesztése volt a Cl⁻ + NH₂I rendszerre, amelynek segítségével lehetőségünk nyílik az atommagok mozgásának követésére a reakció során. A csoportunkban korábban már feltérképezett stacionárius pontokat újabb szerkezetekkel bővítettük. Ezt követően a PES-en megkerestük a fontosabb stacionárius pontokat és összehasonlítottuk a kapott energia értékeket a megfelelő nagy pontosságú ab initio energiákkal. A PES-en futtatott kvázi-klasszikus trajektória (quasi-classical trajectory, QCT) szimulációk segítségével követtük a különböző reakcióutakat. A termékekre számított szórási szögeloszlásból, valamint a termékek belső, illetve relatív translációs energia eloszlásaiból tudtunk következtetni arra, hogy milyen mechanizmusok vannak jelen a reakció során. Emellett a reakció sztereodinamikájának vizsgálatára is volt lehetőség, amely központi kérdés a nem szénközpontú S_N2 folyamatok esetén. Különböző ütközési energiákon vizsgálva a reakciót azt találtuk, hogy 40 kcal/mol alatti energiák esetén az S_N2 szinte egyeduralgoló, magasabb energiákon viszont egyéb reakció típusok is megjelennek (pl.: proton-transzfer).

[1] J. Xie, W. L. Hase, Science, 352, 32 (2016)

[2] B. Hajdu, G. Czakó, J. Phys. Chem. A, 122, 1886 (2018)

[3] D. Papp, G. Czakó, Chem. Sci., 12, 5410 (2021)

[4] A. Giricz, G. Czakó, D. Papp, Chem. Eur. J., 29, e202302113 (2023)

GOMBÁS ANDRÁS
Vegyész
MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Szabados Ágnes
egyetemi tanár, ELTE TTK
Dr. Surján Péter
egyetemi tanár, ELTE TTK

Pivot-invariant Knowles partitioning at the multi-reference level

Kulcsszavak: kvantumkémia; perturbációszámítás; módszerfejlesztés; sokielektron elmélet;

A new approach in single reference many-body perturbation theory was introduced by P. Knowles in 2022. The essence of the idea is to derive the zero-order Hamiltonian of a quantum many-body system from a model by requiring that the zero-order is as close to the exact Hamiltonian as possible. The procedure was termed perturbation-adapted perturbation theory (PAPT). One conclusion of my recent analysis of the formulation of the method was that the efficiency of the single reference method for weakly correlated systems encourages towards the extension of the theory to the multireference approach. Projected multiconfigurational perturbation theory (pMCPT) served as the basis for the formulation of the multireference working formulae of PAPT at first as it required the least alteration of the original approach introduced by Knowles. Performance assessment of the newly developed pMCPT-PAPT method concludes the artefactual increased pivot-dependence causing severe losses in parallelity with the Full-CI benchmark calling for another pivot-independent formulation. A functional minimalisation based general derivation of PAPT enables for the formulation of another, more prominent multireference adaptation that was developed in the frame-based MCPT (fMCPT) framework. The computational cost, when optimally coded, is expected to scale in accordance with the single reference version, introducing a linear increase with the number of determinants in the CI expansion of the arbitrary reference function in case of the fMCPT version. Preliminary results of a few tests performed with a parallelized working code are presented to compare the pMCPT and fMCPT adaptations of MR-PAPT with benchmarking to Full-CI. Both versions are observed to be able to account for a significantly greater part of the correlation than the Moller-Plesset partitioning in strongly correlated cases while they maintain the advance of the original single reference version in the weakly correlated regime. The fMCPT version of PAPT is found to be superior to the similar methods making it a viable candidate for publication and application.

HORVÁTH ÁDÁM
Gyógyszervegyész-mérnöki
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Benkő Zoltán
egyetemi docens, BME VBK

Diels–Alder cikloaddíciók számításhoz kémiai vizsgálata: Hogyan lehet egy lépésből többlépés?

Kulcsszavak: Diel-Alder reakció, cikloaddíció, számításhoz kémia, foszfaetiolát (PCO-) anion

Munkám során anionos dienofilek Diels-Alder (DA) cikloaddícióit vizsgáltam számításhoz kémiai módszerekkel. Általánosan Diels–Alder-reakciónak nevezzük az 1,3-diének telítetlen vegyületekkel (dienofilekkel) való [4+2]-típusú cikloaddícióit. A DA reakciók a felfedezésük óta eltelt közel 100 év alatt a szintetikus szerves kémia területén elterjedten alkalmazott módszerré váltak. A számítástechnika fejlődésével az utóbbi évtizedekben ezen reakciók elméleti vizsgálata is előtérbe került, és lehetőség nyílt (többek között) ezen reakció típus pontos mechanizmusának feltérképezésére is.

A DA reakciók a periciklusos reakciók csoportjába tartoznak, ebből adódóan jellemzően koncertikusak. Azaz a reakció egyetlen lépésben játszódik le, és a két újonnan létesülő σ -kötés egyszerre alakul ki. Azonban, már a kezdeti számításhoz kémiai vizsgálatok bebizonyították alternatív (tehát nem-koncertikus) reakcióutak létezését már a legegyszerűbb, buta-1,3-dién etilénnel való reakciója esetében is. Ezen, nem-koncertikus útvonalon a két új σ -kötés időben elkülönülve, egymás után, egy köztitermék közbeiktatásával jön létre. Később kiderült, hogy ezen két kitüntetett (koncertikus és nem-koncertikus) mechanizmus mellett léteznek olyan, köztes esetek is, amikor a reakció koncertikus (tehát nincs közti termék), viszont a két új kötés kialakulásának mértéke a reakciókoordináta mentén nem azonos (aszinkron koncertikus mechanizmus). Habár ezen mechanizmusok az irodalomban ismertek, a közöttük fennálló kapcsolat, azaz, hogy hogyan válik egy koncertikus reakció többlépésessé, még nem ismert. A TDK dolgozatom során célom volt megvizsgálni ennek lehetőségét, illetve, hogy a reaktánsok (dién és dienofil) elektronikus tényezői, hogyan járulnak ehhez hozzá. Ehhez modellreakcióként a [PCO]⁻ anion 2-piranonnal való reakciót választottam, amely aszinkron koncertikus mechanizmussal rendelkezik. Elsőként megvizsgáltam 4-4 elektronszívó és elektronszállító csoport hatását a piranon elektronikus tulajdonságaira. A szűrés alapján kiválasztottam 4-4 diént, amelyek esetében felderítettem a teljes reakciómechanizmust. A 2-piranon szisztematikus módosításával a koncertikus reakció néhány esetben többlépésessé vált. Az eredmények alapján megállapítottam egy új összefüggést az aktiválási gátak és a dién LUMO energiája között, illetve a dién tekintetében azonosítottam további tulajdonságokat, amelyek valószínűsíthetően hozzájárulnak a többlépéses mechanizmus kialakulásához.

HORVÁTH TAMÁS
Vegyésszámérnök
MSc, 2. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyészszámérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Szóri Milán
egyetemi tanár, ME AVK
Dr. Rózsa Zsófia Borbála
egyetemi adjunktus, ME AVK

Radioaktív stroncium dekorporáció vizsgálata alkáliföldfém ionok komplexképződésének számítógépes analízisén keresztül

Kulcsszavak: Komplexképződés, DFT számítások, molekuladinamika

Az ipari tevékenységek során különböző fémionok jutnak az ökoszisztémába, amelyeknek jelentős szennyező hatásuk van a környezetre, és különösen mérgezőek az emberre nézve. Az atomerőművek működése, a múltbéli atomfegyver-kísérletek és katasztrófák következtében jelentős mennyiségű radioaktív stroncium (^{90}Sr). A radioaktív stroncium az egyik legveszélyesebb izotóp élettani hatásait tekintve, mivel képes helyettesíteni a kalciumot a csontvázban. A nukleáris biztonság és az atomenergia fenntartható fejlődése szempontjából kulcsfontosságú egy olyan kelátképző szer kifejlesztése, amely alkalmas ennek az ionnak a megkötésére. TDK dolgozatomban a (7,16-bisz-malonát)-1,4,10,13-tetraoxa-7,16-diazaciklooktadekán-bisz-malonsav (XI) vegyület kelátképző hatását vizsgáltam az alkáliföldfém kationokra, nevezetesen a kalciumra (Ca^{2+}) és a stronciumra (Sr^{2+}). A komplex ionokhoz való szerkezeti és kötési jellemzőit a B3LYP/def2-TZVP hibrid sűrűségfüggvény (DFT) alapú elméleti számításokkal vizsgáltam nagy pontossággal, vizes SMD polarizálható kontinuum modellben. A modell és az elméleti szint validálását kalcium és stroncium, etilén-diamin-tetraecetsavval (EDTA) alkotott komplexeivel végeztem el. Molekuladinamikai (MD) szimulációkkal a komplex további tanulmányozását is elkezdtem. A DFT és az MD eredmények összehasonlítását azzal a céllal végeztem el, hogy megbizonyosodjak az MD által kapott kation-komplex szerkezetek pontosságáról. Számításaim alapján megállapítottam, hogy a kiválasztott erőterek, a DFT eredményeivel összevetve jó egyezést mutatnak, felhasználhatók a molekuladinamikai szimulációkkal történő szabadenergiaprofil meghatározásában, ezáltal teljes képet kapva az ionok és a kelátképzők közötti kölcsönhatásokról.

MOLNÁR BALÁZS JÓZSEF

Kémia

BSc, 7. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Czakó Gábor
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dékány Attila Ádám
doktorjelölt, SZTE TTIK

A $\text{SiH}_3\text{I} + \text{F}^-$ reakció dinamikájának elméleti modellezése

Kulcsszavak: $\text{SiH}_3\text{I} + \text{F}^-$, PES, QCT, ManyHF, ab initio

Az $\text{S}_{\text{N}}2$ reakciók dinamikája mind kísérleti, mind elméleti módszerekkel intenzíven kutatott terület, ugyanis a szintetikus szerves kémia, valamint a biológia rendkívül széles körben alkalmazza ezen reakciókat. A szilícium centrumon lejátsszódo bimolekuláris nukleofil szubsztitúciókat magas reaktivitás, nagy változatosság és kedvező termodinamika jellemzi. Ennek ellenére jóval kevésbé tanulmányozottak a széncentrumú reakciókhoz viszonyítva. Munkánk során a $\text{SiH}_3\text{I} + \text{F}^-$ reakció dinamikájának feltérképezését tűztük ki célul. Ezt egy újonnan fejlesztett globális analitikus potenciálisenergia-felületen (PES-en) futtatott kvázi-klasszikus trajektóriák elemzésével kívántunk megvalósítani.

A stacionárius pontok geometriáit CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ(-PP) szinten optimalizáltuk, illetve ezen a szinten végeztük a rezgési analízis számításokat is. A kapott szerkezetek Descartes-koordinátáinak kiterítésével előállított 10 325 geometriából építettük fel a kezdeti illesztési készletet, melyek energiáit ManyHF-[CCSD-F12b + BCCD(T) – BCCD]/aug-cc-pVTZ(-PP) szinten számítottuk ki. A globális analitikus potenciálisenergia-felület kifejlesztéséhez a ROBOSURFER programcsomagot használtuk. A PES függvényt Morse-változók polinomjaként definiáltuk, melyek transzformált atom-atom távolságok. A fejlesztés kezdetén 5-öd, később 6-od rendű polinombázist alkalmaztunk, utóbbi esetén 10 810 koefficienssel. Illesztéshez a súlyozott legkisebb négyzetek módszerét használtuk. A végső PES-en számolt reakcióhők, valamint a stacionárius pontok energiái az ab initio értékekkel kémiai pontosságon belüli egyezést mutattak. A végső PES-en 1 930 000 kvázi-klasszikus trajektóriát futtattunk 1 és 80 kcal/mol közötti ütközési energia tartományban. Ezek elemzése során meghatároztuk az egyes termékcsatornához tartozó reakcióvalószínűség, valamint integrális hatáskeresztmetszet értékeket. A kapott eredmények azt mutatták, hogy a $\text{SiH}_3\text{I} + \text{F}^-$ és a kutatócsoportunk által korábban vizsgált $\text{SiH}_3\text{Cl} + \text{F}^-$ reakciók nagymértékben hasonlítanak, néhány érdekes különbségtől eltekintve.

RUDNER CSABA
Kémia Bsc
BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Czakó Gábor
egyetemi docens, SZTE TTIK
Gruber Balázs
PhD hallgató, SZTE TTIK

A $C_2H_5I + Cl$ reakció feltérképezése különböző kvantumkémiai módszerek segítségével

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

Dolgozatomban a $C_2H_5I + Cl$ reakció különböző reakciócsatornáit térképeztem fel kétféle kvantumkémiai módszer segítségével. Az egyes stacionárius pontokhoz tartozó geometriai optimálásokat és frekvenciaszámításokat először MP2/aug-cc-pVDZ elméleti szinten végeztem el, majd az így meghatározott szerkezetek segítségével elvégeztem a számításokat CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVDZ elméleti szinten is. Ezt követően ún. „single-point” energiaszámításokat hajtottam végre a kapott legpontosabb geometriák felhasználásával CCSD(T)-F12b módszer segítségével aug-cc-pVTZ és aug-cc-pVQZ bázisok mellett. Továbbá korrekciós számításokat végeztem, az ún. törzskorrekciót, δT és $\delta(Q)$ korrekciót, és spin-pálya korrekciót. Ezeknek köszönhetően megkaptam a legpontosabb energiaértékeket, és ezek alapján elkészítettem a reakció energiaprofilját, melyek bemutatják az egyes reakciócsatornához rendelhető energiagátakat és a termékcsatornák exo/endotermicitását. Hat féle reakciócsatornát vizsgáltam a munkám során: hidrogén-absztrakciót, jód-absztrakciót, hidrogén-szubsztitúciót, jód-szubsztitúciót, CH_2I -szubsztitúciót, és metil-szubsztitúciót. A legkisebb energiagáttal a hidrogén-absztrakciós reakciócsatorna rendelkezik, ezen belül az a reakcióút, amikor a klóratom a jódatom melletti hidrogént vonja el. A legmagasabb kinetikai gátja az előlről-támadásos hidrogén-szubsztitúciós reakciócsatornának van. A termékcsatornák tekintetében a hidrogén-absztrakciós és jód-szubsztitúciós reakciókon kívül minden esetben endoterm a reakció, melyek közül a legnagyobb endotermicitással a hidrogén-szubsztitúció rendelkezik. A legexotermebb jód-szubsztitúciós termékcsatorna.

SZABÓ ANDRÁS

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Daru János
egyetemi adjunktus, ELTE TTK
Mészáros Bence Balázs
PhD hallgató, ELTE TTK

Reakciók minimum energia útvonalának optimalizálása gépi tanulás felhasználásával

Kulcsszavak: Nudged Elastic Band; Minimum Energy Path; Optimalizáció; gépi tanulás; Delta Learning

A számítógépes kémiában egyre nagyobb teret nyernek a gépi tanuláson (ML) alapuló módszerek, melyek prediktív ereje – a hagyományos társaikkal ellentétben – a matematikai formalizmus és a közelítések javítása nélkül növelhető, pusztán a training adathalmaz kiterjesztésével. Diákköri kutatásom során az Andreas W. Hauser és kutatócsoportja által kifejlesztett ML-NEB módszertl teszteltem egy kiterjedt adatbázison, illetve annak egy Delta-Learning alap továbbfejlesztett verzióját javasoltam. A 17 reakción végzett elemzésünk alapján az általunk kifejlesztett eljárást az eredeti ML-NEB-hez képest nagyobb robusztusság és kisebb hibák jellemzik.

Számszerűsítve: algoritmusunk a Direct-ML alapú NEB módszernél háromszor robusztusabb, miközben az eredeti NEB algoritmushoz képest négyszer kevesebb erőhívást igényel.

TAR-PÁLFI HELGA

Kémia

BSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

*Dr. Perczel András
egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Bódy István Levente
PhD hallgató, ELTE TTK*

*Fazekas Zsolt
tudományos segédmunkatárs, ELTE TTK*

**Hazai mutáns transztiretin tetramerizációjának vizsgálata in silico módszerekkel a jobb
terápiás stratégiáért**

Kulcsszavak: Transztiretin amiloidózis; hazai mutáns; in silico; vegyes tetramer

A Transztiretin amiloidózis (ATTR) egy főként időseket érintő progresszív betegség, amely a Transztiretin fehérjéből képződő amiloid szálak szerkezet szerte történő lerakódásával jár, az életminőség romlását okozza és kardiális formája halálos kimenetelű. Jelenleg a rendelkezésre álló összes gyógyszeres terápia azon az elven működik, hogy a natív formában tetramerikus Transztiretint (TTR) a kóros folyamat első lépésénél, a tetramer disszociációnál megállítsa a tetramer szerkezet stabilizálásával. A magyar populáció vizsgálata kimutatta, hogy a fehérje H88R mutációja érinti a legtöbb magyar családot. A mutáció legjelentősebb hatása, hogy teljes mértékben megakadályozza a fehérje tetramerizációját, amely súlyos aggályokat vet fel a gyógyszeres kezelések hatásosságával kapcsolatban. A gyógyszerek működésének egy lehetséges működési módját ennek ellenére az jelentheti, ha a betegekben heterozigóta módon előforduló TTR H88R fehérje képes a vad típusú TTR-rel vegyes tetramert képezni, ám erre vonatkozóan eddig semmilyen kutatás nem folyt. A kutatásom témája a transztiretin fehérje, H88R mutánsának tetramerizációs hajlamának vizsgálata volt, in silico módszerekkel, azzal a céllal, hogy megállapítsuk, képes lehet-e a TTR H88R a vad típusúval vegyes tetramert képezni, amely így a jelenleg rendelkezésre álló gyógyszerek célpontja lehet. Molekuladinamika szimulációkat futtattam az összes lehetséges mutáns kombinációról (7 szimuláció), majd ezekből, az egyes komplexek létrejöttéhez tartozó szabadentalpia változás meghatározása érdekében számításokat indítottam. Ezeket kiértékelve megállapítottam, hogy a vad típusú tetramerhez viszonyítva termodinamikailag nem kedvezőtlenebb bizonyos vegyes tetramerek létrejötte. Ezt az eredményt in vitro kísérlettel támasztottam alá. Vad típusú tetramer TTR-t monomer H88R mutánssal inkubálva MS alapú peptidterképezés segítségével mutattam ki a mutáns jelenlétét a tetramer frakcióból.

Elméleti kémia II.

BITÓ PATRIK
Vegyészmérnök
BSc, 4. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Szőri Milán
egyetemi tanár, ME AVK

Biológiai membránok megfestésére alkalmas fluoreszcens festékek gerjesztési tulajdonságainak vizsgálata kvantumkémiai módszerekkel

Kulcsszavak: kvantumkémiai módszertan; feszültségérzékeny fluoreszcens festékek; spektrális tulajdonságok; biológiai membránok

Dolgozatomban korszerű technológiai eszközök és elméleti modellek alkalmazásával egy olyan kvantumkémiai protokoll kidolgozására törekszem, amely eszközként szolgálhat a feszültségérzékeny fluoreszcens festékek gerjesztési tulajdonságainak predikciójához. Az ilyen festékek kulcsszerepet játszanak a biológiai membránok akciós potenciáljának nagy felbontású vizsgálatában, ezért hatékonyabb molekulatervezési stratégiák kidolgozása közvetlenül hozzájárulhat az orvosbiológiai kutatások előmozdításához.

Kutatásom célja a legmodernebb kvantumkémiai eljárások alkalmazhatóságának határainak feltérképezése, valamint olyan módszertan kidolgozása, amely a még nem szintetizált festékek gerjesztési tulajdonságainak pontos elméleti meghatározását is lehetővé teszi. A dolgozatomban bemutatom az általam alkalmazott kvantumkémiai módszerek elméleti alapjait, részletesen tárgyalom a választott kvantumkémiai módszertant és ismertetem az elért eredményeket, azok pontosságát, valamint értelmezését.

A számítások központjában a festékek alapvető spektrális és dinamikai tulajdonságai állnak, mint például az abszorpció és fluoreszcens maximumok, intenzitások, átmeneti dipólusmomentumok, fluoreszcencia sebességi állandók, a gerjesztett állapotok élettartama, valamint a fotonindukált intramolekuláris elektrontranszfer mechanizmusának kvantumkémiai elemzése. Ezek a tulajdonságok alapvetően meghatározzák a festékek viselkedését és alkalmazhatóságát biológiai rendszerekben.

Az eredmények egy komplex, rugalmas és prediktív protokoll kidolgozását teszik lehetővé, amely nemcsak a jelenlegi kvantumkémiai módszerek hatékonyságát demonstrálja, hanem új utakat is nyit a kívánt spektrális tulajdonságokkal rendelkező molekulák tervezésében. Ezáltal dolgozatom hozzájárul a kvantumkémia és a molekulatervezés interdiszciplináris fejlődéséhez, valamint a biológiai membránok vizsgálatában alkalmazható innovatív megoldások kidolgozásához.

ECSERI GÁBOR ANDRÁS

vegyész

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Dr. Fábri Csaba

tudományos főmunkatárs, ELTE TTK

Dr. Császár Attila Géza

egyetemi tanár, ELTE TTK

Quantum mechanical calculation of reaction rate coefficients

Kulcsszavak: reaction dynamics; bimolecular reactions; autocorrelation functions; reactive flux; thermal flux

Numerous methods have been developed for the computation of temperature-dependent reaction rate coefficients. The most widely employed methods neglect, partially or fully, the quantum effects. During my work, I implemented a fully quantum mechanical method, originally proposed by Miller, Schwartz and Tromp [1], which allows the direct determination of temperature-dependent reaction rate coefficients. This means that there is no need for the expensive and troublesome computation of detailed, state-to-state information. The algorithm I developed and implemented follows a five-step procedure: (1) diagonalization of the so-called thermal flux operator, (2) time propagation of selected thermal flux eigenfunctions, (3) evaluation of the so-called flux autocorrelation function, (4) integration of the flux autocorrelation function, and (5) division of the result by the reactant partition function.

The code I developed is a significant extension of the GENIUSH program package, developed in our research group. GENIUSH was originally designed for the (quasi-)variational solution of the time-independent nuclear Schrödinger equation. The general kinetic energy representation encoded in GENIUSH ensures that the code can be applied to any reaction scheme, once the potential energy surface and the internal-coordinate definitions are specified by the user. To validate my code, I performed computations on two model reaction systems: the one-dimensional Eckart barrier and the collinear $\text{H}_2 + \text{H} = \text{H} + \text{H}_2$ reaction. Finally, I applied my approach to the full-dimensional $\text{H}_2 + \text{D} = \text{H} + \text{HD}$ reaction. In the case of the Eckart potential the computed reaction rate coefficients showed good agreement with the analytical results. There is also excellent agreement with the literature results for the other two bimolecular chemical reactions, across a large temperature range. During the validation of my code, I identified issues with nonphysical eigenvalues of the thermal flux operator, which were avoided by introducing an additional term in the potential. There are several planned extensions of my research work. For example, I would like to treat systems with more than three atoms, and I would like to investigate the isotopic kinetic effect for reactions of astronomical interest, especially for systems containing light atoms and at low temperatures, where quantum effects are important.

[1] Miller, W. H.; Schwartz, S. D.; Tromp, J. W. *The Journal of Chemical Physics*, 79, 4889–4898 (1983)

ERDEI LAURA CSENGE

Kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Czakó Gábor

egyetemi docens, SZTE TTIK

Dr. Papp Dóra

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

A $F^- + PH_2I$ reakció dinamikájának modellezése saját fejlesztésű *ab initio* potenciálisenergia-felületen

Kulcsszavak: S_N2 ; proton absztrakció; központi atom; inverzió; kvázi-klasszikus trajektória

A számítógépek megjelenésével lehetőség nyílt szoftvereket is bevonni a tudományos kutatásokba. Ezek előnyeit használja ki az elméleti kémia is, ami különféle kémiai rendszerek és reakciók modellezésével foglalkozik. Számítógépes módszereket az egyik legfontosabb szerves reakciótípus, a bimolekulás nukleofil szubsztitúció (S_N2) vizsgálatára is előszeretettel alkalmaznak. A szén- és nitrogén centrumon lejátszódó S_N2 reakciókat már jóval régebben elkezdtek felderíteni, míg a foszfor, mint központi atom szerepe még kevésbé tisztázott. Dolgozatom témája a $F^- + PH_2I$ reakció dinamikájának modellezése. Először a már rendelkezésre álló stacionárius pontokból kiindulva random kitérítéseket végeztünk, hogy előállítsuk a kezdeti illesztési készletet egy potenciálisenergia-felület (PES) fejlesztéséhez. Az így kapott pontokra single point energiaszámításokat végeztünk ManyHF-BCCD(T)-alapú kompozit módszerrel a MOLPRO programcsomag alkalmazásával. Az analitikus PES fejlesztését a ROBOSURFER programcsomaggal végeztük 1-50 kcal/mol ütközési energia tartományban. Ezután kvázi-klasszikus trajektória szimulációkat futtattunk hét különböző ütközési energián. Az így kapott adatokat saját készítésű elemzőkóddal értékeltük ki. A benchmark és a PES-en kapott energiák jó egyezést mutatnak. A két fő termékcsatorna közül alacsony ütközési energiákon a szubsztitúció reaktivitása nagyobb, magasabb energiákon pedig a proton absztrakció válik kisebb mértékben dominánssá. A szórási szög eloszlás mindkét csatorna esetén előre szóródási hajlamot mutat, ami a lehasításos mechanizmusra utal. Szubsztitúció esetén a támadási szögnél 90° a preferált, ami egybevág a stacionárius pontok szerkezetével. A relatív translációs energia eloszlásokból azt állapítottuk meg, hogy a szubsztitúció az egész ütközési energia intervallumon inkább indirekt reakció, míg a proton absztrakció nagyobb energiákon direktté válik. Sztereo-kémiai szempontból a szubsztitúciós termékek nagyobb része inverziós, de az ütközési energia növekedésével a retenció aránya nő. Eredményeink hozzájárulnak a központi atom és a távozó ion reakciódinamikára gyakorolt hatásának szélesebb körű megértéséhez.

GÁL DORINA REBEKA

Kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Papp Dóra

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Czákó Gábor

egyetemi docens, SZTE TTIK

A $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) reakciók lehetséges útvonalainak nagypontosságú kvantumkémiai feltérképezése

Kulcsszavak: klóratom; metil-halogenid; stacionárius pont; átmeneti állapot; energiakorrekció

Dolgozatomban a $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) rendszerek négy lehetséges reakcióútját térképeztük fel, nagypontosságú kvantumkémiai módszerekkel. A vizsgált reakciók a hidrogén-absztrakció, hidrogén-szubsztitúció, halogén-absztrakció és halogén-szubsztitúció voltak. Első lépésként kisebb számítási igényű elméleti szinten (MP2/aug-cc-pVDZ) meghatároztuk a fontosabb stacionárius pontokat. A kapott szerkezetek paramétereinek pontosságát tovább növeltük csatolt-klaszter módszerrel, egyre nagyobb báziskészletek alkalmazása mellett végzett számításokkal (CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVDZ, CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ). A lehető legnagyobb pontosság elérése érdekében a kapott eredményeket tovább pontosítottuk energiakorrekciós számítások segítségével. Figyelembe vettük például a törzselektronok összehangolt mozgását. Vizsgáltuk kétféle relativisztikus hatás (skaláris relativisztikus effektus, illetve az elektronok pálya- és spin-impulzusmomentumának kölcsönhatásából eredő spin-pálya korrekció) hozzájárulását is. Összevetettük a különböző báziskészletekkel számított energiákat és tanulmányoztuk a báziseffektusokat. Megvizsgáltuk, hogy csatolt-klaszter módszer használata során, a magasabb rendű gerjesztések figyelembevétele hogyan hat a végső energiaértékekre. Végül a harmonikus rezgési frekvenciák segítségével számítottunk zérusponti-energia korrekciót. A számított korrekcióknak köszönhetően sikerült rendkívül jó egyezést elérni a kísérleti reakcióentalpiákkal. Számos esetben megfigyelhetőek összefüggések az X halogén atom mérete és a számított korrekciók értékei között. A magyarázat legtöbb esetben a C–X kötés erősségének csökkenésében rejlik, amennyiben a halogén atom mérete nő. A Hammond posztulátum lehetőségét kínált az átmeneti állapotok szerkezeteinek kvalitatív értelmezésére. A Polanyi-szabályok segítségével következtetéseket vontunk le a tárgyalt rendszerek reaktivitásának hatékony növelésével kapcsolatban. A vizsgált rendszerek esetén azonban a rezgési szabadsági fokok nagy száma miatt eltérések várhatóak a Polanyi-szabályoktól.

GYIMESI RÉKA SÁRA

Kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Papp Dóra

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Czakó Gábor

egyetemi docens, SZTE TTIK

A $F^- + NH_2I$ reakció analitikus potenciálisenergia-felületének kifejlesztése és mechanizmusainak részletes vizsgálata

Kulcsszavak: reakciódinamika; potenciálisenergia-felület; kvázi-klasszikus trajektória módszer, SN_2 ; központi atom

A bimolekuláris nukleofil szubsztitúciós (S_N2) reakciók mechanizmusát szén centrum esetén már széles körben tanulmányozták. Az utóbbi időben nagyobb figyelmet kaptak az olyan S_N2 reakciók is, amelyekben más heteroatom szerepel központi atomként (pl.: Si, N, P). A munkám során a nitrogén-centrumú, $F^- + NH_2I$ reakció energetikájának és dinamikájának vizsgálatát végeztük nagy pontosságú kvantumkémiai elektronszámító- és kvázi-klasszikus trajektória(QCT)-módszerekkel.

A kutatócsoportunkban korábban magas elméleti szinten meghatározott stacionárius pontokat [1] kiegészítettük az általam számított szerkezetekkel. Ezt követően analitikus potenciálisenergia-felületet (PES) fejlesztettünk a ROBOSURFER program [2] segítségével, automatizált eljárással. A PES felhasználásával QCT szimulációkat futtattunk széles ütközési energia tartományban a $F^- + NH_2I$ rendszer dinamikai vizsgálatához. Az eredmények elemzéséhez az általam írt elemzőprogram-kódot használtuk fel. A reakció vizsgálata során különös figyelmet fordítottunk a sztereodinamika alakulására, a távozó ion és a központi atom hatás vizsgálatára mellett. A reakciók mechanizmusaira a termékek szórási- és támadási-szögeloszlásából tudtunk következtetni. A $F^- + NH_2I$ rendszer esetében két fő reakcióutat térképeztünk fel. Az egyik a $F^- + NH_2I$ termékekhez vezető S_N2 reakció, a másik pedig a proton-transzfer, amely során $HF + NHI^-$ termékek keletkeznek. Meglepő módon az endoterm proton-transzfer reakcióút az összes vizsgált ütközési energián nagyobb valószínűséggel játszódott le, mint az exoterm S_N2 csatorna. A C-centrumú rendszerekkel ellentétben a $F^- + NH_2I$ reakció nem mutat sztereospecificitást. Az általános S_N2 reakciómechanizmusokon felül a csoportunkban a $F^- + NH_2Cl$ reakció esetén felfedezett [3] multiinverziós mechanizmus lejátszódását itt is megfigyeltük. Az $F^- + NH_2I$ rendszer energetikáját vizsgálva néhol jelentős eltéréseket tapasztaltunk a $F^- + NH_2Cl$ reakcióhoz képest.

[1] B. Hajdu, G. Czakó, J. Phys. Chem. A, 122, 1886 (2018)

[2] T. Győri, G. Czakó, J. Chem. Theory Comput., 16, 51 (2020)

[3] D. Papp, G. Czakó, Chem. Sci., 12, 5410 (2021)

HAFFNER ÁDÁM BALÁZS
Vegyésmérnöki
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Höltzl Tibor
tudományos főmunkatárs, HUN-REN-BME

Fémklaszter-katalizált szén-dioxid elektrodukción folyamatok szimulációja

Kulcsszavak: nanotechnológia; katalizátor; oldószer; szén-dioxid redukció; fémklaszter

Kutatómunkám során fémklaszter-katalizált szén-dioxid elektrodukción folyamatok szimulációjával foglalkozom sűrűségfüggő elméleten alapuló kvantumkémiai számítógépes modellezés segítségével. A szén-dioxid elektrodukción szimulációkat korábban jellemzően oldószer nélkül vagy implicit oldószerben végezték. Ezek a szimulációk gyakran nem írják le megfelelően az oldószer szerepét a folyamatokra nézve, amire munkám is rávilágított.

Emiatt szisztematikusan felépítettem egy modellt, mellyel hatékonyan és pontosan tudjuk szimulálni az elektrodukción folyamatok általános környezetét szolgáló vizes közeget, illetve az elektródot magát, amire a klasztert leválasztják. Fokozatosan növeltem a klaszter körül expliciten szimulált vízmolekulák számát, így eljutottam egy 35 vízmolekulával körülvett „nanocseppig”, amelyben a vízmolekulák komplex kölcsönhatásokat képesek kialakítani mind a klaszterrel, mind az adszorbátummal, mind pedig a szolvátburok további molekuláival.

A gyakorlati körülményekhez közelítve a modellt, megvizsgáltam az elektródfelület (melyre a klasztereket leválasztják) modellezésének lehetőségeit is, ennek szimulációjára vakanciával ellátott grafénfelületet használtam. A statikus szimulációkat követően a legérdekesebb szerkezeteken molekuladinamikai számításokat is futtattam. Ezek során megvizsgáltam a külső elektromos tér modellezésének lehetőségeit, amit elektronok, illetve káliumatomok hozzáadásával is megtettem. Utóbbi rávilágított arra, hogy az elektrolitban jelen lévő ionok szerepe szintén meghatározó az elektrodukción folyamatokra nézve.

A kapott eredményeket a modellépítés minden egyes fázisában összevettem az implicit oldószer, illetve a korábbi fázisok során kapott eredményekkel. A kölcsönhatások elemzése révén további tanulságokat vontam le a folyamatok jellegéről, illetve jellemzőiről, a tanulságokat a modell további bővítése, fejlesztése során felhasználtam. A kapott modell több szempontból megbízhatóbb eredményeket szolgáltat, mint az implicit oldószerben végzett szimulációk, hiszen utóbbiakban rézhidrid klaszterek képződése termodinamikailag kedvező, ami ellentmond a vártnak és explicit oldószerben kiküszöbölhető. Emellett külső feszültség alkalmazása nélkül jelentőssé válnak a klaszter oxidációjával járó effektusok, melyeket implicit oldószerben egyáltalán nem tudnak leírni a szimulációk és amik révén újabb potenciális termékek jelennek meg.

KÍGYÓSI MÁTÉ
Vegyész
MSc, 4. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Daru János
egyetemi adjunktus, ELTE TTK

Benchmarking ab initio protocols for high throughput cluster calculations

Kulcsszavak: high-throughput, cluster, bechmark, DBBSC, ab initio

The combination of machine learning potential development based on local correlation reference calculations and converged path integral simulations has been proposed by Daru et al. It was demonstrated that the resulting CCMD approach can yield results in excellent agreement with experimental data. However, the more than 3.5 million core hours necessary for the reference calculations imposes considerable limitations on the method's potential for routine application. In this work, I have investigated the cost-accuracy compromises of using different basis sets and approximations within the local coupled cluster approach to reduce the computational costs associated with the reference calculations employed in the CCMD framework. My results demonstrate that a suitably chosen combination of these settings and system size can potentially lead to 1-2 orders of magnitude speed-up, while potentially also increasing the accuracy of the reference calculations. In particular, we have shown that LNO-CCSD(T) in combination with DBBSC corrections, can lead to chemically accurate results with unprecedented throughput using moderate basis sets.

RÁCSAI BALÁZS

Kémia

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

*Témavezető:
Dr. Mátyus Edit
egyetemi docens, ELTE TTK*

Regularized relativistic corrections for molecular systems

Kulcsszavak: molekuláris kvantummechanika; nemrelativisztikus kvantumkémia; ECG bázisfüggvények; Hamilton-operátor; konvergenciajavítás

This research report elaborates on a newly developed methodology for obtaining regularized relativistic corrections for small molecular systems. This is a substantial step towards improving the precision of theoretical data for these systems, helping understand and verify the results of high-resolution spectroscopy at the edge of scientific knowledge.

The first section of the paper is dedicated to constructing the necessary theoretical framework, with the main topics being: the foundations of non-relativistic quantum chemistry, the variational method, explicitly correlated Gaussian functions (ECGs) and perturbative approaches.

Next, the importance of the square of the Hamiltonian operator is highlighted, detailing its applications for regularization techniques of relativistic corrections and exact energy lower bound calculations. With an understanding of the necessity of floating ECGs, three analytically unknown matrix elements are identified that cause this operator to become incalculable for molecules. A solution is then presented for evaluating these matrix elements in the form of an approximation, proposed by Beylkin and Monzón [1]. The key steps of this approximation's derivation are detailed, with the recounting of investigations into the choice of the parameters, and considerations regarding the shape of the basis functions.

The essence of this paper is focused on the integration of this approximation to evaluate the three problematic matrix elements identified. The required derivations are detailed along with the challenges and subcases that needed to be accounted for. In the end, the resulting methodology is exceedingly robust, backed by the promising numerical computations presented. Results of regularized singular operators of relativistic corrections are showcased for the He atom and the H₃⁺ cation. The paper concludes with a summary and outlook on ongoing and future works regarding the methodology.

[1] Beylkin G., Monzón L., Applied and Computational Harmonic Analysis, vol. 19, pp. 17–48, (2005)

SZABÓ ANDRÁS

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Daru János
egyetemi adjunktus, ELTE TTK
Mészáros Bence Balázs
PhD hallgató, ELTE TTK

Accelerating coupled cluster molecular dynamics of condensed phase aqueous systems using cluster-based delta-learning protocols

Kulcsszavak: Nudged Elastic Band; Minimum Energy Path; Optimalizáció; gépi tanulás; Delta Learning

A számítógépes kémiában egyre nagyobb teret nyernek a gépi tanuláson (ML) alapuló módszerek, melyek prediktív ereje – a hagyományos társaikkal ellentétben – a matematikai formalizmus és a közelítések javítása nélkül növelhető, pusztán a training adathalmaz kiterjesztésével. Diákköri kutatásom során az Andreas W. Hauser és kutatócsoportja által kifejlesztett ML-NEB módszert¹ teszteltem egy kiterjedt adatbázison, illetve annak egy Delta-Learning alap továbbfejlesztett verzióját javasoltam. A 17 reakción végzett elemzésünk alapján az általunk kifejlesztett eljárást az eredeti ML-NEB-hez képest nagyobb robusztusság és kisebb hibák jellemzik.

Számszerűsítve: algortimusunk a Direct-ML alapú NEB módszernél háromszor robusztusabb, miközben az eredeti NEB algoritmushoz képest négyszer kevesebb erőhívást igényel.

Fizikai kémia I.

BIRÓ RÉKA
Vegyész
MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:
Dr. Alapi Tünde
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Kisnyomású higanygőz és KrCl excimer lámpa hatékonyságának összehasonlítása UV/H₂O₂ és UV/PDS eljárások során

Kulcsszavak: vízkezelés; antibiotikum; excimer; mátrixhatás; fotolízis

Napjainkban számos biológiai hatással bíró, perzisztens mikroszennyező kerül felszíni és felszín alatti vizeinkbe, közegészségügyi és környezeti problémákat okozva. A SO₄⁻ és ⁻OH generálásán alapuló nagyhatékonyságú oxidációs eljárások kiegészítő vízkezelési módszerként lehetőséget kínálnak ezen vegyületek hatékony eltávolítására az ivóvíz kezelés során. A kisnyomású higanygőzlámpa (LPM) a vízkezelésben elterjedten használt fényforrás, mely 254 nm-es fényt bocsát ki. Az LPM lámpa alternatívája lehet a 222 nm-es fényt kibocsátó KrCl excimer lámpa, melynek használata a Covid-19 világitvány alatt terjedt el, elsősorban felületek és légterek fertőtlenítésére. Munkánk során UV/H₂O₂ és UV/PDS (PDS: peroxo-diszulfátion, S₂O₈²⁻) módszerek hatékonyságát vizsgáltuk a két fényforrás esetén, szerves modellvegyületként trimetoprim antibiotikumot használva. Az azonos elektromos teljesítmény (15 W) ellenére az LPM lámpa fotonfluxusa egy nagyságrenddel nagyobb, mint az excimer lámpáé. Azonban a H₂O₂ és a PDS 222 nm-re vonatkozó moláris abszorbanciája jelentősen meghaladja a 254 nm-re vonatkozó értéket, ami a foton fluxusból származó hátrányt részben kompenzálja. Ennek következménye, hogy az LPM lámpa esetén mindkét oxidálószer átalakulási sebessége csak kétszerese az excimer lámpa esetén mértnek. Azonban nem csak az oxidálószer, de a trimetoprim, és a biológiai kezelt kommunális víz, mint mátrix komponenseinek abszorbanciája is számottevően nő a hullámhosszúság csökkenésével. Következésképpen az oxidálószer, a mátrix szerves és szervetlen komponensei és a trimetoprim között kialakuló kompetíció a fotonokért a két fényforrás esetén különböző mértékben befolyásolja a szerves célvegyület átalakulásáért felelős gyökök képződésének a sebességét. A 222 nm-es KrCl excimer lámpa korlátai ellenére jó alternatívája lehet a vízkezelésben használt kisnyomású higanygőzlámpának az UV/PDS és UV/H₂O₂ eljárásoknál. A szervetlen és a szerves vegyületek 222 nm-re vonatkozó nagyobb moláris abszorbanciái miatt azonban az egyes komponensek között sokkal erősebb verseny alakul ki a fotonokért, mint a 254 nm-es fotolízis esetében, amit mindenképpen figyelembe kell venni a működési paraméterek optimalizálása során.

CZUNA ALEXANDRA

Vegyész

MSc, 3. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:
Dr. Papp Gábor Csaba
egyetemi docens, DE TTK*

A $[\{\text{RuCl}_2(\text{mtpms})_2\}_2]$ -komplex által katalizált hangyasav bontás tanulmányozása

Kulcsszavak: Homogén katalízis; Hidrogén tárolás; Hangyasav bontás

A hidrogén gáz megfelelő tárolási módjának, majd üzemanyagként való felhasználhatóságának érdekében meg kell találnunk a költséghatékony és kedvező tárolási módot. Ilyen lehetőséget biztosít számunkra az, amikor kémiai kötéseket kialakítva tároljuk a hidrogént, az ilyen típusú rendszerekben hosszú ideig tárolható a H_2 veszteség nélkül. Az OTDK dolgozathoz kapcsolódó kutatásaim során a $[\{\text{RuCl}_2(\text{mtpms})_2\}_2]$ -komplex katalizátor tanulmányozását végeztem el. A komplexek szintézise után vizsgáltam a katalitikus hangyasav bontást és a különböző feleslegben alkalmazott halogenid ionok hatását a gázfejlődési reakcióban. A mérések kivitelezésére atmoszférikus, termosztált gázbüréttát használtam. A $[\{\text{RuCl}_2(\text{mtpms})_2\}_2]$ komplex esetében vizsgáltam a pH hatását a bontási reakcióra és ennek eredményeként azt kaptam, hogy 2:8 arányú $\text{HCOOH}/\text{HCOO}^-$ rendszerben érhető el a maximális reakciósebesség ($\text{TOF} = 1075 \text{ h}^{-1}$). Ezt követően pedig két eltérő kezdeti pH-val rendelkező rendszerben tanulmányoztam a halogenid ionok hatását 2–20000× feleslegekben alkalmazva.

Jelentős eltérést tapasztaltam a két rendszer között. A 2:8 $\text{HCOOH}/\text{HCOO}^-$ -t tartalmazó oldatokban – kezdeti pH 4,30 – a legjelentősebb hatást a bromid ionok fejtették ki a bontási reakcióra, ~1,8×-os sebesség növelő hatást értem el 300× feleslegben alkalmazva a halogenidet. ($\text{TOF}=1949 \text{ h}^{-1}$). Ezzel szemben, amikor csak HCOOH -t tartalmazott a rendszer – kezdeti pH-ja 2,30 – a fluorid ionok fejtették ki a legjelentősebb hatást a bontási reakcióra. A halogenid nélküli reakcióhoz képest ($\text{TOF} = 553 \text{ h}^{-1}$) 2×-es sebesség növelő hatást ($\text{TOF} = 1133 \text{ h}^{-1}$) értem el, amikor 1000× feleslegben alkalmaztam a fluorid ionokat. Továbbá 1000×-20000× feleslegben alkalmazva a hangyasav 100%-a elbomlott. Ezt azzal magyarázzuk, hogy feltehetően a Ru-alapú komplex esetében is HF keletkezik, amely ko-katalizátorként részt vesz a reakcióban és ezáltal növeli a reakció sebességét. Végső konklúzióban a Ru-alapú komplex esetében gyakorlatilag az összes halogenid iont alkalmazhatnánk a kémiai hidrogén tárolás ezen területén. Mivel megfelelő körülmények között, adott koncentráció tartományban alkalmazva nő a hidrogén fejlődés sebessége. A legkiválóbb halogenid ionnak pedig a fluorid ion mondható a Ru-komplex katalizátor esetében (is), mert adott körülmények között nem csak a sebesség növelő hatását tudjuk kihasználni, hanem 100%-os konverzió is elérhető a dehidrogénezési reakcióban.

DEMCSÁK NORBERT
Vegyésmérnök
BSc, 4. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Bejczy Rebeka
tanszéki mérnök, PE MK
Hartyányi Máté
tanszéki mérnök, PE MK

Vízszám érték meghatározására alkalmas módszer továbbfejlesztése

Kulcsszavak: Felületaktív anyagok, HLB, vízszám, módszerfejlesztés

A különböző felületaktív anyagok, vagy más néven tenzidek a mindennapi életben és a vegyiparban is szinte minden területen megtalálhatók. Amfipatikus jellegük nagymértékben befolyásolja a tulajdonságaikat, funkciójukat és alkalmazhatóságukat. A vízben és az olajban való oldhatóság arányát a HLB értékkel (hydrophilic-lipophilic balance), vagy az ezzel szorosan összefüggő vízszámmal szokták jellemezni. Ezen érték meghatározására régóta jól bevált vizsgálati módszer áll rendelkezésre, ám az ehhez használt segédanyagok és vegyszerek jelentős részéről napjainkban kiderült, hogy súlyos egészségkárosító hatással bírnak és kivezetésre kerültek a mindennapi laboratóriumi használatból.

A kísérleti munka során cél volt egy olyan oldószert vagy oldószer kombinációt találni, amellyel a vízszám meghatározási módszer kivitelezhető. Továbbá célunk volt olyan oldószereket vizsgálni, mely környezetvédelmi és humánbiológiai szempontból kevésbé káros, ezen kívül könnyen és olcsón beszerezhető.

GÁRDI BÁLINT

kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Tóth Ágota

egyetemi tanár, SZTE TTIK

Dr. Horváth Dezső

egyetemi tanár, SZTE TTIK

Kitozángyöngyök méretfüggő kollektív viselkedése

Kulcsszavak: Kitozán polimergyöngyök, oszcilláció, szinkronizáció, Marangoni-hatás, kapilláris hatás

Kollektív viselkedéssel környezetünkben gyakran találkozhatunk: a szentjánosbogarak összehangolt villogásától, a sejtek ön- és létfenntartását biztosító mozgási mechanizmusokon keresztül a társadalmi önszerveződésre példát jelentő vastapson át. Ezen összehangolt, szinkronizált oszcillációk létfontosságú szerepet töltenek be mindennapi életünkben. Kémiai rendszerekben történő szisztematikus kimutatása és szabályozása az évezredben kezdődött. Munkám célja ezen jelenségek laboratóriumbeli modellezése volt olyan mesterséges, aktív anyagi rendszerekben, melyek közti fizikai kölcsönhatás kémiai reakcióban történő változás által jön létre. A kísérletekhez gadolínium(III)-kloridot és etanolt is tartalmazó ecetsavas kitozánszolt állítottam elő, melyet perisztaltikus pumpa segítségével cseppenként adagoltam meghatározott töménységű lúgolatba. A kísérletekről gyorskamerával felvételeket készítettem, melyekből kinyert adatok kiértékelésével a polimergyöngyök egymással való kölcsönhatását és mozgásuk dinamikáját jellemeztem. A savas szol lúgolatba cseppenésekor a kitozán térszerkezetének megváltozásával gél állapotú úszó gyönggyé alakul. [1] Az etanol lúgolatbeli diffundálása a felületi feszültség csökkenését okozza, mely a gyöngyök felszíni mozgását és így önmeghajtó motorokká alakulását eredményezi. Két önjáró kitozángyöngy egymás közelébe kerülésekor két hatás határozza meg a további mozgásukat: a kapilláris vonzás miatt a részecskék között vonzó kölcsönhatás lép fel, míg a Marangoni hatás miatt a részecskék egymást taszítják. [2] Amennyiben a vonzó és a taszító kölcsönhatás hasonló nagyságrendű, oszcilláció léphet fel közöttük. A létrehozott halmazokban az egyes egyedek egymásra gyakorolt hatásainak köszönhetően sajátos dinamikus mozgást eredményező szinkronizáció léphet fel.

