



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

2016

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülések kezdete: 2016. november 17. 8:15

Eredményhirdetés a Ch. C. 14-ben: 2016. november 17. 18:30

	Elméleti Kémia és Analitika Szekció K. I.34.	Anyagtudományi és Polimer Kémiai Szekció K. Mf. 34.	Kémiai Technológiák és Vegyipari Művetetek Szekció Ch.C. 14.	Biokémia és Biotechnológia Szekció Ch. 201.	Szerves Kémia Szekció Ch. 308.	Szerves Kémiai Technológia Szekció Ch. A. 10.	
08:15-08:30	Li Claudia	Fodor Hanna	Nusser Dávid György	Herczeg Viktória	Petró József Levente	Kalocsai Dorottya	08:15-08:30
08:30-08:45	Füredi Adrienne	Nagy Sebestyén	Kolarovszki Zoltán	Fózer Dániel	Kozma József	Ignác Gergő	08:30-08:45
08:45-09:00	Pánczél János Károly	Szemerszki Dóra	Tacsi Kornélia	Móznér Orsolya	Nagy Sándor	Harsági Nikolett	08:45-09:00
09:00-09:15	Le Ba Thong	Bérczes Virág	Kató Zoltán	Lónyi Flóra	Gyűjtő Imre	Kiss Ágoston	09:00-09:15
09:15-09:30	Bódi Dorina	Lővi Vilmos	Farkas Balázs	Hajdú Fanni	Spatis András	Cseresnyés Dóra	09:15-09:30
09:30-09:45	SZÜNET						
09:45-10:00	Szabó Gergő	Rudas Dorottya	Decsov Kata Enikő	Vidra Aladár	Juhász Kinga	Bognár Zsolt	09:45-10:00
10:00-10:15	Slezsák János	Késmárki András	Hegyalvi Csaba	Csaplár Marianna	Gyórfi Nándor	Józsa Máté	10:00-10:15
10:15-10:30	Faragó Endre Zoltán	Bakos László Péter	Tarjáni Ariella Janka	Varga Julia	Henyevez Réka	Domokos András	10:15-10:30
10:30-10:45	Kovács Miklós Márton	Unyi Dániel	Kubovics Márta	Csizmadia Georgina	Angyal Péter	Dénes Márk	10:30-10:45
10:45-11:00	Tóth Gábor	Kanyó László	Hajnal Ádám	Tordai Klaudia Teréz	Tihanyi Inez	Pálvölgyi Ádám Márk	10:45-11:00
11:00-11:15	SZÜNET						
11:15-11:30	Bodrogi Dominika	Vadas Dániel	Czezon Zsombor	Rozbach Margaréta	Huszár Bianka	Bohus Márton	11:15-11:30
11:30-11:45	Takács Gergely	Fleischer-Radu Éva	Fajoyomi Christopher	Hollósi Anna			11:30-11:45
11:45-12:00	Lovász Ádám	Fazekas Réka Árnika	Ráskai Ákos	Csabán Dóra			11:45-12:00
12:00-12:15	Tihanyi Gergely	Bartha Katalin	Mihály Zsolt	Kirchkeszner Csaba			12:00-12:15
12:15-12:30	Bodák Brigitta			Roznár Petra			12:15-12:30

A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán megrendezett 2016. évi
Tudományos Diákköri Konferenciát
a következő cégek és szervezetek támogatták:

BME Rektori Hivatal

BME VBK Dékáni Hivatal

BME Egyetemi Hallgatói Képviselő

Magyar Kémikusok Egyesülete

Pro Progressio Alapítvány

Varga József Alapítvány

Richter Gedeon Nyrt.

Egis Gyógyszergyár Zrt.

Chinoin Gyógyszer és Vegyészeti Termékek Gyára Zrt.

Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft.

Dr. Pungor Ernő családja

Nemzeti Tehetség Program (NTP-HHTDK-16-0016 pályázat)

BME VEGY-ÉRTÉK Tehetségpont



ELMÉLETI KÉMIA ÉS ANALITIKA SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Horvai György egyetemi tanár**
Koordinátorok: **Dr. Madarász János egyetemi docens**
Dr. Rolik Zoltán tudományos munkatárs
Dr. Török Kitti egyetemi tanársegéd
Titkár: **Krezinger Anikó tudományos segédmunkatárs**

Helye: K.I.34.

- 8:15 Li Claudia**
Hipervalens titánvegyületek vizsgálata
- 8:30 Füredi Adrienne**
SELEX eljárásban alkalmazható magnetoforetikus részecske szeparáció és csapdázás mikrofluidikai rendszerekben
- 8:45 Pánczél János Károly**
Lítiumkatalizált Oppenauer-oxidáció vizsgálata számítástechnikai módszerekkel
- 9:00 Le Ba Thong**
Összetett aromás kölcsönhatási energiák pontos számítása diszperzió-korrigált sűrűségfüggvényes módszerekkel
- 9:15 Bódi Dorina**
Foszfórén nanopelyhek: új, flexibilis anyagok hangolható mechanikai és optikai tulajdonsággal
- 9:30 Szünet**
- 9:45 Szabó Gergő**
A víz savassága DMSO-ban, mint a klaszterképződés indikátora
- 10:00 Slezsák János**
Gyógyszeripari alapanyagok polimer csomagolóanyagokon keresztül való mérése különböző optikai elrendezésű NIR spektrofotométerekkel
- 10:15 Faragó Endre Zoltán**
Oxigénnel dópolt szén-nanocsövek szerkezete és stabilitása
- 10:30 Kovács Miklós Márton**
Differenciális elrendezésű nanopórusos ionszelektív szenzorok vizsgálata analitikai teljesítményjellemzők szempontjából
- 10:45 Tóth Gábor**
Saját töltésű kapilláris HPLC oszlopok készítése proteomikai vizsgálatokhoz
- 11:00 Szünet**
- 11:15 Bodrogi Dominika**
Nukleofil szubsztitúció részlegesen redukált grafén-oxid felületen
- 11:30 Takács Gergely**
Különböző genomi uracil kvantifikáló módszerek optimalizálása, és alkalmazása teljes átalakulással fejlődő rovarokban
- 11:45 Lovász Ádám**
Vér-agy gát permeabilis és acetilkolin-észteráz gátló komponensek azonosítása PAMPA-BBB és HPLC-MS/MS módszerekkel növényi kivonatokban
- 12:00 Tihanyi Gergely**
A genomban található uracilmolekulák *in situ* meghatározására alkalmas jelzőfehérje-rendszer kifejlesztése
- 12:15 Bodák Brigitta**
Új real-time képalkotó eszköz fejlesztése gyógyszeripari kristályosítás szabályozására

ANYAGTUDOMÁNY ÉS POLIMER KÉMIAI SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Kubinyi Miklós egyetemi tanár**
Koordinátorok: **Dr. Móczó János tudományos munkatárs**
Dr. Gyarmati Benjámin Sándor egyetemi adjunktus
Titkár: **Kun Dávid PhD hallgató**

Helye: K.mf.34.