Munkám során különböző méretű és számú kitozángyöngy viselkedését tanulmányoztam, tér- és időbeli szinkronizációjukat mennyiségileg jellemeztem. A gyöngyök méretének és számának módosításával eltérő, jól reprodukálható mozgásformákat figyeltem meg.

[1] Kumar, P., Horváth, D., Tóth, Á.: Chaos, 2022 (6) 063120.

[2] Kumar, P., Horváth, D., Tóth, Á.: Soft Matter, 2023 (22) 4137-4143.

HIDEG ÁDÁM

Kémia

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Kovács Noémi
tudományos munkatárs, ELTE TTK
Dr. Vesztegom Soma
egyetemi adjunktus, ELTE TTK

Anódos vízbontás kinetikájának tanulmányozása forgó korongelektróddal

Kulcsszavak: oxigénfejlődés; anódfolyamatok; elektródreakciók kinetikája; voltammetria; transzportfolyamatok

Tudományos diákköri munkám során az elektrokémiai oxigénfejlődési reakciót (OER) vizsgáltam különböző (oxidált felületű arany és platina) forgó korongelektrodokon, erős bázisok híg vizes oldataiban.

Az OER a leggyakrabban használt elektrolizáló berendezések jellemző anódfolyamata, így ennek optimalizálása elektrokémiai technológiák egész sorának teljesítményét tudja megnövelni. Ehhez azonban meg kell határozni a megfelelő katalizátort, és azt széles alkalmazási tartományon karakterizálni is szükséges. Az elektrokatalizátorok egyszerű számokkal kifejezhető jellemzését (amelynek célja a teljesítményalapú rangsorolás) benchmarkingnak nevezzük: az OER-hez fejlesztett katalizátorok ma széles körben elfogadott benchmarking módszerének alapja gyakorlatilag (adott összetételű oldatban) egy megfelelő áramsűrűség eléréséhez szükséges küszöb feszültség meghatározása. Dolgozatomban megmutatom, hogy e módszer sok szempontból kritizálható, de leginkább azért, mert nem ad lehetőséget annak megbecsülésére, hogyan függ az OER árama az oldatösszetételtől (elsősorban a pH-tól), illetve az alkalmazott transzportviszonyoktól.

A probléma megoldására témavezetőimmal egy forgó korongelektrodos (rotating disk electrode, RDE) módszert dolgoztunk ki, amelynek segítségével a katalitikus és transzport hatásokat jól el tudtuk különíteni, és vizsgálatainkat reprodukálható módon oxidált fémfelületeken tudtuk elvégezni. Témavezetőim korábban már foglalkoztak a hidrogénfejlődés híg savakban RDE-ken mérhető, lépcsős szerkezetű polarizációs görbéinek modellezésével: dolgozatomban megmutatom, hogy az OER polarizációs görbéi (enyhén bázikus körülmények között) hasonló lépcsős szerkezetűek. Egy összevont, kvázireverzibilis töltésátlépési reakciót, és a transzportegyenletek egyszerűsített megoldását alkalmazva olyan modellt dolgoztunk ki, amellyel az OER folyamata viszonylag széles pH és kevertetési sebességtartományon három paraméterrel – egy diffúziós együtthatóval (D), egy reakciósebességi együtthatóval (k) és egy töltésátlépési tényezővel (α) – jól leírható volt. Az elektródfelületre jellemző paramétereket egy pH-függő csereáram-sűrűséggé kombinálva a katalizátor jóságát jellemző, alkalmas benchmarking paraméterhez jutunk. Reményeim szerint módszerünk a jövőben az OER rendszerek méretnövelhetőségének elősegítésére, és különböző katalizátorok összehasonlításra is alkalmazható lesz.

KAPDOS ÁDÁM

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

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

A katódos hidrogénfejlődés vizsgálata kronopotenciometriával kombinált dinamikus elektrokémiai impedanciaspektroszkópai mérésekkel

Kulcsszavak: dEIS, impedancia, spektroszkópia, elektrokémia, hidrogénfejlődés

A tudományos diákköri munkám során kifejlesztettem egy dinamikus elektrokémiai impedanciamérésen (dEIS) mérésen alapuló technikát, amellyel bármely tranziens mérés közben követni lehet a töltésátlépési tényező időbeli változását a szabad felülettől, a változó pH-tól és a tranziens mérésben szabályozott jel típusától függetlenül. Ennek köszönhetően sikerült meghatározni a kronopotenciometriás kísérletek közben a töltésátlépési tényező, valamint egy a többi ismeretlen paraméter által definiált konstans értékét a kísérletek minden időpontjára.

Az új technikával a híg perklórsavas NaClO_4 oldatba merülő arany elektródon lejátszódó hidrogénfejlődést vizsgáltam. A dEIS méréseket állandó áramú elektrolízissel kombináltam, melynek során mértem az elektródpotenciált az idő függvényében. Az így kapott kronopotenciogramok alakja a beállított áramtól függően jelentősen eltért. Ráadásul a nagy áramú görbék szerkezete függött a mérés és az előkezelésként szolgáló polarizáció között eltelt időtől. Az új módszernek köszönhetően sikerült modellezni az arany elektródon lejátszódó hidrogénfejlődést és megmagyarázni kronopotenciogramok alakját. A kísérletek során a cellán átfolyó áram felosztható a vízredukció és a hidrogénion-redukció áramára. A görbe szokatlan alakjáért a vízredukció töltésátlépési tényezőjének időfüggése volt a felelős: nyugalmi állapotú, savas elektródon a vízredukció töltésátlépési tényezőjének értéke sokkal alacsonyabb, mint a stacionárius értéke elektrolízis közben. A töltésátlépési tényező a cella lekapcsolása után és a mérések közben is változik, ez eredményezi a görbék időfüggését. A vízredukció töltésátlépési tényezőjének változása egyáltalán nincs hatással a hidrogénion-redukció töltésátlépési tényezőjére, ez is mutatja, hogy két párhuzamos folyamatról van szó.

Az új mérési módszer segítségével sikerült meghatározni a vízredukció kísérletekben vizsgált paramétertartományon történő leírásához szükséges összes kinetikai paramétert, mint például a nyugalmi töltésátlépési tényezőket, vagy a sebességi együtthatókat. Sikerült emellett illesztésekből meghatározni a hidrogénion és a hidroxidion átlagos diffúziós együtthatóját is. Az új mérés technika és a változó töltésátlépési tényezők azt is lehetővé tették, hogy a vízredukció sebességmeghatározó lépésének formálpotenciálja kizárólag kinetikai adatokból kiszámításra kerüljön. Erre korábban egyáltalán nem volt lehetőség.

KONDOR VIRÁG
vegyészmérnök
BSc, 5. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyészmérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Viskolcz Béla
egyetemi tanár, ME AVK
Tóth Péter
K+F mérnök, Wanhua-BorsodChem Zrt.
Dr. Boros Renáta Zsanett
deputy manager, Wanhua-BorsodChem Zrt.

Aromás karbodiimid katalitikus előállítása és a reakció kinetikájának vizsgálata

Kulcsszavak: kinetika; izocianát; karbodiimid; katalitikus; előállítás

A karbodiimideket elsősorban az izocianát-iparban használják modifikáló adalékanyagként. A dolgozatomban a difenil-karbodiimid fenilizocianátból történő előállításának elméleti és kísérleti vizsgálatát mutatom be egy foszfor alapú organokatalizátor (MPPO) segítségével ortodiklór-benzol (ODCB) oldószerben. Vizsgáltam még egy fémalapú katalizátor (TTIP), illetve további oldószerek hatását is a reakcióra nézve. Különböző analitikai módszerek segítségével detektáltam a reakció során keletkező melléktermékeket, illetőleg magát a difenil karbodiimidet. Az elméleti rész a reakciómechanizmus részletes számítógépes DFT elemzését foglalja magába, ω B97X-D/6-311++G(d,p) elméleti szint alkalmazásával, mind a gáz-, mind a folyadékfázisra vonatkozóan, az utóbbi esetében SMD oldószer-modellt használva. A sebességet meghatározó lépés az első átmeneti állapot kialakulása, amelynek energiahatára az entalpiadiagram szerint 53,6 kJ/mol az ODCB, és 67,7 kJ/mol a gázfázisú számítások szerint. A szintézis során szén-dioxid keletkezik, ezért ezt mérve, könnyen nyomon követhető a reakció, így a kinetika kísérleti úton is meghatározható. A méréseket öt különböző hőmérsékleten végeztem 313 K és 353 K között, és a reakció kinetikájának nyomonkövetésére a gáz térfogatmérése szolgált. A kísérleti aktiválási energiát Arrhenius-diagramból kaptam másodrendű kinetikával, ennek az értékét (55,8 kJ/mol) összehasonlítva a számítási értékkel, megállapítható, hogy az eredmények jó egyezést mutatnak. A karbodiimid katalitikus képződésének és a reakció mechanizmusának részletes vizsgálata hozzájárul az ipari alkalmazások mélyebb megértéséhez. Illetve kutatásom eredménye sokban befolyásolhatja az izocianát előállításához szükséges optimális paraméterek meghatározását, így javítva a termék minőségét, miközben az energiafelhasználás csökken.

LUDÉZER-VASKOR MARTIN
Vegyésmérnöki
BSc, 3. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Valiskó Mónika
egyetemi docens, PE MK
Dr. Boda Dezső
egyetemi tanár, PE MK

Nanopórusok szelektivitásának modellezése aszimmetrikus ionkoncentrációkkal a membrán két oldalán

Kulcsszavak: nanopórus; ioncsatorna; Nernst-egyenlet; Monte Carlo; reverziós potenciál

Adott két elektrolit oldat membránnal elválasztva, melyen található egy nanopórus, amin keresztül iontranszport folyik membrán egyik oldalán lévő tömbfázisból a másikba. Az ionok áramlásának hajtóereje a koncentrációgradiens illetve a cellára kapcsolt feszültség. A pórus negatívan töltött, azaz a kationok áramlása előnyben részesül az anionokkal szemben, de nem minden esetben. Egy ilyen cellában lezajló folyamatok megértéséhez a Nernst-Plancktranszportegyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációt használok (NP+LEMC). A rendszer bemeneti paraméterek a cella és a pórus méretei, a koncentrációk a bal és a jobb oldalon, a pórus felületi töltéssűrűsége, és a cellára kapcsolt feszültség. A kutatócsoport korábbi munkáihoz képest az az újítás, hogy eltérő ionkoncentrációkat alkalmazunk. Ekkor a Nernst-egyenlet értelmében mindkét ionra létezik egy-egy feszültségérték, melyen az adott iontípusra ható hajtóerők eredője zérus, tehát az adott ion árama 0. Ezt nevezhetjük Nernst-potenciálnak. Kísérletileg csak az összes ion árama mérhető, mely nem ad információt arról, hogyan függnek az ionáramok a hajtóerőktől, ha azok nincsenek egyensúlyban. Ezzel szemben az NP+LEMC módszer külön szolgáltat adatot az anion- és a kationáramról. A jelenséget az áram-feszültség karakterisztikával (IV görbe) lehet jól szemléltetni. Reverziós potenciálnak nevezzük azt a feszültségértéket, ahol ez a görbe metszi a feszültség tengelyt, tehát ahol a teljes ionáram zérus. Változtatva a koncentrációk arányát a jobb és bal oldal között, a zérushelyek eltolódnak. Amennyiben a pórus teljesen szelektív a kationra, akkor a mért reverziós potenciál megegyezik a kation Nernst-potenciáljával. A kationszelektivitás mértékét a görbék meredekségéből lehet kifejezni. Ez nem más, mint vezetés, mely szintén függ a feszültségtől, mivel az IV-görbék nem lineárisak. Megmutatjuk, ez a szelektivitás összefügg a reverziós potenciálból definiált szelektivitással. A dolgozat módszertani részében megmutatom, hogy az NP+LEMC módszert ki kell egészíteni a Donnan-potenciállal, ami biztosítja a szimulációs rendszer töltéssemlegességét. Megmutatom, hogy erre szükség van, mert ellenkező esetben töltött rendszereket szimulálunk és az eredményeket szisztematikus hibával terheltten kapjuk.

LUKÁCS PANNA
Vegyész
MSc, 5. félév

Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Ósz Katalin
egyetemi docens, PTE TTK

Fotoreaktorok kalibrálása különféle aktinometriás módszerekkel

Kulcsszavak: aktinometria; fotokémia; fotoreaktor; Reinecke-só; [triszoxalato-ferrát(III)]

A fotokémiában az anyagok reakcióképességét vizsgáljuk fénnel való gerjesztés hatására. A fotokémiai reakció sebességét a kvantumhasznosítási tényezővel tudjuk számszerűsíteni, ennek a meghatározásához azonban ismerni kell a megvilágításhoz használt fényforrás fényerejét is, amit aktinometriával határozhatunk meg. Méréseim során végeztem aktinometriás méréseket komplexképzés nélküli aktinometriás módszerrel, mellyel meghatároztam a diódasoros spektrofotométer emittált fotonszámát és fotonenergiáját. Erre szükség van minden olyan esetben, amikor diódasoros spektrofotométert alkalmazunk fotoreaktorként egy fotokémiai reakció kinetikájának a vizsgálatához. Továbbá készítettem egy berendezést, melyben nagy intenzitású UV lámpával egészítettem ki a diódasoros spektrofotométert. Ezen a berendezésen is több aktinometriás mérést is végeztem, szintén komplexképzés nélküli módszert használva. A diódasoros spektrofotométer esetén az emittált fotonszám: $\sum N_{\text{foton}} = 7,72 \cdot 10^{14}$ foton/s. Az UV lámpa fényintenzitása nagyságrendileg 10^{14} foton/s körül volt. Különféle aktinometriás módszereket felhasználva és összehasonlítva végeztem el a PhotoCube™ fotoreaktor fehér, UV (365 nm), viola (395 nm), kék (457 nm), valamint cián (500 nm) LED-jeinek a kalibrálását. Aktinometriás módszerek közül végeztem méréseket IUPAC módszerrel ([triszoxalato-ferrát(III)] fotokémiai bomlása, és a képződött Fe(II) koncentrációjának a mérése o-fenantrolinnal való komplexképzést követően), a Lehóczki és munkatársai által kifejlesztett, komplexképzés nélküli módszerrel, valamint egyes LED-ek esetében (UV és viola) nagyobb koncentrációjú aktinométer-oldattal. A kapott eredmények alapján felírtam egy tapasztalati képletet, mely paraméterei minden LED esetén különböző értékeknek adódtak, és mellyel jól számolható a kalibrált LED-ekre az emittált fotonszám tényleges aktinometriás mérés elvégzése nélkül is. Elvégeztem egy másik aktinométer, a Reinecke-só szintézisét is, amire azért lesz szükség, mert a Reinecke-só gyakorlatilag a teljes látható tartományban (400-750 nm) alkalmas aktinometriás kalibrálásra, míg a [triszoxalato-ferrát(III)] csak 500 nm-ig alkalmazható. A Reinecke-só fotokémiai bomlását diódasoros spektrofotométerben vizsgáltam; 30 perces kinetikai mérést végeztem a komplex kálium-hidroxidos oldatával, a shutter always open funkcióját használva a spektrofotométernek. Ilyen módon 525 nm-en besugárzás hatására abszorbancia csökkenést tapasztaltam.

SZARVAS JÁNOS BERNÁT
Vegyéssz mérnök
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Valiskó Mónika
egyetemi docens, PE MK
Dr. Boda Dezső
egyetemi tanár, PE MK

Az ionmegoszlás vizsgálata rés, hengeres és üreges pórusokban Donnan Nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal

Kulcsszavak: Donnan potenciál; Monte Carlo szimuláció; rés; henger; üreg

A dolgozat célja olyan elektrolitok modellezése, amelyek valamilyen pórusos anyagba adszorbeálódnak. A pórus kifejezést itt általánosan értem, azaz a geometria lehet különböző aszerint, hogy milyen szimmetriával rendelkezik a rendszer. Síkgeometria ($dc = 1$) esetén résről beszélünk, ahol két párhuzamos sík fal határolja a bezárt elektrolitot; hengersizmetria ($dc = 2$) esetén pórusról vagy csatornáról beszélünk, amikor egy henger alakú pórus határolja az elektrolitot; gömbszimmetria ($dc = 3$) esetén üregről beszélünk, amikor egy gömbfelület határolja a rendszert. A pórusok falán töltéseket helyezhetünk el, ezáltal a pórus az ellenionra szelektív válik. A pórusban lévő elektrolit termodinamikai egyensúlyban van egy tömbfázisú elektrolittal, aminek a dielektromos állandója ($\epsilon=80$) rögzített. A pórusban az elektrolit egy inhomogén rendszert alkot, ahol a pórusfalak mellett elektrokémiai kettősrétegek alakulnak ki. A pórusban ugyanakkor kisebb lehet a dielektromos állandó, mint a tömbfázisban, emiatt az ionoknak egy szolvatációs energiagátat kell leküzdeniük, amikor bediffundálnak a pórusba. Ennek következtében az ionok koncentrációja kisebb lesz a pórusban, mint a tömbfázisban. Ez tulajdonképpen egy Nernst-féle megoszlás a két részrendszer között. Mivel a pórusban és a tömbfázisban különbözőek az elektromos viszonyok (különböző ϵ , töltött fal), az egyensúlyt Donnan egyensúlynak nevezzük. Ez lép fel akkor is, amikor a rendszert egy féligáteresztő membrán választja el egymástól (nem-ozmotikus membránegyensúly). Az ionokra és a pórusokra egyszerű modelleket alkalmaztam, amiket a D-GCMC (Donnan-Grand Canonical Monte Carlo) számítógépes szimulációs módszerrel vizsgáltam. Ezt a módszert témavezetőm és Dirk Gillespie fejlesztette ki tömbfázisra, és az elsők között alkalmaztam inhomogén rendszerekre. Azt találtam, hogy (1) a térrész méretének csökkentésével a térrészben csökkenni fog az anion és a kation koncentrációja, de az anioné jobban (a fal negatívan töltött). (2) A térrész geometriája nagy hatással van az eredményekre, azaz nagyobb dimenzionalitású térrészben erősebb lesz a kettősrétegek átlapolódása és az anionok kizárása, mint a kisebb dimenzionalitású térrészben. Azaz a pórusban erősebb, mint a résben, és az üregben erősebb, mint pórusban. A két effektus (ϵ csökkentése és dc növelése) külön-külön is javítja az anionok kizárását és a szelektivitást, de együttesen erősítik egymás hatását.

TÓTH UGYONKA HELGA
Kémia - matematika tanár
Osztatlan, 9. félév

Eszterházy Károly Katolikus Egyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Jedlovszky Pál
egyetemi tanár, EKKE TTK

Imidazólium alapú ionos folyadékok felületének szerkezeti és dinamikai vizsgálata számítógépes szimulációk segítségével

Kulcsszavak: Ionos folyadékok; Határfelület; ITIM analízis; Határfelületi szerkezet; Határfelületi dinamika

Az ionos folyadékok számos különleges kémiai és fizikai tulajdonsággal rendelkeznek, mint például a kiemelkedő hőstabilitás, jó oldódási és elegyedési készség, vagy épp az elektromos vezetőképesség. Széleskörű alkalmazási lehetőségeik miatt szerkezeti és dinamikai tulajdonságaiknak molekuláris szintű megértése kiemelkedően fontos. Négy imidazólium-alapú ionos folyadék gőzfázissal alkotott határfelületét vizsgáltam molekuláris dinamikai szimulációk segítségével. A választott kation az 1-butil-3-metilimidazólium (bmim^+) volt, ezt kombináltam négy különböző méretű, alakú és szimmetriájú anionnal, a BF_4^- , PF_6^- , NTf_2^- és TfO^- ionokkal. Az ionos folyadékok felszínének szerkezetét és dinamikáját az ITIM (Identification of the Truly Interfacial Molecules) [1] módszer segítségével vizsgáltam két különböző felbontásban, egyszer molekuláris, egyszer pedig atomos szinten. A határfelület molekuláris szintű szerkezetének kérdése régóta vitatott, az egyik lehetséges magyarázat szerint a határfelület elektromos kettős réteg jellegű szerkezetet alkot, míg egy másik magyarázat szerint az azonos ionok önasszociációja figyelhető meg a folyadékfelszínen, „sakktábla-szerű” szerkezetet alkotva. Előbbi vizsgálatára meghatároztam a felületi rétegek összetételét és a felületi töltéseloszlást. Az első molekuláris rétegben tapasztalt markáns kation többlet ellenére a határfelület kis mértékű negatív töltéstöbbletet hordoz. Nem látható azonban a pozitív töltéseknek a Gouy-Chapman elméletnek megfelelő exponenciális lecsengése a tömbfázis belseje felé. Ezen eredmények kizárják egy nem elhanyagolhatóan széles elektromos kettősréteg jelentését. A szerkezetre vonatkozó másik elképzelés a „sakktábla-szerű” elrendeződés, ezt Voronoi analízissel vizsgáltam. Az eredmények alapján a folyadékfelületen a hasonló ionok között nem ment végbe jelentős mértékű önasszociáció, azonban az ionok töltést hordozó és töltés nélküli részei önasszociátumokat képeznek. Az egyes részecskék dinamikája a folyadék felszínén általában két-három nagyságrenddel lassabbnak bizonyult, mint a molekuláris folyadékokban.

A dolgozatban bemutatott kutatást témavezetőm és külföldi kollégák irányítása mellett, valamint a rendelkezésre álló programok segítségével önállóan végeztem el.

[1] L. B. Pártay, G. Hantal, P. Jedlovszky, A. Vincze, G. Horvai: J. Comput. Chem., 2008 (29), 945-956.

VIDOSITS PÉTER BENJAMIN
Vegyésmérnök
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

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

Linearizált elektrokémiai modellek alkalmazása AISI 316L rozsdamentes acél korróziójának vizsgálatára különböző agresszivitású közegekben

Kulcsszavak: Korrózió, elektrokémiai kinetika, korrózióálló acél

Munkám során az AISI 316L acél korróziós sajátságainak a vizsgálatát végeztem el négy különböző korróziós rendszerben, EIS, illetve DC mérési módszerekkel, annak érdekében, hogy a BVEG egyenlet, illetve az EIS átviteli függvények linearizált modelljeinek a teljesítőképességét ellenőrizzem.

Az EIS mérési eredmények kiértékeléséből megállapítható, hogy a lineáris modellek eredményesen alkalmazhatók, jó közelítéssel azonos polarizációs ellenállásértékeket adnak, mint a sikeres nemlineáris illesztések. A kisebb pH-jú rendszerek (1HCl és 10HCl) esetében a Nyquist-görbe az irodalomban megtalálható helyettesítő kapcsolásokkal jellemezhető, viszont a nagyobb pH-jú rendszerek esetében a görbék kisfrekvenciás szakaszai nem használhatók fel a kiértékeléshez. Az alkalmazott lineáris illesztés egy olyan, relatíve szűk tartományt használ fel a paraméterek meghatározásához, amit a kisfrekvenciás negyedkörben fellépő torzulások nem érintenek, miközben ez a szűk tartomány önmagában a hagyományos nemlineáris paraméterillesztés számára kevés információt tartalmazna. Ezzel beláttam, hogy a lineáris illesztés nagyon kevés adatból is megfelelően pontos paramétereket tud meghatározni.

A linearizált BVEG egyenlet több esetben nagyon jó illeszkedést adott, ezzel bizonyítva, hogy alkalmas a korróziós kinetika vizsgálatára. Az is nyilvánvaló, hogy az illeszkedés erősen potenciáltartomány-, illetve rendszerfüggő, és ez képessé teszi arra, hogy a hagyományos féllogaritmikus transzformációnál árnyaltabb, komplexebb, információgazdagabb értékelést adjon a folyamatokról. További terveimben szerepel ezeknek a képességeknek a behatóbb vizsgálata.

Fizikai kémia II.

ANTAL BALÁZS
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Hözl Tibor
tudományos főmunkatárs, BME VBK

Szén-dioxid hidrogénezés gallium-nikkel klasztereken

Kulcsszavak: Számításos kémia, CO₂ redukció, Katalizátor, Ötvözetklaszter

A szén-dioxid az ipari forradalom óta hatalmas mennyiségben kerül a légkörbe, az emiatt kialakuló globális felmelegedés hatásait pedig a mindennapjainkban is egyre inkább tapasztaljuk. Annak felfedezése, hogy átmenetifém katalizátorokkal lehetséges a szén-dioxidot számunkra hasznos termékekké alakítani, új lehetőséget nyitott a probléma orvoslására. Erre a célra ígéretes katalizátornak tűnnek a gallium-nikkel ötvözetek, viszont a megfelelő katalizátorok létrehozásához szükséges az aktivitásuk és szelektivitásuk optimalizálása.

Az idei munkám középpontjában a gallium-nikkel klaszterek reaktivitása és katalitikus hatása volt. A kutatómunkámat számításos kémiai módszerekkel végeztem. Elsőként megvizsgáltam a kisebb klaszterek reaktivitását szén-monoxiddal. Azt találtam, hogy a klaszter elektronszerkezete jelentős mértékben képes befolyásolni az adszorpciós energiát. Mivel a szakirodalom alapján a szén-monoxid katalizátorméregként hathat a nikkellek, így feltételeztem, hogy csak a szén-monoxidot kevésbé erősen kötő klaszterek lehetnek alkalmasak katalizátornak. Az ez alapján ígéretesnek bizonyult klaszterek esetén megvizsgáltam a szén-dioxiddal szembeni reaktivitást. Feltérképeztem annak adszorpciós mechanizmusát és azt találtam, hogy az összetétel függvényében többféle módon is képesek a klaszterek aktiválni a szén-dioxidot. Első lépésben a nikkeltöbbletű klaszterek vizsgálatát kezdtem el, főként a Ga₂Ni₃ és a Ga₂Ni₄ klasztereket. Azt találtam, hogy ezeknél a szén-dioxid hidrogénezésére tipikusan alkalmazott körülmények esetén a szén-dioxid redukciója várhatóan nem a tiszta fémklasztereken, hanem a klaszter-hidrideken megy végbe, valamint a hidridképződés jelentősen befolyásolhatja a reaktivitást. Végül elkezdtem a lejátszódó szén-dioxid redukció lehetséges útvonalát feltérképezni. A számításaim rámutattak arra, hogy a gallium-nikkel klaszterek tervezésével és módosításával azok reaktivitása nagyban befolyásolható. Reményeim szerint mindezeket felhasználva a jövőben lehetőség nyílik a jelenleginél hatékonyabb és szelektívebb szén-dioxid hidrogénezés megvalósítására.

BICZÓK BRIGITTA
Környezetmérnöki
MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:
Dr. Sápi András
egyetemi docens, SZTE TTIK

CO₂ hidrogénezési reakciók szelektivitásának hangolása különböző anionokkal dópolt réteges kettős hidroxid katalizátorokkal

Kulcsszavak: CO₂ redukálási módszer; réteges kettős hidroxid; katalizátor prekursorok; szén-dioxid aktiválás;

A CO₂ antropogén háttérű emissziója világszinten jelentkezik és jelentős negatív környezeti hatásai vannak jelen. A CO₂ probléma egyik megoldása lehet a molekula kémiai átalakítása. Atmoszférikus hidrogénezési reakciók során főként metán és szén-monoxid keletkezhet, ahol mindkét molekula hasznos lehet rendre a villanyenergia gázzá konvertálása (PtG) és a szintézis gáz egyik alapanyagának előállítása szintjén. Munkánk során különböző anionokkal hangolt nikkel tartalmú réteges kettős hidroxidokat állítottunk elő, és alkalmaztunk gázfázisú, atmoszférikus nyomáson történő CO₂ hidrogénezési reakciókban. A különböző anionokkal integrált katalizátorokkal jelentős mértékben érhető el nagyfokú metán-, ill. szén-monoxid szelektivitás is magas konverzió mellett. A kísérleti munka során különféle NiAl₄-LDH-k szintézisét ismert mechanokémiai módszer alapján végeztük el, így készült B₄O₇²⁻, HCO₃⁻, CO₃²⁻, PO₄³⁻, HPO₄²⁻, H₂PO₄⁻, HPO₃²⁻, H₂PO₂⁻ és NO₃⁻ rétegeközi anionokat tartalmazó LDH változatok. Az előállított katalizátorok jellemzésére röntgendiffraktometria (XRD), infravörös spektroszkópia (IR) és hőmérséklet programozott redukció (TPR) szolgált. A CO₂ hidrogénezési reakciókat gázkromatográffal (GC-FID-TCD) szerelt áramlásos csőreaktorban végeztük 200 – 550 °C tartományban, különböző előkezeléseket követően. A katalizátorok közül a legmagasabb aktivitást és a legnagyobb metán szelektivitást a nitrát tartalmú katalizátor prekursor mutatta, viszont a H₂PO₄⁻ ion beépítésével kapott katalizátor segítségével nagy mennyiségű szén-monoxid képződött.

DRÁGITY DEJÁN

Kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Endrődi Balázs

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Kormányos Attila

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Hangolható szén-monoxid redukciós szelektivitás polianilin/réz nanokompozit elektrokatalizátorokon

Kulcsszavak: Elektrokémia; elektrokatalízis; szén-monoxid elektroredukció; nanokompozit katalizátorok

A szén-dioxid (CO₂) elektrokémiai redukciója az egyik legígéretesebb módja lehet a Párizsi Egyezményben kijelölt szénmegkötési eljárásoknak, hisz ezzel nem csak az ipari pontforrások által kibocsátott CO₂ mennyisége csökkenthető, de mindeközben kibocsátás-mentesen állíthatók elő hasznos vegyipari alapanyagok. Az egyik ilyen termék a szén-monoxid (CO), mely napjainkban már szelektíven előállítható CO₂-ből iparilag releváns körülmények között is. Ugyan ezen vegyület felhasználása sokrétű, a terület egyik fontos kihívása mégis más, még értékesebb és könnyebben felhasználható vegyületek (pl.: etilén, etanol, acetát, stb...) szelektív előállítása. A kihívás leküzdésére egy lehetséges alternatíva CO₂ helyett a CO redukciója, ugyanis így amellet, hogy a reaktánsveszteség minimalizálódik (a CO vizes elektrolitoldatban való oldhatatlansága miatt), nagyobb szelektivitással képződnek többszénatomos termékek. Szakirodalmi előzmények alapján CO₂ és CO többszénatomos terméké alakítására majdnem kizárólag csak réz alapú katalizátorok alkalmasak, azonban ezek tipikusan nem, vagy csak rövid ideig szelektívek egy termékre. Kutatásom során célom olyan polianilin/réz (PANI/Cu) nanokompozitok előállítása volt, melyek iparilag releváns áramsűrűségek mellett is képesek a CO szelektív redukciójára. Az egyszerűen, PANI különböző koncentrációjú CuSO₄ oldatban való kevertetésével előállított katalizátorok a réz koncentrációjától, valamint az alkalmazott elektrolittól függően különböző termékekre szelektívvé tehetők folyamatos áramlásos cellákban akár hosszútávú működés során is. Elektronmikroszkópos és röntgen-elemanalitikai technikák segítségével megmutattuk, hogy a különleges viselkedés a réz beépülése során bekövetkező változásokra vezethető vissza, ahogy a réz annak koncentrációjától függően más méretű és eloszlású aktív centrumokat alkot. A jelenséget megfigyeltük más nitrogéntartalmú polimerek (polipirrol, poli(o-feniléndiamin)) alkalmazása esetén is, beigazolvva ezzel a beépülési mechanizmus univerzalitását.

GULYÁS FERENC
vegyésmérnök
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Fodor Lajos
egyetemi adjunktus, PE MK

Átmenetifémekkel módosított Cd_{0,5}Zn_{0,5}S fotokatalizátor hidrogénfejlesztő hatékonyságának vizsgálata

Kulcsszavak: CdS, ZnS, heterogén fotokatalízis, hidrogén fejlesztés

A globális éghajlatváltozás és az energiahiány miatt napjainkban egyre nagyobb figyelmet fordítanak környezetbarát energiaforrások felfedezésére és kihasználására. Kézzelfogható megoldást jelenthet a napenergia, mivel az emberiség energiaszükségletének többszöröse érkezik a Földre napsugárzás formájában. Másik ígéretesnek tűnő energiahordozó a hidrogén. Előnyei közé tartozik, hogy elégetése során nem keletkezik CO₂, illetve a többi fosszilis energiahordozóhoz képest jelentősen nagyobb energiasűrűséggel rendelkezik. Ennek a két energiaforrásnak az előnyös tulajdonságait ötvözi a heterogén fotokatalízissel történő hidrogénfejlesztés. Különös figyelmet élvez a szulfid alapú katalizátorok fejlesztése, amelyekkel kénhidrogént, vagy annak oldatát lehet nagy hatékonysággal lebontani.

Munkám során Cd_xZn_xMn_{1-2x}S katalizátorokat állítottam elő, majd ezeket különböző fémekkel módosítottam, impregnálással. Több különböző módszerrel állítottam elő alapkatalizátorokat, elsősorban a leválasztási technikát változtatva. Ezután impregnálásos módszerrel felületmódosítást hajtottam végre. Tavalyi eredményeim alapján Ni(II) és Co(II) ionokat használtam erre a célra. Vizsgáltam a maximális hatékonysághoz szükséges segédkatalizátor mennyiséget, illetve a két fém együttesen is alkalmaztam szinergikus hatás elérése reményében. Mangán tartalmú alapkatalizátorokat is állítottam elő különböző körülmények között. A kutatómunka során bevilágítási kísérleteket végeztem, ahol Na₂S-ot és Na₂SO₃-ot tartalmazó oldatot használtam áldozati reagensként. Ekkor a hidrogénfejlődés sebességét mértem az idő függvényében. A katalizátorok szerkezetét SEM és XPS mérésekkel vizsgáltam. Leghatékonyabbnak a Ni(II)-vel módosított katalizátorok bizonyultak, de a Co(II)-vel impregnált minták is ígéretes eredményt hoztak. Többszöri bevilágítás után is növekvő hidrogénfejlesztő sebességet mutattak. A két fém szinergikus hatásának maximális kihasználása további méréseket igényel. A mangántartalmú katalizátorok nem hoztak kiemelkedő eredményt és levegő hatására instabilnak bizonyultak, hatékonyságuk növelésére a kutatócsoport többi tagja végez vizsgálatokat.

KECSKÉS KARINA
Vegyészmérnök
MSc, 1. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Szőri Dorogházi Emma
egyetemi docens, ME AVK

Természetes alapú részecskék mikroorganizmus adszorpciós képességének vizsgálata

Kulcsszavak: adszorpció; ülepedés; centrifugálás; sejtkoncentráció

A jövő vízhiányának megelőzése és a természetes vizek védelme érdekében az egyes ipari ágazatok egyre nagyobb hangsúlyt fektetnek a hulladékgazdálkodásra és szennyvízkezelésre is. A tisztított ipari szennyvíz visszaforgatására (pl. technológiai vízként), újra hasznosítására (pl. öntözővízként) szigorú szabályozások vonatkoznak, melynek értelmében számos kémiai, fizikai és biológiai paramétert kell figyelembe venni. Ez utóbbihoz tartozik a kezelt vizek mikrobiológiai összetételének meghatározása és az egyes mikroorganizmus típusok határértéken belül tartása. Erre már számos módszer áll rendelkezésre, melyek közül legelterjedtebb a szűrés, ülepítés és az adszorpció. Az adszorpciós víztisztítás során leggyakrabban aktív szénnel kötik meg a különböző szerves (pl. festék) vagy szervetlen (pl. nehéz fém) szennyezőket. Azonban megfelelő adszorbensek alkalmazásával lehetőség van a természetes és mesterséges vizek minőségét rontó mikroorganizmusok eltávolítására is. Az alkalmazott adszorbensek tulajdonságait úgy lehet alakítani, hogy azok felszínén össze tudjuk gyűjteni a megfelelő baktériumokat a szennyvízből, majd azokat az adszorbenssel együtt ülepítéssel eltávolíthatjuk a rendszerből. Dolgozatomban két természetes alapú agyag részecskét, a nátriummal telített montmorillonitot (Na-CM) és a cirkóniumpilléres montmorillonit (Na-Zr 2,5) részecskét vizsgáltam és hasonlítottam össze baktérium adszorpciós képességük alapján, illetve kidolgoztam annak módszerét, hogy ezt az adszorpciós hatékonyságot, biológiai szempontból, hogyan lehet a legjobban kimutatni. Vizsgálati eredményeim igazolták, hogy a Na-Zr 2,5 részecskék alkalmasak baktérium tartalmú szuszpenziókból a mikroorganizmusok adszorpciójára, és ezzel a vizsgált folyadék mikroorganizmus mennyiségének csökkentésére. Ez a fajta sejtszámcsökkenés szignifikánsan nagyobb volt, mint amit az adszorbens nélküli rendszereknél tapasztaltam. Pozitív kísérleti eredményeim lehetővé teszik ezen a részecskék hatékonyságának kipróbálását valódi szennyvízmintákkal is, hosszú távon pedig esetleges alkalmazásukat már meglévő víztisztítási eljárásokban.

KLONKA ÁRON
Vegyésmérnöki
BSc, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:
Dr. Haspel Henrik
tudományos főmunkatárs, SZTE TTIK

Elektrokatalitikus reakciók viselkedésének feltérképezése erős külső mágneses térben

Kulcsszavak: elektrokatalízis; O₂ redukációs reakció; Inventor; CAD 3D; forgatható korongelektród

Dolgozatomban a mágneses tér hatására egy elektrokémiai cellában párhuzamosan végbemenő jelenségek vizsgálatát, valamint a mágneses térrel segített elektrokémiai reakciók mechanizmusának felderítését tűztük ki célul. Ennek során egy mágneses forgatható korongelektrodot (Rotating Disk Electrode, RDE) terveztünk és készítettünk. Az elektródtest elemeit 3D CAD programban terveztük egy NdFeB mágnesrúd köré. Külső elemként kémiaiilag is ellenálló PTFE-t, belső elemként sárgarézet használtunk. A mechanisztikus vizsgálatok mellett a háromelektrodos cellákban külső mágneses térben zajló folyamatok vizsgálatához egy olyan nagyméretű patkómágnes elrendezést terveztünk, melynek NdFeB hasábokkal határolt légrésében néhány cm² felületen nagy homogenitású, közel 1T mágneses indukciójú tér lép fel. Itt lehetőségünk nyílik a munkaelektrod és a mágneses indukcióvektorok szögének változtatásával az egyes jelenségek szögfüggését is vizsgálni. A megvalósított mérési elrendezéseket a szakirodalomból ismert CoNi@NC mágnesesen aktív, illetve Pt/C nem mágneses katalizátorokkal teszteltük.

KONDOR VIRÁG
vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyésmérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Viskolcz Béla
egyetemi tanár, ME AVK
Tóth Péter
K+F mérnök, Wanhua-BorsodChem Zrt.

Aromás karbodiimid foszgénnel alkotott addíciós termékének előállítására és termikus stabilitásának vizsgálata

Kulcsszavak: karbodiimid; foszgénezés; izocianát; bomlás; hőstabilitás

Tanulmányom a poliuretánok alapanyagául szolgáló MDI (metilén-difenil-diizocianát) termékminőségének optimalizálását veszi célba és el is éri azt. Az izocianátok gyártásánál spontán vagy tervezett módon kialakuló karbodiimid, a foszgénezési eljárás során karbamid jelenlétében, mellékreakciók lejátszódásának nyit lehetőséget. A melléktermékek közül az egyik kiemelten vizsgált, a karbodiimid és a foszgén addíciós terméke, az N-(C-kloro-N-fenilkarbonimidóil) -N-fenilkarbamóil-klorid (később: foszgén addukt) képez, mely a technológia további lépéseiben termikusan bomlik. Kutatásom ennek a karbodiimid alapú terméknek a kialakulását és a termikus stabilitását hivatott vizsgálni.

Dolgozatomban ismertetem a foszgén-addukt modell vegyület előállításának módját és folyamatát, laboratóriumi körülmények között, ám bemutatom a kialakulását ipari körülmények között is, valamint részletezem a modell vegyület azonosítására szolgáló lehetőségeket. Feltérképezem a termikus bomlás útvonalaival, illetve a bomlástermékek hatásait az izocianát termelési láncra nézve. Ismertetem az általam kifejlesztett analitikai módszert, mely az addukt bomlásának nyomon követéséhez szükséges.

Ipari szempontból releváns a foszgén-addukt molekula termikus stabilitásának vizsgálata, mert a bomlása során képződő diklórimin, hő hatására az izocianáttal egy izocianidot képez, két klórgyökkel. A klórgyök az izocianátról hidrogént leszakítva savasságot okoz a mintában, emellett a H-donor izocianáton kinodiális szerkezet alakul ki, ami feltételezhetően a színváltozást okozhatja, ugyanis amíg az aromás rendszereknek jellemzően az UV tartományban van fényelnyelésük, addig a kialakult kinodiális szerkezetű molekulát már a látható fény is tudja gerjeszteni. Az addukt termikus stabilitását és bomlástermékeit vizsgálva, ezen feltételezéseket tudom alátámasztani. Emellett célom a jövőben, a foszgén-addukt bomlási kinetikájának, és a bomlásához szükséges aktiválási energiának a meghatározása.

Kutatásom teljeskörűen megalapozza a jövőbeli terveimet, melyek között szerepel a bomlási kinetika kimérése, és a termikus bomlás aktiválási energiájának meghatározása kísérleti, illetve elméleti számításos kémiai úton. Kutató munkám eredménye sokban befolyásolja az izocianát előállításához szükséges optimális paraméterek meghatározását, így javítva a termék minőségét, miközben az energiafelhasználás potenciálisan csökkenthető a gyártás során, ezáltal is környezetbarátabb terméket létrehozva.

NAGY CSENGE
Vegyésmérnöki képzés
BSc, 7. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyésmérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Prekob Ádám
tudományos munkatárs, ME AVK
Dr. Sikora Emőke
tudományos munkatárs, ME AVK

Szénhordozós katalizátorok előállítása és alkalmazása anilin szintézisében

Kulcsszavak: vegyipar; anilinszintézis; katalízis; katalizátorfejlesztés; nitrobenzol hidrogénezése

Az MDI (metilén- difenil-diizocianát) fontos alapanyag a poliuretán habok gyártása során. Előállítása MDA-ból (metilén-difenil-diamin) történik, melynek a legfőbb alapanyaga az anilin. Az anilin szintézisének a leggyakoribb technológiai eljárása a nitrobenzol katalitikus hidrogénezése melyet legtöbbször korom, szén nanocső, illetve aktív szén hordozós Pd, Pt és Ni katalizátorokkal valósítanak meg.

Kutatásom során palládium és nikkeltartalmú korom, szén nanocső (BCNT), és aktív szén hordozós katalizátorokat állítottam elő csepegtetési módszerrel. Az elkészített katalizátorok morfológiáját pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM), a kialakult fajlagos felület nagyságát és pórustérfogatát gázadszorpciós analizátor segítségével, az impregnálás során megkötött fémek mennyiségét induktív csatolású plazma atomemissziós spektrométerrel (ICP-OES) vizsgáltam. A mintákat alkotó fázisok vizsgálatát röntgendiffrakciós vizsgálatok segítségével végeztem. Teszteltem a katalizátorok aktivitását nitrobenzol folyadékfázisú katalitikus hidrogénezése során. A hidrogénező rendszerben a reakció közben mintavételt követően gázkromatográfiás méréssel nyomon követtem a nitrobenzol konverziót, illetve a melléktermékképződést. Vizsgáltam a hőmérséklet, valamint a hordozó típusának katalitikus aktivitásra gyakorolt hatását.

OROSZ NÁNDOR
vegyésmérnök
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Fodor Lajos
egyetemi docens, PE MK

Ni(II)-ionokkal módosított $Cd_xZn_{1-x}S$ fotokatalizátorok előállítása $Na_2S_2O_3$ termikus bontásával

Kulcsszavak: CdS; ZnS; hidrogénfejlesztés; heterogén fotokatalízis

Napjainkban az alternatív energiaforrások, és azok előállításának vizsgálata egyre inkább felértékelődik a globális éghajlatváltozást elősegítő, környezetünkre káros fosszilis anyagok használatával szemben. A hidrogén több területen is ígéretes energiahordozónak mutatkozik, emellett számos vegyipari szintézis nélkülözhetetlen eleme. A hidrogén alkalmazhatóságát döntő mértékben befolyásolja annak eredete. Az előállítási módszerek között megtalálhatóak zöld eljárások, például hidrogéntartalmú anyagok bontása napenergia felhasználásával. Környezetbarát módon állítható elő H_2 a mérgező H_2S lúgos oldatának fotokatalitikus úton történő bontásával látható tartományú fény bevilágítása során. Kiemelkedő hidrogénfejlesztő hatékonyságú fotokatalizátor a $Cd_{0,5}Zn_{0,5}S$ összetétellel jellemezhető kompozit, melynek eredményessége Ni(II)-ionokkal történő felületmódosítással tovább növelhető. Kutatócsoportunk korábbi eredményei mindezt alátámasztják, illetve rámutatnak, hogy a $Cd_xZn_{1-x}S$ katalizátorok hidrogénfejlesztő hatékonysága nagymértékben függ az előállítási körülményektől, különösen a leválasztáshoz használt Na_2S tisztaságától, beszerzési forrásától. E függőség feloldása érdekében alternatív előállítási lehetőségeket vizsgáltam. A Na_2S helyettesítését $S_2O_3^{2-}$ -ionok termikus bontásából származó S^{2-} -ionokkal oldottam meg. Vizsgáltam a katalizátorok előállítási körülményeinek hatását a termék összetételére és H_2 -fejlesztő katalitikus aktivitására nézve. Változtattam a reakcióelegy hőmérsékletét 90 °C és 260 °C között, a kezdeti kémhatást $pH = 5,8\text{--}13$ tartományban, a tioszulfát felesleget (5–30-szoros), illetve a Cd:Zn arányt 1:1 és 1:10 értékek között. A fotokatalizátorok szerkezetvizsgálati elemzését DRS, SEM-EDS és XRD mérések segítették, valamint a H_2 -fejlesztő képességet minden esetben vizsgáltam Na_2S -ot és Na_2SO_3 -ot egyaránt tartalmazó áldozati oldat látható fényű bevilágításával. Az ígéretesebb katalizátorok aktivitását Ni(II)-ionokkal történt impregnálást követően is meghatároztam. A legjobb hatékonyságot – mely elérte a Na_2S -dal leválasztott katalizátorok aktivitását – a 260 °C -on, 10 órás hőntartással, enyhén savas pH-n, nagy $Na_2S_2O_3$ felesleg mellett előállított $Cd_{0,5}Zn_{0,5}S$ eredményezte 1%(n/n) Ni(II)-vel történő módosítás után.

SAJÓSI BENEDEK

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Dr. Tarczay György
egyetemi tanár, ELTE TTK

Dr. Góbi Sándor
tudományos munkatárs, ELTE TTK

Propilén-oxid hidrogénatommal való reakciójának vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával

Kulcsszavak: propilén-oxid; mátrix izoláció; asztrokémia; IR spektroszkópia

A csillagközi tér kémiai jelentőségét a 20. század első felében kezdték felismerni. Azóta 2024. novemberéig több mint 320 molekulát, gyököt, és iont sikerült kimutatni, amelyek közül csupán a propilén-oxid királis. Feltételezhető, hogy ebből komplexebb királis molekulák alakulhatnak ki a csillagközi térben. Diákköri munkám során ezt a hipotézist szerettem volna alátámasztani vagy cáfolni.

A csillagközi tér leggyakoribb részecskéje a hidrogénatom, ennél fogva a csillagközi térben kiemelt jelentőséggel bír ezek reakciója más atomokkal, molekulákkal. A hidrogénatom addicionálódhat a molekula egy atomjára, illetve ha a molekula tartalmaz hidrogénatomot, azt egy kívülről érkező hidrogénatom leszakíthatja, hidrogénmolekula keletkezése közben. Munkám során a propilén-oxid és hidrogénatomok között lejátszódó reakció termékeinek azonosítását végeztem el. Az alacsony hőmérsékleten végzett reakciók kivitelezésére parahidrogén mátrixizolációs technikát alkalmaztam, a reakciókat infravörös spektroszkópiával követtem. A mátrixizolációs technika előnye, hogy a reaktív gyökök csapdázhatók a mátrixban, így lehetővé válik a vizsgálatuk. A parahidrogén mátrix további előnyökkel jár. Ebben a mátrixban nagy hatékonysággal lehet hidrogénatomokat előállítani. Emellett a hidrogénatomok az alagúteffektus révén gyors, úgynevezett kvantumdiffúzióval képesek eljutni a minta molekuláihoz, ahol reakcióba léphetnek ezekkel. A kísérleteim megmutatták, hogy a propilén-oxid és egy hidrogénatom reakciójának termékei közül a 2-oxopropilgyök és az izopropoxygyök keletkezik a legnagyobb mennyiségben, melléktermékként 1-propoxygyök is keletkezik. Utóbbi kettő hidrogénatom-addícióval, míg az első hidrogénatom-leszakítással jön létre. Az első kettőből további hidrogénatommal való reakciójával acetone keletkezik. Emellett megfigyeltem, hogy a propilén-oxid ultraibolya sugárzás hatására izomerizálódik, acetonná alakul. A másik izomer, a propanal képződését nem tapasztaltam. Azonban a hidrogénatommal való reakció során kis mennyiségben keletkező propoxygyök UV sugárzás hatására propanallá alakul át. Eredményeim azt mutatták, hogy a hidrogénatommal történő reakciók hatására a királis propilén-oxidból akirális termékek képződnek. Azaz ebből a molekulából kiindulva, hidrogénatomok által kiváltott reakciókban várhatóan nem jönnek létre nagyobb királis molekulák. Emellett az eredmények arra utalnak, hogy a propilén-oxid, az acetone és a propanal csillagközi előfordulása kémiai reakciók által összekapcsolódik.

SZIRMAI ADRIENN

Vegyész

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Endrődi Balázs

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Kormányos Attila

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Nyers glicerín elektrokatalitikus oxidációja nemesfém és nem nemesfém katalizátorokon

Kulcsszavak: elektrolízis; elektroszintézis; glicerín oxidáció; szén-dioxid megkötés és hasznosítás

Az elmúlt évtizedben egyre nagyobb a kutatási érdeklődés a glicerín elektrokémiai úton történő átalakítására, mely elsősorban a növekvő biodízel termelésnek köszönhető, ahol nagy mennyiségben keletkezik viszonylag tiszta glicerín melléktermék (45-80%). A glicerín részleges oxidációjával számos ipari alapanyag nyerhető. Egy lehetséges átalakítási módszer az elektrokémiai oxidáció (GOR), amelynek elsődleges előnye, hogy enyhe körülmények között hajtható végre (szobahőmérsékleten, légköri nyomáson).

Munkánk során szén hordozón rögzített platina nanorészecskék (Pt/C) és különböző egyatomos katalizátorok (fém nélküli szén hordozó (NC), valamint ennek különböző fémekkel adalékolt változatai: FeNC, NiNC, FeNiNC) viselkedését vizsgáltuk GOR során. Méréseinket folyamatos áramlásos mikrofluidikai elektrolizáló cellában végeztük, hordozóként Freudenberg H23C6 típusú szénpapírt alkalmazva, amire a katalizátorréteget porlasztva fűjásos technikával vittük fel. Glicerín oxidációs termékeként a folyadék fázisban NMR spektroszkópiával és nagyhatékonyságú ionkromatográfiával glicerátot, tartronátot, oxalátot, formiátot, laktátot és Pt/C esetén glikolátot is azonosítottunk. Megállapítottuk, hogy a nemesfém katalizátorokhoz képest az összes egyatomos katalizátor jelentősen szelektívebb volt; a töltés közel 90%-a formiát keletkezésére fordítódott.

Célunk volt továbbá a katódfolyamat (víz redukció) lecserélése CO₂ redukcióra (CO₂RR), így a katódon és az anódon is hasznos termék keletkezik. Az így kialakított párosított CO₂RR/GOR elektrolizáló cella nagy reakciósebességen több órán keresztül üzemeltethető volt, az áramsűrűség kismértékű csökkenése mellett. Az összegyűjtött tapasztalatokat felhasználva a méréseinket megismételtük egy magyarországi biodízel üzemből származó, 80%-os tisztaságú nyers glicerinnel is. A Pt/C katalizátor aktivitása nagyon gyorsan lecsökkent, azonban az egyatomos NiNC és FeNiNC minták megőrizték mind az aktivitásukat, mind pedig a GOR szelektivitásukat. Munkánk során sikerült olyan körülményeket azonosítanunk, mellyel a CO₂RR/GOR párosított elektrolizáló cella nagy áramsűrűségeken, időben változatlan szelektivitással (anód-, és katódfolyamat) üzemeltethető ipari glicerín forrással is.

Kémiai technológia

BÁNRÉVI ZOLTÁN
Vegyésmérnöki
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Galata Dorián László
tudományos munkatárs, BME VBK

Tabletták vizsgálata gépi látási rendszerrel a hatóanyag-tartalom tekintetében

Kulcsszavak: Gépi látási rendszer; UV-megvilágítás; tablettá; hatóanyag-tartalom-meghatározás; roncsolásmentes, gyors, inline módszer

A gyógyszeriparban az egyre inkább előtérbe kerülő folyamatos technológiák új analitikai módszerek megjelenését ösztönzik. A tabletták, mint kiemelkedő jelentőségű gyógyszerformák hatóanyag-tartalmának vizsgálata különösen fontos, ugyanis akár a páciens élete múlhat azon, hogy milyen minőségű készítményt kap kézhez. A jelenleg alkalmazott hagyományos, off-line módszerek nem integrálhatóak a folyamatfelügyelő és elemző rendszerbe (PAT), mivel időigényesek, nem biztosítanak valós idejű információt, destruktívak, valamint korlátozott számú mintáról képesek információt nyújtani. Ezért a hagyományos technológiákkal ellentétben, a gyógyszeripar modernizációjának keretében megjelenő korszerű eljárások során a folyamatok és a termék mélyebb megértésére, valós idejű követésére helyeződik a hangsúly.

Munkám célja bevonat nélküli, fehér színű hatóanyagot tartalmazó tabletták off-line és in-line, roncsolásmentes hatóanyag-tartalom vizsgálata gépi látási rendszerrel, UV megvilágítás alkalmazásával. A modell hatóanyag kiválasztását követően különböző hatóanyag koncentrációjú tablettákat állítottam elő, majd UV megvilágítás alkalmazásával képeket készítettem a mintákról. Referencia módszerként hagyományos UV-VIS spektrofotometriás méréssel határoztam meg a vizsgálandó paramétert. Az így kapott hatóanyag-tartalom, valamint a megfelelő színintenzitás adatpárok segítségével off-line és in-line felvett képek alapján is neurális háló alapú kalibrációs modelleket hoztam létre.

A létrehozott modellek jósági paramétereik alapján megfelelőnek bizonyultak. A hálók, mind off-line, mind in-line esetben 5% körüli relatív hibával képesek becsülni a hatóanyag-tartalmat az UV fényben készült képek kék színtkomponensének felhasználásával. Segítségükkel gyorsan, roncsolásmentesen, pusztán egyetlen kép alapján egyedi információ nyerhető a vizsgálandó tablettáról.

Összeségében elmondható, hogy a munkám során elért eredmények hozzájárulnak a gépi látási rendszerek gyógyszeripari alkalmazhatóságának fejlődéséhez. A bemutatott gépi látási megoldás hatékony alternatívája lehet a jövőben az iparágban hagyományosan alkalmazott analitikai módszereknek.

BENCZÚR MÁTÉ GERGŐ

Vegyésmérnöki

BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi

Egyetem

Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:

*Dr. Galata Dorián László
tudományos munkatárs, BME VBK*

**Porkeverékek összetételének és komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának vizsgálata
valós időben gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével**

Kulcsszavak: porhomogenizálás; endoszkópos képalkotás; gépi látás; folyamatkövető- és elemző technológiák; mesterséges intelligencia

A gyógyszeripar által előállított készítmények jelentős hányada szilárd formában kerül forgalmazásra. Ezeknek a termékeknek gyakran egy porkeverék az alapja, éppen ezért a porkeverékek gyártása, a porhomogenizálás kulcsfontosságú lépés a gyógyszergyártásban. Az általánosan alkalmazott szakaszos módszerek mellett ígéretes alternatíva lehet a folyamatos technológiák alkalmazása.

A folyamatos porhomogenizálás egy gazdaságosabb, termelékenyebb és sokszor könnyebben szabályozható módszer a porkeverékek gyártására. Az így készített porkeverékek hagyományos, mintázáson alapuló minőségellenőrzése azonban nem szolgáltat megfelelően gyorsan, pontos információt. Így akár nem megfelelő minőségű porkeverék is kerülhet a további formulálási lépésekbe, ami által a forgalmazásra kerülő végtermék minősége is romolhat. Munkám célja egy olyan mérési módszer fejlesztése és tesztelése volt, amellyel a porkeverékek egy folyamatos gyártás során valós időben vizsgálhatók. A cél a porkeverékek komponenseinek szemcseméret-eloszlása, illetve a keverék összetételének mérése volt. Hipotézisem az volt, hogy egy képelemzésen és gépi látáson alapuló, neurális hálót alkalmazó módszer képes lehet a porkeverék szemcséinek felismerésére és szegmentálására (a részecskék pontos körvonalának meghatározására), ezáltal az egyes részecskék méretbeli tulajdonságainak alapján a méreteloszlás és az összetétel meghatározható. A keverékekről futószalagon haladás közben felvételeket készítettem, a szemcsék felismeréséhez YOLOv5 neurális hálót alkalmaztam. Az összetételmérés vizsgálatához a mérésre történt elsőfokú polinom illesztésének pontosságát elemeztem, a szemcseméret-eloszlás mérés eredményét fénymikroszkóppal felvett képeken, kézzel bejelölt szemcsékből kapott eredményekkel hasonlítottam össze.

Az így kialakított módszerrel lehetőség adódik porkeverékek gyors, in-line vizsgálatára. Ez elsősorban folyamatos porhomogenizálás termékének vizsgálatára alkalmas, lehetőséget biztosít azonban akár tablettákba, kapszulákba kerülő porkeverék minőségének ellenőrzésére valós időben. A módszer további előnye, hogy nem destruktív, illetve a beruházási költsége is jelentősen alacsonyabb a hasonló mérésekre képes berendezésekénél (pl. lézerdiffrakciónál).

Tabletták felületi hibáinak felismerése és mechanikai tulajdonságainak becslése mesterséges intelligenciával

Kulcsszavak: Mesterséges intelligencia; tablettázás; gépi látás; hibafelismerés; folyamatkövető-, és elemző technológiák

Tabletták gyártása során különböző okok miatt hibás tabletták készülhetnek, melyek észlelése a jelenlegi mintavételezésen alapuló minőségbiztosítási módszerekkel nem valósítható meg hiánytalanul. A hibás tabletták felismerése és kiválogatása csökkentheti a termékvisszahívásokat, biztonságosabb készítményeket eredményezve. Továbbá a jelenleg alkalmazott destruktív, off-line vizsgálati módszerek valós idejű alternatívával történő kiváltásával az összes elkészült tablettá mechanikai tulajdonságai becsülhetővé válhat.

Munkám során azt feltételeztem, hogy egy gépi látáson és mesterséges intelligencián alapuló módszer képes lehet a tablettázási hibák felismerésére és kategorizálására. Először előállítottam a szükséges tablettákat, majd valós tablettázási hibákat modellező sérüléseket hoztam rajtuk létre. Ezt követően futószalagon elhaladó tablettákról készítettem felvételeket. A kapott képeket felhasználva megtanítottam egy objektumfelismerő algoritmust, majd egy független videófelvételre alkalmazva teszteltem a modellt.

Kutatómunkám során még azt is vizsgáltam, hogy eltérő préselő alkalmazásával készült tabletták törési szilárdsága és szétesési ideje meghatározható-e a felületükről készült képek alapján. Ehhez új tablettákat hoztam létre, majd mindkét oldalukról fényképeket készítettem. Ezeket alapul véve mesterséges intelligencia segítségével tablettákat különböző szétesési idő és törési szilárdság osztályokba soroltam be.

Eredményeim azt mutatták, hogy a gépi látást és mesterséges intelligenciát is alkalmazó rendszerek nagy pontossággal képesek voltak a kitűzött feladatok ellátására. A tablettázási hibák felismerése és kategorizálása 99,2 %-os pontosságú volt, valamint a rendszer az áteresztőképessége alapján könnyen integrálható egy gyógyszeripari gyártósorba. A mechanikai tulajdonságok alapján történő osztályozás a sikeressége miatt alkalmas lehet az off-line tesztek kiváltására. Ezen rendszerek segítségével az elkészült tabletták nem destruktív, 100%-os átvizsgálása megvalósítható, jelentősen javítva a gyógyszeripari minőségbiztosítás hatékonyságát.

FEKETE DÁNIEL
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

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

Mesterséges neurális háló alapú modell fejlesztése granulátumok nedvességtartalmának in-line nyomon követésére

Kulcsszavak: folyamatos technológia; folyamatfelügyelő és analizáló technológiák (PAT); soft szenzor; folyamatos granulálás; folyamatos szárítás

A gyógyszeriparra hagyományosan jellemző szakaszos technológiákat egyre jobban felváltják a folyamatos technológiák, melyeket gyakran egy egységként, akár a nyersanyagoktól a végső gyógyszerig, integrálva fejlesztenek és működtetnek. Egy ilyen összetett rendszer használata során szükség van a folyamat minél mélyebb megértésére, amit a hagyományosan alkalmazott minőségellenőrzési gyakorlattal – angolul Quality by Testing (QbT) – nem lehet megtenni. A QbT helyett megszületett a tervezett minőség, a minőségbiztosítási gyakorlat – angolul Quality by Design (QbD) – fogalma, mely segítségével megérthető, hogy az anyagi jellemzők és a folyamatparaméterek változása miként befolyásolja a termék minőségét. Ezeket a rendszereket folyamatfelügyelő és analizáló technológiák – angolul Process Analytical Technologies (PAT) – alkalmazásával lehetőség van valós időben, in-line nyomon követni. PAT rendszerként kiválóan alkalmazhatóak spektroszkópiai módszerek, mint például a közeli infravörös spektroszkópia – angolul Near Infrared Spectroscopy (NIR) –, valamint egy még modernebb irányzat, a szoftveres érzékelők – angolul soft sensors – alkalmazása is egyre jobban elterjed. A szoftveres érzékelők használata során a termék várható tulajdonságai közvetetten, kizárólag mért folyamatparaméterek alapján becsülhetőek anélkül, hogy direkt mérésre lenne szükség.

Munkám során egy elterjedten alkalmazott készítménytechnológiai eljáráson, az ikercsigás nedves granuláláson alapuló integrált, folyamatos rendszer működését vizsgáltam. Mivel a granulátumok nedvességtartalma nagymértékben meghatározza a termék minőségét, célom volt ennek a tulajdonságnak az in-line, valós idejű követése, továbbá annak megállapítása, hogy a különböző gyártási paraméterek hogyan befolyásolják azt. Ennek megvalósításához követtem a granulátumok maradék nedvességtartalmát és az aktuális gyártási paramétereket, hogy felderíthessem a közöttük lévő összefüggéseket. Ennek követésére először NIR spektroszkópiát használtam PAT eszközként, mely az adatokat gyorsan, in-line, valós időben és roncsolásmentesen képes mérni. Ezután kidolgoztam egy még modernebb módszert, amivel közvetett módon tudtam becsülni a nedvességtartalmat, kizárólag a rögzített gyártási paraméterek alapján mesterséges neurális háló alkalmazásával. Ennek köszönhetően az érzékeny és drága NIR spektroszkópia leváltható, az in-line követés már anélkül is megvalósítható.

GYÖNGYÖSSY ÁDÁM
vegyészmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Bálint Erika
egyetemi docens, BME VBK

Heterociklusos kapszaicinoidok előállítása áramlásos kémiai rendszerekben

Kulcsszavak: áramlásos kémia; heterociklus; kísérlettervezés; hidrogénezés; kapszaicinoid

Kutatómunkám célvegyületei a heterociklusos kapszaicinoidok. Szubsztituált homociklusos analógjaik, a kapszaicin, valamint a nonivamid („szintetikus kapszaicin”) az irodalomban jól leírt és jellemzett vegyületek, gyakran használják az élelmiszer-, valamint a gyógyszeriparban egyaránt. Kutatómunkám során célul tűztük ki az irodalomban eddig még ismeretlen heterociklusos kapszaicin analógok előállítását majd a reakciók optimalizálását.

A heterociklusos kapszaicin származékok előállítását három lépésben, áramlásos kémiai rendszerben kívántuk megvalósítani. Első lépésben a különféle heteroaromás karbaldehidekből kiindulva a megfelelő oximokat kívántuk Asia® rendszerben létrehozni, majd ezeket H-Cube Pro® folyamatos hidrogénező reaktorba vezetve heterociklusos metánaminok képzése volt a célunk. Az aminokat preparálást követően aktivált nonánsavval reagáltatva egy N-acilezési lépésen keresztül jutottunk a heteroaromás nonánsavamidokhoz.

A reakciók optimalizálását modellreakciók segítségével végeztük, melyek folyamán több reakciót befolyásoló faktort (hőmérséklet, nyomás, tartózkodási idő) vizsgáltunk. A reakciók végbemenetelét kromatográfiás (GC, HPLC) és tömegspektrometriás (LC-MS) módszerekkel ellenőriztük, a termékeket oszlopkromatográfia segítségével tisztítottuk. Az újonnan létrehozott vegyületek szerkezetének igazolásához ¹H, ¹³C NMR és nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálatokat végeztünk.

HEGYI MIHÁLY
Vegyésmérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Székely Edit
egyetemi tanár, BME VBK

Félfolyamatos neutrális hidrolitikus eljárás fejlesztése PET kémiai újrahasznosítására

Kulcsszavak: hidrotermális, depolimerizáció, félfolyamatos, kémiai újrahasznosítás, PET

A polietilén-tereftalát [PET] ipari méretben megvalósult újrahasznosítása nagyrészt a mechanikai újrahasznosítási technológiákra épít [1]. A technológia nehezen vagy nem képes szennyezettebb hulladékáramokat feldolgozni, ezeknél a kémiai újrahasznosítás lehet a megoldás. Ennek során a polimerből értékes bomlástermékeket nyerünk, például a monomereket, amikből friss polimer szintetizálható. A PET esetében a hidrotermális bontás egy még nem kellőképpen kidolgozott, de nagy potenciállal rendelkező technológiai csoportot alkot. A víz alkalmazása zöld, olcsó, egyszerűen kezelhető közeget jelent, de az irodalomban fellelhető hidrolitikus eljárásokkal elérhető termelékenység és terméktisztaság sok esetben elmarad a rivális technológiáktól.

Munkámban a PET neutrális hidrolízisét vizsgáltam saját fejlesztésű félfolyamatos készülékünkben. A polimer felett folyamatosan cserélődő víz elősegíti a reakció előrehaladását a termékek folyamatos eltávolításán keresztül. A hidrolízist a 250-300 °C-os hőmérséklet-tartományban, 10-30 MPa nyomáson vizsgáltam, az alapanyag teljes konverziójához 14-35 perc szükséges. A pH szabályzásán keresztül stabilizált atmoszférikus oldatból a termék TPA kinyerése savadagolást követő szűréssel megvalósítható, a preparatív hozam 76-100% között alakult. A hőmérséklet emelése kisebb reakcióidő mellett magasabb preparatív hozamot eredményez. A preparatív termék TPA NMR spektrumában nem kvantitatívan meghatározható a szennyezők mennyisége.

A folyamat lefutását frakcionált mintavételt követő folyadékkromatográfiás vizsgálattal végeztem. Míg a nyomás nem fejt ki szignifikáns hatást a folyamatra a 10-30 MPa-os tartományban, a hőmérséklet növelése gyorsítja a reakciót. A TPA készülék végén tapasztalható koncentrációprofilja kvalitatívan változik a vizsgálati tartományban. Ennek okát tartózkodási idő-eloszlás mérések segítségével vizsgáltam. Az eloszlást NaCl oldatát, mint nyomjelzőt használva mértem; a kapott eloszlást a bontási kísérletekkel összehasonlítva megállapítható, hogy a hőmérséklet emelésével fokozatosan a TPA kimosódása válik a domináns, sebességmeghatározó részlépéssé. Ennek eredményeképpen a hőmérséklet 285°C fölé emelése nem gyorsítja számottevően a teljes bontási folyamat lefutását.

A készüléket 20-szoros méretnövelésnek vettem alá, hogy a reaktor belsejében megismerhető legyen a fázisok viselkedése a bontási folyamat befagyasztásával.

[1] Plastics Europe: The circular economic for plastics. An European overview

KÁLNAI ÁRON
vegyésmérnöki szak
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Galata Dorián László
tudományos munkatárs, BME VBK

Porkeverék komponensenkénti szemcseméret-eloszlásának meghatározása gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Kulcsszavak: porhomogenizálás; gépi látás; mesterséges intelligencia; szemcseméret-eloszlás; folyamatkövető- és elemző technológiák

A gyógyszeriparban az utóbbi években jelentős eltolódás figyelhető meg a hagyományos szakaszos gyártástól a folyamatos gyártási technológiák irányába. Ennek a változásnak legfőbb célja a fokozott biztonság és minőség-ellenőrzés. Ez az átmenet nagy figyelmet von magára és ennek keretein belül egyre nagyobb hangsúly kerül a különböző, gyógyszeriparban használt porok, valamint granulátumok vizsgálatára. Az újabban végzett fejlesztések során elsősorban az in-line vizsgálati módszerek élveznek prioritást, melyek segítségével valós idejű információk nyerhetők és a különböző folyamatparaméterek ellenőrzésének optimalizálásában is előrelépések érhetők el. A gyógyszeriparban felhasznált porkeverékek szemcséinek két legfontosabb tulajdonsága a méretük és az alakjuk. Ezek a paraméterek kihatnak a készítmény feldolgozására, gyártására és a hatásosságára is, így az egyes komponensek tulajdonságainak ismerete nagy jelentőséggel bír. Különösen fontos, hogy a porkeverékeket alkotó komponensek tulajdonságait külön-külön ismerjük, hiszen azok az adott készítményben betöltött eltérő funkciójukhoz hasonlóan más és más karakterisztikájúak. Munkám célja egy olyan technológia kifejlesztése volt, mely gyógyszeripari porkeverékek teljes, valós idejű átvizsgálására használható és ami képes a porkeverékeket alkotó komponensek szemcséinek külön-külön történő vizsgálatára. Hipotézisem az volt, hogy egy gépi látáson, mesterséges intelligencián és képelemzésen alapuló rendszer képes lehet porkeverékek szemcséinek felismerésére, az egyes komponensek megkülönböztetésére és a komponensenkénti szemcseméret-eloszlás meghatározására. Az objektumok (szemcsék) felismerését a YOLOv5 neurális hálóval, a felismert szemcsék méretének meghatározását pedig klasszikus képelemzéssel, egy saját készítésű Matlab algoritmus segítségével végeztem. Végeredményben a fejlesztett módszer képes volt a porkeverékekről készített videókban található eltérő komponensek szemcséinek felismerésére és az egyes anyagokhoz tartozó szemcseméret-eloszlások meghatározására, melyhez a felismert részecskék minimális Feret-átmérőjét használta. Az in-line rendszerrel kapott eredményeket ismert nagytípusú mikroszkóppal készített képek elemzésével validáltam. A két módszer eredményei minden esetben jó egyezést mutattak, így a fejlesztett technológia in-line alkalmazásban hatékonynak bizonyult. Ezt kihasználva a módszer beépíthető a gyártási folyamatokba, ezáltal nagy előrelépést hozva a gyógyszeripari minőségbiztosításban.

Epoxi gyanta félfolyamatos üzemű, szelektív hidrotermális bontása

Kulcsszavak: epoxigyanta; kémiai újrahasznosítás; szolvólízis

Az epoxi gyantákat jó mechanikai és kémiai tulajdonságaik miatt egyre szélesebb körben használják bevonatokhoz, kompozitok mátrixaként, építkezéseken, elektronikai-, és elektromos szigetelés céljából, valamint ragasztókban. A probléma az epoxi gyantákkal és kompozitjaikkal, hogy az életciklusuk végére érve a hulladékfeldolgozás a komplex összetétel miatt nem egyszerű. A kémiai újrahasznosítás célja a kompozit korlátozott mértékű lebontása, amellyel csökkenthető az ipar nyersanyagigénye. A szolvólízis is egy kémiai újrahasznosítási módszer, ezen belül epoxi gyanták esetében az irodalomban elterjedten használt szakaszos rendszerben a glikolízis, alkoholízis és hidrolízis (hidrotermális bontás), illetve ezek kombinációja. A hidrotermális bontás előnye, hogy csak vizet használ oldószernek és reagensnek is. Magas hőmérsékleten és nyomáson a bontásnak kedvező irányban változnak a víz fizikai-kémiai tulajdonságai.

A munkámban egy elterjedt összetételű, biszfenol-A alapú, epoxi gyanta teljes konverziójú, félfolyamatos üzemű hidrotermális bontását valósítottam meg. Termékként 7 komponensű termék keletkezett, amelyek közül az egyik az epoxi készítés adalékanyaga volt. Ez egy felettébb szelektív termékprofilnak mondható az eddig leírt szakaszos módszerekhez képest. Box-Behnken-kísérletterv segítségével vizsgáltam a nyomás, hőmérséklet és az átlagos tartózkodási idő hatását a bontások végpontjára és a termék koncentrációprofiljára. Szignifikáns hatása a hőmérsékletnek és az átlagos tartózkodási időnek van, vagyis a vizsgált tartományban (20 – 25 MPa) a nyomáshatás elhanyagolható. A gyanta bontása 330 °C-on már megvalósítható, azonban ekkor még sok idő kell a teljes konverzió eléréséhez, ehhez képest 360 °C-on pár perc alatt elbontható a gyanta. A víz átlagos tartózkodási ideje, a 2 – 4 perces tartományban, inkább a termékösszetételt befolyásolta, mégpedig minél nagyobb volt, annál nagyobb mértékű volt a bontás, vagyis nőtt a kisebb vegyületek mennyisége.

Mivel az epoxi gyantákat ritkán alkalmazzák önmagukban, így megvizsgáltam egy nagy jelentőségű kompozit (leszerelt szélerőmű lapát) bontását is a kidolgozott módszerrel. A bontás során a visszamaradt szilárd maradék egy fehér, szálal, laza szerkezetű szálhalom volt, mely az eredeti kompozit tömegének 65 %-át teszi ki. Ez a tömegcsökkenés korábbi, üvegszáltisztítással foglalkozó munkánk alapján megfelel egy átlagos üvegszállal társított kompozit rendszer polimer tartalmának.

LŐRINCZ ZSOLT
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Pataki Hajnalka
egyetemi adjunktus, BME VBK
Stoffán György Nimród
PhD hallgató, BME VBK

Folyamatos heterogén kristályosítás fejlesztése hatóanyagmorfológia javítására

Kulcsszavak: heterogén kristályosítás; polimer segédanyag; hatóanyag morfológia javítás; folyamatos technológia; kísérletterv

A kristályosítás a gyógyszeriparban az egyik leggyakrabban alkalmazott tisztítási eljárás, amelyen a forgalomba hozott kismolekulás gyógyszerhatóanyagok 70 %-a előállításuk során legalább egyszer keresztülmegy. Ezen feldolgozási lépés meghatározza a keletkező kristályok tisztaságát és alapvető fizikai tulajdonságait. Így hatással van a szilárd hatóanyag biohasznosulására és technológiai feldolgozhatóságára egyaránt. Ezen belül a segédanyagok jelenlétében végzett heterogén kristályosítás egy innovatív és egyben komplex módszer a termékkristályok morfológiájának célzott módosítására. Számos szakirodalmi cikk ismerteti a technológia alkalmazásában rejlő lehetőségeket, melyeket ezidáig leginkább szakaszos üzemmódban valósítottak meg. Az eljárás mechanizmusainak megértése és egyben folyamatos technológiai megvalósítása azonban eddig kiaknázatlan komoly gazdasági előnyökkel járhat.

Kutatómunkám során a formulációs segédanyagként használt polivinilpirrolidon (PVP-K12) polimer hatását vizsgáltam a refluxbetegség ellen alkalmazott famotidin hatóanyag kristályosításában. Célom egy folyamatos üzemű segédanyagos kristályosítás fejlesztése a segédanyag termékmódosító hatásának (polimorfia kontrol, kiváló gördülékenység) kiaknázásával. A folyamatos üzemű kísérletekhez elengedhetetlen volt a szignifikáns folyamatparaméterek meghatározása. Ehhez egy $2^{(4-1)}$ részfaktortervnek megfelelően duplikált falú, szabályozott üvegkristályosítóban végeztem szakaszos kísérleteket, melyben a folyamatparaméterek (adagolási sebesség/tartózkodási idő, keverési sebesség, segédanyag mennyisége és bukógát jelenléte) termékmennyiségre és minőségre gyakorolt hatását tanulmányoztam. A technológiafejlesztéshez szükséges hatóanyag-polimer kölcsönhatások jellemzését további 2^3 -os teljes faktoros kísérlettervvel végeztem. A rész- és teljes faktoriális tervek statisztikai kiértékelést követően meghatároztam az ideális folyamatparamétereket, mellyel folyamatos heterogén kristályosítást valósítottam meg egy 3 testes tartálykristályosítóban. A kristályosítóban referenciaként polimer nélkül elvégzett kísérletben két polimorf módosulat volt jelen (Form A és Form B) kis termeléssel, az állandósult állapot elérése még hat tartózkodási idő elteltével sem sikerült. Ezzel szemben a PVP-K12 jelenlétében már az első tartózkodási idő után beállt az állandósult állapot, a termodinamikailag stabil Form A polimorfot megfelelő termeléssel és kiváló gördülékenységgel sikerült előállítanom.

MAJTÁN MÁRTON
Vegyészmérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Miskolczi Norbert
egyetemi docens, PE MK

Modell bio-olaj észterezésének vizsgálata módosított mesterséges zeolit katalizátorokon

Kulcsszavak: biomassza; pirolízis; bio-olaj; minőségjavítás; motorhajtóanyag

A világ energiaigénye évről-évre nő, miközben a fosszilis energiahordozók hozzáférhetősége csökken. A fosszilis energiahordozók korlátozott hozzáférhetőség mellett jelentős környezetterhelést is okoznak, illetve a beszerzési árak függ az egyes országok diplomáciai/politikai kapcsolatától. Az imént említett problémákra megoldás lehet a különböző hulladékokból, mint pl. műanyagokból, szennyvíziszapból, állattartás melléktermékeiből pirolízissel történő bio-olaj előállítás. Az így előállított bio-olajból nem lehet megfelelő minőségű motorhajtó anyagot gyártani, mely a bio-olaj alkohol és szerves sav tartalmának köszönhető. A bio-olajok nem megfelelő minősége 3 fő problémában mutatkozik meg, ilyen a túl alacsony pH (savas kémhatás), nem megfelelő tárolási stabilitás, illetve az alacsony fűtőérték. Jelenleg rendelkezésünkre állnak nagy konverziójú hidrogénező technológiák a heteroatomok eltávolítására, viszont hátrányuk, a nagy hidrogén igény, melyeket nagyon körülményes kielégíteni fenntartható forrásból (ma ismert technológiákkal szinte lehetetlen). TDK munkám során egy alternatív bio-olaj minőségjavító eljárást vizsgáltam. Az alternatív eljárás alapja, hogy megfelelő körülmények és katalizátor mellett a bio-olajban lévő szerves savak és alkoholok észtereket képeznek, így javítva a bio-olaj tárolási stabilitását, fűtőértékét és pH-ját. Méréseim során modell vegyületekkel (dekanollal és olajsavval) szimuláltam a bio-olaj alkohol és szerves sav tartalmát. A reagenseket 6 órán át reagáltattam. A reakció lefolyásának mértékét fél óránkénti mintavételezéssel monitoroztam. A kvalitatív analízist savszám meghatározás és FITR (Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia) segítségével végeztem. Katalizátorként különböző típusú zeolitokat alkalmaztam (béta, Y, HZSM-5). A méréseket 3 különböző hőmérsékleten folytattam le, annak érdekében hogy megfigyelhető legyen a reakciósebesség és konverzió hőmérsékletfüggése.

Mivel az észterestítő technológiák jelenleg még nincsenek elterjedve az olajiparban, ezért munkánk célja a tárgyalt technológia ipari elterjedésének elősegítése.

MOHÁCSI ZSOMBOR MÁRTON
Gyógyszervegyészmérnök MSc
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Decsi Balázs
egyetemi tanársegéd, BME VBK
Dr. Balogh György Tibor
egyetemi tanár, SE GYTK

Dihidropiridin származékok biomimetikus oxidatív átalakulásainak vizsgálata

Kulcsszavak: biomimetikus, metalloporfirin, metabolizmus, áramlások kémia, dihidropiridinek

Gyógyszervegyületek fejlesztése során kiemelt jelentőségű a citokróm P450 enzimcsalád által katalizált oxidációs reakció vizsgálata. Szintetikus metalloporfirinek alkalmazásával ez a folyamat jól modellezhető. Korábbi munkám során több mint 100 gyógyszerhatóanyag átalakulását vizsgáltam metalloporfirin katalizálta biomimetikus oxidációban. A biomimetikus és irodalmi in vivo metabolitprofilokat összehasonlítva választottam ki a dihidropiridin vegyületcsaládot, amit részletesebben vizsgálni kívántam. Ehhez kiválasztottam 9 dihidropiridin alapvázsal rendelkező gyógyszerkémiai szempontból releváns vegyületet, melyeken elvégeztem a metalloporfirin katalizálta biomimetikus oxidációt. Katalizátorként mezo-tetra(para-szulfoniloxifenil) vasporfirint (FeTPPS), míg oxidálószerként terc-butyl-hidroperoxidot (tBuOOH) alkalmaztam. A reakciókat a biológiai folyamatok szempontjából releváns 4 különböző pH értéken (2,7; 4,5; 6,5; 7,4) vizsgáltam. Az optimális pH meghatározása után a szakaszos biomimetikus reakciót folyamatos áramú rendszerbe integráltam. A folyamatos áramú reakciót egy 5 faktoros (hőmérséklet, térfogatáram, porfirin koncentráció, szubsztrát koncentráció, oxidálószer koncentráció) teljes kísérletterv (32 kísérlet) mentén optimalizáltam az elérhető legnagyobb konverzió érdekében, a kiválasztott 3 vegyület esetében. A kísérletek eredményeként megállapítható, hogy a szakaszos biomimetikus rendszerben képződött metabolitok jó egyezést mutatnak szervezetben képződő metabolitokkal. A preferált oxidációs útvonal első lépése jellemzően a dihidropiridin gyűrű piridinné oxidálódása. Az áramlások kémiai rendszer esetén az átlagos konverziót nagyban befolyásolta a dihidropiridin gyűrű szubsztituáltsága és a reakciókat vegyületenként külön-külön szükséges optimalizálni.

SZÁSZ ADRIENN
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Szabó Edina
tudományos munkatárs, BME VBK
Dr. Nagy Zsombor Kristóf
egyetemi docens, BME VBK

Kristályos hányad meghatározásának jelentősége nagy hatóanyag-tartalmú szálak fejlesztésénél

Kulcsszavak: amorf szilárd diszperziók; elektrosztatikus szálképzés; kristályos nyomok; Raman-spektroszkópia

Napjainkban a gyógyszeriparban egyre több a rossz vízoldhatóságú hatóanyag. A fejlesztésben levő gyógyszerjelölt molekulák ~80% ilyen. Azonban nagy kihívást jelent az ilyen típusú hatóanyagokból megfelelő biohasznosulású orálisan bevehető szilárd gyógyszerforma előállítás. Több különféle készítményfejlesztési stratégia is rendelkezésre áll a kioldódás fokozására, amelyek közül az amorf szilárd diszperziók (ASD-k) alkalmazása kiemelkedő. Ezekben a rendszerekben egy vagy több hatóanyag van valamilyen segédanyag, legtöbbször polimer mátrixba ágyazva és a létrejövő amorf szerkezet az egyensúlyi oldhatóságot meghaladó kioldódást eredményez. Az ASD-k esetén a hatóanyag-tartalom növelése célszerű az ipari alkalmazhatóság szempontjából, emellett pedig a beteg együttműködés is javul, ha így kisebb méretű a betegség kezelésére szánt tabletta. Az előállított ASD-s rendszerek stabilitása nagy hatóanyag-tartalmak esetén azonban kulcskérdés a későbbi felhasználás és tárolhatóság szempontjából, hiszen célunk a gyógyszerhatóanyag kristályos formájának újbóli kialakulásának megelőzése. A magas hatóanyag-tartalmú ASD-k esetén nagyobb eséllyel alakulhatnak ki inhomogenitások, lokális kristályos nyomok, ezért fejlesztésükkel elengedhetetlen az ezt kiszűrő analitikai módszerek kidolgozása.

Kísérleteim során elektrosztatikus szálképzéssel állítottam elő ASD-s szálakat különböző oldószerkelegyek felhasználásával, melyekben a modell hatóanyag a spironolakton, a polimer hordozó pedig poli(vinil-pirrolidon)-vinil-acetát kopolimer volt. Az előállított szálak méretét és alakját pásztázó elektronmikroszkóppal, az amorf jellegüket pedig differenciális pásztázó kalorimetriával és porröntgen-diffrakcióval vizsgáltam. Kioldódás tesztek elvégzésével jellemeztem a szálak anyagok minőségét a gyógyszeripari hasznosíthatóság szempontjából. A kristályos-amorf hányad kvalitatív elemzéséhez polarizációs fénymikroszkópot használtam, míg a kvantitatív jellemzést Raman-spektroszkópiás mérések alapján végeztem el. Az eredmények rávilágítottak arra, hogy a Raman-spektroszkópia alkalmas a kristályos nyomok detektálására és azok mennyiségi meghatározására. A fejlesztett módszer alkalmazásával jól kiszűrhető az a hatóanyag-tartalom határ, melynél már az ASD rendszer stabilitása a kristályos nyomok miatt csökkenhet.

Az eredmények jó kiindulópontként szolgálhatnak a nagy hatóanyag-tartalmú szálak várható fizikai stabilitásának meghatározásához, mely tudatosabb készítményfejlesztést tesz lehetővé.

Kolloid- és makromolekuláris kémia

ÁDER LIZA LÍDIA
Vegyésmérnöki mesterképzési szak
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Hórvölgyi Zoltán
egyetemi tanár, BME VBK
Márton Péter
PhD hallgató, BME VBK

Anionos tenziddel társított kitozánbevonatok felületi és tömbi tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: vékonyréteg, biopolimer, felületaktív anyag, peremszög, pszeudoporozitás

A kitozán egy széles körben alkalmazott, környezetbarát kationos biopolimer. Munkám során kitozán és két elterjedt, kereskedelmi forgalomban kapható anionos tenzid (nátrium-dodecilszulfát és nátrium-dodecilbenzolszulfonát) társított rendszereit vizsgáltam. A biopolimer-tenzid kölcsönhatásokat oldatfázisban, különböző tenzidkoncentrációk mellett tanulmányoztam, mérve az oldatok felületi feszültségét és reológiai tulajdonságait, hogy információt nyerjek a polimer-tenzid komplexek kialakulásáról. A keverék rendszerekből mártásos technikával bevonatokat alakítottam ki, melyek felületi tulajdonságait vízperemszögek mérésével, illetve röntgen-fotoelektron-spektroszkópiával, tömbi tulajdonságait UV-látható spektrofotometriával, valamint elektrokémiai vizsgálatokkal (polarizációs tesztekkel és elektrokémiai impedancia-spektroszkópiával) jellemeztem. Az így létrehozott bevonatok számos területen hasznosíthatóak lehetnek az élelmiszeripari csomagolástechnikától a textiliparion át a gyógyászatig.

BORBÁS BALÁZS
gépészmérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Gépészmérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Hórvölgyi Zoltán
egyetemi tanár, BME VBK

Felkonvertáló nanorészecskék kompozit vékonyrétegei: emissziós intenzitás és energiaátadási folyamatok jellemzése

Kulcsszavak: fénymoduláló nanorészecskék; szilika- és kitozán-nanobevonat; anti-Stokes-hatás; sugárzási kölcsönhatás

A felkonvertáló nanorészecskék (upconverting nanoparticle, UCNP) képesek nagyobb hullámhosszú fotonokkal való gerjesztés hatására kisebb hullámhosszú – azaz nagyobb energiájú – fotonok emissziójára. Az UCNP-szuszpenziók vizsgálata széles körű a tudományos szakirodalomban, azonban kevés publikáció foglalkozik az UCNP-tartalmú kompozit bevonatok jellemzésével annak ellenére, hogy ezek a bevonatok hozzájárulhatnak számos gyakorlati alkalmazás (pl. optikai szenzorok, fotovoltaiikus eszközök) megvalósításához.

Kutatómunkám célja közeli infravörös fényvel gerjeszthető, $\text{NaYF}_4: 20\% \text{Yb}^{3+}, 0,5\% \text{Tm}^{3+}$ felkonvertáló nanorészecskék, illetve a távlati felhasználás szempontjából fontos, a részecskéket tartalmazó kompozit bevonatok előállításának és tanulmányozásának. Fő célkitűzésem olyan funkcionális vékonyrétegek fejlesztése, amelyekben a felkonvertáló nanorészecskékre jellemző anti-Stokes emissziók intenzitása a suszpenziókban mérhető intenzitással összemérhető nagyságú. Vizsgálom kompakt, pórusos és hibrid szilícium-dioxidot, valamint kitozán biopolimert a kompozit bevonatok mátrixanyagoként. A beágyazó közeg anyagi minőségét, szerkezetét és összetételét, a bevonatképzés módját és paramétereit a felkonvertáló emissziós intenzitás maximalizálása érdekében befolyásolom. Eredményeim alapján a legelőnyösebb emissziós és mechanikai tulajdonságokat a kitozánnal alkotott kompozit bevonatok mutatják.

Az alkalmazhatóság fontos paramétere a fotonemisszió intenzitásának hőmérsékletfüggése, illetve más komponensekkel való hatékony energiaátadás. Ebből a célból vizsgálom a felkonvertáló nanorészecskék fluoreszcens színezékmolekulákkal való energiaátadását különböző kolloid rendszerekben. A kialakított kompozit bevonatokban előforduló sugárzási kölcsönhatások eredményei hasznosíthatóak többek között a fotodinamias rákterápia vagy a fotovoltaiikus eszközök hatásfoknövelése területén.

BUDAI ESZTER ANNA
Vegyész, MSc
MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Iván Béla
egyetemi magántanár, ELTE TTK
Dr. Szanka István
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK
Petróczy Anna
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Újszerű, poli(dimetilsziloxán) alapú nanoszerkezetű amfifil kotérhálók

Kulcsszavak: poli(dimetil-sziloxán), amfifil kotérháló, nanofázis-szeperált, termoreszponzív, nanohibrid

Munkám során két különböző típusú, poli(dimetilsziloxán) (PDMS) alapú amfifil polimer kotérhálót állítottam elő sikeresen. Céljaim között szerepelt a kotérhálók szisztematikus vizsgálata, az előállítási körülmények, összetétel, szerkezet és a kapott kotérhálók alapvető tulajdonságai közötti kapcsolatok feltárása.

A kotérhálók szintézisét makromonomer módszerrel hajtottam végre, melyet a PHEMA-I-PDMS kotérhálók esetében oldatban és tömbfázisban, míg a PNIPAAm-I-PDMS kotérhálók esetében oldatban, két különböző oldószer használatával valósítottam meg. A szintézist követően az extrakcióval tisztított kotérhálóknak meghatároztam a gélhányadát, amely minden esetben magas értékeket mutat. Ez a szintézis sikerességét igazolta. A kotérhálók összetételének vizsgálata során tervezett összetételek kiváló egyezést mutatnak a kapott összetétel értékekkel. A kotérhálók szerkezetét különféle eljárásokkal vizsgáltam. A SAXS és az AFM vizsgálatok alapján a PHEMA-I-PDMS és PNIPAAm-I-PDMS polimer kotérhálók kofolytonos nanofázis-szeperált szerkezettel rendelkeznek. SAXS mérések alapján megállapított átlagos domén távolság értékek 9-18 nm között találhatóak. A duzzadás mérések alapján a két polimer fázis szelektíven duzzasztható apoláris és poláris oldószerben, ami egyértelműen igazolja az előállított kotérhálók amfifil tulajdonságát. Továbbá a hőmérséklet szerinti duzzadás mérés alapján a PNIPAAm-I-PDMS kotérhálók növekvő PDMS tartalommal csökkenő zsugorodást mutatnak a hőmérséklet emelésének hatására. A DSC mérések alapján a kotérhálókon belül a PHEMA és PNIPAAm polimerek T_g értékei az olló effektus jelenlétét mutatják. Vizsgáltam továbbá a PNIPAAm-I-PDMS kotérhálók T_{cp} értékeit, melyek a PDMS tartalom növekedésével növekednek. Továbbá sikeresen előállítottam ezüst és arany nanorészecskéket tartalmazó PHEMA-I-PDMS kotérhálókat, amelyeket katalizátorként felhasználtam 4-nitrofenol NaBH_4 -gyel történő redukálásában. A reakció mind az AgNR-et mind az AuNR-et tartalmazó kotérhálók esetében egy óra alatt elérte a 100%-os konverziót. Ezáltal kísérletileg igazoltam a fém tartalmú PHEMA-I-PDMS minták katalitikus aktivitását. Összességében, az irodalomban eddig nem közölt, különleges nanoszerkezetű és tulajdonságú, nanokatalizátor hordozónak alkalmas PHEMA-I-PDMS és termoreszponzív PNIPAAm-I-PDMS amfifil polimer kotérhálók szintézisét és szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek a feltárását valósítottam meg.

BORS ADRIENN MÁRTA
Műanyag- és száltechnológiai mérnök MSc
BSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Albert Emőke
egyetemi adjunktus, BME VBK

Ag-adalék hatása fényátersztést növelő, mezopórusos TiO₂ szol-gél bevonatok fotokatalitikus hatására

Kulcsszavak: mezopórusos TiO₂, szol-gél bevonat, fotokatalitikus aktivitás, fényátersztés-növelés

Munkám célja olyan szol-gél eljárással előállított mezopórusos titán-dioxid bevonatok fotokatalitikus hatásának növelése volt, amelyek növelik transzparens hordozójuk fényátersztését. A bevonatokat mártásos technikával állítottam elő üveghordozón, amelyre először kompakt szilícium-dioxid védőréteget választottam le az üvegben levő nátrium-ionok fotooxidációt gátló hatásának elkerülése miatt. A védőréteget pórusképző anyagot tartalmazó titán-dioxid nanorészecskékkel vontam be, a fényátersztés növelése céljából a bevonatokat vizes ammóniaoldat gőztérben öregítettem. A bevonatokat rétegenként magas hőmérsékleten kondicionáltam. A mintákat UV-látható spektroszkópiával jellemeztem a 400-800 nm-es tartományban felvett transzmittancia spektrumaik alapján. A spektrumokat vékonyrétegoptikai modellek felhasználásával, illesztéses módszerrel elemeztem és meghatároztam a bevonatok vastagságát és törésmutatóját. A fotokatalitikus tulajdonság növeléséhez a bevonatok nyitott pórusrendszerébe ezüst-ionokat juttattam, amelyeket a kondicionáláshoz hasonlóan magas hőmérsékleten (és időn keresztül) kezeltem azért, hogy az ezüst-ionok fémmé redukálódjanak. A fotokatalitikus hatásra a bevonatok pórusrendszerébe impregnált rodamin 6G színezékmolekulák UV-, illetve látható fény hatására bekövetkező, szilárd-levegő határfelületen végbemenő fotooxidációjának mértékéből következtettem.

Az eredményeket elemezve megállapítottam, hogy az ammóniás gőztérben öregített minták UV- és látható tartományban is mutatnak fotokatalitikus aktivitást. Az ezüstrészecskék UV-tartományban nem befolyásolták számottevően a fotokatalitikus hatást, látható tartományban pedig a rodamin 6G színezékérzékenyítő tulajdonsága leárnyékolta az adalékolás hatását. A színezékmolekulák besugárzása során az ezüstartalmú minták esetében annak nagyobb mértékű dimerképződését figyeltem meg (az ezüstöt nem tartalmazó mintákhoz képest). Az ezüstartalom növelésével a bevonatok fényátersztést növelő hatása kisebbnek mutatkozott, illetve fotokatalitikus hatása is kisebbnek bizonyult.

DEMÉNY PETRA
Vegyészmérnök
MSc, 2. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Hórvölgyi Zoltán
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Tegze Borbála
egyetemi adjunktus, BME VBK

Cu- és Cu₂O-nanorészecskékkel adalékolt TiO₂ szol-gél bevonatok előállítása és fotoaktivitásuk vizsgálata

Kulcsszavak: fotokatalízis látható fényben; félvezető nanorészecskék; kompozit nanorétegek; színezékdegradáció; öntisztító felületek

A TiO₂ n-típusú félvezető fém-oxid, mely fotokatalitikus aktivitást mutat UV-fényben: egy foton elnyelésével a TiO₂ elektronjai a vegyértéksávból a vezetési sávba kerülnek, lyukakat hagyva maguk után. Az így létrejött fotogerjesztett töltéshordozók képesek redox-reakciók katalizálására, mely tulajdonság kihasználható többek között a víz- és levegőtisztításban (pl. öntisztító felületek). Annak érdekében, hogy az elektromágneses sugárzás minél nagyobb tartományán aktívra váljon a TiO₂, bevett módszer a fém- és félvezető-részecskékkel - például Cu- és Cu₂O-részecskékkel - történő adalékolás. Az így kialakított bevonatok látható fényben is aktívra válnak, továbbá megfelelő rendszer kialakítása esetében UV-fényben is növekedhet a fotoaktivitás.