8:15 Fodor Hanna

Határfelületi kölcsönhatások módosítása PET szál erősítésű PP kompozitokban

8:30 Nagy Sebestyén

Kristályos nanocellulóz előállítása, jellemzése és alkalmazása

8:45 Szemerszki Dóra

Modellhatóanyagok diffúziós koefficiensének közvetlen meghatározása amorf poli(3-hidroxi-butirát) mátrixban

9:00 Bérczes Virág

Hatóanyag-leadást befolyásoló kölcsönhatások lágy gélekben

9:15 Lővi Vilmos

PLA/kitozán alapú szálak előállítása elektromos szálhúzással szövettenyésztési célokra

9:30 Szünet

9:45 Rudas Dorottya

A poli(3-hidroxi-butirát) enzimatis degradációjának kvantitatív jellemzése kinetikai modellszámítások segítségével

10:00 Késmárki András

Műanyagok felületi tulajdonságainak módosítása hidegplazmás eljárással

10:15 Bakos László Péter

Mag/héj és üreges szén nanogömb/fém-oxid nanokompozitok

10:30 Unyi Dániel

Fluoreszcens szilícium-karbid nanokristályok felületmódosítása

10:45 Kanyó László

PHB/kitozán szálak előállítása elektromos szálhúzással mesterséges szövettenyésztési alkalmazásra

11:00 Szünet

11:15 Vadas Dániel

Égégátolt politejsav habok előállítása szuperkritikus széndioxiddal segített extrúzióval

11:30 Fleischer-Radu Éva

Új numerikus számítási módszer a kristályos polimerek göcsűrűségének számítására izoterm kristályosodási görbéből

11:45 Fazekas Réka Árnika

Kontrollált hatóanyag-leadású gyógyszerhordozó rendszerek fejlesztése elektrosztatikus szálképzéssel

12:00 Bartha Katalin

Poli(3-hidroxi-butirát) alapú scaffoldok előállítása és hatóanyag hordozó mátrixként történő alkalmazása

BIOKÉMIA ÉS BIOTECHNOLÓGIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Salgó András egyetemi tanár**
Koordinátorok: **Dr. Fehér Csaba egyetemi tanársegéd**
Dr. Oláh Julianna egyetemi adjunktus
Dr. Wunderlich Livius egyetemi adjunktus
Titkár: **Szabó Éva PhD hallgató**

Helye: Ch. 201.

- 8:15 Herczeg Viktória**
Új uracil-DNS metabolizmus befolyásoló fehérjék kutatása
- 8:30 Fózer Dániel**
Mikroalga biofinomító upstream technológiájának fejlesztése és kinetikai modellezése
- 8:45 Mózner Orsolya**
Alacsony fehérje expressziót okozó ABCG2 mutációk keresése köszvényes betegekben
- 9:00 Lónyi Flóra**
Tartós quercetin táplálékkiegészítés mérsékeli a koronária hálózat hipertónia indukálta előnytelen átépülését
- 9:15 Hajdú Fanni**
Újszerű antimaláriás célpont: a CCT enzim katalízisének és annak szabályzásának molekuláris alapjai
- 9:30 Szünet**
- 9:45 Vidra Aladár**
Komplex tejsavó hasznosítás: a propionsav alternatíva
- 10:00 Csaplár Marianna**
A Parkinson-kór biomarker fehérjéinek szerkezeti és funkcionális jellemzői
- 10:15 Varga Julia Kornélia**
Szerkezeti genomikai célpontok azonosítása a humán transzmembrán proteomban
- 10:30 Csizmadia Georgina**
Tau protein *in silico* szerkezetvizsgálata
- 10:45 Tordai Klaudia Teréz**
Folyamatos üzemű nedves granulálási eljárás fejlesztése
- 11:00 Szünet**
- 11:15 Rozbach Margaréta**
Fermentációs úton történő xilit előállítás búzaszalmából
- 11:30 Hollósi Anna**
Az ösztrogén receptor szerepe a plazmamembrán kalcium ATP-áz 4b izoforma expressziójának szabályozásában emlőtumor sejtekben
- 11:45 Csabán Dóra**
Genetikai rizikótényezők vizsgálata magyar Alzheimer kóros betegekben
- 12:00 Kirchkeszner Csaba**
Innovatív talajjavítás hulladékokból és melléktermékekből előállított bioszénnel és komposzttal szabadföldi kísérletekben
- 12:15 Roznár Petra**
Gluténmentes termékfejlesztés új irányai: hajdinalisztek tápértékének és térszárak reológiai viselkedésének célzott módosítása

KÉMIAI TECHNOLÓGIÁK ÉS VEGYIPARI MŰVELETEK SEKCIÓ

Elnök: **Dr. Deák András egyetemi docens**
Koordinátorok: **Lakné Dr. Komka Kinga egyetemi adjunktus**
Dr. Weiser Diána posztdoktor
Titkár: **Tajti Ádám PhD hallgató**

Helye: Ch. C.14.

8:15 Nusser Dávid György

Folyamatos gyógyszeripari homogenizáló rendszer fejlesztése, valós idejű Raman kontroll megvalósításával

8:30 Kolarovszki Zoltán

Gőz-folyadék egyensúlyi adatok konzisztenciájának vizsgálata egy új módszerrel

8:45 Tacsí Kornélia

ATR-UV/Vis és Raman spektroszkópián alapuló visszacsatolásos szabályozás fejlesztése

9:00 Kató Zoltán

Félüzemi abszorpciós mérőberendezés tervezése

9:15 Farkas Balázs

Cellulóz-éterek szálképezhetőségének vizsgálata váltóáramú elektrosztatikus szálképzéssel a spironolakton oldódásának gyorsítására

9:30 Szünet

9:45 Decsov Kata Enikő

Raman spektroszkópia alkalmazása önerősített polipropilén kompozitok roncsolásmentes szerkezetvizsgálatában

10:00 Hegyfalvi Csaba

A fedőközetet alkotó agyagásvány átalakulása szuperkritikus szén-dioxid hatására

10:15 Tarjáni Ariella Janka

Hagyományos és osztófalas desztilláló kolonnák szabályozhatóságának összehasonlító elemzése

10:30 Kubovics Márta

Galagonya kivonatok készítése, elemzése, valamint szív és érrendszerre történő hatásának vizsgálata

10:45 Hajnal Ádám

Hangyasav-gamma-valerolakton gőz-folyadék egyensúlyának vizsgálata

11:00 Szünet

11:15 Czeczon Zsombor

Növényi kivonat finomítása antiszolvens kristályosítással

11:30 Fajoyomi Christopher Rotimi

”Mesterséges földgáz” előállítása Sabatier reakcióval, megújuló energia felhasználásával

11:45 Ráskai Ákos

Paksi Atomerőmű radioaktív hulladékának nukleáris spektroszkópiai vizsgálata

12:00 Mihály Zsolt

Drogextrakciós üzem termelésének az optimalizálása

SZERVES KÉMIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Poppe László egyetemi tanár**
Koordinátorok: **Dr. Grün Alajos egyetemi docens**
Dr. Mátravölgyi Béla tudományos munkatárs
Titkár: **Oláh Márk PhD hallgató**

Helye: Ch. 308.