A kutatómunka során anatóz kristályfázisú, mezopórusos TiO₂-bevonatokat állítottam elő szol-gél eljárással. A redukciós módszerrel szintetizált Cu- és Cu₂O-nanorészecskéket in situ leválasztással (heterogén nukleáció) és fogótárcsás módszerrel (homogén nukleációs folyamatban képződött részecskék szuszpenzióját felhasználva) juttattam a TiO₂-bevonat felületére. Előállítottam csak Cu- és csak Cu₂O-részecskéket tartalmazó, valamint Cu- és Cu₂O-részecskéket is tartalmazó bevonatokat. Az előállított mintákat jellemeztem UV-látható spektroszkópiai, elektronmikroszkópiai (HRTEM, FE-SEM) és por röntgendiffrakciós (XRD) módszerekkel. A minták fotoaktivitását színezék degradációs módszerrel jellemeztem látható és UV-fényű bevilágítás alkalmazásával, vizsgáltam milyen hatással van a fotoaktivításra a Cu- és Cu₂O-részecskék együttes jelenléte. Tanulmányoztam az alkalmazott modell színezékanyagok szerepét a fotodegradációs tesztekben, ehhez metilnarancs, metilénkék és rodamin 6G színezékeket hasonlítottam össze. A fotoaktivitás tesztek igazolták, hogy a Cu- és Cu₂O-részecskék aktívra teszik a TiO₂-ot látható fényben H₂O₂ ko-katalizátor jelenlétében, és bizonyos minták növelik a fotoaktivitást UV-fényben is.

KÓKAI KATA PANNA

vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:

*Juhászné Dr. Csapó Edit
egyetemi docens, SZTE TTIK*

Makromolekulák alkotta biokolloidok kialakítása változó oldhatóságú vegyületek formulálására

Kulcsszavak: transzferrin; PLGA; nanoprecipitáció; hatóanyag hordozó; kapszulázás

A Szegedi Tudományegyetem Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszékén működő MTA-SZTE Lendület Nemesfém Nanoszerkezetek Kutatócsoport – Juhászné Dr. Csapó Edit vezetésével – már megalakulása előtt is intenzíven foglalkozott szérumfehérjék, valamint természetes és szintetikus (ko)polimerek alkotta hatóanyag hordozóként funkcionáló kolloid részecskék kialakíthatóságával. Ezen gyógyszerhatóanyag hordozó rendszerek (DDS) döntően a kolloid mérettartományba sorolhatóak ($d = 1\text{--}500$ nm). A hordozó részecskék felhasználhatóak olyan terápiás vegyületek vagy akár étrendkiegészítők és vitaminok szervezetbe vitelére is, amelyek célzott helyre történő eljutását jelentősen nehezítik a nevezett vegyületek korlátozott oldhatósága vagy instabilitása (pl.: hőmérséklet- vagy fényérzékenységük stb.), illetve a hatóanyagok formulálása révén növelhetjük hatékonyságukat is.

A szérumfehérjék és (ko)polimerek kombinálása révén önszerveződéssel is kialakítható összetett hordozó részecskék tulajdonságainak megismerése új kutatási irányvonal a kutatócsoportban, mely munkához 2024-ben csatlakoztam. A diákköri munkám során egy szérumfehérje, a vasmentes-transzferrin (Tf), és egy szintetikus kopolimer, a poli-(tejsav-glikolsav (PLGA), kombinálásával egy új hordozó részecske nanoprecipitációs eljárással történő kialakításán dolgoztunk, melyre a szakirodalomban hivatkozást még nem találhatunk. Vizsgáltuk a makromolekulák közötti, főként másodrendű kölcsönhatások révén milyen méreteloszlású részecskék állíthatók elő. A részecskék előállítására az erősen toxikus oldószerek használatát mellőztük, és stabilizálószerként egy nemionos felületaktív anyagot, az E-vitamin egy biokompatibilis származékát (D- α -tokoferol polietilén-glikol szukcinát, TPGS) alkalmaztuk. Ezen aktív E-vitamin a részecskék stabilizálásán túlmenően hatóanyagként is funkcionálhat és amfipatikus karaktere révén szolubilizációval elősegítheti más hidrofób hatóanyagok kapszulázását is. A Tf/PLGA részecskéket eltérő oldhatóságú modell vegyületek formulálására használtuk. Nem-szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyagok (NSAID) közül modellként választottuk a ketoprofént (KP) és az ibuprofént (IBU), valamint az antioxidánsok közé tartozó a kolekalciferolt (D3-vitamin) is tanulmányoztuk. Meghatároztuk ezen kismolekulák kapszulázási hatékonyság- (EE(%)) és hatóanyag töltöttség (DL(%)) értékeiket a Tf/PLGA/TPGS-alapú hordozóba formulálva, valamint a hatóanyagok in vitro kioldódásának vizsgálatára is végeztük kísérleteket.

MAKLÁRI CINTIA
Vegyész
MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Szabó Tamás
egyetemi adjunktus, SZTE TTIK
Nagy Péter
PhD hallgató, SZTE TTIK

Elektrokémiai funkcionálizálás hatása grafén-oxid diszperziók kolloidstabilitására

Kulcsszavak: módosított grafén-oxid; kritikus koaguláltató koncentráció; kolloidstabilitás; nanorészecskék; réteges anyagok

Az elmúlt évek egyik népszerű kutatási témája a különböző módosított szén alapú nanorészecskék alkalmazásainak lehetőségei. Kísérleti munkám során vizes közegű elektrokémiailag-, illetve foszfát-csoportokkal módosított grafén-oxid diszperziók kolloidstabilitását vizsgáltam, dinamikus fényszórás mérésel.

Emellett, a két különböző típusú grafén-oxid nanorészecske kémiai- és nanoszerkezetét térképeztem fel, rezgési-, forgási spektroszkópiát, valamint röntgendiffrakciót felhasználva, annak érdekében, hogy ez alapján részletesen magyarázhassam a kolloidstabilitás felületkémiai okait. A tapasztalatok alapján kijelenthető, hogy mindkét anyag esetében a grafītszerű multiréteges szénvázon grafit-oxidra jellemző funkcionálisok voltak jelen. Az elektrokémiailag szintetizált-, valamint a foszfát-só tartalmú elektrolitból való előállítással nyert grafén-oxidok kémiailag funkcionálizálhatóak voltak. A két anyag különböző mértékű kémiai módosítást szenvedett. A dinamikus fényszórásméréssel végzett kolloidstabilitásra vonatkozó kísérletek eredménye jó egyezést mutatott a szerkezetvizsgálatok eredményeivel.

A szóban forgó grafén anyagok, az elvégzett kísérletek alapján, alkalmasak lehetnek elektrokémiai felhasználásra (például kompozit előállítás), amely esetben a kolloid tulajdonságok ismerete praktikus információként szolgálhat. A kapott eredmények alapján érdemes lehet a mintákkal egyéb vizsgálatokat is elvégezni.

PÉTER TAMÁS

Vegyész

MSc, 4. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Szilágyi István

egyetemi docens, SZTE TTIK

Takács Dóra

PhD hallgató, SZTE TTIK

Poroszkék nanorészecskék kolloidstabilitása és antioxidáns aktivitása közötti összefüggések különböző szervesen sók jelenlétében

Kulcsszavak: Poroszkék, kolloidstabilitás, elektroforetikus mobilitás, ionspecifikus hatás, antioxidáns aktivitás

Az utóbbi években az antioxidáns aktivitással rendelkező nanozyme-ok kifejlesztése számos tudományos kutatás célját szolgálta. Ezek a szervesen nanorészecskék az enzimekhez hasonló működéssel bírnak, azonban olcsóbban előállíthatóak, és a fizikai-kémia tulajdonságaik hangolhatósága révén kevésbé érzékenyek olyan környezeti hatásokra, mint az oldatok pH-ja, hőmérséklete, vagy a magas sókoncentráció. Mivel ezen részecskéket gyakran vizes közegben diszpergálva alkalmazzák, ezért kiemelten fontos a kolloidstabilitásuk és antioxidáns aktivitásuk közötti összefüggések feltérképezése különböző szervesen sók jelenlétében [1]. A kutatásunk során tormaperoxidáz (HRP) enzimet utánzó PB nanorészecskéket szintetizáltunk, majd vizsgáltuk a részecskék kolloidstabilitását, és enzimatis aktivitását különböző szervesen ionok jelenlétében. A töltésviszonyokat és az aggregációs folyamatokat fényszórásmérésen alapuló technikák segítségével követtük nyomon. A kísérleti eredményeinket a Hofmeister sorozattal, a Schulze–Hardy-szabállyal és a töltéssel rendelkező részecskék kolloidstabilitásának leírására kidolgozott DLVO-elmélet által értelmeztük. A PB antioxidáns aktivitása és kolloidstabilitása közötti összefüggéseket a vizsgált sók jelenlétében HRP teszt segítségével mértük fel. Megállapítottuk, hogy mind az ionok felülethez való affinitásának, mind pedig a koncentrációjának jelentős szerepe van a reakciósebesség szempontjából. Az ionerősség növelése ugyanis az elektromos kettősréteg egyre nagyobb mértékű beszűkülését eredményezi, ami által a részecskék felülete könnyebben megközelíthetővé válik a szubsztrát számára. Ezek alapján a PB olyan magas sókoncentrációjú rendszerekben is hatékonyan kifejtheti antioxidáns aktivitását, melyek a természetes eredetű enzimek inaktiválódását okozhatják.

[1] Alsharif NB, Samu GF, Sáringi S, Muráth S, Szilágyi I: A colloid approach to decorate latex particles with Prussian blue nanozymes. *J Mol Liq* 2020, 309:113066.

TORMA BIANKA

Vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:

*Juhászné Dr. Csapó Edit
egyetemi docens, SZTE TTIK*

Új összetételű, szérumfehérje és hialuronsav alkotta koloidális hatóanyag hordozó részecskék tervezése

Kulcsszavak: poliszacharid; transferrin; polielektrolit komplex; nanoszerkezet; önszerveződés

Napjainkban számos kutatás foglalkozik minél hatásosabb gyógyszerkészítmények fejlesztésével. A legjelentősebb nehézségek, melyekkel a szakembereknek szembe kell néznie az, hogy az adott készítmény képes legyen a hatóanyagot a szervezetben célzottan, azon a helyen leadni, ahol arra szükség van, illetve, hogy minél tovább fejtse ki hatását. Ennek eléréséhez a klasszikus gyógyszerformák mellett már elterjedtek a koloidális hatóanyagszállító rendszerek, melyek képesek szabályozni a hatóanyag felszabadulási folyamatát. Ahhoz, hogy egy optimális összetételű és szerkezetű gyógyszerhordozó rendszert hozzunk létre, elengedhetetlenek a gyógyszertechnológiai vizsgálatok mellett a formuláció kialakíthatóságára és összetételére irányuló fizikai-kémiai és koloidkémiai vizsgálatok is, melyek kutatómunkám motivációját jelentették.

Diákköri dolgozatom témáját két természetes makromolekula, egy nagy mólsúlyú poliszacharid, a hialuronsav (HyA) és a transferrin (Tr) fehérje kölcsönhatásából létrejövő koloid rendszer kialakíthatóságának feltérképezése és annak részletes jellemzése jelentette. Tanulmányoztam, hogy a képződő koloid részecskék alkalmasak lehetnek-e a jövőben gyógyszerhatóanyag(ok) szállítására. Munkám első lépésében nagy jelentőséget tulajdonítottunk a két molekula közötti kölcsönhatás jellemzésére, melynek eredményeképp megállapítottuk, hogy a részecskék kialakulásában mind elektrosztatikus, mind hidrofób kölcsönhatások is fontos szerepet játszanak. Vizsgálataink során a makromolekulák tömegarányának és a pH értékének változtatása mellett számos körülmény hatását vizsgáltuk a keletkező részecskék főbb tulajdonságaira. Dinamikus fényszórás (DLS) mérések kivitelezése mellett a rendszerek zéta-potenciál és áramlási potenciál értékeinek meghatározásán túl reológiai és zavarosság méréseket is végeztünk a részecskék kialakíthatósági korlátjainak felderítése érdekében, mely vizsgálatok eredményeképp sikerült megtervezni egy optimális méretű és szerkezeti tulajdonságokkal rendelkező hordozó előállítását. Megállapítottunk azt a makromolekula tömegarányt ($m_{Tr}/m_{HyA} = 2$), amely mellett stabil koloid részecskék alakíthatók ki. Az előállított konjugátumok méretét, méreteloszlását és szerkezetét transzmissziós elektronmikroszkópiás (TEM) illetve DLS mérések mellett cirkuláris dikroizmus (CD) és Fourier transzformációs infravörös spektroszkópiás (FTIR) mérésekkel jellemeztük, valamint a koloid részecskék kinetikai stabilitását is felderítettük.

VARGA SZILÁRD
Középiskolai hallgató

Orosházi Táncsics Mihály Gimnázium és
Kollégium

Témavezető:
Dr. Szilágyi István
egyetemi docens, SZTE TTIK

Heterogenizált antioxidánsok szinergikus hatása

Kulcsszavak: LDH; galluszsav; NADH; kolloidstabilitás; antioxidáns aktivitás

A sejtek normál működése során keletkeznek reaktív szabadgyökök, melyek mennyiségét a jelen lévő antioxidánsok tartják egyensúlyban. A nem megfelelő sejtes működéskor a gyökök túlsúlyba kerülhetnek oxidatív stresszt okozva, mely számos betegség előidézője lehet. Ezt kiküszöbölendő az antioxidánsok orvos-biológiai vagy ipari felhasználása kézenfekvő lenne, azonban ehhez szükséges megnövelnünk a stabilitásukat. Megoldást jelenthet erre nanokompozitok előállítása felhasználásukkal, ugyanis ekkor a szervesetlen vázszerkezet megvédheti a molekulákat a környezeti hatásokkal szemben.

Célul tűztük ki galluszsavat és nikotiamid-adenin-dinukleotidot (NADH) tartalmazó réteges kettős hidroxid nanokompozit előállítását, majd gyöksemlegesítő hatásának részletes feltérképezését.

Elsőként az említett antioxidánsok külön-külön kifejtett, majd együttes hatását elemeztük DPPH-teszttel. Amellett, hogy átfogóan vizsgáltuk a NADH antioxidáns aktivitását (melynek ismerete korábban hiányos volt az irodalomban), a keverékben szinergizmust észleltünk, vagyis az antioxidánsok együttes alkalmazásával jobb hatást értünk el, mint ha külön-külön használtuk volna őket. A galluszsav és a NADH között fellépő kölcsönhatás magyarázására felállítottunk egy modellt, majd méréseket végeztünk ennek igazolására.

Ezt követően Mg-Al-tartalmú delaminált réteges kettős hidroxidot állítottunk elő, mely alkalmasnak bizonyult arra, hogy az antioxidánsokat rögzítsük a felületén. Az adszorpciót elektroforetikus mobilitás- és dinamikus fényszórásméréssel követtük. A gyöksemlegesítő hatások figyelembevételével olyan antioxidáns dózisokat választottunk, melyek adszorpciójukor a kolloid diszperzió stabil maradt. A nanorészecskék felületén történő együttes immobilizálás javította a hatásukat, csakúgy, mint ahogy azt korábban az oldatfázisban tapasztaltuk. A CuPRAC-tesztet is elvégeztük a vizsgált antioxidánsokra, azok keverékeire és a kompozitokra. A DPPH-teszttel összhangban megállapítható volt, hogy sikeresen állítottunk elő gyöksemlegesítő hatással rendelkező nanokompozitokat a molekulák között fellépő szinergikus kölcsönhatások elvesztése nélkül. Összességében kijelenthető, hogy az antioxidánsok heterogenizálása megkönnyítheti azok későbbi használatát mind ipari-, mind orvos-biológiai területeken.

VICZIÁN DÁNIEL

Kémia

BSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:

Dr. Szilágyi István

egyetemi docens, SZTE TTIK

Elektrolitok és polielektrolitok hatása CeO₂ nanozyme részecskék kolloidstabilitására és enzimutánzó aktivitására

Kulcsszavak: ionspecifikus aggregáció; áttöltés; funkcionalizálás; antioxidáns; peroxidáz-utánzás

A környezetünkben megtalálható reaktív oxigén származékok (ROS) lebontásáért antioxidáns enzimek és molekulák hálózata felelős az élő szervezetben. A ROS felhalmozódása oxidatív stresszt okoz, amely súlyos betegségek kialakulásához vezethet, így ennek megakadályozása kiemelt fontosságú. Emellett a ROS jelenléte az iparban alkalmazott kémiai eljárásokban a termékek minőségének romlásával jár. A természetes antioxidáns enzimek felhasználását korlátozza magas árak, nehézkes kinyerésük, tárolásuk és környezetükre való érzékenységük. Alternatívát jelenthetnek az enzimeket utánzó nanorészecskék, a nanozyme-ok, amelyeket napjainkban nagy szerkezeti stabilitásuk, olcsó előállításuk és hangolható tulajdonságaik miatt kiemelt tudományos érdeklődés övez.

A nanozyme diszperziók felhasználásának fontos feltétele a kolloidstabilitás biztosítása változó sóösszetétel és nagy ionerősség mellett. Munkánk során egyértékű sók hatását vizsgáltuk a számos enzim aktivitását utánozni képes CeO₂ nanozyme (CeNPs) felületi töltésére, aggregációjára és peroxidáz-szerű hatására. A CeNPs kolloidkémiai sajátosságai pH-függők, így savas és bázikus körülmények között is végeztünk méréseket. A vizsgált kationok (Na⁺, K⁺, Cs⁺) destabilizáló hatása jó kvalitatív egyezést mutatott a Hofmeister-sorozattal, azonban anionok (Cl⁻, NO₃⁻, SCN⁻) esetén az adatok nem mutattak egyértelmű tendenciát. A vizsgált sók jelenléte nem változtatta meg jelentősen a CeNPs peroxidáz-utánzó aktivitását, azonban már igen alacsony koncentrációban gyors aggregációt idéztek elő, így alkalmazhatóság szempontjából elengedhetetlenné vált a CeNPs kolloidstabilitásának növelése.

Ennek érdekében a felülettel ellentétes töltésű polielektrolitokkal – heparinnal (pH 4) és metil-glikol-kitozánnal (pH 10) – funkcionalizáltuk a CeNPs felületét. Így megváltoztattuk a felületi töltés előjelét és számottevően stabilabb diszperziót hoztunk létre, amit a kritikus koaguláltató koncentráció értékekben mért nagy különbségek jeleztek. A polielektrolitok a peroxidáz-szerű hatás jelentős növekedéséhez is hozzájárultak, ezzel kiemelten ígéretes nanozyme rendszerré téve a polielektrolit-CeNPs rendszereket, akár nagy sótűrést igénylő alkalmazási területeken is.

A pályamunkámban foglalt eredmények mindegyike a sajátom beleértve a kísérleti munka elvégzését, valamint a kapott adatok összegyűjtését és értékelését is.

VÖRÖS ATTILA
fizika - kémia osztatlan tanári
Osztatlan, 5. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Szilágyi István
egyetemi docens, SZTE TTIK
Dr. Varga Viktória
tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Többféle enzimaktivitással rendelkező nanozyme kolloid rendszerek fejlesztése

Kulcsszavak: nanorészecske; kolloidstabilitás; enzim; zeolit; berlini kék

Az utóbbi évtizedek felfedezése, hogy egyes nanorészecskék (ún. nanozyme-ok) képesek enzimműködést utánozni, viszont a természetes enzimek számos hátrányos viselkedését (pl. nem denaturálódnak, kevésbé érzékenyek a pH-, nyomás-, és hőmérséklet változásaira, és előállításuk költséghatékonyabb) nem mutatják. Az egyik nagy kihívás a területen, hogy olyan nanozyme rendszert hozzunk létre, amely többféle enzim működését párhuzamosan végzi. Kutatásunk során komplex berlini kék (Prussian Blue, PB) nanozyme tartalmú rendszereket hoztunk létre. Cu-ZSM 5 részecskéket funkcionálizáltunk PB nanokockákkal (PB-PCuZ), valamint papain (PPN) enzimet adszorbeáltattunk PB-n, és az így keletkezett kompozitokat vizsgáltuk főképp kolloidkémiai és biokatalitikus képesség szempontokból. A PB szintézis eredményeként egy kolloidálisan igen stabil, jó közelítéssel monodiszperz vizes közegű diszperziót kaptunk. A PB-PPN a PB mintához hasonlóan igen stabilnak mutatkozott nagy ionerősségek mellett is. Megállapítottuk, hogy a PB nanokockák rendelkeznek szuperoxid dizmutáz- (SOD) és peroxidáz-szerű (POD) enzimaktivitással. Ezen antioxidáns képességek a PPN immobilizálása után sem változnak, viszont a kompozit proteáz aktivitással is bír, amit tesztreakciókkal mutattunk ki. A PB-PCuZ esetében viszont jelentős POD aktivitás növekedést tapasztaltunk a funkcionizálatlan PB részecskék aktivitásához képest. Összegezve, a munkánk során kifejlesztett nanozyme részecskék nagy kolloid- és szerkezeti stabilitással bírnak, mialatt képesek oxigén tartalmú szabadgyökök eliminálására és fehérjék hidrolízisére. Az eredmények számottevő érdeklődésre tarthatnak számot főképp ipari eljárásokban, ahol a természetes enzimek alkalmazása nehézkes.

BIMBÓ LEVENTE PÉTER

Vegyész

MSc, 1. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Szabó Tamás

adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Varga Viktória

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Frakcionált agyagásvány-részecskékkel felületmódosított szűrőrétegek alkalmazása sók és szerves szennyezők membránszeparációja céljából

Kulcsszavak: agyagásvány; kationos polimer; ülepitéses frakcionálás; layer-by-layer módszer; nanoszűrés

A OTDK dolgozatom első részében a bentonit tisztításával és fő ásványi komponense, a montmorillonit agyagásvány méret szerinti frakcionálását mutatom be. Sztatikus, többlépcsős szedimentációs módszerrel három eltérő mérettartományú szemcsefrakció vizes szuszpenzióját különítettem el. A szuszpenzió összetételét szárazanyagtartalom-meghatározással, a részecskék méret- és alakviszonyait dinamikus fényszórásméréssel, ill. elektronmikroszkóp segítségével jellemeztem. Munkám második felében nanoszűrésre alkalmas kereskedelmi forgalomban kapható (Dow Filmtec) NF270-es membrán felületmódosításával foglalkoztam azzal a céllal, hogy szűrési hatékonyságát megnöveljem.

A membránok felületére layer-by-layer módszerrel polikation/agyagásvány párosrétegeket építettem fel eltérő rétegszámmal. A multirétegek felépülését kvarclemezen UV-spektrofotometriásan követtük. Azt tapasztaltuk, hogy a kialakuló kompozit vékonyréteg optikai vastagsága, ill. abszorbanciája egy telítési jellegű függvény szerint változik a depozíciós ciklusok számával. Mivel az átlátszatlan polimerhordozón a film felépülését nem tudtuk követni, atomerő-mikroszkóppal vizsgáltuk meg a módosítás nélküli membrán, valamint a négy darab párosréteggel módosított membrán felületi topográfiáját, és kimutattuk a lemezes szerkezetű részecskék jelenlétét a polimer szűrőréteg felszínén.

A módosított membránokkal 0,2 mM-os acetaminofen oldatot, 20 mM-os nátrium- ill. kalcium-klorid oldatot szűrtem majd akriflavint, meghatároztam a szűrlet fluxusát és UV-spektrofotométer, valamint konduktométer használatával a membrán visszatartását állapítottam meg. Akriflavin esetében a pH állandó értéken tartásával végeztem a méréseket. A meghatározást biofilm-képződés és a rétegek esetleges lemosódása zavarta, ezért további vizsgálatokat végeztünk és megállapítottuk, hogy az eredményeink szórásának egyik oka a szűrőberendezés algásodása volt.

Környezeti kémia

ALBERTI ORSOLYA
Vegyészmérnök
MSc, 2. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Szőri-Dorogházi Emma
egyetemi docens, ME AVK

Nikkel, kobalt- és mangán-ferrit típusú mágneses nanorészecskék antibakteriális hatásának és adszorpciós tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: szennyvíz; víztisztítás; mágneses nanorészecske; adszorpció; antibakteriális hatás

Napjainkban a szennyezett víz, legyen az ivóvíz vagy öntözővíz, egyre nagyobb globális egészségügyi problémát jelent, amely világszerte egyre több embert érint. Ennek egyik lehetséges megoldása a víztisztítás, amely lehetővé teszi a szennyezett víz újrahasznosítását a megfelelő kezelési folyamatok után. Az egyik ígéretes vízkezelési eljárás a mágneses nanorészecskék felhasználásán alapul. Ezek a nanorészecskék összetételüknek, valamint funkcionizált felületüknek köszönhetően képesek lehetnek (patogén) mikroorganizmusok reverzibilis megkötésére, illetve elpusztítására. A mágneses tulajdonságuk pedig megkönnyíti a részecskékhez kötött mikroorganizmusok elkülönítését a tisztított közegtől (pl. víztől). Azok az adszorbensek, amelyek egyszerre rendelkeznek mágneses és antimikrobiális tulajdonsággal, egyetlen lépésben nyújthatnak megoldást az adszorpcióval való tisztításra és a használt adszorbens dezinfekciójára is. Kutatásunk során különböző nikkel-, kobalt- és mangán-ferrit alapú, mágneses tulajdonságokkal rendelkező nanorészecskék kerültek tesztelésre. Ezek egy része kiváló adszorpciós képességeket mutatott, míg mások antibakteriális hatással is rendelkeztek. Eredményeink azt mutatták, hogy az általunk vizsgált, antibakteriális és adszorpciós tulajdonságokkal rendelkező nanorészecskék ígéretes jelöltek lehetnek új típusú vízkezelési technológiák fejlesztéséhez.

ANDRÁS BERNADETT
Környezettudomány
BSc, 5. félév

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem
Kolozsvári Kar

Témavezetők:
Dr. Zsigmond Andrea-Rebeka
adjunktus, RO EMTE KVK
Dr. Máthé István
egyetemi docens, RO EMTE CSK

Székelyföldi ásványvízforrások kémiai, geokémiai és mikrobiológiai jellemzése

Kulcsszavak: ásványvíz; Székelyföld; elem összetétel; mikrobiom; geotípusok

Az utóbbi évtizedben Székelyföld több régiójában található ásványvízforrásokról alapos kémiai és geokémiai vizsgálatok folytak. Jelen kutatásunkban 42 széles körben használt forrást vizsgáltunk meg Korondon, az Alcsíki-, Középcsíki- és Felcsíki-medencékben, valamint Erdővidéken. A mintázást 2022 szeptemberében történt. Helyszíni méréseket végeztünk (hőmérsékletet, pH-t, elektromos vezetőképességet, oxido-redukációs potenciált), bórsav, kóvasav, valamint számos kation (Na^+ , K^+ , Li^+ , Rb^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Fe^{2+} , Mn^{2+} , Al^{3+}) és anion (HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-}) mennyiségét határoztuk meg különféle laboratóriumi módszerekkel. A vizek Ca-Mg-HCO₃, Na-Ca-Mg-HCO₃ típusúak voltak. A vizek általában alacsony pH-val rendelkeztek, az elektromos vezetőképesség viszont széles tartományban változott. A hierarchikus klaszteranalízis a vizeket négy nagyobb csoportba sorolta a makroösszetevők alapján. Néhány forrás különleges összetételűnek minősült, például a korondi Árcsó forrás és a Székelyudvarhely mellett levő Szejke forrás kitűnt a magas kalcium-szulfát tartalommal, a felcsíki Sörkertti és Szederjesi forrás pedig a magas magnéziumtartalommal (>240 mg/l). A nyomelemek szempontjából a hargitafürdői Vallató forrásnak magas volt az alumíniumtartalma, ami meghaladta a megengedett 0,2 mg/l határértéket ivóvizekre, és ezért nem ajánlott a rendszeres fogyasztása.

A forrásvizekből meghatároztuk a baktériumok összcsíraszámát 22 °C-on és 37 °C-on, illetve vizsgáltuk a higiéniai szempontból fontos baktériumok (coliformok, Escherichia coli, fekális Enterococcus-ok, Clostridium-ok) jelenlétét. Mikrobiológiai szempontból több forrás kiváló minőségű víznek tekinthető, de voltak olyan források is, amelyekben többféle baktériumot is kimutattunk. Elmondhatjuk, hogy a rendszeres gondozás hiánya miatt az ásványvizek higiéniai állapota egyre inkább romlik, és kimutatható hogy felszíni, nem ritkán fekális eredetű szennyezések kerülnek be a források vizébe.

BÁNGI-MAGYAR IGNÁC

Vegyész

MSc, 2. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezető:

Dr. Salma Imre

egyetemi tanár, ELTE TTK

Aeroszol mozgékonyági spektrométerek összehasonlító vizsgálata és a mérési módszer optimalizálása

Kulcsszavak: aeroszol; differenciált mozgékonyági részecske szeparátor; összehasonlító elemzés;

A légköri aeroszlok vizsgálata kiemelten fontos az éghajlatra és az emberi egészségre gyakorolt hatásuk miatt. Az aeroszlok hatásait jelentősen befolyásolja a részecskék mérete, pontosabban a méreteloszlása.

A Budapest Aeroszol Kutató és Oktató Platform (BpART) Laboratórium folyamatosan méri a részecskék méreteloszlását. A differenciális mozgékonyági spektrométer (DMPS, differential mobility particle sizer) készülék szolgáltatja ezeket. Az első mérőrendszer 11 évig folyamatosan végezte a méréseket. A többszörös karbantartás ellenére a készülék elöregedett, és szükségessé vált a cseréje. Az újabb rendszer azonos elven működik és hasonló felépítésű. Az adatsorok folytonosságának megállapításához a két, korábbi és újabb készülék összehasonlító mérésére volt szükség.

Munkám során ezt az összehasonlítást és kiértékelést végeztem el. A mérőrendszerekkel azonos időszakban, párhuzamosan végzett mérésekkel kapott adatokat értékeltem ki statisztikai módszerekkel. Ennek során több méret- és koncentráció-tartományt hoztam létre, hogy minél alaposabb összehasonlítást végezhessenek. A származtatott eredmények átlagos koncentráció arányokat, idősorokat, regressziós egyenesek és méretcsatornákat foglaltak magukba. A kiértékelés során megállapítottuk, hogy a két mérőrendszer a legtöbb tartományban a megfelelő értékeket mért. Az idősorokban és a regressziós analízisben nem mutatkozott rendszerszerű vagy strukturált eltérés. A legkisebb részecsketartományban (6-25 nm) azonban jelentős eltéréseket kaptunk. A légköri aeroszol részecskék bizonyos része elektromos töltéssel rendelkezik. A 10 nm méretű részecskénél egyensúlyi állapotban csupán 6% hordoz 1 negatív elemi töltést. Az alacsony koncentrációsintek miatt, ebben a tartományban viszonylag kis zavaró hatás is jelentős mérési eltéréseket okozhat. Az új mérőrendszerbe egy szolenoid szelepet építettek be ellenőrzési céllal, amin keresztül haladt az aeroszol áramlás. A szelepből elektromágneses tér van, ami a mérendő részecskéket eltérítette, és komoly veszteségeket okozott. A hiba okának feltárása után a készülék áramlási rendszerét átkötéssel módosítottuk. Utána a mérési adatok jelentős javulást mutattak. Az újabb DMPS készülék azóta a végső konfigurációban átvette a méréseket. Az összehasonlítás alapján és az ezen alapuló módosítások elvégzése után, megállapítottam, hogy az új mérőrendszer mérései folytonosan és koherensen követik a korábbi készülék adatait.

FEJES BENCE

Fizika

BSc, 7. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezető:

Dr. Tarczay György

egyetemi tanár, ELTE TTK

Izopropanol és hidrogénatomok reakcióinak kísérleti vizsgálata csillagközi körülmények között

Kulcsszavak: para-H₂ mátrixizoláció, H-atom reakciók, gyökreakciók, infravörös spektroszkópia, csillagközi tér

A csillagközi térben mára több, mint 300 molekulát azonosítottak. Az azonosításhoz szükség van laboratóriumokban elvégzett asztrokémiai kísérletekre. Ezeket a kísérleteket a csillagközi térben uralkodó körülmények között, jellemzően alacsony hőmérsékleten és nyomáson kell elvégezni. A laboratóriumi asztrokémiai mérés során felvett spektrum összehasonlításra kerül a teleszkópok által felvett spektrumokkal, amelyből meghatározható, hogy jelen van-e az adott molekula a csillagközi térben. Más kísérletek pedig azt célozzák meg, hogy megértsük, hogy milyen molekulák és hogyan keletkezhetnek a csillagközi térben. Ilyen kísérletekhez épült az ELTE-n 2021-ben a VIZSLA nevű berendezés. A TDK munkám során ezt a berendezést használtam. 2022-ben a csillagközi térben azonosították az izopropil-alkoholt ($\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$, továbbiakban IPA). [1] A kutatásom során azt vizsgáltam, hogy milyen termékek keletkeznek az IPA H-atomokkal történő reakciója során. Az előzetes várakozás az volt, hogy a H-atom az IPA középső C-atomján lévő H-atommal reagál, és ebben a reakcióban H_2 -molekula, valamint $\text{CH}_3\text{C}(\text{OH})\text{CH}_3$ -gyökmolekula keletkezik. Annak érdekében, hogy a gyökmolekula keletkezését jobban tudjuk vizsgálni, a csillagközi térben korábban szintén kimutatott acetonnal (CH_3COCH_3) [2] is végeztünk mérést. Ennek oka, hogy az acetonból is kialakulhat a fentebb említett gyök, aminek az azonosítása könnyebb, ha az aceton esetében is látjuk a keletkezését. Abban az esetben pedig, ha az IPA-ból keletkező megfelelő gyökmolekula egy további H-atommal reagál, akkor az IPA-ból összesen két H-atomos reakcióval aceton képződhet és fordítva. A kísérleti eredmények kiértékelése során azt tapasztaltam, hogy valóban keletkezett a $\text{CH}_3\text{C}(\text{OH})\text{CH}_3$ -gyökmolekula mind IPA mind pedig aceton esetében a H-atommal reagálva. Az előzetes feltételezésünk tehát helyesnek bizonyult. A két molekula (IPA és aceton) egymásba alakulását azonban a kísérletek során nem sikerült megfigyelni.

[1] A. Belloche, R. T. Garrod, O. Zingsheim, H. S. P. Müller, K. M. Menten *A&A* 662:A110 (2022)

[2] F. Combes, M. Gerin, A. Wooten, G. Wlodarczak, F. Clausset, P. I. Encrenaz, *A&A* 180:L13-L16 (1987)

GERÉD BOGLÁRKA
Génebézészet
BSc, 4. félév

SZÉP LEVENTE ISTVÁN
Génebézészet
BSc, 8. félév

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem
Csíkszeredai Kar

Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem
Csíkszeredai Kar

Témavezetők:
Dr. Bodor Katalin
egyetemi óraadó, RO EMTE CSK
Dr. Bodor Zsolt
egyetemi docens, RO EMTE CSK

A kültéri levegő aeroszol koncentrációjának vizsgálata Csíkszeredában

Kulcsszavak: Levegő; aeroszol; Koncentráció; PM; szuszpendált

A légszennyezés problémája egyidős az emberiséggel, viszont a gazdasági-, ipari fejlődésnek és a népesség növekedésnek köszönhetően napjainkban globális méreteket ölt. A légszennyezés káros hatása számos területen megtapasztalható, káros hatással van az emberi egészségre, a növényzetre és az épített örökségre. Dolgozatunk során a légszennyező anyagok közül a PM₁, PM_{2,5}, PM₄, PM₁₀ és összes aeroszol (TSP) koncentrációit követtük nyomon. Csíkszereda öt különböző pontjában végeztünk pontszerű és folyamatos aeroszol koncentráció méréseket. A légszennyező paraméterek alakulásán túl nyomon követtük a közúti forgalom intenzitásának változását a napszakok (délelőtt, délután) függvényében, valamint összefüggéseket kerestünk az aeroszolok és a meteorológiai paraméterek változása között. A mérési eredményeink jelentős különbségeket mutattak a város különböző pontjain mért aeroszol koncentrációk között. A hétköznap-délelőtti aeroszol koncentrációk lényegesen magasabbak voltak a hétköznap-délutáni mérések eredményeihez viszonyítva, minden egyes mérési pontban. A hétvégi aeroszolok koncentrációi lényegesen alacsonyabbak voltak, a hétköznap rögzített értékekéhez viszonyítva. A hétvégi délelőtti és délutáni koncentrációk közötti különbségek mérsékeltebbek voltak, mint a hétköznap mérések eredményi. A mintavételezés második fázisában, a kora reggeli órákban (6-9 óra között), folyamatos aeroszol koncentráció méréseket valósítottunk meg. Az eredmények szoros összefüggést mutattak a kora reggeli csúcsforgalom alakulásával. A csapadékos periódusban az aeroszolok koncentrációja megközelíti az alapértékeket. A csapadék kimosó hatása érvényesült, alacsonyabb koncentrációkat tapasztaltunk esős napokon, míg csapadékmentes napokon magasabb aeroszol koncentrációt mértünk.

A városközpontban mért folyamatos PM₁₀ koncentrációt összehasonlítva a Környezetvédelmi Ügynökség által mért órás PM₁₀ adatokkal, az esetek többségében (93,16%) a városközpontban volt magasabb a PM₁₀ koncentrációja (átlagosan 3,27-szer nagyobb volt a városközpontban, mint a HR02 mérőállomáson mért koncentrációk).

ILLÉS TAMÁS

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Dr. Salma Imre

egyetemi tanár, ELTE TTK

Vörösmarty Máté

tudományos munkatárs, ELTE TTK

A léghőköri aeroszol higroszkópos tulajdonságai Budapesten különleges események alkalmával

Kulcsszavak: higroszkopicitás; kritikus átmérő; felhőcseppek; túltelítettség; felhőszimulátor

Az aeroszolak jelentős szerepet játszanak az éghajlati rendszerben, leginkább a felhőképződésen keresztül. Az emberi tevékenység átalakíthatja a felhők szerkezetét és élettartamát, ami nagyban hozzájárul az éghajlatváltozáshoz, valamint befolyásolja a csapadékeloszlást. A felhőképződés bizonytalansága az éghajlati modellek legnagyobb egyedi járulékát adja. A pontosabb megértéshez további, folyamatos mérési adatok és ezek kiértékelése szükséges.

A BpART Laboratóriumban korszerű műszeregyüttessel végzett és komplex adatkiértékelést magába foglaló kutatásba kapcsolódtam be. A mérési adatokat egy egyedülálló, szkennelő műszerkapcsolás szolgáltatta. Ez lehetővé teszi a polidiszperz léghőköri aeroszol higroszkopicitásának a meghatározásán túl, vele párhuzamosan a 20 – 400 nm átmérő-tartományban méreiszeparált részecskék higroszkopicitásának a meghatározását 0,1% – 1.0% túltelítettségi értékeken.

A Köhler-elmélet segítségével modelleztük az aeroszol részecskék felhőkondenzációs magként (CCN) való viselkedését. A folyamatot elsősorban a részecskék mérete és kémiai összetétele, leginkább a vízdoldhatósága határozzák meg. A kémiai összetétel hatását a víz aktivitásának segítségével tudjuk figyelembe venni, amit a higroszkopicitási paraméterrel (κ) fejeztünk ki. Munkám egyik fő feladata a mérőrendszer működtetése és felügyelete, valamint három, különleges eseménynek (tűzijátéknak, szublokális és regionális újrészecske-képződés és növekedés eseménynek) a CCN-koncentrációra és a cseppképződésre kifejtett hatását tanulmányozni a kapcsolódó mennyiségek meghatározásával és értelmezésével.

A tűzijáték rendkívül nagy mennyiségű és viszonylag nagy méretű részecskét juttatott a levegőbe. Számuk meghaladta a napi medián érték tízszeresét. Ezek a részecskék higroszkópos, szervesen fémsókból álltak. A szublokális esemény során többlet ammónia-kibocsátás következtében jöttek létre új vízdoldható részecskék, melyek kis méretük és korlátozott növekedésük miatt nem voltak képesek cseppképzésre. A regionális esemény alkalmával is kis méretű részecskék keletkeztek, de ezek mérete a térben és időben kiterjedt növekedési folyamat miatt elérte a szükséges (>50 nm) mérettartományt, így jelentős számú CCN állt rendelkezésre a cseppképződésre. Kémiai összetételük eltért a városi (tipikusan széntartalmú vegyületektől), és előzetes ismereteink alapján külső kevetéket képeztek a meglévő, városi aeroszollal. Hosszútávú terveink közé tartozik egy teljes év hosszúságú mérés kivitelezése.

KECSKÉS KARINA
Vegyészmérnök
MSc, 3. félév

Miskolci Egyetem
Anyag-és Vegyészmérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Szőri-Dorogházi Emma
egyetemi docens, ME AVK

Cirkónium-pilléres montmorillonit mikroorganizmus-adszorpciós tulajdonságainak vizsgálata

Kulcsszavak: adszorpció; ülepedés; sejtkoncentráció; mikroorganizmus

A természetes vizek megőrzése egyre fontosabb feladat napjainkban, amihez hozzátartozik, hogy fokozott figyelmet kell fordítanunk az emberi tevékenységekből származó szennyvizek kezelésére, majd újrafelhasználására. A szennyvíztisztításban így folyamatosan jelennek meg újabb tisztítási lehetőségek. Az egyik innovatív megoldás a természetes agyagalapú adszorbensek alkalmazása, többek között, (patogén) mikroorganizmusok eltávolítására vizes rendszerekből. Ez nem csak új, de költséghatékony alternatívát is jelenthet a hagyományosan alkalmazott vízfertőtlenítési eljárásokhoz képest, mivel olcsó alapanyagigénye mellett előnye, hogy alkalmazásakor nem keletkeznek veszélyes melléktermékek. Az újonnan kialakított adszorbensek mikroorganizmus adszorpciós hatékonyságának tesztelése azonban nem egyszerű feladat. Pásztázó Elektronmikroszkóppal (SEM) ugyan kimutatható az adszorpció, de a hatékonyság számszerűsítésére egyéb módszerekre van szükség. Korábbi munkám során kidolgoztam egy ülepedési (gravitációs) elven megvalósítható mérési módszer, amelynek segítségével a mikroorganizmus szuszpenzió sejtkoncentrációjának változásával nyomon követhető volt az adszorpció mértéke. Jelen dolgozatban a cirkónium -pilléres montmorillonit részecskékre kidolgozott vizsgálati módszert terjesztettem ki, és határoztam meg az adszorbens szelektív vagy általános alkalmazhatóságát különféle Gram-negatív és Gram-pozitív mikroorganizmusok esetében. Emellett, a szennyvizek mikroorganizmusokkal való szennyezettségét jelző, indikátor jelentőségű *Escherichia coli* (Gram-negatív) és *Enterococcus faecalis* (Gram-pozitív) baktériumokat egyszerre tartalmazó, kevert szuszpenzióval (mint egy ún. mesterséges szennyvízzel) is teszteltem az adszorbens hatékonyságát. Az elvégzett tesztek eredményei azt mutatták, hogy a cirkóniummal módosított, agyag alapú adszorbens kiválóan alkalmazható lehet a szennyvíztisztításban, hiszen nagy hatékonysággal köti meg a mikroorganizmusokat homogén és heterogén baktérium szuszpenziókban egyaránt. Elvégeztem továbbá az adszorbens regenerálását és a regenerált részecskék további alkalmazhatóságát is vizsgáltam, mivel ezek az eredmények nélkülözhetetlenek a későbbi, ipari tisztítási folyamatokba való integráció megvalósíthatóságához.

KOVÁCS ÁRON BOLDIZSÁR
Környezetmérnök
BSc, 9. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Harasztiné Hargitai Réka
tanszéki mérnök, PE MK
Pitász Viktória
tanszéki mérnök, PE MK

Üzemi méretű szennyvíztisztító technológia léptécsökkentéséből adódó problémáinak kiküszöbölése laboratóriumi méretben

Kulcsszavak: Szennyvíztisztítás; Szakasos betáplálás; SBR; Többlétfoszfor eltávolítás; C:N:P arány

Kutatásom célja volt annak megállapítása, hogy milyen ciklus beállítások mellett lehetséges nagyüzemi, anaerob, anoxikus és oxikus medencetereket tartalmazó (A2/O) szennyvíztisztító technológiát átültetni laboratóriumi méretű, szakasos üzemű (SBR) technológiává úgy, hogy a nagyüzemi és a laboratóriumi méretű rendszer tisztítási hatékonysága a lehető legnagyobb mértékben egyezzen. Az üzemi méretű, anaerob medencetereket tartalmazó technológiák laboratóriumi méretű szakasos üzemű technológiára történő átültetése szennyvíztisztítás területén nehézségekbe ütközik. Ennek oka, hogy a többlétfoszfor eltávolításhoz szükséges körülmények nehezen biztosíthatók, mivel egyrészt anaerob - azaz oxigén- és nitrátmentes - környezet, másrészt elegendő mennyiségű, könnyen bontható szerves anyag egyidejű megléte szükséges hozzá. A kutatás ideje alatt egy laboratóriumi SBR technológia hosszú idejű folyamatos üzemeltetése mellett rendszeres méréseket végeztem, három különböző beállítást vizsgálva. A szakirodalomban olvasható módon alakítottam ki az első beállítást, melyben a befolyó szennyvizet közvetlen az iszapréteg alá, kevertetés nélkül, hosszú időn keresztül juttattjuk be annak érdekében, hogy így lokális anaerob körülmények kialakulását érjük el a biológiai többlétfoszfor eltávolítás érdekében. Mivel ezzel a beállítással nem sikerült megfelelő foszforeltávolítást elérni, további kettő beállítást vizsgáltam. Elsőként a szennyvíz gyors, kevertetés melletti feladásával próbáltam meg elérni, hogy az előző tisztítási ciklus végén az iszapos vízzel a reaktorban maradó nitrátot denitrifikálja a biológia, majd ezt követően anaerob körülmények alakuljanak ki a többlétfoszfor eltávolítás érdekében. A másik beállításban a szennyvíz betáplálást két egyenlő mennyiségre osztottam, időben is elcsúsztatva azokat. Feltételeztem, hogy az első betáplálást követően az anoxikus körülmények között denitrifikálódik a reaktorban visszamaradt nitrát, a második betáplálással a reaktorba érkező friss, könnyen bontható tápanyagban dús szennyvíz pedig biztosítani tudja a foszfor akkumuláló mikroorganizmusok számára szükséges szerves anyagot az így kialakult anaerob körülmények mellett. Mérési eredményeim alapján mind a második, mind a harmadik beállítás alkalmas a nagyüzemi A2/O rendszerrel egyező mértékű biológiai többlétfoszfor eltávolítás biztosítására – amennyiben ezt a befolyó szennyvíz C:N:P aránya is lehetővé teszi.

PETRICS MAGDOLNA
Környezettudomány
MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Záray Gyula
tudományos tanácsadó, HUN-REN Ökológiai Kutatóközpont Vízi Ökológiai Intézet
Dr. Tatár Enikő
nyugalmozott egyetemi docens, ELTE TTK

Egy szennyvíztisztító telep mikroműanyag terhelése a Dunára

Kulcsszavak: szennyvíztisztító; mikroműanyag; Duna; mikroszál; emisszió

A növekvő műanyagtermelés következtében a mikroműanyagok (MP) a világon mindenütt jelenlévő, perzisztens szennyezőkké váltak. A vízi ökoszisztémát elsősorban a kommunális szennyvíztisztító telepekből (WWTP) származó és a folyók által szállított MP szennyezők veszélyeztetik. Ezek a különböző alakú és kémiai összetételű, 1-5000 µm méretű műanyag részecskék bekerülve az élő szervezetekbe káros hatásokat fejtenek ki. A tisztított szennyvíz a textíliák mosása során szabaddá váló természetes (pl. pamut és gyapjú) és mesterségesen gyártott (pl. viszkóz és polipropilén) szálakat tartalmaz. Jelentős terhelést jelent a részben degradálódott toalettpapírból származó cellulóz-alapú szálmennyiség. A szálakon túlmenően számolni kell a kozmetikai ipar által gyártott MP-okkal is. A világon a kommunális szennyvíznek csak egy része kerül összegyűjtésre és tisztításra, de a hagyományos WWTP-ek tervezésénél sem volt korábban szempont a MP eltávolítás. Céлом, hogy a vonatkozó szakirodalmi adatok és a saját munkám eredményeinek ismertetésével értékeljem a WWTP-ek MP emissziójának jelenlegi helyzetét. Hazai példaként bemutatom a budapesti Csepeli Központi Szennyvíztisztító telep környezetében és a Duna vízben mérhető MP koncentráció értékeket. Kísérleti munkám eredményeit Tserendorj és munkatársai a Csepeli Központi Szennyvíztisztító telep Dunára gyakorolt MP emissziójával kapcsolatos publikált eredmények és a szerző által biztosított nyers adatok további feldolgozásával kívánom összevetni. A Csepeli Központi Szennyvíztisztító telep környezetében a Dunában, 2023 februárban és áprilisban végzett mérések szerint a MP koncentráció 2,27-3,67, illetve 4,45-6,97 részecske/L között ingadozott. A Duna vízben Budapestenél, 2023-ban, 0,028-0,164 részecske/L MP koncentrációt mértem. A WWTP-be befolyó szennyvíz üzemenként eltérő összetétele, az egységes mintavételi és meghatározási módszerek hiánya, a vizsgáló laboratóriumok eltérő felszereltsége megnehezíti a szennyvíztisztítási módszerek hatékonyságának összevetését. A nagyszámú megjelent publikációban sokféle mintavételi módszert alkalmaznak, amelyek például különböző részecskeméret tartománynak, formának, sűrűségnek felelnek meg. Ajánlott egy szélesebb tudományos közösség számára alkalmazható, megbízható és összehasonlítható mintavételi eljárás kidolgozása, amely a jelenlegi tanulmányok minőségi értékelésével elérhető.