8:15 Petró József Levente

Új, akridin egység tartalmú királis koronaéter alapú szelektorok szintézise és alkalmazása

8:30 Kozma József

Újfajta makrociklusos receptorok: pillérarén-alapú kemoszenzor az adenzin-5'-trifoszfát szelektív detektálására

8:45 Nagy Sándor

A fehér lilium laktám-gyűrűt tartalmazó alkaloidjainak első, racém szintézise

9:00 Gyűjtő Imre

Váratlan, bázis hatására bekövetkező átrendeződési reakció a 3-acetil-2-metil-3,4-dihidro-2*H*-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid származékok körében

9:15 Spaits András

Pirrolidon gyűrűt tartalmazó flavonoid alkaloidok biomimetikus szintézise

9:30 Szünet

9:45 Juhász Kinga

P-Sztereogén centrumot tartalmazó foszfin-oxidok alkalmazhatóságának vizsgálata enantioszelektív katalitikus *Wittig*-reakcióban

10:00 Győrfi Nándor Zsolt

Heteroaromás vegyületek trifluormetilzése

10:15 Henyecz Réka

Foszfinátok és foszfonátok előállítása észterezés reakciókkal

10:30 Angyal Péter

Aspidospermán vázas indol alkaloidok organokatalitikus, divergens szintézise

10:45 Tihanyi Inez

Foszinsavak észterezése fenol-származékokkal ionos oldószer jelenlétében

11:00 Szünet

11:15 Huszár Bianka

Palládium katalizált P–C kapcsolási reakciók vizsgálata

SZERVES KÉMIAI TECHNOLÓGIA SZEKCIÓ

Elnök: **Dr. Fogassy Elemér** professzor emeritusz
Koordinátorok: **Dr. Bagi Péter** posztdoktor
Dr. Hegedűs László tudományos főmunkatárs
Titkár: **Démuth Balázs** PhD hallató

Helye: Ch. A.10.

8:15 Kalocsai Dorottya

(S)- α -feniletilaminofoszfónatok és származékaik előállítása Kabachnik-Fields reakcióval mikrohullámú körülmények között

8:30 Ignácz Gergő

Szintetikus metalloporfirinek előállítása és alkalmazása gyógyszervegyületek biomimetikus oxidációjában

8:45 Harsági Nikoletta

Foszfinátok hidrolízisének vizsgálata

9:00 Kiss Ágoston

1-Fenilpirrol alapvázú, atropizomer foszforamidok előállítása és vizsgálata

9:15 Cseresnyés Dóra

7-Foszfánorbornének szintézise és redukciójának megvalósítása

9:30 Szünet

9:45 Bognár Zsolt

Indeno[1,2-b]fluorén-6,12-dion molekulaváz kialakításának vizsgálata

10:00 Józsa Máté

Gamma-valerolakton alapú ionos folyadékok előállítása és jellemzése

10:15 Domokos András

Acetilszalicilsav teljesen folyamatos szintézise és formulációja elektrosztatikus szálképzés alkalmazásával

10:30 Dénes Márk

Cukoralapú epoxi komponens kontrollált előállítása PAT reaktorban

10:45 Pálvölgyi Ádám Márk

D-Glükopiranozid alapú királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként

11:00 Szünet

11:15 Bohus Márton

Furfural homogénkatalitikus hidrogénezésének vizsgálata

A DOLGOZATOK ÖSSZEFOGLALÓI

Hipervalens titánvegyületek vizsgálata

Li Claudia, II. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kelemen Zsolt** tudományos segédmunkatárs

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

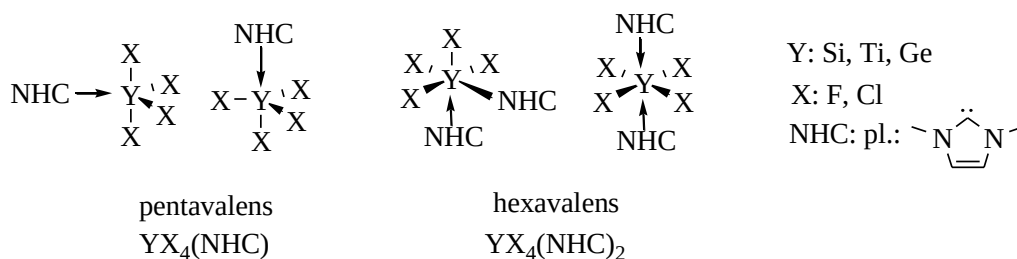
Konzulens: **Dr. Nyulászi László** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A molekulák elektronszerkezetét általánosan az oktett-szabály írja le, amely szerint a molekulát úgy építik fel az atomok, hogy azok vegyértékhéjain nyolc elektron legyen. Ezen szabály alól azonban léteznek kivételek. Ha a molekulát alkotó atomok vegyértékhéján nyolcnál több elektron van, akkor hipervalens vegyületekről beszélünk, amiknek koordinációs száma nagyobb négynél és központi atomjuk nagyrészt a harmadik és negyedik periódus elemeiből tevődik ki.

A karbén ligandumot is tartalmazó hipervalens titán vegyületek ($YX_4(NHC)$, $YX_4(NHC)_2$, $Y = Ti$, $X =$ halogén, $NHC =$ nitrogén-heterociklusos karbén, 1. ábra) egyedi elektronszerkezetük mellett és katalitikus alkalmazhatóságuk miatt váltak napjainkban intenzíven kutatott területté.¹

Munkám során célul tűztem ki e vegyületek kötésviszonyainak és stabilitásának vizsgálatát kvantumkémiail módszerekkel. A vizsgálatokat kiterjesztem az eddig még szintén részletesen nem vizsgált germánium analógokra ($GeX_4(NHC)$ és $GeX_4(NHC)_2$ $X = F, Cl$), illetve a jobb összehasonlítás végett a korábban kutatócsoportunk által már vizsgált szilícium vegyületekre ($SiX_4(NHC)$ és $SiX_4(NHC)_2$ $X = F, Cl$).



1. ábra: Karbén stabilizált hipervalens titán és analóg germánium és szilícium komplexek: axiális és ekvatoriális elrendeződésű pentakoordinált ($YX_4(NHC)$) és hexakoordinált ($YX_4(NHC)_2$) komplexek

2.

¹ a) D. Zhang, G. Zi, *Chem. Soc. Rev.*, **2015**, 44, 1898—1921, b) M. Niehues, G. Kehr, G. Erker, B. Wibbeling, R. Fröhlich, O. Blacque and H. Berke, *J. Organomet. Chem.*, **2002**, 663, 192–203.

² O. Hollóczki, L. Nyulászi *Organometallics* **2009**, 28, 4159–4164 4159

SELEX eljárásban alkalmazható magnetoforetikus részecske szeparáció és csapdázás mikrofluidikai rendszerekben

Füredi Adrienne, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Fürjes Péter** tudományos főmunkatárs

MTA Energiatudományi Kutatóközpont,

Holczér Eszter tudományos segédmunkatárs

MTA Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi
Intézet

Konzulens: **Dr. Wunderlich Lívius** egyetemi adjunktus

BME VBK Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Napjainkban a diagnosztikai eljárások döntő része egy adott fehérje molekula detektálásán alapul, melyekhez általában az adott molekulához specifikusan és nagy affinitással kötődő ellenanyagokat alkalmaznak receptorként. Az ellenanyagok lehetséges alternatívái lehetnek a kismolekulákat, fehérjéket szelektíven felismerő szintetikus oligonukleotid molekulák, az aptamerek. Előállításuk in vitro módszerrel, az ún. SELEX (Systematic Evolution of Ligands by Exponential Enrichment) eljárás segítségével megvalósítható, mely azonban idő és költség igényes folyamat. Az eljárás egyes lépéseinek mikrofluidikai környezetbe való átültetésével, a mikrofluidikai SELEX (mSELEX) módszer segítségével a minta és reagens igény, valamint a szelekciós idő és szelekciós körök száma is drasztikusan csökkenthető. A módszer alkalmazásával lehetőség nyílik olyan hordozható eszközök létrehozására melyen az aptamer szelekció gyorsan és olcsón, nagy hatékonysággal elvégezhető.