STROMÁJER KEVE CSANÁD
Középiskolai hallgató

Kaposvári Munkácsy Mihály Gimnázium

Témavezetők:
Dr. Stromájer-Rácz Tímea
adjunktus, PTE ETK
József Tibor
tanársegéd, PTE ETK

**A CSAPVÍZ MINŐSÉGI VIZSGÁLATA SOMOGY VÁRMEGYE TERÜLETÉN
KOLORIMÉTERREL ÉS SPEKTROFOTOMÉTERREL**

Kulcsszavak: ivóvíz; másodlagos vízromlás; ásványi anyag; koloriméter; spektrofotométer

Célkitűzés:

Magyarországon az ásványvíz fogyasztás dinamikusan nő, világviszonylatban is magas. Korábbi tanulmányok azt találták, hogy a fogyasztók nem találják biztonságosnak a csapvizet, kifogásolják a színét és az ízét is. Magyarországon a csapvíz iható, ennek ellenére a különböző kutakból nyert víz, illetve a vízvezeték rendszer befolyásolhatja az előbb említett tulajdonságokat (másodlagos vízromlás). Ezért célunk volt felmérni a Somogy vármegyei települések háztartási ivóvizeinek minőségét, azoknak ásványianyag összetételét, és a kapott értékeket összehasonlítani a szolgáltató által mért adatokkal, valamint a referencia tartománnyal. Anyag és módszer: A csapvíz mintákat kényelmi mintavétellel gyűjtöttük Somogy vármegye több településéről (n=12). A laboratóriumi munka során a minták nitrit-, vas-, mangán-, ammónia- és vízkeménységét mértük meg koloriméterrel. A minták nitrit és vastartalmát spektrofotométerrel is meghatároztuk. Eredmények: Koloriméterrel mérve a csapvíz mintákban a vas mennyisége 5 település vízmintáiban volt szignifikánsabban magasabb (Osztopán, Répáspuszta, Igal, Ordacsehi, Kaposvár ($p < 0,01$)), a nitrit Barcson szignifikánsabban magasabb volt, ($p < 0,016$) és a mangán esetében is találtunk eltéréseket a referenciatartományhoz képest. Több esetben eltérés mutatkozott az eredményekben a szolgáltató által mért adatokhoz képest. A spektrofotométerrel mért vas mennyisége újabb két településen lett szignifikánsan magasabb, mint a referenciatartomány ($p < 0,01$), a nitritnél pedig Andocs, és Nagyatád esetében volt szignifikánsan magasabb a koncentráció. Következtetések:

A mintáink háztartásokból származtak, 7 mintavételi helynél volt magas a vastartalom, ebből következtethetünk arra, hogy a vízvezetékcsövek elavultak, esetleg cserére szorulnak. A másodlagos vízromlás jelentősen befolyásolja a víz színét, ízét és illatát, jelentős eltéréseket mutatnak az értékek a referenciatartományhoz és a szolgáltató által a fő vezetékben mér értékekhez képest.

SÜTŐ MÁTÉ
Vegyész
MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:
Dr. Szabó Tamás
adjunktus, SZTE ZMK
Sajdik Kadosa
PhD hallgató, SZTE TTIK

Vízszennyező helyi érzéstelenítők eltávolítása oldatadszorpciós módszerrel grafén-oxid adszorbensen

Kulcsszavak: adszorpció; grafit-oxid; szennyvíztisztítás; gyógyszerhatóanyagok; érzéstelenítők

Napjainkban egyre jelentősebb problémát jelent a vizeink elszennyeződése, melyért az intenzív mezőgazdaság, az ipar, illetve a kommunális tevékenységek egyaránt felelősek. Dolgozatomban olyan, kationos és neutrális molekulákból felépülő helyi érzéstelenítők vizsgálatára helyeztem a fókuszot, melyeket napjainkban is használnak, kiemelten a fogorvoslás terén. A kiválasztott hatóanyagok (benzokain, prokain, lidokain, tetrakain) potenciáljuk és hatóidejük kapcsán sorba rendezhetők, és lefedik a jelenleg széles körben használt helyi érzéstelenítő anyagok teljes spektrumát. Ezen anyagok egy részét kimutatták természetes vizeinkben, sőt a budapesti ivóutak vizében is. A vizes oldatokból történő eltávolítás céljából adszorbensként réteges szerkezetű grafit-oxidot (GO) használtam, mely híg vizes szuszpenzióban döntően elemi grafén-oxid lamellákra válik szét, lehetővé téve a nagy fajlagos felület kialakulását a szilárd-folyadék határfelületi adszorpciós folyamatok számára. Céljaim közé tartozott az említett „kain” hatóanyagcsalád GO-n történő adszorpciójának mennyiségi jellemzése. Az adszorpciós egyensúly beállítását követően a felülúszó fotometriás mérésével vizsgáltam a gyógyszeroldatok koncentrációváltozását a kezdeti koncentrációhoz képest, mely a prokain és a tetrakain esetében magas volt. Az oldatfázis összetételváltozásából kiszámítottam, hogy 1 g GO ~290-350 mg hatóanyagot kötött meg, míg a lidokain csak kis mértékben, a benzokain pedig egyáltalán nem halmozódott fel a GO felületén. A szuszpenziók zéta-potenciálját meghatározva megállapítottam, hogy a hatóanyagmolekulák többsége specifikus ionadszorpciós mechanizmussal kötődik a szénlamellákhoz. Az XRD mérések eredményei is összhangban vannak a fentebb említett módszerekkel: a vizsgált „kain”-típusú hatóanyagok a benzokain kivételével interkalálódnak a kiszáritott adszorbens réteges szerkezetének elemi lapszerű részecskéi közé. Kutatómunkám kísérleti eredményei alapján arra a megállapításra jutottunk, hogy a GO (nagy fajlagos felülete és kationcserélő képessége miatt) egy kiváló teljesítőképességű adszorbens helyi érzéstelenítők vízből történő eltávolítására. Az adszorpciós kapacitás ugyanakkor erősen függ a konkrét vegyület ionizációs állapotától, ami miatt tekintetbe kell venni a tisztítandó vizes oldat kémhatását és ionos összetételét is.

SZEBERÉNYI PÉTER
Környezetmérnök
BSc, 2. félév

Óbudai Egyetem
Rejtő Sándor Könnyűipari és Környezetmérnöki
Kar

Témavezető:
Dr. Mészárosné Dr. Bálint Ágnes
egyetemi docens, OE RKK

Fungicid nehézfém tartalmának felhalmozódása a talajban

Kulcsszavak: Nehézfém; Fungicid; Talaj; Felhalmozódás; Réztartalom

A fő témája a dolgozatnak, mint ahogy a címből is olvasható, a talaj réz szennyezése. Az lett megvizsgálva, hogy egy földterületet ért-e rézszennyezés, attól, hogy hosszú éveken át lett kezelve rézgáliccal, ami egy réztartalmú fungicid. A talajból minta és kontrol minta lett véve. A minták elő lettek készítve és el lett porítva. A porból kivonatot készítettünk EDTA kivonószerrel. A kivonatot meg lett vizsgálva atomabszorpciós műszerrel, és egy öt tagú oldatsorozattal meg lett állapítva a réztartalom. A réztartalom vissza lett számolva mind a kontrol mind a mérendő talajmintánál az eredeti mennyiségre mg/kg mennyiségre tekintve. Az eredmény az lett, hogy egy a mérés helyétől nem messze lévő kontrol eredményhez képest többszöröse volt a minta réztartalma. A túlzott réztartalom a föld minőségét rontja. A földigilisztákat a szennyezett területről elűzi. Ezenfelül a magas réztartalom a többi elem felvételét is gátolja, ezért a növények nem jutnak hozzá a megfelelő tápanyagokhoz. A téma fontos abból a szempontból, hogy sokan tartanak szőlőt és ezt egyre inkább kell kezelni különböző gombaölő szerekkel. A hagyomány és a gazdaságosság miatt az emberek főleg rézgálicot használnak, ami viszont a mérés alapján is rézfelhalmozódáshoz vezet.

SZÉKELY ÁKOS BENDEGÚZ

Kémia BSc

BSc, 7. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

Témavezetők:

Dr. Zsirkáné Dr. Fónagy Orsolya

tudományos munkatárs, PE MK

Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet

egyetemi docens, PE MK

Permetszer degradációja környezetbarát módszerrel

Kulcsszavak: penkonazol, TiO₂, heterogén fotokatalízis, fotolízis, nagyhatékonyságú oxidációs eljárások

Az egyre növekvő gyümölcsstermesztés fenntartása érdekében napjainkban különféle permetszerek kerülnek forgalomba. A fungicidek közé tartozó penkonazol a gyümölcsök gombás fertőzéseinek megakadályozására szolgál. A természetben degradálódhat a napfény által, a keletkező intermedierek környezeti problémákat okozhatnak. A penkonazol bejuthat a vízbázisokba is, felboríthatja az ott lejátszódó biokémiai körfolyamatokat. A hagyományos víztisztítási módszerekkel a gombaölőszer kivonása a vizekből nehézkesnek bizonyult, ezért új, hatékony megoldásokat kell keresni. A penkonazol lebontását környezetbarát módszerrel, a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások közé tartozó heterogén fotokatalízissel vizsgáltam aerob és anaerob körülmények között. A lejátszódó folyamatok nyomon követése céljából a bevilágított minták fényelnyelését spektrofotométerrel rögzítettem, mértem az oldatok pH-ját, meghatároztam a szervesanyagok mennyiségének időbeli változását, valamint a modellvegyület koncentrációjának folyadékkromatográfiás meghatározására is sor került. *Vibrio fischeri* mélytengeri baktériumokkal követtem nyomon a kezelt minták toxicitásának változását. A mineralizáció hatékonyságának növelése céljából a fotokémiai eljárást ózonizációval kombináltam. A kereskedelmi forgalomban kapható készítmény (TOPAS 100 EC) fotokémiai bomlását is részletesen tanulmányoztam. Feltártam, hogy a különböző adalékanyagok hogyan befolyásolják a hatóanyag, a penkonazol átalakulását.

Polimerkémia és -technológia

GALBICSEK NOÉMI VANDA

Kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Endrődi Balázs

egyetemi adjunktus, SZTE TTIK

Dr. Kormányos Attila

tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Polimer adalékanyagok szerepe elektrokémiai CO redukcióban

Kulcsszavak: elektrolízis, szén-monoxid redukció, polimer adalék, rézkatalizátor

Az üvegházhatású CO₂ kibocsátás mértékének korlátozása egy jogosan felkapott és aktuális téma. Ezt a célt gazdaságosan szeretnénk megvalósítani, mely egyik megfelelő megoldása lehet az elektrokémiai CO₂-redukció, majd az így termékként keletkező CO tovább alakítása. Ennek megvalósulásához gázdifúziós elektródokra van szükség, melyek egy porózus hordozóból, és az azon elhelyezkedő katalizátorrétegből állnak. A katalizátort tekintve esetünkben szakirodalmi források alapján is gyakran és CO-redukcióra szinte kizárólagosan alkalmazott CO-redukciós katalizátort, nano mérettartományban lévő rezet alkalmaztunk. A pórúszos hordozó szerepét pedig szénpapír gázdifúziós réteg töltötte be a kutatás során.

A gázdifúziós elektród feltehetőleg egyik fő kihívása, hogy hidrofób legyen annyira, hogy a víz bejutását - ezáltal pedig a CO redukcióval versengő, hasonló termodinamikai potenciálú vízbontást - visszaszorítsa, azonban a CO redukciós reakció végbemenetelét még hidrofób jellegével ne gátolja. Ennek megvalósítására bizonyos polimerek-adalékok már a szakirodalomban is alkalmazottak. A dolgozatomban utóbbi kihívásra koncentrálva, a szén-monoxid redukciós reakció során alkalmazott polimerek szerepét vizsgáltuk. Ehhez a kutatócsoportban korábban már eredményesen használt Capstone-ST-110 polimerrel végzett mérésekből indultunk ki. Ennek bonyolult szerkezete miatt azonban nem határozható meg egyértelműen, mely tulajdonságok, esetleg funkciós csoportok szükségesek és elégségesek a reakció olyan paramétereinek optimalizálásához, mint a szelektivitás, maximális reakciósebesség vagy stabilitás. Így a továbbiakban egy egyszerű lineáris, Capstonehoz hasonló alapvázú polimer (polimetil-metakrilát) vizsgálatából indultunk ki, majd különböző, funkciós csoportokkal szisztematikusan ellátott polimereket is tanulmányoztunk. Ezek a poliakrilamid, poli(2-akrilamido-2-metilpropán-trimetilamónium-klorid), poli(2-akrilamido-2-metil-1-propánszulfonsav) voltak. Ezeken kívül egy a szakirodalomban is alkalmazott polimeradalékot (Nafion) és egyszerű, lineáris szerkezetű és hidrofób tulajdonságú polimeradalékok (polivinilidén-fluorid, poli(vinilidén-fluorid-ko-hexafluoropropilén)) elektrokémiai szén-monoxid redukcióra gyakorolt hatását is vizsgáltuk.

HELLER BENCE
vegyészmérnöki
BSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Bálint Erika
egyetemi docens, BME VBK

3D nyomtatott áramlásos kémiai reaktormodulok tervezése és tesztelése

Kulcsszavak: áramlásos kémia, nifedipin, 3D-nyomtatás, polimerek, kompozitok

Az áramlásos kémia napjaink egyik feltörekvő technológiája a gyógyszeriparban. A kis átmérőjű csőrendszerből álló reaktorokban, folyamatos üzemben végzett szintézisek több előnnyel rendelkeznek: nagyobb termelékenység, biztonság és a termék időben állandó, magas minősége.

Az áramlásos kémia mellett korunk másik meghatározó technológiája a 3D nyomtatás, amit számos előnyös tulajdonságának köszönhet; ilyen például a költséghatékonyság, a pontosság, valamint a technika rendkívül sokrétű felhasználási módja.

Kutatómunkám során célul tűztük ki 3D nyomtatott reaktorok tervezését és megalkotását olyan kémiai ellenálló anyagokból, mint a PP (polipropilén), valamint a PA6 CF (karbonszálas poliamid 6) kompozit. Olyan reaktormodulok létrehozására törekedtünk, melyek szivárgásmentesek és magasabb hőmérsékleten is képesek túlnyomás tartására, így a kereskedelmi forgalomból kapható drága áramlásos kémiai rendszereket költséghatékonyan helyettesíthetik. További célom volt egy Arduino UNO által vezérelt fűtőegység kialakítása, tesztelése, valamint alkalmazása a 3D nyomtatott reaktor melegítéséhez.

Tesztreakcióként egy vérnyomáscsökkentő hatóanyag (nifedipin) multikomponensű szintézisét kíséreltük meg elvégezni erélyes körülmények (120 °C, 10 barg) között a létrehozott reaktorok strapabírásának demonstrálására. A hatóanyag szintézisét szakaszos reakcióvezetéssel, valamint az Asia® áramlásos kémiai rendszerében is elvégeztük. A reakciókat kromatográfiás és tömegspektrometriás (HPLC MS) analitikai módszerekkel követtük.

PALLOS PATRIK JÓZSEF
Vegyésmérnök
MSc, 2. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Pethő Dóra
egyetemi docens, PE MK

Szálerősített műanyag kompozitok előállítása vákuum infúziós eljárással

Kulcsszavak: vákuum infúzió; VART; szálerősített műanyag; FRP; szakítószilárdság

A hőre keményedő műanyagok nem mindig rendelkeznek megfelelő tulajdonságokkal, ezért azokat erősíteni kell. Az erősítőanyag alkalmazása miatt különleges előállítási módszereket kell használni. Az infúziós eljárásoknál vákuumot hozunk létre az erősítő anyag rétegei között és ezzel szívjuk be a mátrixanyagot a formába. Ezen módszerrel nagyon magas erősítőanyag tartalmú termékeket lehet előállítani. Ennek köszönhetően a termékek kiváló mechanikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Gyakran alkalmazott mátrix anyag a poliészter gyanta. A polimer kompozitok legnépszerűbb erősítő anyagai a különböző szálak szerkezetek, amelyek lehetnek természetesek és szintetikusak. A feladata különféle struktúrájú üvegszövettel erősített poliészter kompozitok előállítása és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata. A kísérleti munka során különböző szálak erősítőanyagok alkalmazásával készítettük el a kompozitokat, és a minták mechanikai jellemzőit, így a törési szilárdságot, a rugalmasságot és a nyújtási tulajdonságokat mértük. Az eredmények alapján a kompozitok szilárdsága és rugalmassága szoros összefüggést mutatott az alkalmazott erősítőanyag típusával és a gyártási paraméterekkel. A szakítószilárdsági elemzések azt mutatták, hogy az üvegszálak erősítőanyagok alkalmazása jelentősen javítja a kompozitok mechanikai tulajdonságait, és az infúziós eljárás kulcsszerepet játszik a kívánt teljesítmény elérésében. Az unidirekcionális üvegszövet keresztirányú sérülékenységén javítani tudtunk a keresztirányú rétegrenddel. A különböző gyanták minimálisan befolyásolták a laminátum tulajdonságait, azonban hatásuk jelen volt. A szimmetria hatását nem sikerült egyértelműen megfigyelni, ezért további mérés bevonása szükséges a teljes képhez.

PILTER LILLA
Vegyésmérnöki szak
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd
egyetemi docens, BME VBK

A gócképző hatás szerkezeti magyarázatának modellezése

Kulcsszavak: polipropilén, gócképzés, kristályos polimerek

A műanyagipar széleskörű alkalmazási területeken használ fel kristályos polimereket, melyek iránti kereslet az iparág dinamikus növekedésével együtt növekszik. Ezen polimerek tulajdonságait a kialakult kristályszerkezetük határozza meg, ezért jellemző tulajdonságaik tág határok között változtathatók szerkezetük módosításával és így a felhasználási területhez illeszthetők. Erre a célra az iparban gócképző hatású segédanyagokat alkalmaznak, melyek heterogén felületként vannak jelen a polimer ömledékben a kristályosodás során, ezáltal lecsökkentik a kristályos fázis kialakulásának energetikai gátját. Hatással vannak többek között a létrejövő elemi cella szerkezetére, a kristály tökéletességére, a kristályosság mértékére és a kialakuló szferolitok méretére. Ezáltal a termék mechanikai tulajdonságai, a merevség, a szilárdság a hőállóság és az ütésállóság is a felhasználási területnek megfelelően változtatható. Számos anyag képes gócképzőként viselkedni, de máig nem ismerünk módszert arra, hogy hatékonyságukat előre, kipróbálás nélkül jósolhassuk. A kutatás keretein belül arra keresem a választ, hogy lehetséges-e a hatékonyság becslése a polimer és a potenciális gócképző anyag kémiai szerkezetének ismeretével. A gócképző hatékonyság mennyiségi jellemzésére az irodalomból ismert illeszkedő lapkaméreték elméletét használom fel, ami a polimer és a gócképző elemi cellaszerkezetének méretbeli illeszkedésén alapul. Mátrix anyagként polipropilént alkalmazok, mert iparilag ez az a polimer melyben a legnagyobb mennyiségben alkalmaznak gócképző hatású adalékokat, gócképzőként pedig ismert kristályszerkezetű modell anyagokat használok. A kristályosodási és olvadási jellegzetességeket, valamint az adalékok hatékonyságát differenciális pásztázó kalorimetriával (DSC) és polarizációs optikai mikroszkópiás (POM) módszerrel végzett mérésekkel minősítem. A céljainknak megfelelően eltérő hatékonyságú anyagokat kevertem a polipropilénbe és vizsgáltam az illeszkedő lapkaméreték elméletének alkalmazhatóságát.

SPÁTAY SÁRA
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Tóth Tünde
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Golcs Ádám
posztdoktor, BME VBK

Mikrotálcák PVDF-szűrőmembránjának kémiai funkcionálizálása

Kulcsszavak: PVDF; membrán; plazma; felület polarizálása; kovalens rögzítés

A mikrotálca alapú rendszerek a nagy átteresztőképességű kísérletek egységes és egyezményes platformjai. Ezeket a polimereszközöket világszerte napi szinten használják - főként a gyógyszeriparban - párhuzamos szintézisek, reakcióoptimalizálás, különböző preklinikai vizsgálatok és nagy átteresztőképességű szűrési módszerek során. Ennek megfelelően a laboratóriumi automatizálás általános célja ezen kereskedelmi forgalomban kapható eszközök kezelése, a módosításukra összpontosító fejlesztések a modern alkalmazott kutatások kiemelt területei. Egy általánosítható módszerrel lehetővé tettem porózus PVDF polimer kovalens funkcionálizálását, mely a széleskörűen alkalmazott szendvics rendszerű szűrőtálcák membránja. Az indifferens membrán felületi aktiválását követően kovalensen kapcsolt monofunkciós linkerek segítségével tetszőleges további kémiai funkcionálizálás valósítható meg. A kutatás során a jövőbeni adaptálhatóságot szem előtt tartva az iparilag széles körben elterjedt atmoszférikus nyomású levegőplazmát és két különböző kémiai felületkezelést dolgoztam ki és hasonlítottam össze a gyakorlati megvalósítás, a polarizációs hatások, a funkcionálizálás hatékonysága, valamint a morfológiára és a porozításra gyakorolt hatás szempontjából. Az összehasonlításhoz nedvesítési szög méréseket, felületi ATR-FTIR, ¹H-NMR, ¹⁹F-NMR, UV-Vis spektroszkópiás és pásztázó elektronmikroszkópiás méréseket, valamint permeabilitási vizsgálatokat végeztem.

STEIN ANNA

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Sármezey Bence
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK
Kasza György
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Iván Béla
egyetemi magántanár, ELTE TTK

Szerkezeti paraméterekkel tervezhető termoreszponzív viselkedésű poli(N-izopropil-(met)akrilamid-ko-poli(etilén-glikol)-(met)akrilát) kopolimerek

Kulcsszavak: N-izopropil-akrilamid; N-izopropil-metakrilamid; poli(etilén-glikol)-(met)akrilát; termoreszponzív kopolimerek; kritikus szételegyedési hőmérséklet

Napjaink egyik kiemelkedő kutatási irányát képezik a termoreszponzív polimerek, tekintettel széles körű alkalmazási lehetőségeikre a gyógyásztól a nanotechnológiáig. Ennek megfelelően ezen anyagok kritikus szételegyedési hőmérsékletének (CST) előre tervezhető változtatása jelentős fontosságú azok felhasználása szempontjából. A munkám során célom volt, hogy N-izopropil-akrilamid (NIPAAm) és N-izopropil-metakrilamid (NIPMAAm) különböző lánchosszúságú poli(etilén-glikol)-(met)akrilát (PEG(M)A) komonomerek (DEGEEA, mPEGA480, mPEGA640, mPEGMA300, mPEGMA500) felhasználásával gyökös polimerizációt alkalmazva különböző összetételű, biokompatibilis összetevőkből álló random P[NIP(M)AAm-ko-mPEG(M)A] kopolimereket szintetizáljak, és így egy olyan polimer könyvtárat nyerjek, melynek vizsgálatával feltárjam a kopolimerek szerkezete és a termoreszponzív viselkedésük közti összefüggéseket. Az előállított kopolimereket gélpermeációs kromatográfiával és ¹H-NMR spektroszkópiával vizsgáltam. Turbidimetriás mérésekkel meghatároztam az LCST típusú homo- és kopolimerek felhősödési (T_{CP}) és kitisztulási (T_{CL}) hőmérséklet értékeit. A mérés eredménye alapján megállapítottam, hogy minden PEG(M)A-alapú komonomer esetén a kopolimerbe beépült PEG(M)A mennyiségével lineárisan változnak a kopolimerek T_{CP} és T_{CL} értékei a vizsgált összetétel tartományban, valamint a változás iránya és mértéke a PEG(M)A komonomer filicitásával jelentősen befolyásolható. Ezen felül a beépített PEG(M)A komonomer ismétlődő egységeinek számával, azaz a PEG(M)A molekulatömegének növelésével a kopolimerek CST értékeinek összetételtől való függésére illeszthető egyenes meredeksége is növekszik. Megállapítottam, hogy mind a NIPAAm, mind a NIPMAAm esetében a T_{CP} és T_{CL} értékek az összetétel mellett a PEG(M)A komonomer etilén-glikol ismétlődő egységeinek számával, azaz két egyszerű szerkezeti paraméterrel skálázhatók a megállapított koeficienssek ismeretében a következő összefüggés szerint:

$$T_c = T_{c,0} + (a + b \times \log_{EG}) \times X_{PEG(M)A}$$

ahol $a = -1,09$ és $b = 2,71$ a felhősödés, illetve $a = -1,02$ és $b = 2,69$ a kitisztulás esetében a NIPAAm, míg $a = -1,27$ és $b = 2,33$ a felhősödés, illetve $a = -1,28$ és $b = 2,35$ a kitisztulás esetén a NIPMAAm kopolimerjeire. Ez az egyedülálló, eddig az irodalomban tudomásunk szerint nem ismert összefüggés lehetővé teszi előre tervezhető termoreszponzív viselkedéssel rendelkező polimerek előállítását.

SZABARI ZALÁN

Vegyész

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Fecske Dóra

tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Kasza György

tudományos munkatárs, HUN-REN TTK

Dr. Iván Béla

egyetemi magántanár, ELTE TTK

Hiperelágazásos poliglicidol alapú poliuretán térhálók előállítása, vizsgálata és in situ képződő, ezüst nanorészecskékkel alkotott, katalitikus hatású nanohibridjeik

Kulcsszavak: Polimer; Poliuretán; Nanorészecske; Ezüst; Katalizátor

Munkám során sikeresen állítottam elő 1-pentilamin iniciátor felhasználásával hiperelágazásos poliglicidolt (HbPG) a glicidol anionos gyűrűfelnyílásos multielágazásos polimerizációjával. Az így kapott polimerből poliuretán térhálókat állítottam elő hexametilén-diizocianát keresztkötő alkalmazásával. Eltérő keresztkötő sűrűségű térhálókat állítottam elő 20, 30, 40, 50, illetve 60 n/n%-os NCO/OH arányban, hogy vizsgáljam az összetétel hatását a gél tulajdonságaira. A térhálók előállítása sikeres volt, magas gélhányad értékkel. Az előállított térhálók duzzadási kinetikáját szerves, illetve szervesetlen oldószerekben egyaránt vizsgáltam. Megállapítottam, hogy vízben és metanolban, melyek a térháló fő alkotójának, a HbPG-nek jó oldószerei kiváló, 150-200%-os duzzadásra képesek a térhálók. Ezzel szemben tetrahidrofuránban alacsony, 15-20% volt a gélek egyensúlyi duzzadása. Munkám fő célja annak vizsgálata volt, hogy a HbPG alapú poliuretán térhálók ezüst-nitrát oldattal történő duzzasztásukat követően képesek-e redukálni az ezüst ionokat és képződnek-e ezáltal kémiaiilag aktív ezüst nanorészecskék. Azt tapasztaltam, hogy hozzáadott redukálószer nélkül is elszíneződtek a gélek, vagyis a HbPG alapú poliuretán gélekben lejátszódott az ezüst-ionok fém ezüstté való redukálása. A minták barnás színe alapján pedig feltételezhető, hogy a gélbe ágyazott ezüst részecskék a nanométer mérettartományba esnek. Továbbá megfigyelhető volt, hogy a különböző ideig (0,5; 1; 3; 5; 8 és 24 óra) ezüst-nitrátban duzzasztott géldarabok színe egyre mélyülő barna volt, ami arra utal, hogy minél tovább ideig hagyjuk a géleket a duzzasztószerben, annál több ezüstöt képesek redukálni. Az ezüst részecskéket tartalmazó minták katalitikus aktivitását a 4-nitrofenol redukációjával vizsgáltam, melyet UV-Vis spektroszkópiával követtem. Megállapítottam, hogy a minták katalitikus aktivitással rendelkeznek, amit a kiindulási 4-nitrofenol vegyület abszorpció csúcsának intenzitás csökkenésével igazoltam. A kapott eredmények alapján tehát megállapítható, hogy a hiperelágazásos poliglicidol alapú poliuretán térháló képes hozzáadott redukálószer nélkül redukálni a megkötött ezüst ionokat. Ennek révén a térhálóban megkötött fém ezüst stabilizálódik, vagyis az ezen egyszerű eljárással nyert teljesen újszerű, ezüst nanorészecskéket tartalmazó nanohibrid kiválóan alkalmas ezüst hordozóként való alkalmazásra, melyekről kimutattam, hogy katalitikus aktivitással rendelkeznek.

TAKÁCS KÉSA RÓZA

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

*Dr. Mészáros Róbert
egyetemi tanár, ELTE TTK*

*Dr. Kardos Attila
tudományos munkatárs, ELTE TTK*

Innovatív nyomtatási módszerek kidolgozása strukturált folyadékok előállítására

Kulcsszavak: strukturált folyadékok; ATPS; 3D nyomtatás; határfelületi kémia; stabilizáló határréteg

Az elmúlt évtizedekben a felfedezésüket követően gyors fejlődésnek indultak a rekonfigurálható, adaptálható, teljesen folyékony rendszerek. [1] Nanorészecskék határfelületen történő adszorpciójával majd ezt követő elakadásával a folyadék-folyadék rendszer strukturálható, alakja egy nem egyensúlyi elrendeződésbe zárható. [2] Szilárd anyagokra jellemző térbeli elrendeződés alakul ki, mialatt a folyadékokra jellemző tulajdonságok megmaradnak. Munkám a víz-vizes (ATPS) rendszerek és strukturált folyadékok innovatív 3D nyomtatási módszerekkel történő előállítására összpontosít. Kutatásom során a két vizes fázis között (polietilén-oxid és dextrán) kialakuló határfelület stabilizálására ellentétes töltésű, kolloidális szilícium-dioxid nanorészecskék és Poli(diállil-dimetil-ammónium-klorid) (PDADMAC) molekulák által képzett aggregátumokat alkalmaztam. A paraméterek optimalizálása után innovatív 3D nyomtatási módszert használtam strukturált folyadékok gyors és hatékony előállítására, majd megfigyeléseket tettem arra, hogyan befolyásolják a film stabilitását a különböző koncentrációkban adagolt szilícium-dioxid nanorészecskék és PDADMAC molekulák. Ezen kívül vizsgáltam azt, hogyan befolyásolja a kialakult membrán szerkezetét, ha eltérő molekulatömegű PEO-t alkalmazok. Tapasztalataim alapján 20 kDa PEO esetén keletkeznek a legstabilabb filmek. A kísérletek során igazoltam, hogy alacsonyabb koncentrációjú PDADMAC molekulák és szilícium-dioxid nanorészecskék esetén a membrán stabilitása csökken, míg a nagyobb stabilitást és a kisebb áteresztőképességet nagyban befolyásolja a polimerlánc optimális hossza.

[1] K. Stratford, R. Adhikari, I. Pagonabarraga, J-C Desplat, M. E. Cates., Science, New York 2098-201 (2005)

[2] Joe Forth, Xubo Liu, Jaffar Hasnain, Anju Toor, Karol Miszta, Shaowei Shi, Phillip L. Geissler, Todd Emrick, Brett A. Helms, Thomas P. Russell., Advanced Materials, 1707-603 (2018)

Szerves kémia I.

BOGNER MARCELL MÁRK
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Szak
BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. London Gábor
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Hegedűs László
habilitált egyetemi docens, BME VBK

Egy fotokapcsolható molekuláris áramköri elem tervezése és szintézise

Kulcsszavak: molekuláris kapcsoló; antiaromásság; fotokémia; molekuláris elektronika

A komplex molekuláris elektronikai feladatok teljesítését célzó rendszerek napjaink egyik fontos kutatási területét képezik és komoly szintetikus kihívást jelentenek. Kutatócsoportunk által tervezett új egyenirányító egység a fotorezponzív molekuláris kapcsolók, valamint, az ígéretes és érdekes elektronikai tulajdonságokkal rendelkező stabilizált antiaromás rendszerek kémiáját egyesíti. Munkám során egy ilyen molekula totálszintézisét dolgoztam ki a diariletén típusú fotokapcsolók^[1] és a dibenzopentalén származékok^[2] nyújtotta szintetikus platformon. A két megfelelően funkcionális, eltérő "feladatokat" teljesítő molekuláris építőelemet Ag/Pd katalitikus rendszerű Suzuki keresztkapcsolási reakcióban rögzítettük C-C kötésen keresztül konjugált pozícióban. Az egyenirányító elem működése két egymásra ortogonális töltésáramlási irány biztosításában rejlik, melyek a reverzibilis fotokapcsoló egység által kontrollálhatók. A szintézis termékeként kapott molekula szerkezeti és működését igazoló jellemzését átfogó analitikai vizsgálatokkal igazoltuk, többek közt HRMS és besugárzásos UV-Vis/NMR mérésekkel kiegészítve. A fotokapcsolás hatását a dibenzopentalén lokális antiaromás jellegére elméleti kémiai számításokkal vizsgáltuk, továbbá a szinglett-exciton bomlásra való készségét is figyelembe vettük. A totálszintézis kidolgozása során a dibenzopentalén trialkil-szilil származékainak egy újszerű reaktivitását fedeztük fel. Ennek során a kulcsintermedierként kiemelendő dihalo-dibenzopentalén származékok rövid, grammos méretű szintézisének metodológiáját szélesebb szubsztrátkörre is kiterjesztettük.

[1] M. Irie, T. Fukaminato, K. Matsuda, S. Kobatake, *Chemical Reviews* 2014, 114, 12174–12277.

[2] T. Kuwabara, K. Ishimura, T. Sasamori, N. Tokitoh, M. Saito, *Chemistry – A European Journal* 2014, 20, 7571-7575.

CSEH ORSOLYA ZSUZSANNA
Gyógyszervegyész-mérnök mesterképzési
szak
MSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Rapi Zsolt
egyetemi docens, BME VBK

Ciklodextrinhez rögzített szénhidrátalapú koronaéterek szintézise

Kulcsszavak: ciklodextrin, fázistranszfer katalízis, koronaéter

Célom olyan szénhidrátalapú monoaza-15-korona-5 koronaéterek előállítása volt, amelyek propargilcsoportot tartalmaznak, és ennek köszönhetően a molekula ciklodextrinhez rögzíthető. A ciklodextrinhez való rögzítés azt a célt szolgálja, hogy felhasználás után a koronaéter visszanyerhető legyen. A ciklodextrinhez rögzített makrociklusok esetén megváltozik a szerves oldószerekben való oldhatóság, ezáltal a felhasználást követően kicsapással vagy szelektív extrakcióval elválaszthatók lesznek a többi komponenstől. Mivel a ciklodextrinnek maguk is királis vegyületek, ezért kihatással vannak az enantioszelektivitásra is. A szintetizált, ciklodextrinnel konjugált koronaéterek katalitikus tulajdonságait olyan modellreakciókban vizsgáltam, amelyeket a kutatócsoportban korábban már jó enantioszelektivitással valósítottak meg.

GERŐ VIKTÓRIA
vegyészmérnök
BSc, 5. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Bálint Erika
egyetemi docens, BME VBK

(1,2,3-Triazol-4-il)metil-foszforamidát-származékok előállítása azid-alkin-cikloaddícióval

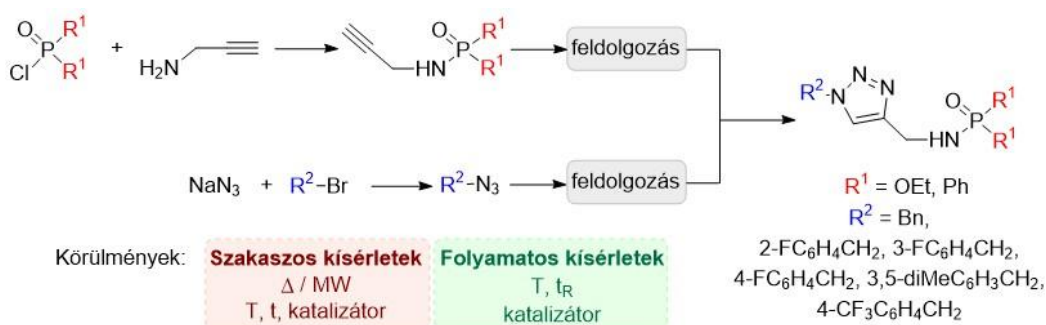
Kulcsszavak: klikk-reakció; réz(I)-katalízis; nitrogéntartalmú heterociklus; áramlásos kémia; mikrohullámú technika

A nitrogéntartalmú heterociklusok fontos képviselői közé tartoznak az 1,2,3-triazolszármazékok, széleskörű alkalmazhatóságuk és potenciális biológiai aktivitásuk révén. Kutatómunkám során célul tűztük ki foszforamidát vagy foszfinamid szerkezeti egységet tartalmazó 1,2,3-triazol vegyületek réz(I)-katalizált Huisgen-cikloaddícióval történő előállításának tanulmányozását szakaszos és áramlásos kémiai rendszerekben.

A reakció feltérképezését, választott modellreakciókon (diethyl-klórfoszfát vagy difenil-foszfin-sav-klorid és propargil-amin, valamint benzil-bromid és nátrium-azid reakcióin) keresztül valósítottuk meg, melyek során vizsgáltuk a reakcióidő, a hőmérséklet és a hőközlés módjának hatását a reakció összetételére nézve. Első lépésben a kulcsintermedierek előállítását optimalizáltuk szakaszos és áramlásos kémiai rendszerben. A következő lépésben a céltermékek előállítását tanulmányoztuk különféle reakciómegvalósítási módszerekkel.

Munkám folytatásaként az intermedierek és céltermékek előállítása szempontjából legmegfelelőbb módszer és paraméterek megválasztása után, elvégeztük a reakció kiterjesztését különféle benzil- és fenil-azidokkal egyaránt. Az optimális paramétereket alkalmazva összesen 20 új vegyületet szintetizáltunk jó, illetve kiváló termeléssel.

A reakciókat vékonyréteg- (VRK), gáz- (GC) és folyadékkromatográfiás (HPLC) mérésekkel követtük. A termékeket HPLC-MS és ^{31}P NMR segítségével azonosítottuk, szerkezetük ^{13}C és ^1H NMR spektroszkópiával, valamint nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálattal jellemeztük. Az előállított származékok antibakteriális hatását és in vitro citotoxicitását együttműködés keretein belül tervezzük vizsgálni.



GÉMES GERGŐ
gyógyszervegyész-mérnöki mesterképzési
szak
MSc, 2. félév

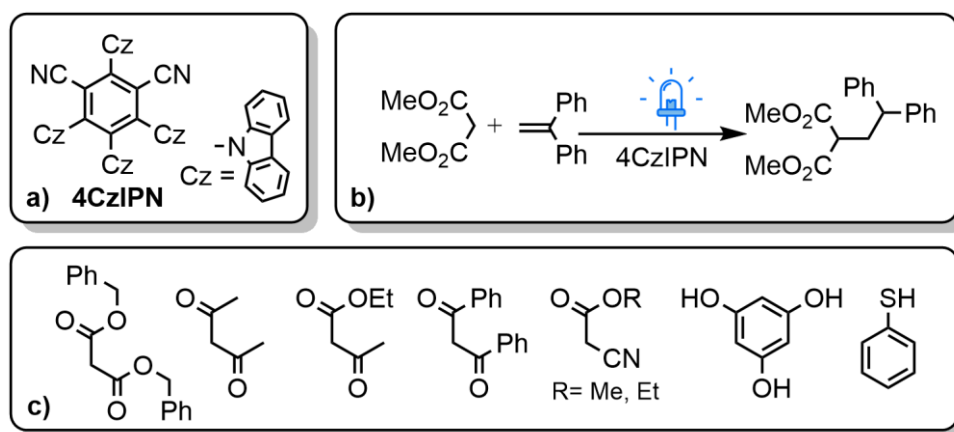
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Kupai József
habilitált egyetemi docens, BME VBK

Organo-fotokatalitikus rendszerek alkalmazása C-alkilezési reakciók fejlesztésére

Kulcsszavak: 4CzIPN; gyökös reakció; fotoreaktor; látható fény; új szubsztrátok

A fotokatalízis napjainkban reneszánszát éli, mivel remek eszköze a környezetbarát kémiai átalakításoknak. A legnagyobb előnye, hogy alkalmazásával kifejezetten enyhe körülmények közt végezhetünk reakciókat. Ez hasznos lehet a fejlett gyógyszer intermedierek funkcionálizálása esetén, ahol különösen fontos a szelektivitás. A fotokatalízisben elengedhetetlen egy robusztus kísérleti elrendezés az ismételhető és reprodukálható eredményekhez. Ebből a célból megvalósítottam egy nyílt forráskódú, 3D-nyomtatott fotoreaktor tervet, amely biztosítja a szükséges feltételeket. A reaktor pontosan beállítható fényintenzitással rendelkezik, lehetőséget ad párhuzamos reakciók kivitelezésére, illetve képes a reakcióelegyek termosztálására. Munkám során előállítottam egy nagy lehetőségeket tartogató, fémionmentes fotokatalizátort is, a 4CzIPN-t. (1. ábra, a) A katalizátort alkalmaztam egy irodalomban ismert C–C kapcsolási reakció reprodukálása során, (1. ábra, b) illetve megkísérletem a reakció kiterjesztését további szubsztrátokra. Eddig nyolc új szubsztráttal értem el sikeres reakciót. (1. ábra, c) A továbbiakban az új reakciók optimalizálását tervezem a 3D-nyomtatott reaktorban, kísérlettervezés segítségével.



1. ábra a) A 4CzIPN szerkezete, b) A 4CzIPN által katalizált C-alkilezési reakció c) További szubsztrátok.

GÖRÖG LADISLAV
Biológia és kémia
MA, 1. félév

Pavol Jozef Safarik Egyetem - Kassa

Témavezető:
Dr. Slávka Hamul'aková
egyetemi docens, SK PJSU

A piridin szerepe az orvosi kémiában és az új, biológiailag aktív anyagok tervezésében

Kulcsszavak: piridin; Alzheimer-kór; acetilkolin-észteráz; kumarin; karbamát

A piridin egy heterociklusos, szerves vegyület, amely struktúráját tekintve leginkább a benzolhoz hasonlít. Számtalan természetes vegyület részét képezi, de megtalálható sok gyógyszerkészítményben is. A piridin és prekurzormolekulája a dihidropiridin jelentőségéről vall a számtalan megjelent tanulmány, amelyek 2010 – 2020 között lettek publikálva. Bebizonyosodott, hogy a piridin jelenléte a különböző gyógyszerekben jelentős hatással bír azok farmakológiai profiljára és a biológiailag aktív molekulákra. Ezért a piridin- és dihidropiridingyűrűvel rendelkező új analógok kifejlesztése a hatásmechanizmusuk, mint potenciális farmakológiailag aktív hatóanyagok tanulmányozása érdekében számos tudományos csoport fő céljává vált. Ezen eredmények alapján munkánk, különböző hosszúságú láncokkal rendelkező N-piridil-O-alkil-karbamátok szintézisére összpontosított, amelyek a neurodegeneratív betegségek, például az Alzheimer-kór (AD) kezelésének potenciális hatóanyagai lehetnek.

GYÓRFI SÁRA
vegyéssz mérnök
BSc, 7. félév

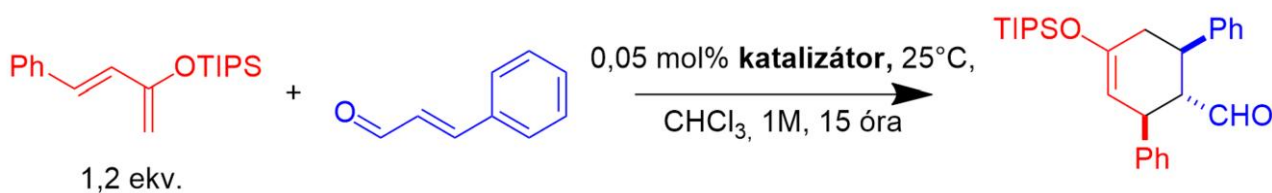
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Soós Tibor
kutatócsoport-vezető, HUN-REN TTK
Dr. Bölcskei Hedvig
címmzetes egyetemi docens, BME VBK
Forman Ferenc Sándor
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK
Hegedüs Kristóf
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Exo szelektív Diels-Alder reakció fahéjaldehid és származékainak felhasználásával

Kulcsszavak: organokatalízis; optimalizálás; borán katalizátorok; NMR spektroszkópia

A katalizátorok alkalmazása nem csupán a kémia tudományában, hanem a mindennapi életünkben is alapvető jelentőséggel bír. A vegyipar fejlődésének egyik meghatározó pillére a katalizátorok fejlesztése, mivel ezek lehetővé teszik az folyamatok hatékonyabb és gazdaságosabb megvalósítását. A modern katalizátorok tervezésénél nem csupán a reakciók hatékonyságának növelése a cél, hanem a fenntarthatóság, a zöldkémiai, valamint a gyógyszerkémiai alkalmazásoknak való megfelelés is egyre fontosabb szemponttá válik. Ennek eredményeként nő az organokatalitikus eljárások szerepe a vegyiparban. ^[1] Kutatócsoportunk évek óta foglalkozik fémmentes katalizátorok fejlesztésével és alkalmazásával. Egy korábban általunk kifejlesztett eljárás során már alkalmaztunk szimmetrikus borán katalizátort exo szelektív Diels-Alder reakcióban ^[2]. Bár ez az módszer számos előnnyel rendelkezett, néhány hátrány is megfigyelhető volt: közép magas katalizátor mennyiséget (5 mol%) igényelt, és aldehidekkel végzett reakciók esetén a termelékenység és az exo/endo szelektivitás csupán közepes szintet ért el. Kutatómunkám során újonnan szintetizált aszimmetrikus triaril-borán katalizátorokkal vizsgáltam a Diels-Alder reakciót, célom az exo szelektivitás növelése és a katalizátor mennyiség jelentős csökkentése volt. Az optimalizált körülmények között 0,05 mol% katalizátorral teljes konverziót értem el, miközben az exo/endo arány javult. Laboratóriumi munkám során összesen 12 új, a szakirodalomban korábban nem ismert vegyületet állítottam elő, melyeket NMR-spektroszkópia segítségével jellemeztem.



[1] P. Ahlberg, Adv. Inf. Nobel Price Chem. 2001 2001, 1–12.

[2] M. Bakos, Z. Dobi, D. Fegyverneki, Á. Gyömöre, I. Fernández, T. Soós,
ACS Sustain. Chem. Eng. 2018, 6, 10869–10875.

HERCZEGH ATTILA RICHÁRD

Vegyész MSc
MSc, 3. félév

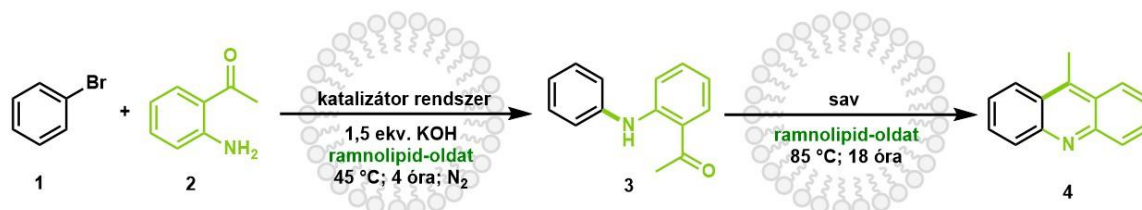
Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Novák Zoltán
egyetemi tanár, ELTE TTK

Katalitikus átalakítások vizsgálata biotenzid oldatokban

Kulcsszavak: micelláris katalízis; Buchwald-Hartwig-kapcsolás; keresztkapcsolás; ramnolipidek; tenzidoldat

A legtöbb kémiai reakcióban fontos szerepet tölt be az oldószer, mert biztosítja az átalakulás lejátszódásához szükséges közeget. A nagyméretű, vegyipari átalakítások során gyakran alkalmaznak olyan szerves oldószert, amely a környezetre és az egészségre is ártalmas. Manapság már a vegyipar számára többféle alternatív megoldás is rendelkezésre áll a káros oldószerek kiváltására. Egy ideális választás lehet a tenzidoldatok használata, mert bennük a kritikus micellaképződési koncentráció felett micellák alakulnak ki, amelyek képesek megfelelő közeget biztosítani a reaktánsoknak a reakció lejátszódásához. A felületaktív anyagok egy csoportját a biotenzidek alkotják, melyek képviselői a kutatás során használt ramnolipidek. Szerkezetüket tekintve a mono- és di- forma szerint, egy vagy két L- α -ramnopenitranzil részlet adja a tenzid hidrofíl részét, a β -hidroxidekanoil- β -hidroxidekánsav pedig a molekula hidrofób részét képezi [1]. A biotenzidek mikroorganizmusokkal biokémiai úton állíthatók elő, a ramnolipidek például *Pseudomonas Aeruginosa* baktériumcsalád segítségével szintetizálhatók. Korábbi munkánk során sikeresen végeztünk Suzuki-, Sonogashira- és Buchwald-Hartwig keresztkapcsolási reakciókat. Előállítottunk többféle szerkezetű egyszerű terméket és gyógyszerhatóanyagokat, valamint hatóanyag intermediereket [1]. Tudományos diákköri munkám során a ramnolipidek vizes oldatának alkalmazhatóságát vizsgáltam részletesen. A micelláris hatások vizsgálatához egy olyan Buchwald-Hartwig kapcsolási reakciót (1. ábra) választottam, amelyet már sikeresen elvégeztek tenzidoldatban [2]. A kísérletek során összehasonlítottam a ramnolipid-oldatban végzett kapcsolási reakciók hatékonyságát különböző tenzidoldatokban és szerves oldószerekben végzett reakciókéval. Ezen kívül vizsgáltam a tenzidoldat töménységének, illetve különböző katalizátoroknak és ligandumoknak a reakcióra gyakorolt hatását. A leghatékonyabb katalizátor rendszerből törzsoldatot készítettem és vizsgáltam annak eltarthatóságát is. A Buchwald-Hartwig reakcióban 21 különböző szerkezetű diarilamin származékot állítottam elő, továbbá vizsgáltam a termékek gyűrűzárási reakcióját 9-metilakridin előállítására (4), amely egy gyógyszeripari alapanyag.