Munkám során a SELEX eljárásban gyakran alkalmazott magnetoforetikus szeparáció mikrofluidikai környezetben történő adaptálása, vizsgálata és optimalizálása volt a cél. Ferromágneses (FeNi) mikrostruktúra mikrofluidikába történő beágyazásával a mágneses tér laterális eloszlása megfelelően módosítható, lokalizálható, így precízen és automatikusan manipulálható már kis mennyiségű mágneses gyöngy is a magnetoforetikus jelenségek kihasználásával. A vizsgált mikrofluidikai struktúrákat a hagyományos mikrogépészeti és soft litográfiás módszerek kombinálásával alakítottam ki heterogén, üveg-polimer (PDMS, polidimetil-sziloxánban) rendszerben. Az egyes rendszerek szeparációs és csapdázási paramétereit, valamint hatékonyságát fluoreszcensen jelölt mágneses gyöngyök viselkedésének elemzése alapján jellemeztem. Tapasztalataimra alapozva javaslatot tettem egy hatékony magnetoforetikus mikrofluidikai szeparációs (MMS) geometriára.

Lítiumkatalizált Oppenauer-oxidáció vizsgálata számítási kémiai módszerekkel

Pánczél János Károly, II. évf. (MSc)

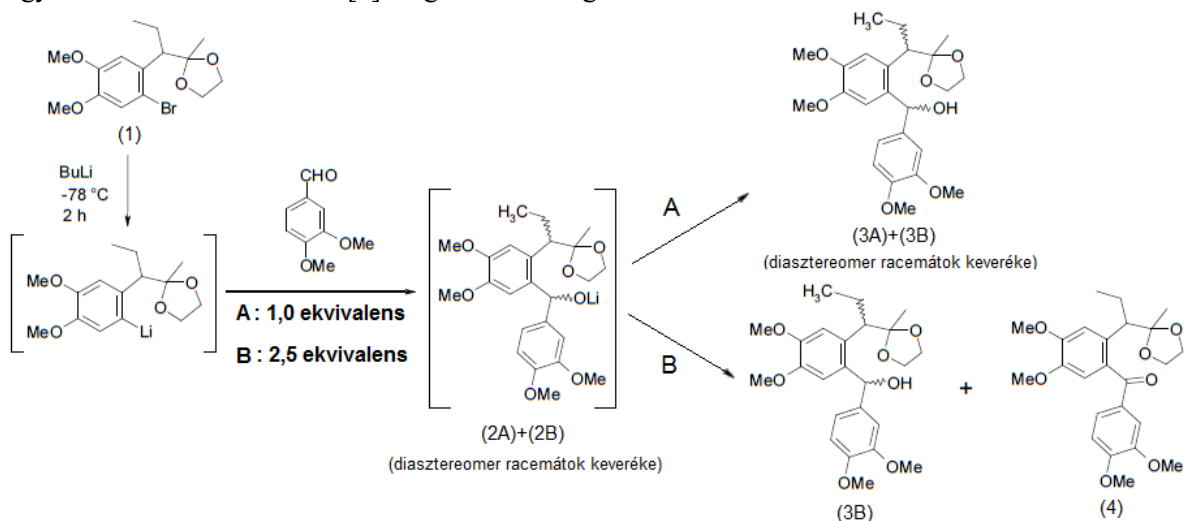
Témavezető: **Dr. Benkő Zoltán** egyetemi adjunktus

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Volk Balázs** hatóanyagfejlesztési igazgató

EGIS Gyógyszergyár Zrt.

Napjainkban a számítási kémia az ipari alkalmazásokban is kezd teret hódítani, mivel anyag- és vegyszerfelhasználás nélkül gyors, olcsó és megbízható eredményeket szolgáltat a reakciók mechanizmusára, energetikájára és végeredményére vonatkozóan. Munkám során a tofisopam nevű gyógyszermolekula szintézisében fontos diaril-ke-ton **(4)** újfajta előállítás (ld. ábra) során tapasztalt nagyfokú sztereoselektivitás [1] megértéséhez végeztem kvantumkémiai számításokat.



Az **(1)** aril-bromid litiálása után kapott terméket 3,4-dimetoxibenzaldehiddel reagáltatva többféle termék is keletkezhet: Ekvimoláris mennyiségű aldehidet alkalmazva – hidrolízis után – a **(3A)** és **(3B)** szekunder alkoholok elegye keletkezik. Ezzel ellentétben az aldehidet feleslegben alkalmazva a **(3B)** termék mellett a **(4)** keton is keletkezik, mely a tofisopam szintézisének kiindulási anyaga. A keton keletkezésének feltételezett magyarázata a **(2A)** köztitermék sztereoselektív lítium-katalizált Oppenauer-oxidációja. [1]

Vizsgálataim során a **(2A)** illetve **(2B)** lítium-alkoxidok és a 3,4-dimetoxibenzaldehid közötti Oppenauer-oxidációt modelleztem. Számításokat végeztem kisebb modellrendszerekre (a metoxicsoportokat hidrogénnel helyettesítve), valamint a valós molekulákra különböző számítási szinteken, emellett figyelembe vettem az oldószer (tetrahydrofuran) hatását implicit és explicit modellel. Az eredmények alapján, kinetikai és termodinamikai megfontolásokat figyelembe véve javaslatot tettem a reakció mechanizmusára, valamint a tapasztalt szelektivitás eredetére. Mivel az Oppenauer-oxidáció egy gazdaságos alternatíva lehet a **(4)** keton közvetlen előállítására, vizsgáltam különböző aldehidek és ketonok felhasználási lehetőségét is.

Összetett aromás kölcsönhatási energiák pontos számítása diszperzió-korrigált sűrűségfukcionál módszerekkel

Le Ba Thong, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Csonka Gábor István** egyetemi tanár
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Mezei Pál Dániel**
MTA-BME Lendület Kvantumkémiai Kutatócsoport

A szerves és biomolekuláris kémiában az aromás π - π rendszerek kölcsönhatási energiájának pontos számítása elengedhetetlen, mivel az aromás gyűrűk közötti gyenge kölcsönhatások gyakran meghatározzák a szupra- vagy makromolekuláris rendszerek szerkezetét. A sűrűségfukcionál közelítések fizikai alapon létrehozott, gyors kvantumkémiai módszerek. E közelítések azonban jelentős hibákat eredményezhetnek az intermolekuláris kölcsönhatások számításánál, így a feladat megoldásához korrekciók bevezetésére és azok tesztelésére van szükség.