[1] Adamik, R., Herczegh, A. R., Varga, I., May, Z., Novák, Z., *Green Chemistry*, 25 (9), 3462-3468, (2023)

[2] Kincaid, J. R. A., Wong, M. J., Akporji, N., Gallou, F., Fialho, D. M., Lipshutz, B. H., *Journal of the American Chemical Society*, 145 (7), 4266–4278, (2022)

KAPDOS ÁDÁM
Vegyész
MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Novák Zoltán
egyetemi tanár, ELTE TTK

Réz katalizált elektrokémiai dekarboxilatív borilezés fejlesztése

Kulcsszavak: borilezés, elektrokémia, szerves, kémia

A kutatás során sikerült egy olyan reakciót megtervezni és optimalizálni, amellyel primer és szekunder karbonsavak aktív észtereinek dekarboxilatív borilezése elvégezhető. A kifejlesztett reakció egyenlete az ábrán látható. Az újonnan kifejlesztett szintézisek különlegessége az, hogy a borilezéshez a B_2pin_2 reagenst alkalmazza, így közvetlenül alkil-bórpinakolatok keletkeznek a reakcióban. Ennek köszönhetően nincs szükség drága diborán reagensekre, például B_2cat_2 -re, illetve nincs szükség a reakció után egy külön átészteresítéssel lépésre.

A funkciós csoportok közül a karbonsavak átalakítására a közelmúltig az irodalomban meglehetősen kevés módszert írtak le. A napjainkban leggyakrabban használt és legmegbízhatóbb aktív észterek az N-hidroxi-ftálimid, vagy röviden NHPI észterei. Az NHPI észterek kémiai szerkezete az ábrán látható, mint kiindulási anyag. Az NHPI észtereket egy elektronos redukción keresztül lehet reakcióba vinni. Ekkor az észter ftálimidre, szén-dioxidra és alkil-gyökre bomlik el.

Az alkilgyökök bórpinakolat észterekké alakítására egy réz-alkoxidból előállított difenilf-foszfinoxid komplexet alkalmaztam katalizátorként. A kutatás során az átalakulás mechanizmusát is megvizsgáltam. A difenilf-foszfinoxid komplex a diborán reagens hozzáadása során előbb rézzé, majd nyomnyi oxigén és más oxidálószer hatására réz(I)-oxid nanorészecskékké alakul. A bórpinakolatok a mechanizmusvizsgálat alapján valószínűleg a réz(I)-oxidra adszorbeált boril specieszeken és alkil gyökökön keresztül keletkeznek. Az előadás során bemutatom a kutatás legalapvetőbb mérföldköveit, a kifejlesztett reakciót és a reakció mechanizmusával kapcsolatos vizsgálatokat, eredményeket.

KIS DÁVID
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Kupai József
habilitált egyetemi docens, BME VBK

Egy új, természetes alapú oldószer alkalmazása palládiumkatalizált kapcsolási reakciókban

Kulcsszavak: alternatív oldószer; biomasszaalapú szerves molekulák; szén-szén kapcsolás; paramétervizsgálat

Korunkban az ipar minden területén egyre nagyobb szerepet kapnak a környezetbarát technológiák. Ez alól nem képez kivételt a gyógyszeripar sem, ami számos módon szennyezheti a környezetet. Ide sorolható a gyártás során keletkezett szennyvíz, amit megfelelő módon kezelni kell a környezetbe való kikerülés előtt, az oldószerek párolgása révén a légkörbe kikerülő szerves oldószerek, továbbá a gyártáshoz szükséges energia termelése és a hulladékanyagok égetése során keletkező szén-dioxid és egyéb füstgázok. A káros hatások csökkentésének egyik lehetséges módja az oldószerekből származó hatások mérséklése, hiszen a gyógyszer- és finomkémiai iparban a hagyományos módon előállított termékek esetében az összes felhasznált anyag tömegének kb. 80–90%-a az oldószerekből származott 2007-ben. Ezek a káros hatások csökkenthetőek a felhasznált oldószerek megfelelő tisztításával és visszaforgatásával, valamint ha olyan oldószereket választunk a gyártáshoz, amelyeknek eleve kisebb a potenciális egészség- és környezetkárosító hatása.

Kutatómunkám során folytattam a korábban elkezdett, egy új, alternatív oldószerrel, a metilszezamollal kapcsolatos kutatásaimat. Célom volt a metilszezamolt olyan reakciók oldószereként vizsgálni, mint a gyógyszer-szintézisekben is felhasználható, aromás acetilén-származékok előállítására alkalmas Sonogashira-reakció, illetve a benzofurán- és indolváz vegyületek szintézise során alkalmazható Cacchi-gyűrűzárás. A reakciók ideális körülményeinek megtalálásához paramétervizsgálatot végeztem, amelynek során vizsgáltam, hogy hogyan befolyásolja az elérhető termelést a reakció során alkalmazott bázis típusa, a reakcióidő és a hőmérséklet, továbbá milyen hatással van a termelésre az, hogy milyen halogénatomot tartalmaz az aromás halogenid. További célom volt összehasonlítani a metilszezamol alkalmazásával elért termeléseket az irodalomban megtalálható, más oldószerekben végzett reakciókban elért termeléssel. Kutatásom során a metilszezamol előállítási reakcióját is fejlesztettem, mellyel sikerült elérnem, hogy a metilszezamol a korábbiakkal összemérhető idő alatt, a korábban alkalmazott katalizátormennyiség kevesebb, mint 10%-ával is előállítható legyen jó termeléssel.

MÁRIÁS ATTILA
Vegyészmérnök
MSc, 2. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezető:
Skodáné Dr. Földes Rita
egyetemi tanár, PE MK

6-Jód- és 8-jód-imidazo[1,2-a]piridin származékok előállítása és aminokarbonilezése heterogén palládium katalizátor jelenlétében

Kulcsszavak: jódzás; kondenzációs gyűrűzárás; amidok; ketoamidok; újrafelhasználhatóság

Az imidazo[1,2-a]piridin vázas vegyületek döntő többsége kedvező biológiai aktivitással – például antivirális, antioxidáns, enzimgátló, vagy akár rákellenes hatással – rendelkezik. A kutatás célja kettős: egyrészt eddig ismeretlen származékok előállítása karboxamid funkciós csoport beépítésével, másrészt a kutatócsoportban kidolgozott heterogén palládiumkatalizátor tesztelése a vegyületcsalád három képviselőjének átalakításában. A heterogén katalizátorok használata gazdasági szempontból egyre jelentősebb, mivel a homogén katalízissal szemben a termék tisztítása egyszerűbb, a katalizátor könnyen ülepíthető, szűrhető, valamint a nyers termék fémtartalma mérsékelhető. A többszöri felhasználás pedig lehetővé teszi a katalizátor-hulladék mennyiségének, valamint a környezetterhelésnek a csökkentését. Az új csoportok kialakítását több lépésben terveztem megoldani. Irodalmi módszerek alapján egy 6-jód- és kettő 8-jódimidazo[1,2-a]piridin származékot állítottam elő. A jód funkciós csoport lehetővé teszi különféle csoportok beépítését Pd-katalizált reakciókban. Én a jódvegyületet aminokarbonilezési reakcióban kívántam karboxamidokká alakítani heterogén palládiumkatalizátor jelenlétében. Különböző reakciókörülmények között vizsgáltam a katalizátor aktivitását és szelektivitását az aminokarbonilezési reakcióban aromás és alifás aminok mint reakciópartnerek jelenlétében. Megállapítottam, hogy az aminokarbonilezéssel és kettős karbonilezéssel képződő termékek arányát a hőmérséklet és nyomás mellett mind az amin reakciópartner, mind a szubsztrátum szerkezete befolyásolja. Többféle oldószer és bázis felhasználásával tanulmányoztam a katalizátor újrafelhasználhatóságát különböző paraméterek mellett. A vizsgálatok során bizonyítottam, hogy a katalizátor minimális fémlemosódás mellett többször felhasználható.

Szerves kémia II.

BENEDIKTI ANNA

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezető:

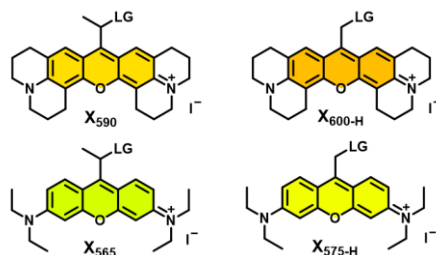
*Bojtár Márton Gáspár
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK*

Rodaminok új megvilágításban: kiemelkedően hatékony fotolabilis vegyületek szintézise és vizsgálata

Kulcsszavak: xanténvázás fotolabilis védőcsoportok; rodamin-analógok; vöröseltolás

A fotolabilis védőcsoportok jelentősége abban rejlik, hogy fényel térben és időben szabályozhatók, így lehetővé teszik a célzott hatóanyagleadást. Kezdetben csak UV-fénnyel aktiválható fotolabilis vegyületek szintézise volt lehetséges, mely kedvezőtlen biológiai alkalmazásra alacsony szöveti áthatolóképessége és sejtkárosító hatása miatt. Az új fejlesztések célja, hogy a fotolabilis védőcsoportok abszorpciós maximumát eltolják vörös/közeli-infravörös tartományba, utat nyitva in vivo vizsgálatokhoz. [1]

Kutatásom a rodamin-analóg fotolabilis védőcsoportok továbbfejlesztésére, illetve szerkezetfüggő vizsgálatára irányult. [2] Célom olyan vöröseltolt xanténvázás fotolabilis vegyületek előállítása volt, melyekben az alapváz 3-as és 6-os pozíciójában lévő nitrogénatomok a Texas Red fluoreszcens festékhez hasonlóan többgyűrűs rendszereket alkotnak. [3]



Munkám során sikeresen alkalmaztam egyedi szintézisstratégiákat a julolidinnel kiterjesztett váz kétféle módosulatának-, illetve dietilamino-szubsztituenseket tartalmazó referenciavegyületek előállítására. A négy vegyület fényel bevilágítva vizsgáltam a távozócsoport felszabadulásának hatékonyságát, illetve fénytől elzárva a sötétstabilitást. Kutatómunkám legfontosabb eredménye az irodalomban nem ismert X_{600-H} „photocage”, mely öt lépésben szintetizálható, stabil, jó a vízzoldékonysága és kiemelkedő hatékonysággal bomlik fény hatására.

[1] Dai, M., Yang, Y. J., Sarkar, S., Ahn, K. H., *Chemical Society Reviews*. 52, 6344–6358 (2023)

[2] Egyed, A., Németh, K., Molnár, T. Á., Kállay, M., Kele, P., Bojtár, M., *Journal of the American Chemical Society*. 145(7), 4026-4034 (2023)

[3] Grimm, J. B., Tkachuk, A. N., Patel, R., Hennigan, S. T., Gutu, A., Dong, P., *Journal of the American Chemical Society*, 145(42), 23000-23013 (2023)

GERGELY KRISTÓF TAMÁS

Vegyész

MSc, 1. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezető:

*Dr. Tolnai Gergely László
adjunktus, ELTE TTK*

Egyszerű módszer propellán elektrofil aktiválására savakkal

Kulcsszavak: propellán; Lewis-sav; amin; elektrofil; bioizosztéria

A biciklo[1.1.1]pentán vázrészlet a benzolgyűrű bioizosztere. Emiatt a tulajdonsága miatt gyógyszermolekulákba beépíthető, ezzel javítva annak biológiai hatását, vagy fizikokémiai tulajdonságait. [1] A biciklo[1.1.1]pentil-aminoknak, mint szintetikus építőelemeknek az ismert előállítási módszerei erélyes körülmények között, több lépésben történnek. [2] Munkám során egy olyan előállítási utat dolgoztam ki, amivel egyszerűen állíthatók elő ezek az építőelemek, egy lépésben. Lewis-savakkal történő aktiválás során az [1.1.1]propellán reagál a kiválasztott aminnal egy lépésben. A szintetizált biciklo[1.1.1]pentil-amint egy kromatográfiás tisztítás után megkapjuk. A kutatómunkám elején az [1.1.1]propellán és a morfolin reakcióját vizsgáltam. Eredetileg bór-trifluorid éterátot használtam Lewis-savként. A reakció nem-szelektív, a biciklusos gyűrű felnyílhat a reakció során 4-(3-metilenciklobutil)morfolint képezve. Ennek a mellékterméknek a visszaszorítása érdekében trimetilszilil-triflátot, majd 2,4,6-kollidínium-triflátot alkalmaztam, mint Lewis-sav. A morfolin után nyíltláncú, heterociklusos és aromás gyűrűt tartalmazó aminokkal és anilin-származékokkal végeztem reakciókat. A munkám során előállítottam 5 db biciklo[1.1.1]pentil-amint és 5 db (3-metilenciklobután)-amint, amelyek közül több eddig nem szerepel az irodalomban.

[1] Meanwell, N. A., Journal of Agricultural and Food Chemistry, 71 (47), 18087-18122 (2023)

[2] Ma, X., Nhat Pham, L., Asian Journal of Organic Chemistry, 9 (1), 8-22 (2020)

HORNYÁNSZKY ÁGNES
Gyógyszervegyész-mérnök MSc
MSc, 4. félév

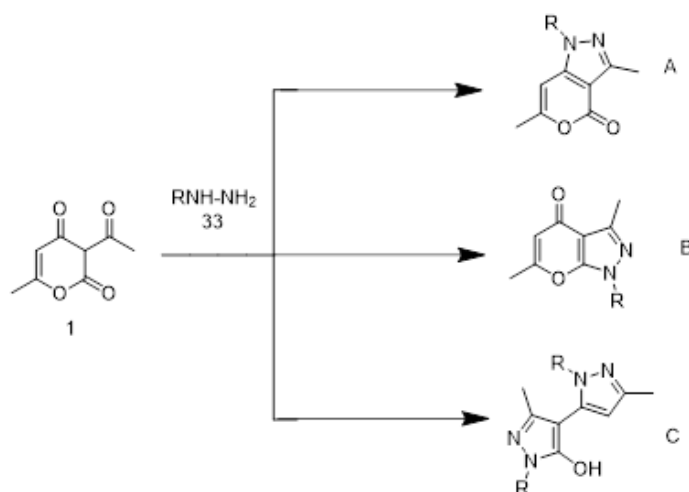
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Kovács Péter
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Keserű György Miklós
egyetemi tanár, BME VBK
Dr. Ábrányi-Balogh Péter
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK

Pirazolszármazékok szintézise dehidroecetsavból

Kulcsszavak: heterociklusok; gyűrűzárás; szubsztituens függés; szelektivitás; hidrazin

A szakirodalomban fellelhető számos reakció dehidroecetsavval (1) és többféle hidrazinszármazékkal (33), amivel különböző pirazolszármazékokat állítottak elő. Az eredmények azonban nem minden esetben egyeztek, nagyon hasonló reakciókörülmények egészen más termékek leírásához vezettek, sok esetben a teljes analitikai vizsgálatok is hiányoznak. Munkánk során az volt a célunk, hogy megvizsgáljuk a különböző hidrazinok és a reakciókörülmények hatását a céltermékek arányára, illetve napjaink korszerű analitikai módszereivel a termékek valódi szerkezetének meghatározása. A reakciókban három különböző heterociklust (A-C) különböztettünk meg a kiindulási dehidroecetsavtól és egy diketon intermediertől. Emellett megfigyeltük a konverzió függését az alkalmazott oldószertől és segédanyagoktól.



1. ábra. A reakciók során azonosított szerkezetvariációk.

KŐSZEGI KRISTÓF ANDRÁS

Kémia

BSc, 6. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezetők:

Dr. Szöllősi György
tudományos tanácsadó, SZTE GYTK

Dr. Szabados Márton
tudományos munkatárs, SZTE TTIK

Mechanokémiai aszimmetrikus Michael-addíciók maleimidekre heterogén királis organokatalizátor használatával

Kulcsszavak: aszimmetrikus; Michael-addíció; organokatalízis; heterogenizálás; mechanokémia

A gyógyszeripar számára nagy jelentőséggel bírnak a különböző aszimmetrikus C–C kapcsolási reakciók, melyek segítségével optikailag tiszta vegyületek szintézisei valósíthatók meg. Ilyen kiemelt reakció a Michael-addíció is, melyben fontos Michael-akceptorok az N-szubsztituált maleimidek. Ezen molekulák aldehidekkel való reakciójában szukcinimid-származékok keletkeznek, melyek királis építőelemekként nyernek felhasználást gyógyszer-molekulák előállításánál. A környezetvédelem fontossága miatt mára nagy teret nyertek a különféle alternatív reakcióaktiválási módszerek, melyek közül a mechanokémia fontos szereppel bír, ugyanis a reakciók oldószer használata nélkül valósíthatók meg, a hagyományos termikus aktiváláshoz képest rövidebb reakcióidők alatt. A zöld kémia alapelvei közé tartozik a heterogén katalizátorok használata, mely az organokatalízissel kombinálva gazdaságos és környezetkímélő katalitikus technológiák kidolgozását teszi lehetővé.

Munkánk során izobutiraldehid N-szubsztituált maleimidekre való aszimmetrikus Michael-addícióját vizsgáltuk mechanokémiai reakcióaktiválást használva. Királis katalizátorként szervesen oxid (Laponite RD illetve Bentolite H) felületen adszorbeált L-fenilalanint (L-Phe) alkalmaztunk, mely a reakciókban *in situ* képződik. Vizsgáltuk a mechanokémiai- és a reakcióparaméterek konverzióra és enantioszelektivitásra gyakorolt hatását az optimális körülmények feltérképezése végett. Kutatásunk során megállapítottuk, hogy a hibrid anyag *ex situ* előállításával egy aktívabb katalizátort kapunk az *in situ* képződőhöz képest. A visszaforgathatóság tanulmányozásakor megfigyeltük azt, hogy az általunk használt anyag katalitikus aktivitása fenntartható, az hatékonyan alkalmazható több lépésben is. Szerkezetvizsgálati mérések alapján bebizonyítottuk, hogy az aminosav a szervesen anyag felületén molekulárisan adszorbeálódik, valamint az interlamelláris térben szintén megkötődik. A módszerünk alkalmazhatóságát vizsgáltuk izobutiraldehid több N-szubsztituált maleimidekre történő addíciójában, melyekben kiváló eredményeket értünk el.

LAM THI DA THAO
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Kovács Ervin
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Hegedűs László
habilitált egyetemi docens, BME VBK

Innovative and Sustainable Electrocatalytic Oxidation of Amines for Synthesis of Imines and Nitriles

Kulcsszavak: Amine oxidation, electrocatalysis, electrosynthesis, imines, nitriles

Over the past few decades, various sustainable electrochemical oxidation reactions have been deeply investigated due to their sustainable and productive cleansing methodology compared to traditional chemical transformations that require harsh conditions and toxic reagents. The high applicability of imine and nitrile in a wide range of fields, including pharmaceuticals, agriculture, material science, and polymers, coupled with their versatility in a plethora of reactions, make the synthesis of imines and nitriles represent a promising avenue of research in the present era.[1] Electrochemical oxidation of amines is well-known, applying transition metal electrodes, special alloys, or expensive electrodes with modified surfaces.[2] This project represents a comprehensive analysis of the diverse electrocatalytic transformation of various amines, including primary amines, N-substituted benzylic amines, and secondary amines by applying inexpensive electrodes in mild conditions. Consequently, using appropriate conditions with nitroxyl radical catalytic, cost-effective electrodes such as graphite and stainless steel were successfully employed to produce stable imine and nitrile products with high efficiency (>99% yield) and selectivity (up to 99%).

References

- [1]. Pollok, D.; Waldvogel, S. R. *Chem. Sci.* 11, 12386–12400 (2020).
- [2]. Xu, Z.; Kovács, E. *ACS Org. Inorg. Au* (2024) doi:10.1021/acsorginorgau.4c00025.
- [3]. Semmelhack, M. F.; Schmid, C. R. *J. Am. Chem. Soc.* 105, 6732–6734 (1983).

NAGY DORKA
vegyészmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK

Butil-fenil-H-foszfinát szintézisének vizsgálata és hasznosítása α -aminofoszfonátok előállításában

Kulcsszavak: zöld; aza-Pudovik; halogénmentes; szintézis módszerek

Kutatócsoportunkban korábban már vizsgálták a foszfinsavak direkt észteresítését mikrohullámú (MW) besugárzás segítségével [1], ugyanis ez a reakció hagyományos termikus körülmények között nem játszódik le. Munkám során a fenil-H-foszpinsav (1) direkt észteresítését – mint egy klórmentes megközelítést - vizsgáltuk butil-alkohollal MW körülmények között. Azért döntöttünk a butil-származék mellett, mert kereskedelmi forgalomban nem kapható. Összehasonlításképpen az alkilező észteresítést is megvizsgáltuk. Mivel a MW észteresítés méretnövelése nehézségekbe ütközött, másképp próbálkoztunk. Bár a foszfinsavak termikus észteresítése várhatóan nem következik be, mégis megpróbáltuk, és meglepetésre sikerrel jártunk.

Az α -aminofoszfonátok biológiailag aktív vegyületek és az α -aminosavak foszfor-analógjaiként ismertek.[2,3] Legáltalánosabb szintézis módszerük az aza-Pudovik-reakció, illetve Kabachnik-Fields reakció. Az előállított butil-fenil-H-foszfinátot (2) kívántuk hasznosítani aza-Pudovik-reakciókban (A), illetve Kabachnik-Fields kondenzációkban (B). A környezetbarát megvalósítást szem előtt tartva, oldószer és katalizátor nélkül, MW körülmények között végeztük el az átalakításokat.

1. G. Keglevich, N. Zs. Kiss, Z. Mucsi, T. Körtvélyesi, *Org. Biomol. Chem.* 10, 2011-2018, 2012.
2. Caballero, F. J.; Navarrete, C. M.; Hess, S.; Fiebich, B. L.; Appendino, G.; Macho, A.; Munoz, E.; Sancho, R. *Biochem. Pharmacol.* 73, 1013, 2007.
3. Zhang, H.; Lemley, A. T. *J. Agric. Food Chem.* 55, 407, 2007.

NÉMETH ÁRON SOMA
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

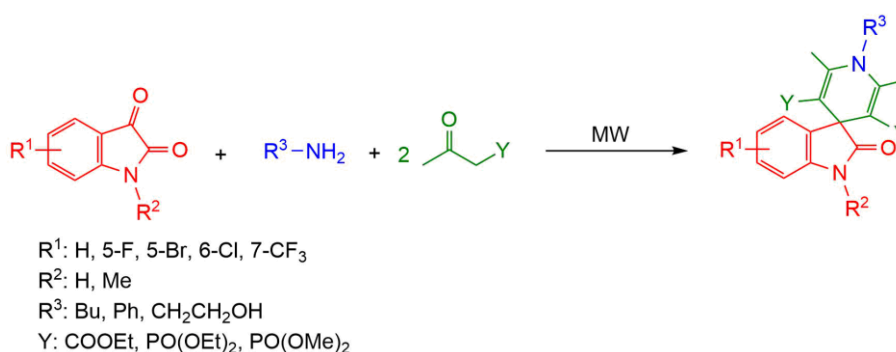
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Bálint Erika
egyetemi docens, BME VBK
Rávai Bettina
PhD hallgató, BME VBK

Spirooxindol-dihidropiridin-biszfoszfonátok és analógjainak előállítása

Kulcsszavak: mikrohullámú reaktor; optimalizálás; multikomponensű reakció; izatin; spirooxindol

Kutatómunkám során célul tűztük ki új spirooxindol-dihidropiridin-biszfoszfonátok és spirooxindol-dihidropiridin-dikarboxilátok multikomponensű szintézisét. A célvegyületek három fontos farmakofór szerkezeti egységből (spirooxindol, dihidropiridin és biszfoszfonát vagy dikarboxilát) tevődnek össze, melyek számos biológiailag aktív vegyületben megtalálhatók és a gyógyászatban is nagy jelentőséggel bírnak. Munkám első felében a spirooxindol-dihidropiridin-biszfoszfonátok előállítását különböző izatinok, primer aminok és β -ketofoszfonátok Hantzsch-típusú reakciójával kívántuk megvalósítani mikrohullámú körülmények között. Először az izatin, butil-amin és dietil-(2-oxopropil)foszfonát modellreakcióját vizsgáltuk és optimalizáltuk. Ezt követően a reakciót különböző izatinokra (5-fluor-, 5-bróm-, 6-klór-, 7-trifluorometil-, illetve N-metilizatin), primer aminokra (anilin, etanolamin, ciklohexil-amin), valamint egy további β -ketofoszfonátra [dimetil-2-oxopropil)foszfonát] kiterjesztve, új, az irodalomban nem ismert származékokat szintetizáltunk. Célünk volt a kapott termékek kipreparálása, valamint teljes analitikai jellemzése is. Továbbá kísérleteket tettünk a lehetséges reakcióutak feltérképezésére is. Kísérleti munkám másik felében az előbb említett célvegyületek C-analógjait, a spirooxindol-dihidropiridin-dikarboxilátok szintézisét tanulmányoztuk. Az izatin, anilin és acetecetészter alapreakciójának optimalizálása során több intermedier keletkezését tapasztaltuk, így a reakció körülményeinek alapos változtatásával igyekeztünk a céltermékre nézve szelektívvé tenni a reakciót.



A kísérleteket ³¹P NMR spektroszkópiával, valamint tömegspektrométerrel kapcsolt kromatográfiás módszerrel (HPLC-MS) követtük, a termékeket flash oszlopkromatográfiás módszerrel tisztítottuk, szerkezetüket ¹H és ¹³C NMR spektroszkópiás mérésekkel igazoltuk.

Tuning the conformational properties of dithienylbenzene photoswitches for solid-state applications

Kulcsszavak: virtuális szűrés; szintézis; fotoaktív; kristályszerkezet; fémorganikus térháló

Dithienylbenzenes are promising candidates for applications in molecular electronics, however they often crystallize in a photoinactive conformation, therefore they cannot be used as solid-state photoswitches.

To prevent such cases, I tried to develop a theoretical method, so I made calculations for differently substituted dithienylbenzenes. The virtual screening showed, that for most of the derivatives the energy differences between the photoactive and inactive forms are negligible, but substantial structural modifications alter the conformational space in a way that may be beneficial. However the effect of these modifications on the photoswitching properties are unknown, therefore in my lab work I rather focused on obtaining the photoswitches, investigating their properties in solution and then try to tune their conformational properties by integrating them into various solid-state structures. During my research I synthesized three photoswitches (molecule 1, 2 and 3), that form a ring through an electrocyclicization reaction if irradiated with UV light (Figure 1).

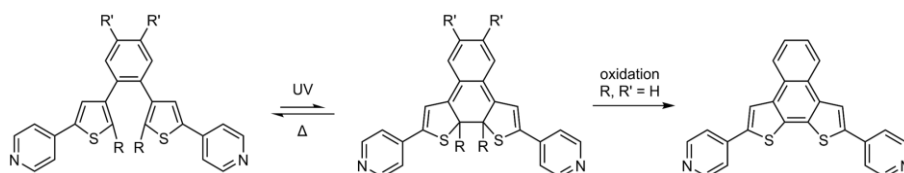


Figure 1. Reactivity of the photoswitches to be synthesized. During my research I studied molecule 1 (R=CH₃, R'=H), 2 (R,R'=H), and 3 (R=CH₃, R'=OMe).

I investigated the photoswitching properties in solution with UV-Vis spectroscopy. I found that for 1, a reversible photoreaction can be measured, but only at lower temperatures (-60 °C), while 2 undergoes an irreversible reaction upon irradiation at 25 °C. However 3 is capable of a reversible photoreaction even at room temperature with a cycloreversion as fast as a few seconds. I studied 1 in solid-state as well. First, I crystallized it in its pure form, but the X-ray measurements revealed, that it is in a photoinactive parallel form in this case. I also integrated 1 into a MOF, where it became antiparallel, but it is still photoinactive as the reactive carbon atoms are too far away from each other for the solid-state photoswitching. Other than these I made a methylated derivative and synthesized an organometallic complex as well, but these new compounds are not yet crystallized. I hope that from these, I will be able to get photoactive solid-state structures, and provide a method, that can give options for the solid-state conformational tuning of other dithienylbenzenes as well.

SZABÓ ZITA
Kémia
BSc, 5. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Farkas Gergely
egyetemi docens, PE MK
Császár Zsófia
tudományos segédmunkatárs, PE MK

Királis P,NP-ligandumok előállítása és alkalmazása ketonok réz-katalizált aszimmetrikus hidrogénezési reakciójában

Kulcsszavak: foszfin-aminofoszfin ligandum; enantioszelektív C=O redukció; prokirális szubsztrátum; homogén katalízis; nem nemesfém katalizátor

Az aszimmetrikus hidrogénezési reakciók rendkívüli jelentőséggel bírnak a szintetikus szerves kémiában. A rendelkezésre álló preparatív módszerek közül kiemelendő az átmenetifém-katalizált aszimmetrikus szintézis, amely során a királis információt a kis mennyiségben jelenlévő, királis ligandumot tartalmazó fémkomplex a szubsztrátum nagy mennyiségének képes átadni. A módszer sikerességét igazolja, hogy az utóbbi évtizedben számos királis átmenetifém-katalizátorral kiváló enantioszelektivitást értek el hidrogénezési reakciókban. Az enantioszelektív hidrogénezési reakciókban általánosan alkalmazott ruténium-, ródiium- és irídium-tartalmú katalizátorok helyett az elmúlt néhány év során előtérbe került a nem nemesfém katalizátorok alkalmazása. [1] Bár előbbiek segítségével hatékony és szelektív katalitikus rendszerek alakíthatók ki, azonban e fémek korlátozott hozzáférhetősége, költséges előállítása, illetve komplexeik toxicitása határt szab szintetikus alkalmazásuknak. Mindezek fényében érthető a nagy mennyiségben előforduló, olcsóbb és sok esetben kevésbé toxikus átmenetifémekkel (pl. mangán, vas, réz) alkotott katalizátorok jelentőségének növekedése. Meglepő módon a szakirodalomban ez idáig kevés példa található homogénfázisú réz-katalizált aszimmetrikus hidrogénezésre, jóllehet az előállított királis réz-komplexekkel nagy enantioszelektivitással sikerült megvalósítani ketonok aszimmetrikus hidrogénezését.[2] Munkám során új, alkán-diil vázzal rendelkező királis foszfin-aminofoszfin (P,NP) ligandumokat állítottam elő és vizsgáltam ezek foszfor- és nitrogén-szubsztituenseinek hatását prokirális ketonok réz-katalizált aszimmetrikus hidrogénezési reakciójában. A katalitikus reakcióban egyfogú, akirális foszfin ligandum alkalmazása is szükséges, a megfelelő aktivitás és szelektivitás eléréséhez. A kísérletek során e vegyületek szterikus és elektronikus sajátosságainak hatását is tanulmányoztam. Célom volt a reakciókörülmények optimalizálása a maximális optikai hozam elérése érdekében. Az előállított új királis katalizátorokkal kiváló enantioszelektivitást (90 % ee) sikerült elérni a vizsgált reakcióban.

[1] Wen, J.; Wang, F.; Zhang, X. Chem.Soc.Rev. 2021, 50, 3211.

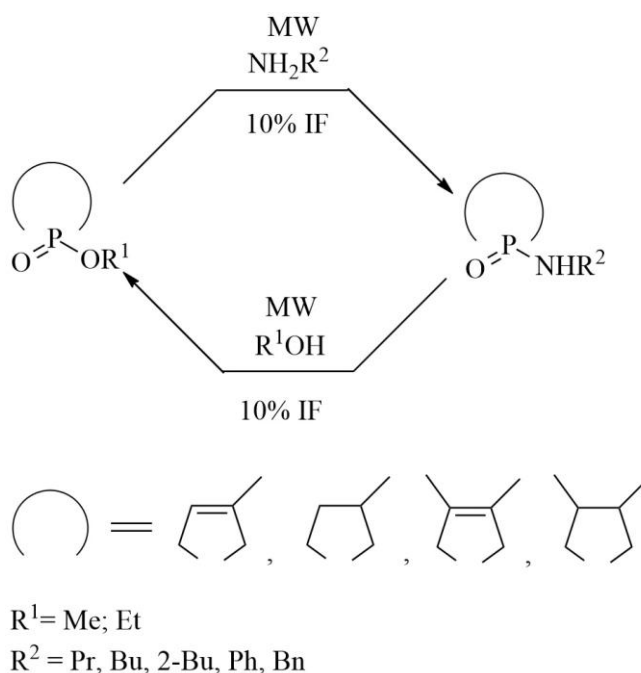
[2] Gebbing, R. J. M. K.; Moret, M-E. (2019) Non-noble metal catalysis: molecular approaches and reactions, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, Germany.

Foszfinsavszármazékok mikrohullámmal segített “klórmentes” szintézise

Kulcsszavak: zöldkémia; P-észterek; P-amidok; halogénmentes; átalakítás

A XXI. század egyik legégetőbb kérdése a fenntarthatóság. A vegyiparral szemben azonban régóta állnak azon állítások, hogy az egyik legkörnyezetszennyezőbb iparág. Az utóbbi években elindult a kémiai szektor úgynevezett „zöldítése”, melynek során igyekeznek a szakemberek környezetbarát és fenntartható alternatívákat találni. Ilyen alternatívák lehetnek a mikrohullámú technika, valamint az ionfolyadékok.

Dolgozatomban a szerves kémia egy egyelőre még felfedezetlennek mondható területén, a gyűrűs P-észterek és P-amidok egymásba alakításán szeretném bemutatni ezen zöldkémiai technikák szerepét. Alkoxycsoportot tartalmazó gyűrűs foszfinátok aminolízisét tanulmányoztam különböző aminokkal hagyományos, valamint mikrohullámú körülmények között, ionfolyadék katalizátor hozzáadásával, illetve anélkül. Az ellentétes folyamatot, azaz a foszfinsav-amidok alkoholokkal való reakcióját is vizsgáltam, szintén hagyományos, illetve mikrohullámú környezetben ionfolyadék jelenlétében. A leghatékonyabb szintézis érdekében megfigyeltem a hőmérséklet, a reakcióidő és az ionosfolyadék változtatásának konverzióra gyakorolt hatását, így optimalizálva a körülményeket.



UNYI ZSOMBOR
Gyógyszervegyész-mérnöki mesterszak (MSc)
BSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Cserép Balázs Gergely
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK

Aktiválható, makrociklusos tetrazinok szintézise

Kulcsszavak: tetrazin, makrociklus, aktiválhatóság, szerves kémiai szintézis

Kutatómunkám során tetrazin alapú makrociklusokat állítottam elő, melyek kezdetben nem vihetők IEDDA (fordított elektronigényű Diels–Alder) reakcióba transz-ciklookténnel. Egy specifikus külső (fény) vagy belső (enzim) hatásra a makrociklus felnyílik, aktiválódik és így újra gyors reakcióba tud lépni transz-ciklookténnel. Az IEDDA reakció ilyen módon történő gátlása azért előnyös, mert az úgynevezett click-to-release transz-ciklookténhez kötött molekula (például egy gyógyszer) csak a tetrazinnal való reakció után hasad le, így a külső vagy belső hatás tudja biztosítani a kívánt molekula időben és térben célzott felszabadulását.

Szerves kémia III.

BESE CINTIA
Vegyésmérnök
MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK

α -Hidroxi-benzilfoszfonátok reakciója dialkil-acetiléndikarboxiláttal

Kulcsszavak: α -hidroxifoszfonát; bioaktivitás; α -aminofoszfonát; 2D-NMR; szerves szintézis

Az α -hidroxifoszfonátok jelentőségét bioaktivitásuk szempontjából már számos területen felfedezték, így ismertek baktérium-, vírus-, gomba-, és rovarölő tulajdonságai, de beszámoltak már antioxidáns és citotoxikus hatásairól is. Mindezen tulajdonságok enzim-inhibíciós képességével függnek össze. Kutatómunkám során szubsztituált benzaldehidek és dialkil-foszfitok reakciójából nyert α -hidroxibenzilfoszfonátok addíciós reakcióját valósítottuk meg dimetil- és dietil-acetiléndikarboxilát vegyületekkel 1,4-diazabiciklo[2.2.2]oktán (DABCO) katalizátor jelenlétében. A reakció körülményeit optimáltuk, a kapott nyers termékeket kromatográfiásan tisztítottuk, majd különböző analitikai vizsgálatokkal vizsgáltuk és elemeztük (NMR, LC-MS). A keletkezett termék E/Z izomer keverék volt, melyek pontos arányát 2D NMR segítségével határoztuk meg. A termékeket katalitikusan hidrogéneztük, mely során diasztereomer elegyeket kaptunk. A kapott adduktokat bioaktivitási vizsgálatra küldtük, melyek eredményeire még várunk. Munkám folytatásaként hasonló kísérletekbe kezdünk α -aminofoszfonát vegyületekkel is.

FAJKA LILLA
kémia
BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Orgován Zoltán
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Ábrányi-Balogh Péter
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK

Fotoaktiválható fragmensek előállítása és gyógyszerkémiiai alkalmazása

Kulcsszavak: gyógyszerkémia, fragmens alapú gyógyszertervezés

A fragmens alapú gyógyszertervezés egyik legnagyobb kihívása a találatok észlelése, amelyet a gyenge fragmens-fehérje kölcsönhatások okoznak. Az észlelés megkönnyítésére elektrofil vegyülettárakat alkottak meg, a fragmensekhez kapcsolt reaktív kötőelem kovalens kötést tud kialakítani az aminosavak oldalláncaival. Az így létrejött kölcsönhatás miatt nem szükséges nagy érzékenységű módszerek használata, hanem folyadékkromatográfiával kapcsolt tömegspektrometriát lehet alkalmazni. Tudományos diákköri munkám során egy fotoaktiválható vegyülettár előállítása volt a célom, amelyet különböző fehérjecélpontok ellen terveztem tesztelni. A fotoaktiválható vegyülettárak előnye, ellentétben a hagyományos elektrofil vegyülettárakkal, hogy nem csak olyan fehérjecélpontok ellen alkalmazhatóak, amelyek kötőhelye közelében támadható nukleofil aminosavat, például ciszteint tartalmaznak, így kiszélesíthető a célozható fehérjék köre. A 100 tagú vegyülettár tagjai a kutatócsoport által megalkotott fragmens optimalizálási módszer által lettek megtervezve, hogy a fragmensek hatékonyan lefedjék a kémiai teret. A vegyülettárat egy leukémiás folyamatokban résztvevő fehérjecélpont, a STAT5B (Signal transducer and activator of transcription) fehérje N-terminálisán teszteltük. A jelölés során 24 találatot kaptunk, azonban a konverzió alacsonynak bizonyult, amelyet a kovalens kötés hatékonyságát javító úgynevezett fotokatalizátor használatával sikerült növelni. A két legjobb találat esetében meghatározták a kötési helyet, amely az N-terminális dimerizációjában részt vevő felület közelében található. A kutatómunkám során egy olyan vegyülettárat állítottam elő, amely megkönnyítette a találatok észlelését, illetve több találatot is adott a STAT5B N-terminálisával szemben, amelynek korábban nem volt ismert liganduma.

GACOV DONÁT ADRIÁN

Kémia

MSc, 3. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

Témavezetők:

Dr. Ispán Dávid

tudományos segédmunkatárs, PE MK

Skodáné Dr. Földes Rita

egyetemi tanár, PE MK

Oxazolidinon származékok előállítása szén-dioxid C1 építőelemként történő felhasználásával ionfolyadék oldószerben

Kulcsszavak: karboxilatív ciklizáció; keresztkapcsolás; visszaforgathatóság

A farmakológiai szempontból jelentős 2-oxazolidinon vázzal rendelkező molekulák előállításának újonnan elterjedt, ígéretes módszerét a propargil-amin származékok szén-dioxiddal történő karboxilatív gyűrűzárása nyújtja. Az utóbbi években számos olyan eljárást fejlesztettek ki, melyek átmenetifém-katalizátorokon és/vagy szerves szuperbázisokon alapulnak. Legtöbb esetben azonban érelyes körülményekre, bonyolult szerkezetű és drága katalizátorokra, valamint olyan poláris oldószer alkalmazására (pl. DMSO) van szükség, melyből a katalizátor/bázis nem, vagy nehezen nyerhető vissza, így a módszer nagy környezetterheléssel jár. Ilyen problémák jó megoldása lehet, ha oldószerként imidazólium-alapú ionfolyadékokat alkalmazunk, amelyekről bizonyított, hogy szerves bázis jelenlétében kemisorpció révén a szén-dioxid aktiválását elősegítik. Továbbá nem csak alkalmas hordozói lehetnek az átmenetifém-katalizátoroknak, de aktivitásuk növelésében is szerepet játszanak.

Kutatómunkám során azt vizsgáltam, hogy a szén-dioxid beépítése propargil-amin származékba megvalósítható-e ionfolyadék oldószerben. Az N-benzil-propargil-amin mint szubsztrátum felhasználásával optimalizáltam a gyűrűzáráshoz szükséges körülményeket és megállapítottam, hogy egyes katalizátor-bázis párok szinergikus hatása elősegíti a 2-oxazolidinon származék keletkezését. Bizonyítottam, hogy a kidolgozott katalitikus rendszer több cikluson keresztül alkalmazható a termék előállítására. A legalkalmasabbnak talált reakciókörülmények között további 3-as pozícióban helyettesített 5-metilén-oxazolidin-2-onokat állítottam elő. Palládiumkatalizátor és jódaromás vegyületek jelenlétében a karboxilatív ciklizációt C-C kapcsolás is kísérheti, amelynek vizsgálata kutatómunkám másik részét képezi. A kezdeti eredmények alapján a reakció során termékelegy keletkezik, de a reakciókörülmények változtatásával a szelektivitás növelhető. A termékek izolálása és elválasztása után a főtermék szerkezetét NMR-spektroszkópiai mérésekkel sikerült igazolnom.

GARAMI KRISTÓF
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Ábrányi-Balogh Péter
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK

Kovalens inhibitorok fejlesztése H3 receptorra fragmens alapú megközelítéssel

Kulcsszavak: kovalens; fragmens; heterociklus; hisztamin

Kutatócsoportunk egyik érdeklődési területe a fragmens alapú kovalens inhibitorok fejlesztése, így a közelmúltban nagyszámú heterociklusos elektrofil fragmens előállítását, jellemzését, illetve biológiai vizsgálatát végezték el különböző fehérjecélpontokon. Dolgozatom témája a fent említett elektrofil fragmenskönyvtárak vizsgálata a hisztamin H3 és H4 receptorokon nemzetközi partnereink segítségével, majd az eredmények alapján kovalens modulátorok tervezése és szintézise. Kiválasztottunk mintegy 140 heterociklusos elektrofil fragmenst, amelyek kis méretűek, öt- és hattagú nitrogéntartalmú gyűrűket és halogén, nitril, vinil és acetilén elektrofil kötőelemeket tartalmaznak. Ezek a vegyületek a nukleofil cisztein aminosavat célozzák, amely megtalálható a H3 és H4 receptorok aktív centrumában, így kovalens módosításával várhatóan a receptorok működése befolyásolható. A nemzetközi együttműködő partnereink segítségével elvégzett biokémiai szűrés során több fragmenstalálatot azonosítottunk, kötődésüket és H3/H4 szelektivitásukat jellemeztük.

Kiválasztottuk a legjobban kötődő és leginkább szelektív fragmens, majd a hatékonyság növelése érdekében irodalmi megfontolások alapján az immepip ismert nem kovalens H3 agonistát módosítottuk, illetve több hasonló szerkezetet állítottunk elő több lépéses szintézisekben. Így valóban a fragmensnél jobb affinitású, és feltételezhetően kovalens vezérmolekulához jutottunk. A kovalens kötőelem szerepét és a háromdimenziós szerkezet szükségességét további vegyületek szintézisével erősítettük meg. Partnereink meghatározták a célmolekulánk funkcionális aktivitását, és molekulamodellezéssel adtunk magyarázatot a vegyület kötődésére, szelektivitására és funkciójára.

HALMAI MÓNIKA
Vegyésmérnöki mesterképzési szak
MSc, 1. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Keglevich Péter
adjunktus, BME VBK
Dr. Hazai László
egyetemi magántanár, BME VBK

Sejtsztódásgátló hatású, foszfintartalmú vindolin- és krizinszármazékok előállítása

Kulcsszavak: vindolin; krizin; tumorellenes; hibrid; foszfin

A vindolin egy Vinca alkaloid monomer, mely önmagában nem rendelkezik antiproliferatív hatással, viszont megfelelő farmakofórokkal kapcsolva alkalmas lehet a rák kezelésére. A flavonoidok a természetben gyakran előforduló növényi metabolitok, melyek széles spektrumú biológiai aktivitással rendelkeznek, köztük tumorellenes hatással. Egyik képviselőjük a krizin (5,7-dihydroxiflavon), mely képes apoptózist okozni a sejtekben [1]. Potenciális farmakofórok lehetnek a trifenilfoszfin és származékai. Korábban kimutatták, hogy a trifenilfoszfin nagy lipofilitásából adódóan könnyen átjuthat a sejtmembránon és felhalmozódhat, mely alkalmassá teheti a daganatos sejtek kezelésére [2].

Munkám során célom volt olyan új, foszfinszármazékokkal kapcsolt vindolin- és krizintartalmú hibridek előállítása, melyek daganatellenes hatásúak, és esetlegesen szelektívebbek vagy kevésbé mérgezőek elődeiknél. A farmakofórokat a vindolin 17-es helyzetébe terveztem kapcsolni linkerek segítségével, így elsőként az ott lévő észtercsoportot távolítottam el hidrolízissel. Ezt követően a 17-dezacetilvindolint acileztem brómkarbonsavakkal. A szerkezet-hatás összefüggés vizsgálata érdekében két egyenes szénláncú és két merevebb linker kialakítását céloztam meg. Végül az egyenes szénláncú, flexibilis linkert tartalmazó vegyületeket 6 foszfinszármazékkal, a merevebb linkereket tartalmazó intermediereket pedig trifenilfoszfinnal kapcsoltam. A krizint elsőként 1,4-dibrómbutánnal mono-O-alkileztem a 7-es helyzetben a linker kialakítása érdekében. A keletkezett intermediert végül 8 foszfinszármazékkal reagáltattam.

Összességében sikerült 21 új hibrid molekulát előállítanom. A vegyületeket az amerikai Országos Rákkutató Intézetben (NCI) vizsgálták meg, mely során több vegyület is kiugró sejtsztódásgátló hatást mutatott. Eredményeim felhasználásával egy tudományos közlemény is született.

[1] Mayer, S.; Nagy, N.; Keglevich, P.; Szigetvári, Á.; Dékány, M.; Szántay, C. Jr.; Hazai, L. Synthesis of Novel Vindoline-Chrysin Hybrids, *Chem. Biodivers.*, 2022, 19, e202100725.

[2] Tsepaeva, O. V.; Nemtarev, A. V.; Abdullin, T. I.; Grigor'eva, L.; R., Kuznetsova, E. V.; Akhmadishina, R.; A., Mironov, V. F. Design, Synthesis, and Cancer Cell Growth Inhibitory Activity of Triphenylphosphonium Derivatives of the Triterpenoid Betulin. *J. Nat. Prod.*, 2017, 80, 2232–2239.

NEMESKÉRI DÁNIEL

Fizika

BSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezetők:
Dr. Soós Tibor
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK
Szobota András
tudományos segédmunkatárs, HUN-REN TTK

Hosszú szénláncú kontakt feromonok iteratív sztereoselektív szintézise

Kulcsszavak: Feromonok; Aszimmetrikus szintézis; Ciklohexanon; Láncbővítési stratégia; Fotoredox katalízis

Sok esetben a rovarferomonok kémiaileg egyszerű szerkezetűek, sztereoselektív szintézisük gyakran kihívásokkal teli, előállításukra kevés általános módszer létezik még a hasonló vegyületek esetén is. A kutatásomnak az volt a célja, hogy hosszú szénláncú kontakt feromonok aszimmetrikus szintéziséhez általános módszert dolgozzunk ki. A megközelítésünk ciklohexanon építőelemek segítségével végrehajtandó láncbővítési stratégiát alkalmaz, amely során megfelelő funkcionálalással királis információ bevitelére is lehetőség adódik.