TDK munkám során a különböző orientációjú benzol-benzol, illetve a benzol-naftalin rendszerek π - π kölcsönhatási energiáit és potenciálgörbéit számítottam különböző diszperzió korrigált sűrűségfukcionál módszerekkel. Kutatásom célja az volt, hogy kiválasszam a kölcsönhatási energiát legpontosabban leíró módszert.

Munkám során kimutattam, hogy a PBE0-VV10 és TPSSh-VV10 módszerek képesek megfelelő pontossággal leírni a π - π kölcsönhatás energetikáját a benzol-benzol és benzol-naftalin dimerekben. A PBE0-VV10 módszerrel ellentétben azonban a TPSSh-VV10 módszerrel számított benzol és naftalin dimerek relatív kölcsönhatási energia sorrendje helytelen. Kimutattam továbbá, hogy a PBE0-VV10 módszer jobban teljesít a szendvics benzol-benzol, valamint a szendvics és T-alakú benzol-naftalin dimerek potenciál görbéi esetében. A TPSSh-VV10 módszer pedig jobban teljesít a párhuzamosan eltolts és T-alakú benzol-benzol, valamint a párhuzamosan eltolts benzol-naftalin dimerek esetében. A kisebb eltérésektől eltekintve mindkét módszer megbízhatóan teljesít.

Összességében elmondható, hogy munkám során olyan új eredményeket kaptam, melyek lehetővé teszik a π - π kölcsönhatások gyors és pontos számítását akár nagyobb aromás szénhidrogének között kialakuló kölcsönhatások esetében is.

Foszforén nanopelyhek: új, flexibilis anyagok hangolható mechanikai és optikai tulajdonsággal

Bódi Dorina, III. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Hóltzl Tibor** fejlesztőmérnök

FETI Kft.

Dr. Veszprémi Tamás egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A kétdimenziós (2D) anyagok olyan kristályos anyagok, amelyet egy- vagy néhány réteg atom épít fel. Az első előállított kétdimenziós anyag a grafén volt, melyet a grafit egyetlen rétegét leválasztva kaphatunk meg. A kétdimenziós anyagok segítségével olyan új termékek állíthatók elő, melyek az eddigi technológiákkal és anyagokkal nehezen, vagy egyáltalán nem valósíthatók meg. Tudományos érdekességük és a különböző területeken való ígéretes alkalmazásuk (mint például napelemek, félvezetők, elektródák, víztisztítás) miatt a kétdimenziós anyagok kutatásában és technológiájában szédületes fejlődésnek lehetünk tanúi.

Az egyik legígéretesebb új kétdimenziós anyag a foszforén. A periódusos rendszer egyik érdekes jellemzője az ún. diagonál szabály, ami azt jelenti, hogy egy bizonyos elem kémiai tulajdonságaiban hasonlít a hozzá képest jobb alsó átlóban található elemre. A foszfor esetén ennek alapján szénhez hasonló kémiai viselkedést várunk, azaz a grafittal analóg, réteges szerkezetű feketefoszfor felveti a lehetőségét, hogy leválasszunk egyetlen réteget. A ragasztószalagos eljárással grafitból kapott grafén mintájára előállítottak már feketefoszforból foszforént. A foszforén félvezető és közvetlen tiltott sávval rendelkezik, melynek szélessége kb. megegyezik a szilíciuméval. Anizotróp szerkezete különleges mechanikai, elektronikai, mágneses, optikai és termikus tulajdonságok megjelenéséhez vezetnek.

Munkám célja a foszforén kétdimenziós rácsából származtatható nanorészecskék új tulajdonságainak feltárása és annak megértése, hogy ezek a tulajdonságok miképp befolyásolhatók a részecske méretének és alakjának változtatásával. A foszforén nanorészecskék ("nanopelyhek" - angolul nanoflake) tulajdonságait (szerkezet, stabilitás, flexibilitás, optikai tulajdonságok) vizsgáltam számításhoz kémiai módszerek segítségével. A vizsgálatok során különböző számítási módszereket teszteltem és kiválasztottam a vizsgált tulajdonságok leírására legalkalmasabbat.

Stabilitását vizsgálva elmondható, hogy a foszforén nanopelyhek energiája minden esetben kisebb a fehérfoszforénál, azaz energetikai szempontból viszonylag stabilis szerkezetekről van szó. Azonban a különböző hőmérsékleten végzett szabadentalpia számítások azt mutatták, hogy foszfinból való gázfázisú előállítás során a fehérfoszfor képződése várható a nagyobb entrópiánövekedés miatt, így a nanopelyhek várhatóan oldatban vagy felületen állíthatók elő.

Dinamikai számításokból azt a következtetést vonhatjuk le, hogy bár a foszforén nanopelyhek flexibilisek, de szobahőmérsékleten és 500 K-en nincs jelentős deformáció, azaz laboratóriumi körülmények között síkszerkezetűnek tekinthető a részecske, és magasabb hőmérsékleten sem tekeredik fel, csak deformálódik a nanopelyhely.

Vizsgáltam foszforén nanorészecskék optikai tulajdonságait a részecskék méretének függvényében. Azt tapasztaltam, hogy a gerjesztési energia a legkisebb nanorészecskék esetében a legnagyobb, és a méret növelésével csökken. Ilyen módon nemcsak a gerjesztési energiának a részecske méretével való beállítására van lehetőség, hanem többféle méretű nanopelyhely együttes alkalmazásával a fény spektrumának széles tartományát elnyelő rendszer készíthető. Így a foszforén nanopelyhek napelemek aktív anyagai lehetnek, illetve új, hatékony fotokémiai katalizátorok kifejlesztéséhez járulhatnak hozzá.

A víz savassága DMSO-ban, mint a klaszterképződés indikátora

Szabó Gergő, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Nyulászi László** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Kelemen Zsolt** tudományos segédmunkatárs

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Munkám során a víz savasságát vizsgáltam DMSO oldószerben kvantumkémiail és kísérleti módszerekkel. A Bordwell által kidolgozott indikátor módszert [1] használva levegőkizárásos technikával mértem a víz pK_a értékét DMSO-ban széles koncentrációtartományban. Kovarianciaanalízis vizsgálat szerint a mért értékek szignifikánsan függenek a víz és a hidroxidion koncentrációjának arányától. A mérés szórása mindössze 0,08 egységnek adódott, ugyanakkor a pK_a 29,2 és 32,7 között változott a különböző mérési beállításoknál.

Az eredmények interpretálásához kvantumkémiail számításokat végeztem. A különböző méretű víz klaszterekre több termodinamikai ciklussal és oldószermodellel (implicit és hibrid) pK_a értékeket számoltam. A növekvő klaszterméret hatására, a hidrogén-kötések kialakulásával, a víz klaszterek savassága (és bázikussága is) nő gázfázisban. Ezzel ellentétes hatása van a szolvatációnak: a klaszterméret növekedésével a pK_a értéket növelni igyekszik. Az implicit oldószermodellel végzett számítások alapján a pK_a folyamatosan csökken a klaszterméret függvényében. Ugyanakkor explicit oldószer molekulákat is alkalmazva, így a szolvatációs effektust pontosabban figyelembe véve, a dimer esetében pK_a növekedés tapasztalható a monomerhez képest.

A számolt pK_a értékek, az oldatban jelen lévő specieszek (H_2O , OH^- , DMSO) közötti a folyadékfázisban kialakuló hidrogén-kötés erősségek és a kísérleti eredmények alapján a hidroxid és a víz közötti hidrogén-kötés erőssége bír meghatározó szereppel.