A javasolt iteratív reakciósor a ciklohexanon platformból kiindulva minden iterációs ciklusban négy szénatommal bővíti a láncot. A meghatározó reakciólépések a fotoredox katalizátorral történő gyűrűnyitás, majd az így kapott származék Norrish II reakcióval történő alkénné alakítása.

A kutatásom során a vázolt iteratív feromon szintézis startégia megvalósíthatóságának vizsgálata volt a célom. Továbbá a természetes pulegonból kiindulva megfelelő, a királis információ beviteléhez szükséges vegyületcsalád kialakítása, illetve feromon példavegyületek szintézise.

RÁBAI KÁROLY TAMÁS

Kémia

BSc, 5. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezető:

Dr. Mező Gábor

tudományos tanácsadó, ELTE TTK

HER2-pozitív emlőtumor célzására alkalmas biokonjugátumok fejlesztése

Kulcsszavak: HER2+ tumor; célzott tumorterápia; peptid-hatóanyag konjugátum; in vitro citosztázis

Napjainkban a rákos megbetegedések okozzák a második legtöbb halálesetet világszerte a WHO statisztikái szerint. Különösen sok ember esik áldozatul a mellráknak, ráadásul gyakran az igen agresszív HER2-pozitív változatnak. A közép-európai régióban és kifejezetten Magyarországon pedig az esetszámok rendkívül magasak. [1] Az utóbbi időben így rendkívül fontossá váltak a HER2-pozitív változat gyógyítására irányuló kutatások. Az elmúlt években előtérbe kerültek az irányított tumorterápiás megoldások, amelyek azon alapulnak, hogy a tumorelles szereket egy irányítómolekula segítségével nagy szelektivitással a tumorsejtekhez juttatják. Biri-Kovács és munkatársai HER2 receptort specifikusan felismerő peptidet választottak ki (KCCYSL-NH₂) az irodalomban leírt fág-könyvtárból. [2] A peptid és analógjainak szintézisével vizsgálták a molekulában található két cisztein szerepét és szükségességét a receptorhoz való kötődésben. Munkájuk során az előállított szekvenciák közül a KAAAYSLGYYNPT-NH₂ bizonyult a leghatásosabbnak.

Munkám során a fent leírt eredményeket alapul véve szintetizáltam eddig le nem írt peptidkonjugátumokat. Tizenkettő előállítását végeztem el, melyek a fent említett két szekvencia mellett a KAAAYSL-NH₂ peptiden alapultak. A hexamer peptideket három módon konjugáltam daunomicinhez (Dau). Az első esetben közvetlenül a peptidlánc végén lévő α -aminocsoportra kapcsoltam aminooxiacetsavat (Aoa), amelyen keresztül oxim-kötéssel kötöttem a Dau-t. A másik két módszerben enzimlabilis távtartókat (GFLG vagy LRRY) építettem a peptid N-terminálisára, ezekre kapcsoltam az Aoa-t, majd rá a Dau-t. A dodekamer esetén vizsgáltam a szekvenciában található lizin oldalláncán lévő aminocsoport szerepét. A lizint ezért egy esetben vajsavval acileztem, egy esetben pedig norleucinra cseréltem. Az így előállt három peptidet fejenként két-két módszerrel konjugáltam Dau-hoz. Egyik esetben közvetlenül Aoa-n keresztül, a másik esetben pedig LRRY távtartóra épített Aoa-n keresztül. Az előállított peptideket és konjugátumokat preparatív RP-HPLC-vel tisztítottam, tömegspektrometriával és analitikai HPLC-vel azonosítottam és jellemeztem. A konjugátumok in vitro citosztatikus hatását MTT-teszt segítségével vizsgáljuk, in vitro sejtbejutási képességüket pedig áramlásos citometriával és konfokális mikroszkópiával határozzuk meg.

[1] Cancer Today. <https://gco.iarc.who.int/today/>

[2] Biri-Kovács, B. et al. Biomolecules 10, 183 (2020)

SZABÓ BENCE
Vegyésmérnöki szak
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Cseri Levente
senior vegyész, BrainVisionCenter Nonprofit Kft.
Dr. Kupai József
egyetemi docens, BME VBK

Fotoaktiválható idegnövekedési faktor mimetikumok szintézise és fotokémiai vizsgálata

Kulcsszavak: fotolabilis védőcsoport; idegnövekedési faktor; bioaktív anyagok; fotolízis

A központi idegrendszer érintő sérülések, betegségek világszerte több millió embert érintenek. Kutatócsoportunk célja, hogy ezen kondíciók kezelésére alkalmas fénystimuláción alapuló terápiás eljárásokat dolgozzunk ki. Szervezetünkben az idegsejtek fejlődése, túlélése szempontjából számos vegyület játszik meghatározó szerepet, ezek közül az egyik legfontosabb az idegnövekedési faktor (NGF) fehérje. Kutatási munkám során céloom olyan kismolekulás vegyületek előállítása volt, melyekről korábban már megmutatták, hogy képesek az NGF-hez hasonló biológiai hatást kifejteni. Ezeken kívül az irodalomban ismert, széles körben használt fotolabilis védőcsoportok szintézisét is megvalósítottam. Végül az NGF mimetikumok és fotolabilis védőcsoportok sikeres szintézisét követően, ezek kapcsolása révén öt új "cagelt" vegyületet állítottam elő. Annak érdekében, hogy a későbbi kísérletek során hatékonyan tudjuk használni az előállított vegyületeket, vizsgáltam azok fotokémiai és spektroszkópiai tulajdonságait is. A molekulák fotolízisére jellemző kvantumhatékonyság mérésére egy új eljárást alkalmaztam, mely során a 4,4'-dimetilazobenzolt használtam referencia anyagként, annak fény hatására lejátszódó cisz-transz izomerizációs folyamatait felhasználva. A kapott molekulák segítségével több olyan biológiai kísérletet tervezünk a jövőben megvalósítani, melyek során az aktív vegyületek felszabadulásának tér- és időbeli szabályozását fény segítségével érjük el. Ezen stratégia lehetőséget nyújthat az axonok irányított növesztésére, valamint idegsérülések helyreállítására az élő sejtek károsítása nélkül.

SZEIP JUDIT
Vegyészmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Bell Evelin
egyetemi adjunktus, BME VBK
Dr. Németh Krisztina
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Cserép Gergely
tudományos munkatárs, HUN-REN TTK
Dr. Kele Péter
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK

Hipoxia aktivált fényérzékeny védőcsoportok tervezése és szintézise

Kulcsszavak: célzott hatóanyag leadás; hipoxia; fotolabilis vegyületek; totál szintézis

A célzott hatóanyag-leadó rendszerek útján megvalósított gyógymódok a rákos megbetegedések esetében napjainkban is aktívan kutatott terület. A módszer célja, hogy eljuttathassuk a hatóanyagot közvetlenül a rákos sejtekhez a szervezetben úgy, hogy az csak azokon fejtse ki hatását, miközben minél kevesebb mellékhatás jelentkezik.

Munkám során olyan feltételesen fotoaktiválható vegyületek létrehozása volt a célom, amik csak hipoxiás (oxigénszegény) környezetben képesek aktiválódni, majd ez után tudnak reagálni fényel való besugárzásra és elengedni a hozzájuk kapcsolt hatóanyagot. A szolid tumorok belsejében kialakuló hipoxiás környezet kihasználása kedvező lehetőséget nyújt, mivel egyértelmű kapcsolat áll fent a nitroreduktáz enzim túltermelése és a hipoxia mértéke között, így az enzim specifikus reakciója során effektíven megvalósítható a konjugátum aktiválódása. Ezt a módszert kombináltam fotolabilis (fényel eltávolítható) védőcsoportok alkalmazásával. Az így létrehozott, feltételesen aktiválható konjugátum inaktív, a hatóanyag nem képes kifejteni tumorelles hatását, és ezzel párhuzamosan a negatív mellékhatásai sem jelentkeznek. Azonban az enzim aktiválás után, a megfelelő hullámhosszú fényel történő bevilágítás során a hatóanyag felszabadul, és újra citotoxikussá válik. Munkám során az aktiválási és felszabadulási folyamatok egyszerűbb nyomon követésére a hatóanyagot fluorogén modellvegyülettel helyettesítettem.

TÓTH SZIGFRID BOLDIZSÁR
Vegyéssz mérnök
BSc, 8. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK
Szalai Zsuzsanna
PhD hallgató, BME VBK

Hidroxi-biszfoszfónát típusú vegyületek szintézise Pudovik-reakcióval

Kulcsszavak: foszforkémia; osteoporosis; dronsavak; egykristály röntgen diffrakció; in vitro citosztázis assay

A biszfoszfonsav-származékok az osteoporosis és a csontok daganatos megbetegedéseinek gyógyszeres kezelésében igen hatásos vegyületnek számítanak, ezért minél hatékonyabb előállításuk kulcsfontosságú feladat.

Az alfa-oxofoszfónátok és dialkil-foszfítok vagy szekunder foszfin-oxidok Pudovik-reakciójával hidroximetilénbiszfoszfónátokat állíthatunk elő, amelyekből hidrolízissel nyerhetők az értékes dronsavak. A reakció során az addukt képződést követheti egy átrendeződés, ami foszfónát-foszfát terméket eredményez, ezért a kívánt termék előállítása optimalást igényel.

Kutatómunkám során alfa-oxofoszfónátokat képeztem acetyl- és benzoil-klorid, trimetyl- és trietyl-foszfittal történő reagáltatásával. Az előállított alapanyagokat dialkil-foszfítokkal (dimetyl; dietyl; dibutyl) és diarilfoszfin-oxidokkal (aryl= fenyl; 4-metylfenyl; 3,5-dimetylfenyl) tovább reagáltattam dietyl-amin jelenlétében. Változtatva a hőmérsékletet, reakcióidőt és molarányokat vizsgáltam az addukt és átrendeződött származékának képződési arányát. A módszerrel több még az irodalomban nem jellemzett származékot állítottam elő.

Az előállított vegyületek citotoxicitási vizsgálata négy különböző sejtvonalon folyt. (humán emlő adenokarcinóma, prosztatata kissejtes karcinóma, tüdő laphámsejtes karcinóma, epidermoid karcinóma sejtvonal). A kristályos formában kivált vegyületeket pedig egykristály röntgendiffrakciós analízissel vizsgáltattuk. Az újszerű vegyületeket teljeskörűen jellemeztük, közülük néhány aromás egységgel rendelkező átrendeződött származék jelentős sejtpusztító hatást mutatott.

Szerves kémia IV.

BABCSÁNYI ISTVÁN JÁNOS

Kémia

MSc, 3. félév

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Témavezetők:

Sóvári Bence

PhD hallgató, HUN-REN TTK

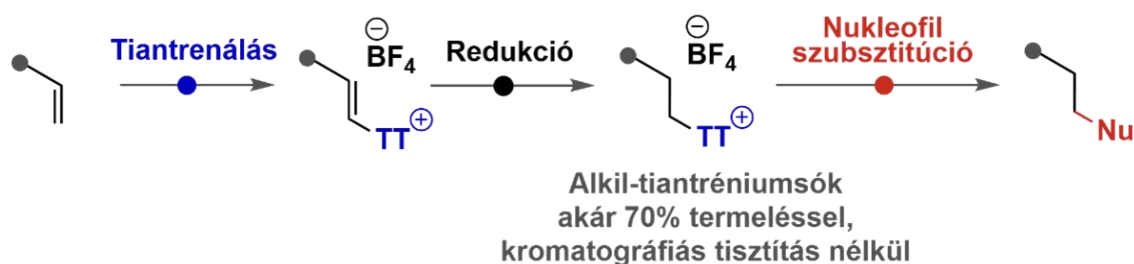
Dr. Varga Szilárd

tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK

Alkil-tiantréniumsók újszerű szintézise és továbbalakításaik

Kulcsszavak: anti-Markovnyikov; hidrofunkcionalizáció; tiantrén; olefinek

Az olefinek addíciós reakciói hagyományosan hasznos átalakításnak számítanak heteroatomok, új funkciók beépítésekor. Szintetikus kihívást jelent azonban az addíciók szelektivitásának kontrollja, különösen a poláris addíciókban nem kedvezményezett anti-Markovnyikov-termékek előállítására alkalmas módszerek keresése. Az ismert eljárásoknak hátrányai az alkalmazott drága átmenetifém-katalizátorok és az alkalmazható szubsztrátok, illetve nukleofil reagensek szűk köre. Az egyik alternatívát a gyökös intermedieren keresztül lejátszódó addíciók jelentik, azonban ezek is gyakran nehezen hozzáférhető fotokatalizátorokat igényelnek. E megfontolások alapján komoly szintetikus jelentőséggel bír a fém- és katalizátormentes módszerek fejlesztése.



Munkám során nem aktivált olefinek regioszelektív funkcionálzására dolgoztam ki új eljárást. Ismert vegyületcsaládot, alkenil-tiantréniumsókat alkalmazó stratégiámban redukció révén állítottam elő korábban nehezen hozzáférhető alkil-tiantréniumsók széles körét.

E termékek kiváló elektrofil C(sp³) szintonok, nukleofilokkal szubsztitúciós reakcióba vihetőek, akár heteroatom beépülését, akár lánchosszabbítást eredményezve. A bruttó folyamat tehát olefinek formális anti-Markovnyikov addíciója.

HEGEDŰS MÁRTON
Középiskolai hallgató

Kecskeméti Református Gimnázium

Témavezetők:
Bogner Marcell Márk
mentor, BME VBK
Tóth Imre
felkészítő tanár, mentor, Kecskeméti Református Gimnázium

[2]katenán - Együtt vagy külön?

Kulcsszavak: fotokapcsoló; katenán; molekuláris gépek;

Kutatási munkánk a szintetikus szerves kémián belül egy szimmetrikus fotokapcsolóval funkcionizált [2]katenán rendszer szintézise és karakterizálása. A katenánok jellemzően két vagy több gyűrű alakú makrociklusból álló molekulák, amelyek nem kémiai, hanem fizikai interlokációval kapcsolódnak egymáshoz, lehetővé téve azok szabad rotációját. Az alacsony gyűrűtagszámú [2]katenánok célzott szintézisével a gyűrűk közötti rotáció csökkentése következtében stabil konformerek alakulhatnak ki, amit egy fotokapcsolóval funkcionizált [2]katenán rendszer esetében lehetne kihasználni és irányított molekuláris mozgást elérni. A katenánt templát-alapú szintézis út alkalmazásával végezzük, figyelembe véve a glikol láncok optimális hosszát, amit számításkémiai módszerekkel határoztunk meg. A tervezett "fotokatenán" fotoizomerizációval strukturális változásokon mehet keresztül, potenciálisan alkalmazható molekuláris gépekben, elektronikákban vagy farmakológiában.

JAKAB MÁTÉ
Vegyésmérnöki
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. London Gábor
tudományos főmunkatárs, HUN-REN TTK
Meiszter Enikő
PhD-hallgató, HUN-REN TTK

Monobenzo-pentalén kromofórok szerkezeti hangolása fotovoltikus alkalmazásokhoz

Kulcsszavak: antiaromás, kromofórok, singlet exciton bomlás, pentalén

A szinglet exciton bomlás egy, még ma is kevés irodalmi háttérrel rendelkező, „töltésszorzó” folyamat, mely napelemek hatékonyságnövelését teheti lehetővé. Ennek során egy szinglet gerjesztett állapotú elektron (S1) átalakul két alacsonyabb energiájú triplet gerjesztett állapotú (T1) elektron keletkezik. A szinglet bomlásra alkalmas molekulák esetén, azok gerjesztett állapotbeli energiaszintjei [E(S1), E(T1)] között, fenn kell állnia az $E(S1) \geq 2E(T1)$ relációnak. Az egyik antiaromás rendszer, amely alkalmas lehet a jelenség produkálására, kvantumkémiai számítások alapján, a monobenzo-pentalén szerkezet. A kutatás során a monobenzo-pentalén alapvázat különböző többgyűrűs aromás és heteroaromás rendszerekkel szubsztituáljuk. Az új monobenzo-pentalének szintézisének túl, a különböző szubsztituensek által kiváltott elektronikai változásokat UV-Vis és ¹H-NMR spektroszkópiával térképezzük fel. Továbbá UV-Vis spektrofotométer segítségével, hőmérséklet és különböző hullámhosszúságú fényvel való besugárzás mellett, a különbözőképpen szubsztituált származékok stabilitását is vizsgáljuk. Az ¹H-NMR és az UV-Vis spektrumok összehasonlító elemzése alapján látszik, hogy a monobenzo-pentalén-vázhoz kapcsolt különböző aromás és heteroaromás szubsztituensek nem változtatják meg jelentősen a váz elektronikus szerkezetét. Ezek alapján a monobenzo-pentalén váz tulajdonságai hangolhatók a közvetlen kapcsolódó szubsztituensek változtatásával, úgy, hogy a váz megőrzi az eddigi kutatások során feltárt tulajdonságait a szinglet exciton bomlást illetően. A stabilitási mérésekből pedig kiderült, hogy a monobenzo-pentalének szubsztituáltsági foka, illetve a szubsztituensek szerkezete befolyásolja ezen molekulák stabilitását. A kapott eredmények biztatóak a monobenzo-pentalén származékok szinglet exciton bomláson alapuló fotovoltikus rendszerekben való alkalmazására.

KIS ANNA SÁRA
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Keglevich György
egyetemi tanár, BME VBK
Szalai Zsuzsanna
PhD hallgató, BME VBK

α -Hidroxi-alkilfoszfonátok szintézise, rezolválása és reakciói

Kulcsszavak: környezetbarát, foszforvegyületek, oldószermentes, bioaktivitás, mikrohullám

Az α -hidroxifoszfonátok jelentős biológiai aktivitással és széleskörű felhasználási lehetőséggel rendelkezhetnek. Mivel enzim inhibitorok, antibiotikus, vírus- gomba- és rákellenes hatásuk lehet. [1,2]

A reakciók megvalósítása során hangsúlyt fektettem a zöld kémia alapelveinek betartására, és a fenntarthatóságra. Törekedtem atomhatékony reakciók alkalmazására, amilyen például a Pudovik-reakció is. Mikrohullámú (MW) technikát is használtam a szintézisek során, amely nem igényel oldószert. Egy másik vonzó lehetőség a szilárd fázison történő szintézis volt. Kutatómunkám során α -hidroxi-alkilfoszfonátok és α -hidroxi-alkilfoszfin-oxidok előállítását valósítottam meg acetaldehidből és acetontól kiindulva különböző $>P(O)H$ -reagensekkel, Pudovik-reakcióban. A racémátok esetében 3 esetben végeztem el a diasztereomer sóképzéses rezolválást. A szintéziseknél alkalmaztam folyadékfázisú eljárást, Al_2O_3/KF szilárd fázisú szintézist és Na_2CO_3 katalizált MW technikát is. Továbbá O-acilezési reakciókat is végeztem, illetve egy metánszulfoniloxi-származékot is állítottam elő, amelyből biszfoszfonátot képeztem.

A szintetizált α -hidroxifoszfonátokat egy részét citotoxicitás vizsgálatnak vetettünk alá, PANC-1 (hasnyálmirigy adenokarcinóma) és U266 (mielóma multiplex) sejtvonalakon. Ezeket vizsgálatokat együttműködő partnereink végezték. A bioaktivitás vizsgálatok alapján a vegyületek a rákos sejteket kis százalékban pusztították el, így kismértékű citotoxicitást mutattak.

KISFALUDI PÉTER
Gyógyszervegyész-mérnök
MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Tóth Tünde
egyetemi docens, BME VBK
Dr. Golcs Ádám
posztdoktor, BME VBK

Egy bisz(akridino)-koronaéter a spermin bioszintézis oligoaminjainak felismerésére

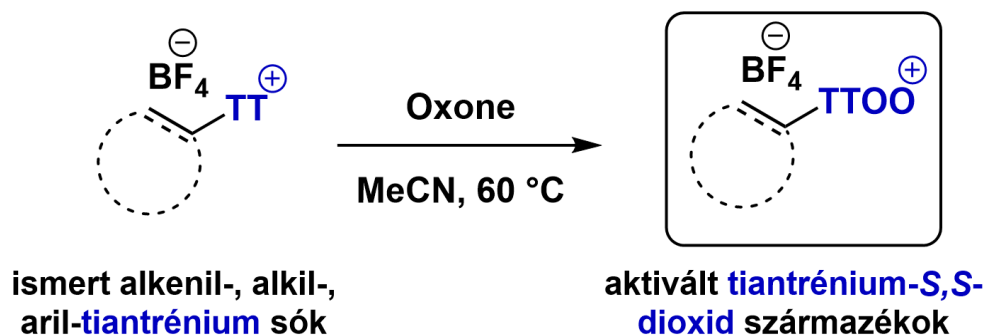
Kulcsszavak: spermin; spermidin; fluoreszcencia; kemoszenzor; koronaéter

Az oligoaminok a sejtek anyagcseréjében rendkívül sokféle biológiai funkciót látnak el (pl. a Ca^{2+} -beáramlás, neuronális nitrogén-monoxid-szintáz, membránpotenciál és Na^+ , K^+ -ATPáz aktivitás szabályozása a szinaptoszómákban stb.). Emellett élettartam-növelő anyagokként is működnek, valamint meghatározó szerepet játszanak az autofágiában, a sejtnövekedésben, a proliferációban és a sejthalálban, míg szabályozási folyamataik kulcsfontosságúak számos rákos megbetegedés esetében. Ennek ellenéreműködési mechanizmusuk megértése még csak most kezdődött el. A bioszenzoros módszerek mellett csak néhány egyszerű, kismolekulás teszt áll rendelkezésre az oligoaminok szelektív, de reverzibilis nyomon követésére vagy fluoreszcens jelölésére. Ezen megfontolások alapján állítottunk elő egy új bisz(akridino)-koronaétert, mint biogén oligoaminok vizsgálatára alkalmazható szenzormolekulát. A szenzormolekula szelektíven képes megkülönböztetni az oligoaminokat az alifás mono- és diaminoanalogonoktól, miközben reverzibilis 1:2 sztöchiometriájú (gazdamolekula-oligoamin) komplexképződést mutat, melyet fluoreszcencia intenzitásnövekedés kísér. A szenzormolekula oligoamin-felismerő tulajdonságainak vizsgálata céljából számítógépes szimuláción alapuló molekuláris dokkolást és titrálási kísérleteken alapuló regressziós módszereket alkalmaztunk. Az új fluoreszcens szenzormolekula releváns potenciált hordoz az oligoaminrendszerek molekuláris szintű vizsgálata terén (sejtfelvétel, transzport, rákos folyamatok előrehaladása stb.), így számos alkalmazás kidolgozásához járulhat hozzá a későbbiekben.

Tiantréniumsók oxidatív aktiválása és reaktivitásuk vizsgálata

Kulcsszavak: olefinek; tiantrén; aktiválás; C-H funkcionalizáció

Mind az olefinek, mind az aromás vegyületek regio- és kemoszelektív C-H funkcionalizációi komoly szintetikus jelentőséggel bírnak. Egy hatékony és jól kiterjeszhető módszer a tiantrenálás, amellyel számos különböző elektrofil szinton állítható elő nem aktivált kiindulási anyagokból. Munkám során sikeresen kidolgoztam és optimalizáltam az eddig ismeretlen oxidatív módon aktivált alkenil-, alkil- és aril-tiantréniumsók általános szintézisét. Ezáltal az umpolung C-H aktiválásra alkalmas tiantréniumsókból S-oxidáció útján még elektronhiányosabb szintonok állíthatók elő. A megnövekedett aktivitás következtében enyhébb körülmények és kevésbé reaktív reakciópartnerek mellett is megvalósíthatóak ismert típusú átalakítások. Az új eljárás enyhe körülmények és könnyen hozzáférhető reagensek segítségével általánosan alkalmazható módszer, amely jelentősen különböző elektronikus tulajdonságú szubsztrátokat tolerált. Az előállított aktivált alkenil-tiantréniumsót megkíséreltem a kinetikailag kedvezett Z-allilezésben felhasználni, azonban az aktiválási módszer olyan mértékű növekedést okozott a reaktivásban, amely már nem tette lehetővé a reakció sztereoselektivitásának kontrollját alacsony hőmérsékleten sem.



Sikeresen végeztem oxidatív aktiválást a korábban általunk leírt alkil-tiantréniumsókon is, így elektrofil karakterüket tovább növelve eddig nem alkalmazható gyengébb nukleofilok által is jól funkcionalizálhatóvá váltak. Aril-tiantréniumsók esetében az aktiválási módszerrel szintén megnövekedett reaktivitást tapasztaltam, azonban az egyaránt felgyorsult mellékreakciók miatt nem volt elérhető magasabb kitermelés keresztkapcsolási vagy fotokatalizált reakciókban.

KUGLER VALENTIN
Kémia
BSc, 5. félév

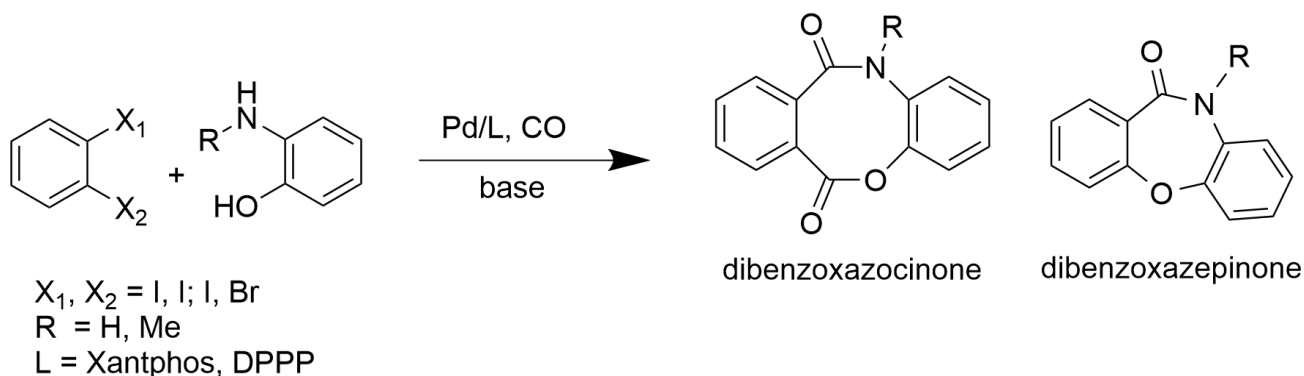
Pécsi Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Témavezető:
Dr. Pongrácz Péter
adjunktus, PTE TTK

Carbonylation reactions of aryl-dihalides with mixed nucleophiles

Kulcsszavak: homogén katalízis; karbonilezés; palládium

Transition metal catalyzed reactions display notable functional group tolerance and selectivity, allowing for the construction of complex molecules from their building blocks. Through the use of palladium catalyzed amino-, alkoxy-carbonylation, and coupling of phenylene dihalides with bifunctional nucleophiles, we attempted to develop methods for the selective synthesis of 7 and 8 membered rings, namely dibenzoxazepinones and . The one-pot reactions conducted under carbon monoxide atmosphere resulted in the formation of various unexpected products, such as phthalimides and benzoxazole derivatives, however with optimization of reaction conditions the target compounds were formed with good to excellent conversion and selectivity.



PELESKEI ZSÓFIA

Vegyész

MSc, 4. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők:

Dr. Juhász László

egyetemi docens, DE TTK

Dr. Homolya Ágnes

adjunktus, DE GYTK

1-C-Szubsztituált-2-jódoglikál származékok Sonogashira kapcsolási reakcióinak optimalizálása

Kulcsszavak: Sonogashira kapcsolat; keresztkecsolás; katalízis; optimalizálás; jódoglikálok

A szénhidrátok fontos szerepet játszanak az élő szervezetben lejátszódó biológiai folyamatokban [1], azonban a természetes szénhidrát származékokban található O-glikozidos kötés kémiai és enzimátikus hasítással szemben kevésbé ellenálló. Így olyan új módszerek fejlesztése szükséges, amelyekkel nagyobb stabilitású, de szerkezetben és biológiai hatásban a természetes szénhidrátokat utánzó, úgynevezett glikomimetikumok előállítására nyílik lehetőségünk [2]. Az elágazó szénláncú szénhidrátok az utóbbi években különös figyelmet kaptak, mivel széles körben megtalálhatóak a természetben, és számos antibiotikum, makrolid vagy bakteriális poliszacharid építőegységeként is szolgálhatnak. Közülük kiemelendők a C-2 helyzetben elágazást tartalmazó származékok, amelyek a sejt felszíni reakciók szempontjából is értékes 2-N-acetil-aminocukrok glikomimetikumai, valamint lipidek bioszintézisének inhibitorai is lehetnek [3]. Kutatómunkánk során a C-1 szénatomon metoxikarbonil csoportot tartalmazó per-O-acetilezett 2-jódogalaktál és fenilacetilén Sonogashira keresztkecsolási reakciójának a vizsgálatával és optimalizálásával foglalkoztunk. Tanulmányoztuk a kapcsolat során alkalmazott palládium forrás, réz forrás, ligandum, bázis és az oldószer hatását a reakció lefutására. Ezt követően az optimalizált körülmények alkalmazásával kísérletet tettünk a reakció kiterjesztésére is. Végrehajtottuk a karbonilatív Sonogashira reakciót, illetve egy cukor-acetilén származékkal is elvégeztük a kapcsolási reakciót.

[1] Gabius, H. J., Ed. The Sugar Code - Fundamentals of Glycosciences; Wiley-VCH: Weinheim, 2009.

[2] Wong, C-H. Acc. Chem. Res. 1999, 32, 376.

[3] Yin, J.; Linker, T. Org. Biomol. Chem. 2012, 10, 2351.

PETRILLA BRIGITTA
vegyésmérnök
BSc, 6. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Mucsi Zoltán
vezető kutató, Femtonics Ltd.
Dr. Kupai József
habil. egyetemi docens, BME VBK
Csomos Attila
kutatóvegyész, Femtonics Ltd.

N-B-OH egységet tartalmazó fluoreszcens policiklusos azaborin kromofórok előállítása és spektroszkópai vizsgálata

Kulcsszavak: börtartalmú heterociklusok; GFP-kromofór analógok; Zn²⁺-szenzor; fluoreszcencia

Napjainkban az analitok érzékelésére és nyomon követésére szolgáló fluoreszcens vegyületek nagy érzékenyséjük, alacsony költségük és kis műszerezettségű igényük miatt nagy érdeklődést keltenek a kémia, a biológia és a környezettudomány számára. Mivel a fluoreszcens mikroszkópia a biológia és a gyógyszerkutatás egyik legfontosabb eszközévé vált, ezért egyre nagyobb az igény a fényesebb és hatékonyabb fluoreszcens festékek iránt. (1) Az utóbbi években a börtartalmú heterociklusos vegyületek iránt egyre nagyobb érdeklődés mutatkozik. A börtartalom különlegessége abból adódik, hogy a többi heteroatómtól eltérően rendelkezik egy üres p-pályával. Ez a tulajdonság jelentősen megváltoztatja a börtartalom tartalmazó vegyületek kémiai sajátságát, így a börtartalmú heterociklusok széles skálájára számos alkalmazást fejlesztettek már ki a gyógyszerkémia, az anyagtudományok, a katalízis, valamint az optoelektronika területén. Napjainkban az ilyen típusú vegyületek iránti érdeklődés a molekula fluoreszcens tulajdonságához, illetve a fluoreszcencia hangolásának lehetőségeihez kapcsolódik. Az olyan kémiai tulajdonságok, mint a spektrális jellemzők hangolása és a biológiai hozzáférhetőség miatt jelentős erőfeszítéseket fordítottak új aromás, B-N-tartalmú heterociklusos molekulák szintézisére. (3) Kutatómunkám során olyan, mikroszkópiára alkalmazható vegyületek fejlesztését tűztem ki célul, melyek jelentős Stokes-eltolódással rendelkeznek, valamint fényességük is magas. Ezt olyan policiklusos azaborin vegyületek előállítása révén oldottam meg, amelyek a zöld fluoreszcens protein (GFP, green fluorescent protein) kromofórjának konformációsán rögzített analógjai. Jelen munkában a szintézisen túl bemutatom a vegyületek részletes spektroszkópai elemzését is, továbbá demonstrálok biológiai felhasználhatóságukat fluoreszcens szenzorok előállítása által.

(1) Wang, H., Wang, D., Wang, Q., Li, X., Schalley, C. A. *Org. Biomol. Chem.* 2010, 8 (5), 1017–1026.

(3) Rasheed, R. T. *Asian J. Chem.* 2015, 27 (11), 4037–4039.

STEINSITS DÁNIEL
Gyógyszervegyész-mérnöki szak
MSc, 3. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezetők:
Dr. Bálint Erika
egyetemi docens, BME VBK
Rávai Bettina
PhD hallgató, BME VBK

3,3-Diszubsztituált oxindolok előállítása és a termékek felhasználhatóságának vizsgálata

Kulcsszavak: mikrohullám; oxindol; xantén; szintézis; zöldkémia

Az oxindolalapú vegyületek ígéretes bioaktív tulajdonságaik miatt mára már számos gyógyszerkutatói téma fókuszpontjában állnak. Kutatómunkám során célul tűztük ki a 3,3-diaril- és a 3,3-spirooxindolok savkatalizált előállítását. Az irodalomban ismert eljárást környezetbarát szempontokat figyelembe véve kívántuk javítani, így a reakciókat mikrohullámú (MW) besugárzás hatására, egy „zöld”, környezetbarát oldószerben terveztük megvalósítani. Először a reakció optimalizálást végeztük el izatin és p-krezol modellreakcióján keresztül, mely során több paraméter (hőközlési mód, hőmérséklet, reakcióidő, oldószer, katalizátor) hatását is vizsgáltuk. Az optimalizálás során a hőmérséklet és a reakcióidő változtatásával a reakciót a 3,3-diariloxindolok szelektív képződése felé kívántuk eltolni, továbbá célunk volt a 3,3-spirooxindolok képződését is maximalizálni.

A téma második felében az optimalizált körülményeket kiterjesztettük további izatinok (5-fluor-, 5-bróm-, 6-klór-, 7-trifluormetil-, illetve N-metilizatin) és fenolszármazékok (p-krezol, fenol és hidrokinon) reakciójára. A kísérleteket tömegspektrométerrel kapcsolt kromatográfiás módszerrel (HLPC-MS) követtük, a termékeket oszlopkromatográfiás módszerrel tisztítottuk, szerkezetüket ¹H és ¹³C NMR spektroszkópiás mérésekkel igazoltuk. A termékek felhasználhatóságát modellreakción keresztül azido- β -ciklodextrinnel történő konjugálás során vizsgáltuk.

Szervetlen és koordinációs kémia

BALOGH MARCELL JÁNOS
Vegyésmérnöki mesterképzési szak
MSc, 4. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Kelemen Zsolt
egyetemi docens, BME VBK

Karboranil-szilolok fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata – két AIE-aktív csoport egy csárdában?

Kulcsszavak: fluoreszcencia; UV-Vis spektroszkópia; aggregáció-indukált emisszió; szilícium- és bórorganikus kémia; Schlenk-technika

A szilolok¹ és a karborán vegyületek² értékes tulajdonsága, hogy oldatban fluoreszkálnak, de ami még különlegesebbé – és alkalmazás szempontjából érdekesebbé – teszi őket, hogy AIE-jelenséget (aggregáció-indukált emisszió) mutatnak, azaz aggregált állapotban nagyobb kvantumhatásfokkal rendelkeznek. Az AIE jelenségének felismerése új utakat nyitott meg optoelektronikai alkalmazás szempontjából, hiszen olyan vegyületcsaládok kerültek a tudományos érdeklődés középpontjába, amelyekről korábban elkönnyvelték, hogy fotofizikai szempontból nem számítanak különlegesnek. Különböző szubsztituált és polimerizált szilolokat már alkalmaznak optoelektronikai készülékekben (pl. OLED-ekben).³

Mindezek miatt a két vegyületcsoport összekapcsolásával kapott karboranil-szilolok ilyen jellegű fotofizikai tulajdonságainak vizsgálata nagy potenciállal bír. Karboranil-szilolokat első ízben a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékén működő Modern Szervetlen Anyagok Kutatócsoport állított elő. TDK-munkám során feltérképeztem a korábban a kutatócsoportom által sikeresen szintetizált karboranil-szilolok optikai tulajdonságait, és összefüggéseket vontam a molekulák szerkezete és fluoreszcenciája között. Továbbá kutatómunkám részeként sikeresen előállítottam két új karboranil-szilol vegyületet, amelyek kvantumhatásfokát meghatároztam oldott és aggregált állapotban. A kiindulási vegyületként alkalmazott halogénezett szilolok hidrolízisre hajlamosak, ezért munkám során standard Schlenk-technikát alkalmaztam, szárított nitrogén, illetve argon atmoszférában dolgoztam. A termékek szerkezetének azonosításához NMR-spektroszkópiai méréseket, IR-spektroszkópiát és egykristály-röntgendiffrakciós méréseket alkalmaztam. A reakciók mélyebb megértésére, a mechanizmusok feltérképezésére kvantumkémiai számításokat végeztem.

[1] Uchida, M. et al.; Chemistry of Materials, 2001, 13, 2680–2683.

[2] Kokado, K.; Chujo, Y; Macromolecules, 2009, 42, 1418–1420.

[3] Cai, Y.; Qin, A.; Tang, B. Z; Journal of Materials Chemistry C, 2017, 5, 7375–7389.

BARTEK MÁTÉ
Vegyésmérnök
BSc, 7. félév

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem
Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar

Témavezető:
Dr. Kelemen Zsolt
egyetemi docens, BME VBK

Erős vagy gyenge, egyáltalán létezik? Heterobimetallikus kölcsönhatás vizsgálata κ^3 - bisz(donor)ferrocén-átmenetifém komplexekben

Kulcsszavak: QTAIM, DFT, fém-fém kölcsönhatás, ferrocén, homogén katalízis

A fém centrumok közt kialakuló kötések, valamint egyéb, nem konvencionális kölcsönhatások kiemelt helyet foglalnak el a modern elméleti kémiai kutatásokban. Elméleti jelentőségükön túl az elmúlt évtizedekben a molekuláris fém-fém kötések sajátos tulajdonságait a gyakorlatban is sikerült felhasználni. Az egyes fém centrumok között létrejövő ún. kooperatív effektusok lehetővé teszik, hogy olyan vegyületeket állítsunk elő, amelyek nagyobb katalitikus aktivitással rendelkeznek. A ferrocén egységet tartalmazó katalizátorokat napjainkban széleskörűen alkalmazzák, azonban e vegyületek esetében a bimetallikus kooperáció szerepe még nem vizsgált. Ennek oka a komplexekben létrejövő heterobimetallikus kölcsönhatás pontos karakterizálásának hiánya. Emellett nincs konszenzus azt illetően, hogy az e vegyületcsaládban jelenlévő fém-fém kölcsönhatás direkt datív kötés, valamilyen indirekt datív kölcsönhatás. A fém-fém kooperáció lehetősége nem vizsgálható a heterobimetallikus kölcsönhatás precíz ismerete nélkül.

Emiatt kutatásom során szubsztituált ferrocén származékok átmeneti fémekkel alkotott komplexeiben jelenlévő heterobimetallikus kölcsönhatás természetét, és erősségét vizsgáltam DFT módszerek segítségével. Munkám során több elméleti szintet is megvizsgáltam és megállapítottam, hogy a TPSSh funkcionál a leginkább alkalmas a kísérleti geometria reprodukálására. A def2-TZVP báziskészlettel a fématomokon vett pszeudopotenciálokkal a fém centrumokat érintő relativisztikus effektusokat figyelembe vehetők. A QTAIM mennyiségek, az atomi mezőkben vett töltések, valamint a fém-fém kötéshossz közti korrelációval megállapítottam, hogy a palládium komplexekben lévő Fe-M kölcsönhatás kovalens karaktere nagyobb, mint a nikkal analógoké. A forrásfüggvény vizsgálatával javaslatot tettem a kölcsönhatás indirekt természete mellett. A szubsztituens hatások vizsgálatára számos modell vegyületet tanulmányoztam, amelyekre NBO számításokat, potenciális energia (hiper)felület szkencet (PES-szken) végeztem, valamint ligandumcsere reakciókkal LNO-CCSD(T)/def2-QZVP// TPSSh/def2-TZVP számításokkal is vizsgálva javaslatot tettem a kölcsönhatás erősségét illetően. A számítások eredménye konzisztens a kölcsönhatás részleges datív karaktere mellett. Elektronzívó, gyenge donor ligandumok megnövelik a kölcsönhatás kovalens jellegét, ezáltal az elektronsűrűséget a kötéskritikus pontban, míg elektronküldő jó donor ligandumok esetében ellenkező trendet tapasztalunk.

FERENCZ ORSOLYA

kémia

BSc, 4. félév

Pannon Egyetem

Mérnöki Kar

*Témavezető:
Dr. Fodor Lajos
adjunktus, PE MK*

Fém-szulfiddal módosított grafityszerű szén-nitrid fotokatalizátorok előállítása és vizsgálata

Kulcsszavak: heterogén fotokatalízis; fém-szulfid; g-C₃N₄; hidrogén; lebontás

Napjainkban egy igen komoly probléma a környezetszennyezés, különösen a légkörben és a természetes vizeinkben található szennyezőanyagok mennyisége, illetve a termékek ipari melléktermék és hulladék felhalmozódása. A szennyezők ártalmatlanításának egy környezetbarát megoldása a heterogén fotokatalitikus lebontás, amely ugyanakkor megoldást nyújthat arra is, hogy mialatt szennyezőanyagokat oxidálunk a napfény energiájának felhasználásával, párhuzamosan a víz redukciójával hidrogént állítsunk elő, amiből CO₂ kibocsájtás nélkül termelhetünk energiát.

Jelentős hidrogénfejlesztő hatékonyság érhető el, ha víz helyett H₂S-t, vagy annak lúgos oldatát bontjuk. Emellett a H₂S felhasználásával egy igen toxikus ipari hulladék mennyiségét tudjuk csökkenteni, ami főként a kőolaj finomítása, illetve a földgáz tisztítása során szabadul fel melléktermékként.

Munkám során grafityszerű szén-nitrid katalizátorok előállításával foglalkoztam, amelyeket különböző módszerekkel fém-szulfidokkal (CdS-ZnS) és/vagy Ni(OH)₂-dal módosítottam. Az előállított katalizátorokat egyrészt fotokatalitikus hidrogénfejlesztésre használtam fel, másrészt pedig szennyezőanyagok lebontására. Utóbbi nyomon követésére átfolyós rendszerben real-time UV-elnyelési színek mérést alkalmaztam, amellyel néhány perces időközönként akár 24 órás nyomon követés is lehetségesnek bizonyult.

GÁTSZEGI GERDA TÍMEA

vegyész

MSc, 3. félév

Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:

Dr. Enyedy Éva Anna

tanszékvezető egyetemi tanár, SZTE TTIK

2-formilpiridin-guanilhidrazon-származékok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redox tulajdonságai: a morfolin és piperazin szubsztitúciók hatása

Kulcsszavak: tioszemikarbazon; guanilhidrazon; stabilitási állandó; redoxi reakció; citotoxicitás

Számos tioszemikarbazon-származékot és azok fémkomplexeit már széles körben tanulmányozták antimikrobiális, vírusellenes és daganatellenes hatásuk miatt. Mind a koordináló donorkészlet, mind a szubsztituensek erősen befolyásolják a fémkomplexeik stabilitását és farmakológiai hatását. Az aminoguanidinből származó guanilhidrazon-típusú Schiff-bázisokat is széles körben vizsgálják szerkezeti sokoldalúságuk miatt. A háromfogú 2-formilpiridin-guanilhidrazonok az α -N-piridil tioszemikarbazonok analógjainak tekinthetők, ahol a tioamid egységet a guanidincsoport helyettesíti. A tioszemikarbazonokkal szemben, azonban ilyen (N,N,N) donorkészletet tartalmazó származékok oldategyensúlyi vizsgálata a szakirodalomban meglehetősen hiányos.

Tudományos diákköri munkám során különböző 2-formilpiridin-guanilhidrazon Schiff-bázis-származékokat, valamint réz(II)- és vas(II/III)komplexeiket vizsgáltuk. A tioamid iminocsoporttal (C=S \rightarrow C=NH) történő helyettesítése mellett vizsgáltuk amin, morfolin, és piperazin szubsztituensek hatását is a ligandumok proton disszociációs állandóira és a képződő komplexek stabilitási szorzataira. Oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságaik jellemzése céljából pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás, ciklikus voltametriás és spektroelektrokémiai méréseket végeztünk. Továbbá a réz(II)komplexeik fiziológiás redukálószerekkel való közvetlen reakcióját UV-látható spektrofotometriás módszerrel követtük.

Megállapítottuk, hogy a fiziológiás pH-n semleges analóg tioszemikarbazonokkal szemben ezek a ligandumok túlnyomórészt pozitív töltésűek, és a számolt képződési állandóik alapján mind a réz(II)-, mind a vas(II/III)ionokkal kisebb stabilitású komplexeket képeznek. A kelátképző helyzetben lévő morfolin- és piperazin-nitrogénekkal létrejövő négyfogú koordináció sem növelte meg számottevően a komplexek stabilitását. A vizsgált humán rákos sejtekkel szemben (Colo205, Colo320, MCF7) sem a ligandumok, sem a rézkomplexeik nem bizonyultak citotoxikusnak. Összefoglalva, a tioamid-kén iminocsoportra történő cseréje kisebb stabilitású fémkomplexeiket és gyengébb rákellenes hatású vegyületeket eredményezett.

KUN EMESE
Vegyészmérnök
BSc, 6. félév

Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezetők:
Dr. Bunda Szilvia
tudományos munkatárs, DE TTK
Dr. Kálmán Ferenc Krisztián
egyetemi docens, DE TTK

Az OPDMA ligandum előállítása és koordinációs kémiai vizsgálata

Kulcsszavak: MRI; kontrasztanyag; O-piklén; Gd(III)-komplex; malonát

A Mágneses Rezonanciás Képzéskészítés (MRI) kontrasztanyagainak kutatásában a Nefrogén Szisztémás Fibrózis (NSF) megjelenése, nagy fellendülést hozott. Két irányban indult meg a kutatás, egyrészt stabilabb Gd(III)-komplexek előállítása felé a ligandumok szerkezetének merevítésén keresztül, másrészt biokompatibilis, azaz a szervezet számára jobban tolerálható paramágneses fémiont (pl. Mn(II), Fe(II) és Fe(III)) tartalmazó komplexek fejlesztése felé. A Gd(III) komplexek esetében elvárás, hogy számos követelménynek megfeleljenek a Gd(III) toxicitása miatt. Éppen ezért a Gd(III)-komplexeknek elegendően nagy stabilitással és inertséggel, valamint egyéb más feltételek mellett jó relaxivitással is kell rendelkezniük. A stabilabb szerkezetű ligandumok fejlesztése elsősorban a már bevált Gd(III)-iont megkötő ligandumok módosításával történik. Csupász és munkatársai így állították elő az O-piklén alapvázú, két acetát csoportot tartalmazó OPC2A ligandumot, amely Mn(II)-komplexének fiziko-kémiai sajátságai akár in vivo alkalmazást is lehetővé tennék. [1] Tulajdonképpen ennek a munkának a folytatásaként állítottuk elő kutatócsoportunkban az OPMMA ligandumot, amely két acetátcsoporthelyett, egy malonátcsoporthelyett tartalmaz. Ez az új, kellően merev O-piklén származék kiváló volt a Mn(II)-ion komplexálására. Az OPMMA továbbfejlesztésével, olyan O-piklén alapvázú makrociklust állítottam elő (OPDMA), amely már két malonátcsoporthelyett tartalmaz, ezáltal lehetővé téve Gd(III)-komplexének koordinációs kémiai vizsgálatát. Munkám során tanulmányoztam a [Gd(OPDMA)]-komplex egyensúlyi, kinetikai és relaxációs tulajdonságait, valamint DFT számításokat is végeztem a szerkezetének jellemzésére.