[1] Walter S. Matthews, Joseph E. Bares, John E. Bartmess, F. G. Bordwell, Frederick J. Cornforth, George E. Drucker, Zafra Margolin, Robert J. McCallum, Gregory J. McCollum, Noel R. Vanier J. Am. Chem. Soc., 1975, 97 (24), pp 7006–7014.

Gyógyszeripari alapanyagok polimer csomagolóanyagokon keresztül való mérése különböző optikai elrendezésű NIR spektrofotométerekkel

Slezsák János, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Gergely Szilveszter** egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Szabó Éva PhD hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A gyógyszergyártók számos esetben a csomagolóanyag megbontása nélkül kívánják ellenőrizni a beszállított alap-, segéd-, illetve hatóanyagok azonosságát. Erre a célra a rezgési spektroszkópiai módszerek közül a közeli infravörös (*near-infrared*, NIR) és a Raman spektroszkópia által szolgáltatott jelek lehetnek alkalmasak.

TDK munkám során különböző optikai elveken működő – diszperziós (*dispersive*, DS), Fourier-transzformációs (*Fourier transform*, FT) és detektorsoros (*detector-array*, DA) – NIR spektrofotométerekkel mértem az eltérő típusú gyógyszeripari alapanyagokról a polimer csomagolóanyagokon keresztül diffúzan visszaverődő elektromágneses sugárzást. Optimaltám a mérés körülményeit a vizsgálandó gyógyszeripari összetevők és a csomagolóanyagok minősége függvényében.

A nyert (ún. „*as is*”), illetve a matematikai transzformációknak (pl. normálás, szóráskorrekció, simítással kombinált deriválás) alávetett NIR spektrumokat sokváltozós adatelemzésen alapuló kemometriai módszerekkel dolgoztam fel. Többek között olyan, előzetes információkat, referencia méréseket nem igénylő ún. nem irányított eljárásokat alkalmaztam, mint a főkomponens-elemzés (PCA) és a csoportelemzés (CA).

A gyógyszerelőállítást ellenőrző hatóságok is felismerték a NIR alapú módszerek speciális előnyeit, ezért a folyamat- és minőségellenőrzésben „alternatív” módszerként fogadják el. Döntéselőkészítő lépésként ezen előnyöket mindenképp érdemes laboratóriumi körülmények között különböző modellrendszereken tesztelni, hogy azok ipari megvalósításra kerülhessenek hatékony PAT eszközként.

Oxigénnel dópolt szén-nanocsövek szerkezete és stabilitása

Faragó Endre Zoltán, III. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Höltszl Tibor** fejlesztőmérnök

FETI Kft.

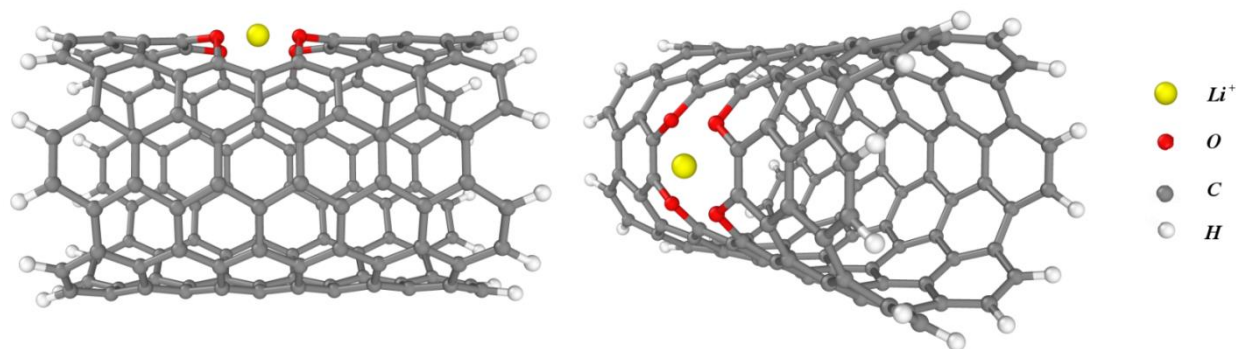
Dr. Veszprémi Tamás egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A szén-nanocsövek kiváló mechanikai, elektronikus és optikai tulajdonságaik miatt felfedezésük óta a nano-tudományos kutatások kiemelt anyagai közé tartoznak. A nanocsövek szerkezete és tulajdonságai jelentősen befolyásolhatók heteroatomok nanocsövek falába való építésével, úgynevezett dópolással. A dópolt nanocsövek gyakran az eredetitől teljesen eltérő optikai és elektronikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Az irodalom számos heteroatom beépítésére tett sikeres kísérletről számol be, azonban mindeddig nem sikerült szisztematikusan oxigénatomokat a falba építeni a nanocsövek szintézise közben, mindössze kész nanocsövek falait sikerült oxidálni.

Kutatómunkám célja képet adni azon stabil, oxigénnel dópolt szerkezetekről, amelyek szintézise és alkalmazása kiemelt stabilitásuk miatt nagyobb jelentőséggel bírhat. Munkám első fázisában sűrűségfüggvény-alapú számítási kémiai módszerekkel megvizsgáltam, mely oxigént tartalmazó szerkezeti elemek és kötéstípusok preferáltak a stabilitás szempontjából. Eredményeim alapján kiemelt stabilitást jelent az oxigénatom C-O-C kötés formájában való beépítése. Ez alapján létrehoztam két olyan szerkezetet, amelyek több ilyen C-O-C típusú kötést tartalmaznak egy gyűrűs vázban. Az így kapott szerkezetek termikus stabilitását empirikus reaktív erőterben végzett számításokkal vizsgáltam. Eredményeim alapján a dópolt nanocsövek magas hőmérsékleten is stabilisnak bizonyultak. Megvizsgáltam továbbá a gyűrűs váz komplexálási lehetőségeit is, mely lehetőséget teremthet új ion-szelektív elektródok kifejlesztésére.

A jelen munka hozzájárulhat annak a hosszú folyamatnak az elindításához, amely oxigénnel dópolt nanocsövek szintézisét és alkalmazását célozza, ezzel lehetővé téve a mikroelektronika és katalizátortechnika eszköztárának bővítését.



Differenciális elrendezésű nanopórusos ionszelektív szenzorok vizsgálata analitikai teljesítményjellemzők szempontjából

Kovács Miklós Márton, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Höfler Lajos** egyetemi adjunktus

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Különböző analitikai mintákat vizsgálva sok esetben okoz gondot a mátrixhatás. A legtöbb klinikai vizsgálat során egy biológiai mintából (pl. vészérum) egymástól függetlenül kívánjuk meghatározni az egyes komponenseket. A klinikai gyakorlatban a vér és vizelet ionkoncentrációjának a meghatározására az olcsó és megbízható ionszelektív szenzorok alkalmazása terjedt el. Ezekkel naponta több millió mérést végeznek rutinszerűen.