[1] Tibor Csupász et al., *Molecules*, 2022, 27, 371

OLASZ MÁRK
Vegyész
MSc, 2. félév

Szegedi Tudományegyetem
Természettudományi és Informatikai Kar

Témavezető:
Dr. Schusztér Gábor
adjunktus, SZTE TTIK

Reakciók sztöchiometriájának meghatározása Job-módszerével: csapadékreakciók

Kulcsszavak: csapadékképződés; oktatás; digitális képfeldolgozás; kémcsőreakció

A reakciók sztöchiometriájának meghatározása mind elméleti, mind gyakorlati szempontból fontos, így egyetemi hallgatói laboratóriumok alkalmával is tananyag. A gyakorlaton általában komplexképző reakciók sztöchiometriája kerül meghatározásra spektrofotometriás mérésekkel és a Job-módszer alkalmazásával. Ezen módszert egy új megközelítésből csapadékképző reakciókra alkalmazzuk. A sztöchiometriai arány meghatározására egyrészt egy egyszerű analóg módszert (mérés vonalzóval), másrészt digitális képelemzést alkalmazunk. A módszer lényege, hogy a kémcsőkísérletek során kapott csapadékoszlop-magasságot mérjük, és meghatározzuk a reakció sztöchiometriáját az oszlopmagasság–oldatösszetétel függvény alapján. Az általunk kidolgozott módszernek különböző sztöchiometriai arányok esetén is alkalmazhatónak kell lennie, hogy a gyakorlaton több különböző ismeretlen is kiadható legyen. Minden esetben fontos a kísérleti paraméterek optimalizálása és a reprodukálhatóság biztosítása. Az oldatkoncentrációk változtatásával elérhető a megfelelő mennyiségű csapadék képződése, háttélelektrolit hozzáadásával pedig az ionerősség állítható és a koaguláció gyorsítható. A reprodukálhatóság biztosításához szükséges háttér-információként, a kísérletek során keletkezett csapadékokból mintát véve, vizsgálatokat végeztünk pásztázó elektronmikroszkóppal, valamint röntgendiffrakciós mérés segítségével is. A mérések által megbizonyosodtunk a csapadék összetételéről és az ugyanazon kísérletben keletkezett csapadékok azonosságáról. A gyakorlatot 20 elsőéves vegyész és vegyészmérnök hallgató sikeresen elvégezte, ezzel is alátámasztva a kísérletek reprodukálhatóságát és alkalmasságát egy hallgatói laboratórium keretein belül. A javasolt laboratóriumi gyakorlatot sikeresen publikáltuk egy oktatási folyóiratba.

SZABÓ MIRA
Vegyésmérnök
BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem
Természettudományi és Technológiai Kar

Témavezető:
Dr. Lihi Norbert
egyetemi docens, DE TTK

Antioxidáns tulajdonságú réz(II)-komplexek előállítás és vizsgálata

Kulcsszavak: komplex; réz; SOD aktivitás; kromén; oldategyensúly

A szuperoxid-dizmutáz enzim a biológiai rendszerekben képződő szuperoxid gyökanion elbontásáért felelős. Az enzim hiánya vagy a szuperoxid gyökanion koncentrációjának megemelkedése az oxidatív stressz állapotát idézi elő. Mivel a szuperoxid-dizmutáz enzim terápiás alkalmazása nem lehetséges annak kis szérum stabilitása miatt, előtérbe kerülnek az olyan, kis molekulatömegű antioxidánsok, amelyek képesek a szuperoxid anion koncentrációját megfelelő szintre csökkenteni. Munkám során új, potenciálisan antioxidáns tulajdonságú kromén-3-karbonsavval konjugált ligandumot (CroHis) állítottam elő, valamint réz(II)ionokkal alkotott komplexképződési reakcióját vizsgáltam. Az így nyert fiziko-kémiai paramétereket és a komplex antioxidáns tulajdonságát hasonlítottam össze a réz(II)/kromén-3-karbonsav modellrendszerrel. A réz(II)/CroHis rendszer esetében fiziológiás pH-tartományban a $\text{Cu}_2\text{L}_2\text{H}_2$ összetételű komplex az uralkodó részecske és a fémion koordinációs szférájában (O,O,N_{lm},N) donorcsoportok vannak. A komplex ESR spektrumának szimulációjával alátámasztottuk, hogy a részecskében a két Cu(II) ekvatoriális síkjai egymás alatt és felett helyezkednek el, valamint a két fémion a síkban kis mértékben eltolódik egymáshoz képest. Ezen eredményeket a röntgenkrisztallográfiával meghatározott szerkezet is igazolta. A SOD aktivitás vizsgálatok Cu(II)/kromén-3-karbonsav 1:2, valamint a Cu(II)/CroHis 1:1 arányú rendszer esetén a xantin/xantin-oxidáz/NBT modellrendszer segítségével valósultak meg. Eredményeinkből megállapítottuk, hogy mindkét réz(II)-komplex kiemelkedően nagy SOD aktivitással bír, amely elsődlegesen a réz(II) és kromén alegység közötti kölcsönhatásból származik. Ugyanakkor fontos kiemelni, hogy a CroHis alkalmasabb jelölt lehet biológiai vizsgálatokra, melynek oka a hisztidin imidazol-nitrogénjének a koordinációja, amely növeli a réz(II)-komplex termodinamikai stabilitását.

TAKÁCS ALETTA
Középiskolai hallgató

SZTE Báthory István Gyakorló Gimnázium és
Általános Iskola

Témavezetők:
Dr. Enyedy Éva Anna
tanszékvezető egyetemi tanár, SZTE TTIK
Gátszegi Gerda Tímea
MSc hallgató, SZTE TTIK

**Rákellenes hatású pirazolcsoportot tartalmazó (tio)szemikarbazonok és réz(II)komplexeik
oldategyensúlyi jellemzése**

Kulcsszavak: UV-Vis spektrofotometria; stabilitási állandó; redoxi reakció; citotoxicitás

Számos rákellenes hatást mutató fémkomplexet állítottak elő az évek során, azonban a fellépő mellékhatások és a rezisztencia újabb és hatékonyabb vegyületek fejlesztésére adott okot. Korábbi vizsgálatok eredményei alapján a tioszemikarbazon (TSK) és szemikarbazon (SK) vegyületcsalád ígéretesnek mutatkozott a daganatos sejtekkel való küzdelemben. Az α -N-pridil-TSK-ok közül a triapin már fázis III vizsgálat alatt áll [1]. Korábban történtek vizsgálatok pirazolcsoportot tartalmazó TSK-okkal és egy SK-nal, valamint azok réz(II)komplexeivel, mely mérések eredményei alapján hatásosnak bizonyultak rákos sejtek ellen [2]. A TDK munkám során olyan pirazolcsoportot tartalmazó (tio)szemikarbazonokat vizsgáltunk, melyek nemcsak koordinációs módjukban, hanem szubsztituenseikben is különböznek. Az N-terminális aminocsoporton NH_2 vagy NHCH_3 , a pirazolgyűrűn pedig furán vagy tiofén csoport található. Munkánk során kíváncsiak voltunk, hogy ezen szerkezeti különbségek hogyan hatnak a ligandumok proton disszociációs folyamataira, a réz(II)komplexeik stabilitására, illetve a rákellenes hatásukra. Vizsgáltuk a ligandumok lipofilitását és UV-látható spektrofotometriás titrálás segítségével meghatároztuk a ligandumok deprotonálódására és réz(II)ionokkal való komplexképzésre vonatkozó egyensúlyi állandókat, és a komplexeik redoxi tulajdonságait is tanulmányoztuk. Az eredmények alapján megállapítottuk, hogy a vegyületek fiziológiás pH-n semleges formában vannak jelen, ami hozzájárul a korlátozott vízdoldhatóságukhoz. A ligandumok a réz(II)ionnal mono- és biszkomplexeiket képeznek, utóbbi az uralkodó részecske pH = 7,4-n. Továbbá megállapítható, hogy a TSK – SK ligandumpárok közül a TSK-ok rendelkeznek erősebb rákellenes hatással, illetve a réz(II)ionok jelenléte növelte a citotoxicitásukat.

[1] C. A. Leath, W. Deng, L. K. Mell, D. L. Richardson, J. L. Walker, L. L. Holman, J. S. Lea, S. R. Amarnath, L. J. Santos-Reyes, R. C. Arend, J. Mayadev, N. Jegadeesh, P. Disilvestro, H. S. Chon, S. A. Ghamande, A. M Quick, J. P. Chino, H. Mackay, C. Aghajanian, B. J. Monk, J. Clin. Oncol. 41 (2023) 5502.

[2] O. Dömötör, M. A. Kiss, G. T. Gál, N. V. May, G. Spengler, M. Nové, A. Č. Gašparović, É. Frank, É. A. Enyedy, J. Inorg. Biochem. 202 (2020) 110883.

TÖRÖK DÓRA VIKTÓRIA

Kémia

BSc, 5. félév

Debreceni Egyetem

Természettudományi és Technológiai Kar

*Témavezető:
Dr. Kállay Csilla
egyetemi docens, DE TTK*

Szalán típusú vegyületek átmenetifémionokkal való kölcsönhatása

Kulcsszavak: Komplexképződés; fémionmegkötő-képesség; fémionkatalizált oxidáció; peptid; human prion protein

Munkám során szalán típusú vegyületek komplexképző tulajdonságait, valamint a peptidek fémionkatalizált oxidációjával szembeni védőhatását tanulmányoztuk. Vizsgáltuk a szerkezet és a fémkomplexek stabilitása közötti összefüggést; hogy a donoratomok közötti híd növekvő mérete hogyan befolyásolja a fémionmegkötő-képességet és a peptidek fémionkatalizált oxidációjával szembeni védelmét. Vizsgálatainkhoz pH-potenciometriát, UV-Vis spektrofotometriát, HPLC technikát alkalmaztunk. Vizsgálataink során megállapítottuk, hogy a donoratomok közötti híd növekvő mérete jellemzően növeli ligandumok bázicitását, azonban ez nem jár a fémionmegkötő-képesség növekedésével. Egyik vizsgált átmenetifémion (Cu(II), Ni(II) és Zn(II)) esetén sem kedvez ez a tényező a fémionmegkötésnek, de a Cu(II)-ionok esetén lehetővé teszi, hogy egyetlen ligandumhoz több fémion is koordinálódjon, illetve hogy dimer szerkezetű komplexek alakuljanak ki.

A vegyületek védőhatását a peptidek oxidációjával szemben egy human prion protein fragmens (HuPrP(103-112)) esetén a Cu(II)/H₂O₂ rendszerrel tanulmányoztuk. A vizsgált ligandumok visszaszorították a peptid fémionkatalizált oxidációját. Ez a hatás azonban alulmaradt a kutatócsoportunkban korábban vizsgált hasonló koordinációs módú szalán vegyületekkel szemben. Ez alapján az állapítható meg, hogy a védőhatás sokkal hatékonyabb, hogyha a Cu(II)-ion koordinációs szférája telített, ami a donoratomok közötti rövidebb összekötő hidak esetén valósulhat meg.

VINCZE BÁLINT
Vegyészmérnöki
BSc, 7. félév

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

*Témavezető:
Dr. Kaizer József
egyetemi tanár, PE MK*

Aldehidek Fe-katalizált H₂O₂-oxidációs reakciói

Kulcsszavak: biokatalizátor; cianobakteriális aldehyd deformiláz oxigenáz; divas(III)-μ-peroxo; koligandum; nukleofil karakter

Az enzimek a természetben biokatalizátorokként funkcionálnak, a biokémiai folyamatokat szelektíven és hatékonyan viszik véghez. Nagy előrelépést eredményezne a világunk fejlődésében az olyan enzim alapú katalizátorok előállítása, amelyeket számos ipari vagy gyógyszerkémiai folyamatban fel tudnánk használni. Az enzimek vizsgálata azonban nehéz feladat, izolálásuk és kezelésük körülményes. Erre a problémára egy megoldás a szintetikus enzim modellek előállítása és vizsgálata. Kutatásom során nem-hem oxidoreduktázok vizsgálatával foglalkozom, amelyek dioxi gént használnak fel arra, hogy a szubsztrátmolekulákat oxidálják. A cianobaktériumok által is használt aldehyd-deformiláz-oxigenáz enzim (cADO) az aldehidek alkánokká történő átalakítását végzi. Az irodalom alapján azt feltételezik, hogy az enzimreakció főlépése reaktív divas(III)-μ-peroxo intermedieren keresztül játszódik le, ennek érdekében kutatócsoportban egy hasonló intermediert próbáltunk generálni. A munkám során szintetikus enzim modellként egy vas(II)-központi atommal rendelkező prekursor komplexet használtam, a $[\text{Fe(II)}(2'-(2\text{-piridil})\text{-benzimidazol})_3](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2\text{-t}$, amelyben a központi fémiont három kétfogú nitrogén donoratómmal rendelkező ligandum vesz körül. Oxidálószer (H₂O₂) hatására egy divas(III)-μ-peroxo intermedier keletkezik. A kialakuló részecske katalitikus és kinetikai tulajdonságait különböző aldehidek oxidációs reakcióiban vizsgáltam. Általam használt szubsztrátmolekulák a 2-fenil-propionaldehyd és a fenil-acetaldehyd volt. Kutatómunkám során GC-MS, Ciklikus-voltammetriai és UV-Vis spektroszkópiai mérésekkel tanulmányoztam az intermedier reaktivitását és katalitikus tulajdonságait, ennek nyomán bizonyítani tudtam, hogy az általam vizsgált rendszerben is a reaktivitásért a kialakuló intermedier felelős. Továbbá tanulmányoztam eltérő tulajdonságú, szerkezetű koligandumok hatását az oxidációs folyamatokra, annak érdekében, hogy a reaktivitást finom hangolhassam. Ezen eredmények is alátámasztják a divas(III)-μ-peroxo intermedier nukleofil karakterét.

AZ OTDK FŐVÉDNÖKEI

A Magyar Tudományos Akadémia elnöke

Kulturális és Innovációs Miniszter

AZ OTDK VÉDNÖKE

A Nemzeti Média- és Hírközlési Hatóság elnöke

AZ OTDK FŐTÁMOGATÓJA

Kulturális és Innovációs Minisztérium, Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap



AZ NKFI ALAPBÓL
MEGVALÓSULÓ
PROJEKT

AZ OTDK TÁMOGATÓI

Nemzeti Média- és Hírközlési Hatóság



MÁV Személyszállítási Zrt.



GYSEV Zrt.



A KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ FŐTÁMOGATÓI

MOL Petrolkémia Zrt.



BorsodChem Zrt.



Contemporary Amperex Technology Hungary Kft. (CATL)



Bogdány Petrol Kft.



BMW Group Gyár Debrecen



EcoPro BM Hungary Zrt.



Richter Gedeon Nyrt.



Samsung SDI Magyarország Zrt.



A KÉMIAI ÉS VEGYIPARI SZEKCIÓ TÁMOGATÓI

Magyar Műanyagipari Szövetség



Genevation Aircraft Kft.



Science Port Kft.



Semcorp Hungary Kft.



Magyar Vegyipari Szövetség (MAVESZ)



SPL Europe Kft.



Servier Hungária Kft.



Egis Gyógyszergyár Zrt.



Teva Gyógyszergyár Zrt.



TAPI Hungary Industries Kft.



EGYÉB TÁMOGATÓK

Debreceni Egyetem



Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar



DE TTK Kémiai Intézet



Kémia Koordinációs Intézet



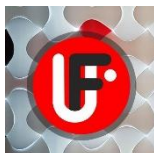
Debreceni Egyetem Egyetemi és Nemzeti Könyvtár



Debreceni Egyetem E-Sport Központ



UNIFIT Fitness & Gym Center



Debreceni Egyetem Botanikus kert



Debreceni Egyetem
Botanikus Kert

Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság



Magyar Kémikusok Egyesülete



FŐTÁMOGATÓK BEMUTATKOZÁSA

MOL Petrolkémia Zrt.



PETROLKÉMIA
MEMBER OF MOL GROUP

A tiszaujvárosi MOL Petrolkémiai Zrt. Magyarország egyik legnagyobb vegyipari szereplője, amely stabil és megbízható munkahelyet biztosít munkavállalóinak. A vállalat 1953-ban kezdte meg működését Tiszai Vegyi Kombinát néven, 2004-ben került a MOL-csoport többségi tulajdonába, majd 2015-ben a MOL lett a kizárólagos tulajdonos. A vállalat a pozsonyi Slovnaft a.s. petrolkémiai üzemeivel együtt a MOL Downstream divízió integrált részeként működik. 2023-ban ünnepelte fennállásának 70. évfordulóját. A MOL Petrolkémia kiemelkedő pozíciót foglal el a közép-európai régió petrolkémiai vállalatai között. A tiszaujvárosi telephelyen található két olefin üzem gőzkrakkoló egység kapacitása 660 kt/év etilén és 330 kt/év propilén, míg az extrakciós termékcsoporthoz évente 130 kt butadién és 60 kt MTBE termék készül. Az 5 polimerüzem 765 kt/év termeléssel a legnagyobb európai polimergyártók között van, 17%-os piaci részesedéssel Közép-Európában. Az integrált működés lehetőséget ad a MOL-csoport számára a vegyipari termékek gyártására. A MOL-csoport 2030-ig szóló hosszú távú stratégiájában kulcsszerepet szán a vegyipari értéklánc bővítésének, 2016 és 2030 között 4,5 milliárd dollár értékű beruházást tervez, amelynek jelentős része Tiszaujvárosban valósul meg. A stratégia megvalósításának meghatározó eleme a májusban átadott Poliol Komplexum, amelynek éves termelési kapacitása 205 kt poliol és 60 kt propilén-glikol. A jelenleg építés alatt álló Olefin Konvertáló Egység az MPK saját nyersanyagellátásának biztonságát növeli. A MOL Petrolkémia az észak-magyarországi régió egyik legnagyobb munkaadója, és társadalmi felelősségvállalásával is kiemelkedő szerepet játszik. A vállalat elkötelezett a munkavállalók fejlődése és a munkahelyi biztonság iránt, biztosítva a hosszú távú karrierlehetőségeket. Ezen felül a társaság célja, hogy hosszú távon minél nagyobb arányban foglalkoztasson helyi szakembereket, ezért már több éve szoros kapcsolatot ápol a térség oktatási intézményeivel. A vállalat középfokú és felsőfokú oktatásban tanulóknak is indít duális képzést, mely képzések során a hallgatók az MPK üzemeiben, valós ipari környezetben is megismerkedhetnek a vegyipari technológiákkal, a képzés végén pedig karrierlehetőség várja őket a MOL Petrolkémianál. Ilyen képzéseink vannak például a Debreceni Egyetem vegyészmérnök MSc, valamint a villamosmérnöki BSc szakán, továbbá a Miskolci Egyetem gépészmérnöki MSc vegyipari szakirányán és a villamosmérnöki MSc-n is. (<https://mol.hu/hu/karrier/strategiai-oktatasi-kapcsolatok/#lt-strong-gt-dualis-kepzes-lt-strong-gt>) Családbarát vállalként támogatja a munkavállalók személyes fejlődését és a közösségi összetartozást. Folyamatosan törekszünk a fenntartható fejlődésre és a közösségünk jólétére.

LÉGY TE IS RÉSZESE A JÖVŐ VEGYIPARÁNAK!

ÉPÍTSD KARRIEREDET MÉRNÖK KARRIERPÁLYA
ÉS UP! TALENT PROGRAMUNK SEGÍTSÉGÉVEL!

A KÍNAI WANHUA CSOPORTHOZ TARTOZÓ KAZINCBARCIKAI SZÉKHELYŰ BORSODCHEM ZRT. EURÓPA EGYIK PIACVEZETŐ MŰANYAG ALAP- ÉS SZERVETLEN VEGYIANYAG GYÁRTÓJA. TÖBB MINT 3200 FŐS MUNKAVÁLLALÓI LÉTSZÁMÁVAL MAGYARORSZÁG LEGJELENTŐSEBB MUNKÁLTATÓI KÖZÉ TARTOZIK. HÉT ÉVTIZEDES VEGYIPARI TAPASZTALATTAL AZ INNOVÁCIÓ ÉS A FENNTARTHATÓ FEJLŐDÉS JEGYÉBEN CÉLUNK MINŐSÉGI ALAPANYAGOKAT BIZTOSÍTANI A MINDENNAPI ÉLETBEN NÉLKÜLÖZHETETLEN TERMÉKEKHEZ.

SZENVEDÉLLEL MŰVELJÜK A KÉMIÁT, AMELY UTAT MUTAT SZÁMUNKRA AZ INNOVATÍV MŰANYAGIPARI MEGOLDÁSOK FELÉ. FÁRADHATATLANUL AZON DOLGOZUNK, HOGY A MINDENNAPOK KIHÍVÁSAIT LEKÜZDVE EREDMÉNYEINKET A TÁRSADALOM ÉS A KÖRNYEZET JAVÁRA FORDÍTSUK.

ÉLJ A VÁLLALATUNK ÁLTAL KÍNÁLT LEHETŐSÉGEKKEL, ÉS BIZTOS LEHETSZ BENNE, HOGY A LEGJOBB SZAKEMBEREK TÁMOGATÁSÁVAL, EGYEDI, INNOVATÍV TECHNOLÓGIÁK ALKALMAZÁSÁVAL SZEREZHETSZ NAPRAKÉSZ TUDÁST ÉS TAPASZTALATOT!

KÉPZÉSED A KARRIERED ALAPJA!

TANULJ JÓL, SZEREZZ GYAKOLATOT
ÉS ÉPÍTS KARRIERT A BORSODCHEMBEN!

-  3700 KAZINCBARCIKA, BOLYAI TÉR 1.
-  KEPZES@BORSODCHEM.EU
-  KARRIER.BORSODCHEM.EU
-  BORSODCHEM.COM

A CATL piacvezető akkumulátortechnológiai megoldásaival kiemelkedő szereplője a fenntartható jövő megteremtésének. A 2011-ben Ningtö-ben alapított vállalat célja, hogy a világon minél több ember számára elérhetővé tegye az elektromos közlekedést, csökkentve ezzel a szén-dioxid kibocsátást. A CATL 12 működő gyárából 9 már karbonsemleges minősítést kapott, 6 kutatás-fejlesztési központjában pedig 20.000 alkalmazott dolgozik azon, hogy üzemeiben magas minőségű, biztonságos termékeket állítson elő környezetbarát módon. A vállalat az innovációt és a kutatás-fejlesztést helyezi sikerének középpontjába, így világszerte ma már több mint 30.000 szabadalommal és több mint 100 iparági szabvánnyal rendelkezik.

A debreceni gyár a CATL európai terjeszkedésének fontos mérföldköve és hozzájárul ahhoz, hogy az elektromos közlekedés minél szélesebb körben elterjedjen a kontinensen. A cég elkötelezett Debrecen fejlődése mellett és részt kíván venni a város társadalmi, kulturális és sport életében, valamint célul tűzte ki, hogy innovatív tudásával támogatja a régió oktatási intézményeit és segít felkészíteni a jövő szakembereit a gyorsan fejlődő iparág kihívásaira.

CATL
DEBRECEN

Nyiss a jövőre!
Csatlakozz hozzánk!
catl-karrier.hu



A Bogdány Petrol Kft. gyártóüzeme Nyírbogdányban, Nyíregyházától 16 km-re található az ukrán, román és szlovák határ közelében kiváló logisztikai adottságokkal. Jelenlegi telephelyén, összesen 42 hektáron már 1904 óta folyik olajipari gyártás, itt volt ugyanis Magyarországon az első ásványolaj finomító. Maga a cég 2000. december 12-én jött létre, a menedzsment ekkor vásárolta ki a céget a - jogelődjei révén több évtizeden keresztül tulajdonló és működtető - MOL-tól. A vállalat tovább folytatta a nemzetközi piacokon akkor már jól bevezetett termékek gyártását és kereskedelmét, valamint licence és technológiai vásárlással, saját fejlesztésekkel tovább bővítette és számtalan piaci szegmensbe szállítja termék portfólióját.



A Bogdány Petrol Kft. termékeihez szükséges alapanyagok döntően ásványolaj finomítókából származó szénhidrogének, nevezetesen különböző olajtartalmú paraffin waxok és olajok, melyekhez jelentős kapacitású tartályparkkal, saját iparvágánnyal, hatékony gyártóberendezésekkel és jól képzett, ~90 fős dolgozói állománnyal rendelkezik. Az éves termelési mennyiség meghaladja a 40.000 tonnát, melyek az alábbi termékek gyártásából áll össze:

- **Gyógyászati és kozmetikai vazelinek**, elsősorban krémek, rúzsok, alapanyagai, de pl. a gyurmának is.
- **Technikai vazelinek**, melyek egyik fő alkotóelemei a nyomtatófestékeknek, de a cipő és egyéb bőrtermékek ápoló szereinek is, továbbá ipari kenőzsíroknak, szerelőpasztáknak.
- **Paraffin emulziók**, bútortárgygyártásban használják a lapok vízfellevő képességének hatékony korlátozására.
- **Olaj emulziók**, melyek szigetelőgyártásban használatosak pormegkötés céljából
- **Hagyományos és optikai kábeltöltő anyagok**, hagyományos telefonkábelekhez és speciális térkitöltő gélek optikai kábelekhez.



használatos a szobrászatban és ékszerészetben is.

- **Kenőanyagok.**

A Bogdány Petrol Kft. termelésének 85-90%-át a világ több mint 50 országába exportálja, de a hazai vállalatok is szívesen használják termékeiket. Külkereskedelmi, ezen belül is a jelentős Európán kívüli export tevékenységét budapesti irodájából irányítja a cég.

A vállalat jól felszerelt, korszerű, auditált laboratóriummal rendelkezik. ISO 9001 és ISO 14001 minőségi és környezetirányítási rendszerét a BSI (British Standard Institution) auditálja. A Bogdány Petrol Kft., követve a gyógyszeriparral kapcsolatos EU-s előírásokat, egy új, GMP üzemet avatott 2013 áprilisában, amelyhez jelentős EU támogatást nyert 2011-ben. Emellett vazelin termékcsoportja 2021 óta Halal-tanúsítvánnyal is rendelkezik.

A vállalat szakmai fejlődését az Európai Waxgyártók Szövetsége (EWF – European Wax Federation) is elismeréssel követi, amelynek eredményeként a Bogdány Petrol Kft. az EWF tagjává válhatott 2011. év elején.



Magyarország északkeleti részén, Debrecenben több mint 400 hektáros területen a BMW Group egy teljes járműgyárat épít.

Immár több mint 2 000 munkavállalóval, a terveknek megfelelő ütemben haladó építkezéseknek köszönhetően az előszériás modellek gyártásával, a termelési folyamatok finomhangolásával és intenzív toborzási munkával halad a BMW Group Gyár Debrecen csapata a „Neue Klasse” teljesen elektromos hajtású X modelljének (SAV modell) sorozatgyártása felé.

A BMW Group éves konferenciáján Oliver Zipse kiemelte, hogy a NEUE KLASSE modellgenerációval a vállalat történetének eddigi legnagyobb jövőbe vezető projektjét váltja valóra. A NEUE KLASSE modellgeneráció első sorozatgyártásban érkező képviselője az új BMW iX3 lesz, mely 2025 végén gördül ki a debreceni gyártósorról. A BMW AG igazgatótanácsának elnöke a konferencián bemutatta a BMW iX3 modell előszériában, Magyarországon gyártott prototípusát.

A NEUE KLASSE modellgeneráció sorozatgyártása 2025 végén veszi kezdetét. A BMW modellek új nemzedékének **első képviselője BMW iX3** típusnéven lát napvilágot. E Sports Activity Vehicle modellt – amelynek előfutárát a gyártó a BMW Vision Neue Klasse X tanulmányautó képében már tavaly bemutatta – a BMW debreceni gyára készíti majd – a BMW Group nemzetközi gyártási hálózatának első olyan létesítménye, amelyben kizárólag tisztán elektromos meghajtású modellek készülnek. A debreceni üzem a jövőbe vezető modellgeneráció próbagyártását már 2024 végén megkezdte.

Az új BMW iX3 a bajor prémiumgyártó új modelljeinek példátlan **offenzíváját** indítja be: **2027-ig** a BMW Group gyors egymásutánban **több mint 40 új és továbbfejlesztett modellt** mutat be **elérhető összes hajtáslánc-technológiájával**, köztük egy sportos limuzinnal, amely 2026-ban ünnepli világpremierjét.

Az új BMW iX3 sorozatgyártásának beindításával **a bajor prémiummárka teljes portfóliójára megérkezik az új, moduláris járműszerkezeti elvre épülő technológiai arzenál**. E fejlesztéssel a BMW Group **az innováció új szintjét váltja valóra**, megannyi sikeresen bejegyzett szabadalom kíséretében – magába foglalva többek között az elektromos motor alkatrészeit, a kijelző és kivetítő technológiákat, illetve a menetdinamikai vezérlőfunkciókat is.

Ez azt jelenti, hogy **a NEUE KLASSE modellgeneráció innovációiból – és új formanyelvéből – számos jövőbeni BMW modell előnyt kovácsol majd**.

Az új BMW iX3 modell végleges, sorozatban gyártott változatát a BMW Group szeptember elején, a müncheni IAA MOBILITY 2025 kiállításon mutatja be.

A vállalat csapata a gyáron belül és kívül egyaránt aktívan „építkezik”. A BMW Group azon belül természetesen a debreceni gyár esetében is igaz, hogy bárhol legyen is a világon, a közösség aktív részese szeretne lenni ott, ahol otthonra talál. A cég örömmel veszi az érkezése kezdete óta tapasztalt szívélyes fogadtatást, és a Debrecenben jövőt építő BMW Group Gyár Debrecen csapata számára fontos, hogy a helyi közösségi élet részese legyen értékteremtő kezdeményezésekkel.

A vállalat aktivitásai is jól mutatják, hogy a debreceni gyár rendre képviselteti magát azokon a hagyományokon alapuló programokon, amelyek a város identitásának szerves részét képezik, mindig törekedve arra, hogy kifejezésre juttassák az általuk képviselt értékeket és bemutassák a vállalat által kínált lehetőségeket is.

Az EcoPro BM vezető szerepet tölt be a nagy kapacitású katódanyagok piacán nem csak Koreában, hanem világszerte is azáltal, hogy elsőként fejlesztett ki és gyártott sikeresen nagy nikkeltartalmú katódanyagot.

Az elektromos járművek (EV-k), energiatároló rendszerek (ESS), szünetmentes tápegységek (UPS), intelligens hálózatok, repülőgép- és űrkutatási, orvosi és katonai célokra szánt lítium-ion akkumulátorok korlátlan jövőbeli növekedési potenciáljára alapozva az EcoProBM kulcsfontosságú alapanyag-vállalatként növekszik, hogy a következő generációs akkumulátorok globális vezetőjévé váljon.

Az EcoPro BM rendelkezik a prekursoroktól a katódanyagokig terjedő teljes folyamatszintézis technológiával. A vállalat kiváló minőségi és árverseny-képességi előnyökkel rendelkezik azáltal, hogy a prekursorokat a többi leányvállalatától szerzi be. A magas nikkeltartalmú, ultranagy kapacitású katódanyagokra összpontosítunk, és a vezető technológiák fejlesztése révén elősegítjük a kiváló, hosszú élettartamú és stabilitású egykristályos termékek, valamint a fokozott árversenyképességű termékek kifejlesztését. Vállalatunk különböző területeken alkalmazható elemi technológiát is fejleszt. Valamint, a minőségi termék gyártásához szükséges folyamattechnológia ellenőrzésével és fejlesztésével törekszünk a minőségi hibák csökkentésére.

Az EcoPro vállalatcsalád 2030-ra évi 770 000 tonna katódanyagot tervez szállítani három kontinens öt telephelyéről, ami 7 millió közepes méretű autó gyártásához elegendő. Gyártási bázisainkat nemcsak Magyarországra, hanem Kanadára, Indonéziára és a világ más részeire is kiterjesztjük, Koreára fókuszálva, amivel erősítjük ellátási láncunkat az európai és észak-amerikai piacon, ezen belül Németországban és az Egyesült Államokban.

Az elektromos járművek iránti növekvő keresletre reagálva 2018-ban megkezdtük első tengerentúli gyárunk tervezését Magyarországon. A Debrecenben található üzem az 1. fázisban és egy jövőbeli 2. fázisban együttesen évi 108 000 tonna katódanyagot fog előállítani, amivel a cél a 2025-ös tömegtermelés.

Annak érdekében, hogy fenntartható vállalatként felelősségteljes vállalatként tevékenykedjen, az EcoPro BM folyamatosan végez különböző társadalmi hozzájárulási tevékenységeket és környezetvédelmi erőfeszítéseket.



Az 1901-ben alapított Richter magyarországi központú, innovációra épülő, specializált multinacionális gyógyszercég. A Richter a régió legnagyobb innovációs bázisa, a legnagyobb elit szakértelmen és multidiszciplináris együttműködésen alapuló, nagy hozzáadott értékű iparágat művelő hazai tudáscentrum. A Richter az egyetlen olyan hazai, a nemzetközi piacokon is meghatározó gyógyszercég, amely külföldi szakmai befektető nélkül, magyar irányítással működik. A Richternek az anyavállalat mellett öt országban működnek termelő leányvállalatai, termékeit a világ csaknem száz országába juttatja el. A cég hazánkban 5600 főnek ad munkahelyet közvetlenül, a beszállítói körén keresztül pedig további 13000 embernek.

A cég küldetése, hogy az egészség megőrzését és az életminőség javítását szolgálja olyan magas hozzáadott értékű termékek piacra vitelével, melyeknek a fejlesztésében és előállításában speciális tudása van. A Társaság 2800 féle gyógyszert gyárt, termékei között originális, generikus, bioszimiláris és licenckészítmények egyaránt megtalálhatók, amelyek szinte valamennyi terápiás területen kínálnak hatékony, korszerű és elérhető árú gyógymódot. A cég kivételes figyelmet fordít a központi idegrendszerre ható, a szív- és érrendszeri, valamint a nőgyógyászati termékek fejlesztésére és gyártására. A régióban a Richter költ a legtöbbet kutatás-fejlesztésre: árbevétele 10%-át.

A Richter az egyetlen olyan hazai gyógyszercég, amely originális gyógyszerkutatást végez, 1200 főt meghaladó kutatófejlesztő bázisával Közép-Kelet-Európa legjelentősebb gyógyszerkutatási központja. A Richter az egyetlen olyan hazai gyógyszercég, amely saját biotechnológiai fejlesztéseket folytat, amelyek nemcsak Magyarországon, de regionális szinten is úttörőnek számítanak. A cég kiemelkedő ipari tudományos tevékenységet is végez, aminek köszönhetően 2024-ben a cég K+F igazgatósága megkapta az „MTA Kiváló Kutatóhely” minősítést.

A Richter pályázatokon és alapítványokon keresztül számtalan formában támogatja a természettudományos felső- és közoktatást. A cég jelentős anyagi támogatást nyújt egészségügyi intézményeknek és betegszervezeteknek, valamint nagy szerepet vállal a lakosság egészségének megőrzésében is. A Richter jelen van a legfontosabb tudományos és innovációpolitikai testületekben, fórumokon, és meghatározó jelentőséggel bír az egyetemi és kutatóintézeti alap kutatások számára. Aktívan támogat számos tudományos konferenciát és kutatási programot. A portfóliójához kapcsolódó kutatói műhelyekkel kutatási hálózatokat épít ki. A Richter hatása különösen jól érzékelhető a biológiai, az orvosi, a kémiai és gyógyszerészeti, a gazdálkodás és menedzsment, továbbá a szellemi tulajdonjogokhoz és a nemzetközi gazdasági kapcsolatok jogával foglalkozó tudományterületeken. A Richter a termékein és szolgáltatásain túl a szakmai gondolkodásra, az egészségügyi, ipari és innovációs stratégiák alakítására, a jogalkotásra, a támogatási rendszerre gyakorolt hatása révén is fontos szerepet játszik a hazai egészségügy, az egészséggazdaság, az egészségpolitika, a népegészségügy, az innovációpolitika és az iparpolitika alakításában.

A Samsung SDIHU Magyarország egyik vezető akkumulátorgyártó vállalata. A cég kulcsszerepet játszik a globális akkumulátoripar fejlődésében, különösen az elektromos járművek és az energiatároló rendszerek területén. A gödi telephely 2018-ban kezdte meg új működését akkumulátorgyártó üzemként, amely azelőtt képcsöves televíziót, később plazma TV-t gyártott.

Egyetemi együttműködések

A Samsung SDI kiemelt figyelmet fordít a tehetséggondozásra és az oktatás támogatására. Magyarországon több egyetemmel is szoros együttműködést alakított ki, köztük a Debreceni Egyetemmel. A pesti régióban nagy népszerűségnek örvend az egyetemi szintű Samsung-kurzus, amely az akkumulátoripar elméleti ismereteit adja át a hallgatóknak. Ezek az együttműködések nemcsak a hallgatók szakmai fejlődését segítik, hanem hozzájárulnak az iparág jövőbeli szakembereinek képzéséhez is. Emellett nagy sikerű a Samsung SDI Tech Forum, amely kifejezetten mérnököknek szóló szakmai napként teret biztosít az iparági trendek és innovációk megvitatására.



CSR Tevékenységek

A Samsung SDI társadalmi felelősségvállalási (CSR) programjai széleskörűek és sokrétűek. A vállalat elkötelezett a helyi közösségek támogatása iránt. A gödi gyár rendszeresen szervez faültetési programokat és hulladékgyűjtési kampányokat, véradást, adományozást különböző alapítványok számára. A munkatársak aktívan részt vesznek önkéntes programokban, amelyek célja a rászorulóknak segítése és a közösségi összetartozás erősítése.

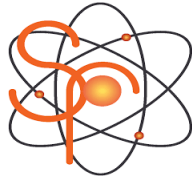


Innováció és Fenntarthatóság

A Samsung SDI folyamatosan investál új technológiák fejlesztésébe, mint például a szilárdtest-akkumulátorok és a lítium-vas-foszfát (LFP) akkumulátorok. A vállalat magyarországi gyára jelentős szerepet játszik az európai piac ellátásában, és hozzájárul a helyi gazdaság fejlődéséhez.

TÁMOGATÓK BEMUTATKOZÁSA

Science Port Kft.

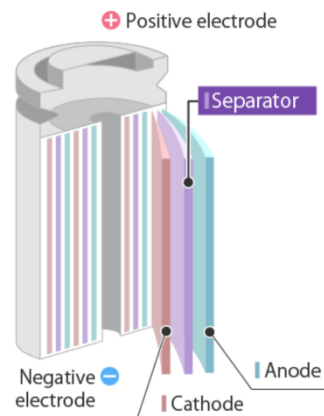


A Science Port Kft. 2012-ben alakult, főként analitikai kémiai vizsgálatokkal és tudományos tanácsadással foglalkozó vállalkozás. Korszerű, jól felszerelt laboratóriuma a legváltozatosabb minta-előkészítési és mérési feladatok elvégzésére is fel van készülve, a toxikológiai támogató vizsgálatoktól a nano-anyagok azonosításán és jellemzésén át egészen a hatósági kémiai karakterizációs vizsgálatokig. Egyedülálló módon a spektroszkópiás műszerpark az ultraviola spektrális tartománytól a távoli infra tartományig teljes lefedettséget biztosít az analitikai feladatokhoz. A laboratórium a legkülönbözőbb mintatípusok elemzéséhez nyújt műszeres háttérrel. A Science Port Kft. a Perkin Elmer magyarországi képviselőjének, a Per-Form Kft. szakmai tanácsadói csapatának tagja. A közeli infravörös spektrométer transzmittancia és mintaforgatóval rendelkező diffúz reflektancia (NIRA) kiegészítővel rendelkezik, a közép- és távoli infravörös spektrométer transzmittancia és csökkentett teljes visszaverődés (ATR) feltétellel, az UV-VIS spektrofotométer pedig integrálgömbös reflexiós feltétellel biztosít lehetőséget a legkülönbözőbb szilárd és folyadék minták elemzéséhez. Ezen kívül lehetőség van RAMAN és röntgen-fluoreszcencia és NMR mérések kivitelezésére. Kiemelt ágazat továbbá a nano-anyag vizsgálat, mely során többek között lézerdiffrakciós részecskeméret meghatározással teljeskörű nano-anyag karakterizáció lehetséges. A mérési adatok sokváltozós, kemometriai kiértékeléséhez természetesen a kellő szoftveres háttér és szakmai tudás is biztosított.

A cég kiemelkedő kapcsolatokat ápol a Debreceni Egyetemmel. Nem csak azért mert Elek János, az ügyvezető fél állásban a MÉK oktatója, hanem több projektjében is megbízást ad az Egyetem kiváló szakembereinek. Ezt közös PhD témavezetés, KDP-s hallgatók foglalkoztatása, nyárigyakorlatos hallgatók és szakdolgozók fogadása egészíti ki.

A SEMCORP Hungary Kft. a szeparátor fólia gyártás területén globális piacvezető SEMCORP Advanced Materials Group első európai gyára.

A SEMCORP élen jár a legmodernebb, környezetbarát technológiák kifejlesztése területén. Vezető elektromos járműgyártók elsődleges beszállítói vagyunk, termékeink pedig jelentősen hozzájárulnak az energiahatékonyság és biztonság növeléséhez az iparágban. Partnereink közé tartozik többet között a Samsung, LG, CATL, BYD, TESLA.



Mindemellett a cég nagy hangsúlyt fektet a munkavállaló-barát munkahelyek kialakítására, az egyéni karrierek támogatására, és társadalmi szerepvállalása is példamutató.

A SEMCORP számos, színvonalas munkahelyet kínál pályakezdő jelentkezőknek is. Amennyiben szívesen lennél része a SEMCORP innovatív világának küldd el jelentkezésedet az allas@semcorpglobal.com címre!



A Magyar Vegyipari Szövetséget (MAVESZ) 1990-ben alapították a hazai vegyiparban meghatározó szerepet játszó gazdasági társaságok. A Szövetség tagjai között megtalálhatóak a magyarországi piacvezető petrokémiai társaságok, a műtrágya- és növényvédőszer-gyártásban, a szénszálgyártásban, a festék- és háztartás-vegyiparban, a speciális és finom-kémiai anyagok gyártásában tevékenykedő vállalkozások, továbbá a vegyipari disztribútor és importőr társaságok. A MAVESZ a Magyarországon vegyipari tevékenységet folytató vállalkozások szakmai és munkaadói érdekképviselőjét látja el.

A Szövetség tevékenységének prioritásai között szerepel a környezetvédelem, iparbiztonság, munkavédelem és egészségvédelem. Ezeken a területeken aktívan közreműködik a hazai és EU jogalkotási folyamatokban, továbbá a nemzetközi Felelős Gondoskodás program széleskörű magyarországi elterjesztésében.

A MAVESZ tagja az Európai Vegyipari Tanácsnak (CEFIC), melyben aktívan képviseli a magyar vegyipar érdekeit az európai szinten. A CEFIC-en keresztül is részt vesz a MAVESZ számos, az EU intézményrendszere (Tanács, Bizottság, Parlament) által kezdeményezett jogszabályalkotási folyamatban és szakmai kezdeményezésben.

Kitüntetett szerepet tölt be a MAVESZ tevékenységében a szakmai utánpótlás biztosításának támogatása. Számos kormányzati szervvel, oktatási intézménnyel és civil szervezettel működik együtt annak érdekében, hogy segítse a fiatalok pályaorientációját és ezzel elősegítse az ipar szakember utánpótlásának kielégítését. 2013-ban megalapította a Kiváló Vegyészmérnöki Tanulmányokért MAVESZ Díjat, melyet évente a BME VBK, a Pannon Egyetem és a Debreceni Egyetem egy-egy végzős MSc hallgatója vehet át. A MAVESZ szakmai utánpótlás konferenciákat szervez, támogat több civil szervezetet és kezdeményezést (Kémia Mindenkinek), versenyek (Hevesy György Kémiaverseny, OTDK) támogatójaként lép fel és maga is szervez versenyt (MAVESZ-Szabó Szabolcs Alapítvány Projektverseny)

A MAVESZ Alapszabályában felvállalta ágazati munkaadói képviselői funkciók ellátását is. A Szövetségnek, fontos szerepe van a Vegyipari Ágazati Párbeszéd Bizottság (VÁPB) működésében, amelyen belül a munkaadói oldal elnöki feladatait is ellátja. A magyar vegyipar képviselőjében a MAVESZ részt vesz az Európai Vegyipari Társadalmi Párbeszéd Bizottság munkájában is, munkaadói oldalon a MAVESZ igazgatója tagja az Európai Vegyipari Munkaadók Szervezete (ECEG) elnökségének.

A MAVESZ elemzéseket készít és tájékoztatást ad a vegyiparban működő vállalkozások és szervezetek részére az európai és a magyar vegyipar fő számairól, trendjeiről, az ipart érintő jogszabályi változásokról és a folyamatban lévő EU, illetve hazai jogalkotási projektekről.

CÉGÜNKRŐL:

Az SPL foszgén bázisú intermedierek, növényvédőszer gyártásával és kereskedelmével foglalkozik. Fő ügyfeleink helyi és regionális disztribútorok és multinacionális vállalkozások. Vállalkozásunk 2008-ban kezdte meg tevékenységét a volt ÉMV (Észak Magyarországi Vegyiművek) eszközeinek megvásárlásával és a termelés újraindításával. Vállalatunk a Sajóbábonyi Ipari Parkban helyezkedik el, ahol a vegyipar hosszú tradícióval rendelkezik. Az ÉMV tradicionális foszgén bázisú agrokémiai termékei mellett vegyipari termékek bérnyártásával és egyedi gyártásokkal is foglalkozunk.

**VÍZIÓ ÉS KÜLDETÉS:**

Nemzetközileg vezető szerepet kívánunk betölteni a foszgén bázisú intermedierek és termékek gyártásának területén középpontba helyezve a minőség menedzsmentet és a vevői elégedettséget.

Technológiáink és erőforrásaink ésszerű kihasználásával és fejlesztésével folyamatosan bővítjük termékportfóliónk, mely hozzásegít a folyamatos növekedéshez, miközben szigorúan betartjuk a környezetvédelmi előírásokat és politikánkat.



Az alapítványi formában működő, idén 70 éves francia Servier cég gyógyszerkémiai kutatási tevékenységének számottevő része a budapesti Graphisoft Park közepén elhelyezkedő intézetünkben történik. 60 magasan képzett kollégánk az onkológia és a központi idegrendszeri betegségek gyógyszereit kutatja. Az elmúlt 15 év áttörő felfedezései számos gyógyszerjelölthöz vezettek, melyek közül már a harmadik lépett klinikai vizsgálati fázisba.

Az elmúlt évtized folyamatosan magas szintű kutatási tevékenységének elismeréseként 2024-ben elnyertük a Magyar Tudományos Akadémia Kiváló kutatóhely minősítését. A hazai és nemzetközileg is elismert kutatócsoportokkal való szoros együttműködés eredményeként több PhD ösztöndíjas és posztdoktori munkatárs is kutat intézetünkben, illetve a Servier támogatásával akadémiai partnereinknél. Intézetünk fennállása óta aktívan részt vesz a szakmai utánpótlás nevelésében is. Szinte minden hazai képzőhelyről fogadunk szakmai gyakorlatra diákokat.

A Servier elkötelezett a fenntartható fejlődés és egy élhetőbb világ mellett. Ezért kiemelt figyelmet fordítunk az olyan technológiai megoldásokra, amelyek csökkentik ökológiai lábnyomunkat. Az elmúlt években például felépítettünk egy biotranszformációs csoportot, amely a természetes enzimeket és ezek továbbfejlesztett változatait használja kémiai átalakításokra.

A szigorúan vett napi munka mellett munkatársaink a hazai és nemzetközi tudományos-szakmai közéletnek is aktív résztvevői. Ezen kívül örömmel veszünk részt a társadalmi felelősség-vállalás jegyében segítő tevékenységben is. Így az elmúlt években cégünk anyagi támogatásán túl közel 50 munkatársunk áldozta idejét és energiáját a társadalom perifériáján élők megsegítésére, felzárkóztatásának támogatására.

A Tevánál generációk dolgoznak együtt az egészségért. Büszkék vagyunk arra, hogy csapatunkban a legfiatalabb és a legidősebb kollégánk között több évtizednyi korkülönbség van. Ez a tapasztalatbeli, korosztálybeli és tudásbeli sokszínűség az, ami előrevisz minket, és ami biztosítja folyamatos fejlődésünket. Ennek köszönhetően az elmúlt években debreceni telephelyünk a Teva stratégiai fontosságú K+F központjává és gyártóhelyévé nőtte ki magát, termékeink Európában, Dél-Amerikában, sőt még Új-Zélandon is, a világ 50 országában járulnak hozzá a betegek gyógyulásához, mindamelllett, hogy a magyar páciensek életének jobbá tételét is segítik. Gyógyszereink javíthatják az életminőséget, gondtalanabb élethez segíthetik hozzá a betegeket, de akár életmentők is lehetnek. Komplex termékportfóliónk és összetett gyártási folyamataink szükségessé teszik a folyamatos fejlődést, melynek kulcsa a nálunk dolgozó generációk tudásában és elhivatottságában rejlik.

Mind napi munkánk, mind pedig beruházásaink során kiemelkedő fontossággal kezeljük a környezetvédelem kérdését is. Fenntarthatósági stratégiánk vezérel bennünket, amikor a betegeinkről gondoskodunk. Az elmúlt időszakban vállalatunk sokoldalú energiamegtakarítási programot vezetett be, melynek eredményeként 2024-ben második alkalommal érdemeltük ki az Energiahatékony Vállalat megtisztelő címet is.



DEBRECENI EGYETEM



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI
ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL

AZ NKFI ALAPBÓL
MEGVALÓSULÓ
PROJEKT



Az OTDK támogatója a Nemzeti Média- és Hírközlési Hatóság.

www.otdk.hu

www.kemia.unideb.hu/37otdk