Kutatásom során a kutatócsoportunkban kifejlesztett differenciális elrendezésű elektrokémiai szenzorral való vizsgálatok elvégzésére volt lehetőségem. Célom, hogy továbbfejlesszem az eredetileg lágyított PVC alapú membránokon alapuló módszert [1]. A lágyított PVC alapú membránok hátránya, hogy hosszabb idő alatt a víznél lipofilebb karakterű vészérum képes extrahálni az ionszelektivitást biztosító komponenseket. Ezért olyan ionszelektív membrán használatát választottuk, amelynél az aktív komponensek kovalensen vannak rögzítve a membrán felszínéhez [2]. Ezeket a mindössze 6 μm vastag arany nanopórusos membránokat vizsgáltam analitikai teljesítményjellemzők szempontjából. Korábban a kutatócsoportban megmutattuk, hogy lehetséges két membrán felhasználásával – ahol a két membrán között az egyetlen különbség az ionofor jelenléte – differenciális elrendezésű szenzorban alkalmazva csökkenteni a mátrixhatást a hagyományos felépítésű ionszelektív szenzorokhoz képest. Ennek bemutatására a nanopórusos szenzort potenciometriás, amperometriás és elektrokémiai impedancia spektroszkópiás méréseknek vettem alá. A mérések sikerességének előfeltétele, hogy a nanopórusos membrán ioncserélő tulajdonsággal rendelkezzen, ezért optimalám a kovalens módosításhoz használt lipofil karakterű és az állandó töltéssel rendelkező tiolok arányát. Az ionszelektivitást tiol funkciók csoporttal rendelkező ezüst ionoforral biztosítottam. Vizsgáltam a membránok választását egyenként és differenciális elrendezésben különböző kationokra potenciometriás és amperometriás módszerekkel. Az egyes szelektivitási tényezők meghatározásán túl vizsgáltam a hagyományos és differenciális elrendezés és az alkalmazott mérési elv – potenciometria ($I = 0\text{A}$) vagy amperometria ($E = 0\text{V}$) – kimutatási határát és ismételhetőségre gyakorolt hatását.

Saját töltésű kapilláris HPLC oszlopok készítése proteomikai vizsgálatokhoz

Tóth Gábor, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Ozohanics Oliver** tudományos munkatárs

MTA TTK Szerves Kémia Intézet, MS Neuroproteomika Kutatócsoport

Napjainkban egyre elterjedtebb a saját töltésű kapilláris HPLC kolonnák használata. Egyszerűsége, gazdaságossága, és a töltetek széleskörű variálási lehetőségei miatt szinte elengedhetetlen a proteomikában vizsgált komplex mintákhoz. Ennek segítségével a kereskedelmi forgalomban nem elérhető méretű vagy töltetű oszlopok használatára is lehetőség nyílik.

Munkám során célul tűztem ki proteomikai elválasztásokra alkalmas fordított fázisú kapilláris kolonnák készítését, a töltési paraméterek széleskörű optimalizálásával, valamint élettartam vizsgálattal. A vizsgálatok során kifejlesztettünk egy protokollt 2.6 μm szemcseátmérőjű XB-C18 töltetek 100 μm belső átmérőjű kapillárisba töltésére. Optimaltunk a kapillárist lezáró frit elkészítésének idejét és a kolonnatöltés kiválasztott paramétereit. Fontos paraméternek tekintettük a töltetszuspenzió sűrűségét, ezzel összefüggésben a töltési időt is, emellett vizsgáltuk a töltéshez használt gáz nyomását is.

Az alábbi optimális paramétereket határoztam meg: 1000 perc feletti töltési idő, 30 percig tartó 6000 psi tömörítés, 0.4 mg/ml töltetszuspenzió töménység. Az így kapott kapilláris kolonnák kromatográfiás paraméterei kiemelkedően jó reprodukálhatósággal jellemezhetőek: a kolonnák jó minőségűek, keskeny csúcsokat, és jó elválást lehet rajtuk elérni. Emellett a retenciók időben nem mutatkozik számottevő átlagos csúszás (<0.075 perc), így a méréseink jól reprodukálhatóak (RSD $<1.1\%$). Fontos kiemelni, hogy a töltet szabadon választható meg, számos HPLC, UHPLC vagy egyéb töltetet és ezek tetszőleges arányú keveréke használható fel, így nagyon nagyfokú változatosságot mutatnak a saját töltésű oszlopok, ezáltal igen specifikus elválasztás érhető el. Munkánk során a fordított fázisú elválasztásra koncentráltunk, mivel így lehetőség nyílt a kereskedelembe kapható megoldásokkal történő összehasonlításra. A módszer használhatóságának jellemzésére két gazdaságossági paramétert használhatunk: a kolonnák élettartamát, valamint a költséghatékonyságot. Hozzávetőleges számításokat végeztem, melyek során az egy oszlopra eső fajlagos költséget hasonlítom össze hasonló típusú gyári kolonna beszerzési költségével. Számításaim alapján kijelenthető, hogy saját töltésű kolonnák jellemzésére használt paraméterek 30 mérés alatt csak kis mértékben változtak (átlagos RSD 11%). A gazdaságossági számítások azt mutatták, hogy saját töltésű kapilláris kolonnák a kereskedelembe kapható kolonnákhoz képest mintegy 200-szor gazdaságosabbak.

α -1 savas glikoprotein triptikus emésztmény elválasztásával jellemeztük a kolonnák szelektivitását. Az vizsgált emésztményben található glikopeptidek több izomerrel rendelkeznek, amelyek a részleges/teljes elválasztása csúcshézagot okozhat. Eredményeink azt mutatják, hogy a saját töltésű kolonnák, a kereskedelmi megoldással ellentétben, alkalmasak a referenciaként kiválasztott glikopeptidek izomerjeinek az elválasztására. Ez által a jövőben lehetőség nyílik proteomikai mérések során is a glikopeptidek izomerjeinek széleskörű jellemzésére.

Nukleofil szubsztitúció részlegesen redukált grafén-oxid felületen

Bodrogi Dominika, III. évf.(BSc)

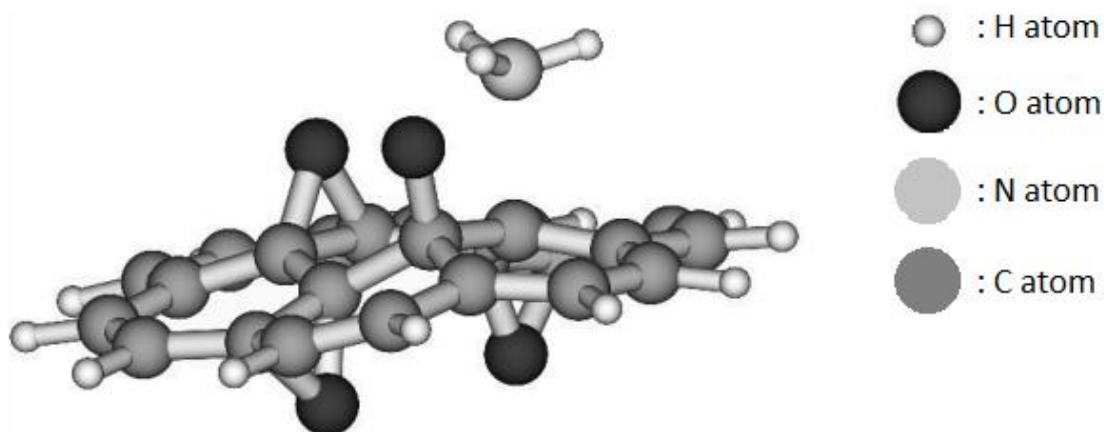
Témavezető: **Dr. Szieberth Dénes** egyetemi docens

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Napjainkban a grafén lemezek, illetve a funkcionizált grafén származékok előállítását és alkalmazását nagy érdeklődés kíséri, hiszen ezek fontos alapanyagai az elektronikának, nanotechnológiának, és a gyógyszerkutatásnak. Előállítás szempontjából az egyik leggyakoribb termék a redukált grafén-oxid. Ennek felszínén különböző oxigén-tartalmú csoportok találhatóak, így például epoxi-csoportok. A grafén származékok tulajdonságai nagyban változnak aszerint, hogy milyen egyéb funkciós-csoportokat sikerül rájuk kapcsolni. Az egyik ilyen származék a nitrogénnel funkcionizált redukált grafén-oxid.

Kísérleti eredmények alapján ennek előállítása főleg nukleofil szubsztitúciós reakcióval megy végbe. A reakció során az ammónia, vagy amin nemkötő elektronpárja nukleofil támadást indít a redukált grafén-oxid felszínén lévő epoxi-csoportra.

Dolgozatomban ennek a reakciónak keresem a lehetséges mechanizmusait kvantumkémiai módszerek segítségével, és összehasonlítom a reakciót más irodalmi eredményekkel, melyek aminok, és epoxi-csoportot tartalmazó alifás vegyületek nukleofil szubsztitúcióját elemezték. Korábbi számítások szerint a redukált grafén-oxid felszínén az epoxi-csoportok bizonyos kitüntetett stabilitású elrendeződésekben fordulnak elő (ld: ábra). Az egyik ilyen négy epoxi-csoportot tartalmazó elrendeződés reaktivitását vizsgáltam különböző méretű grafén-modellek felszínén. Reakciópartnerként ammóniát választottam.



Különböző genomi uracil kvantifikáló módszerek optimalizálása, és alkalmazása teljes átalakulással fejlődő rovarokban

Takács Gergely, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Scheer Ildikó** doktorjelölt

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az uracil jelenléte a genomi DNS-ben a leggyakoribb hibák egyike. A citozin dezamináció során keletkező uracil pontmutációt eredményezhet. A hiba elleni védekezés preventív módjának effektor a dUTP-t dUMP-vé alakító dUTPáz. A DNS-be beépült uracil eltávolításáért az UDG (uracil-DNS-glikoziláz) enzimes család tagjai felelősek, amely család leghatékonyabb tagja az UNG. Az uracil sokszor fiziológiás körülmények közt is jelen van a DNS-ben. Bizonyos bakteriofágoknak dezoxitimidin helyett dezoxiuracil van a DNS-ében. A HIV vírus DNS-e is nagy számban tartalmaz uracilt, és a B-limfocitáink érésekor is fontos szerepet játszik. Érdekes módon a teljes átalakulással fejlődő rovarokban nincs jelen az UNG, és az ide tartozó ecetmuslica differenciált lárvá szövetében nincs dUTPáz expresszió sem. Emellett azt is kimutatták, hogy az ecetmuslica lárvákban, és bábban is megemelkedik a genomi uracil szint.

Kísérleteim célja az volt, hogy ecetmuslicán kívüli egyéb különböző rendszertani kategóriákba tartozó teljes átalakulással fejlődő rovarok esetében (lisztbogár, selyemlepke, házi méh) is megvizsgáljam a genomi uracil alakulását, amelyhez 3 módszert is alkalmaztam.

Munkám során egy qPCR alapú genomi uracil kvantifikáló módszert¹ optimalizáltam lisztbogárra. Ezen technika két polimerázon alapszik: a Pfu (*Pyrococcus furiosus*) polimeráz uracilhoz érve leállítja a polimerizációt; a Taq polimeráz ezen hibára azonban érzéketlen. Másik módszerként kvantifikálásra a „dot blot” nevű technikát² alkalmaztam, amely egy katalitikusan inaktív, uracilt specifikusan felismerő UNG enzimet használ, majd a mennyiségi meghatározás antitestek segítségével, egy ELISA alapú módszerrel történik. Ezen módszert továbbfejlesztettem: egy új bioszenzort, egy frissen felfedezett fehérjét, az UDG enzimes család UDGX nevű tagját előállítva, és sikeresen alkalmazva. Ezen fehérje egy nem az UNG családba tartozó, nagy uracil specifitású UDG, amely eredendően katalitikusan inaktív.

Referenciák:

1. Horváth és Vértessy. Nucleic Acids. Res. 2010.
2. Róna et al. Nucleic Acids. Res. 2016.

**Vér-agy gát permeábilis és acetilkolin-észteráz gátló komponensek
azonosítása PAMPA-BBB és HPLC-MS/MS módszerekkel növényi
kivonatokban**

Lovász Ádám, II. évf. (MSc.)

Témavezető: **Dr. Könczöl Árpád** kutató-fejlesztő
Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium

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

A TDK munkám során egy, gyógynövényekből kiinduló gyógyszerkutatási projekt korai fázisába kapcsolódtam be. Vizsgálatainkat egy központi idegrendszerre hatással bíró növényi kivonat-gyűjteményen (N=15) végeztük. Célunk volt egyrészt a kivonatokban vér-agy gát permeábilis, másrészt az Alzheimer-kórban indikált acetilkolin-észteráz enzimet (AChE) gátló komponensek azonosítása. A permeabilitás vizsgálatok *in vitro* PAMPA-BBB (Parallel Artificial Membrane Permeability Assay for the Blood-Brain Barrier) technikával történtek, míg az AChE-gátlásra az előzetesen optimált Ellman-féle kolorimetriás teszt segítségével szűrtük az extraktumokat. Az amarilliszféle *Clivia miniata* (klívia) herbájának kloroformos nyers kivonata mindkét tesztben aktívnak bizonyult, ezért részletes elemzésére HPLC-MS/MS módszert fejlesztettünk. Irodalmi források és a felvett MS/MS spektrumok alapján különböző Amaryllidaceae-alkaloidokat (pl.: likorin) azonosítottunk a *C. miniata* aktív mintájában.

A genomban található uracilmolekulák *in situ* meghatározására alkalmas jelzőfehérje-rendszer kifejlesztése

Tihanyi Gergely, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy Beáta** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer tudományi Tanszék

Konzulensek: **Pálincás Hajnalka Laura** PhD hallgató

MTA TTK Enzimológiai Intézet

Dr. Róna Gergely tudományos segédmunkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer tudományi Tanszék

Az élőlények DNS-ében számos módosulás mehet végbe, melyek közül az egyik leggyakoribb az uracil megjelenése, amely egyrészt a citozin oxidatív dezaminációjának terméke, másrészt a DNS-polimerázok építhetik be timin helyett, melyhez szerkezetileg igen hasonló. Több enzimsalád is ismert, melynek feladata az uracil kivágással történő javítása, melyek közül az emberben a legaktívabb az uracil-DNS-glikoziláz családhoz tartozó UNG. Laboratóriumunkban korábban módosították az UNG enzimet, így az továbbra is specifikusan képes kötődni a DNS-beli uracilhoz, ám nem vágja ki azt. Ennek segítségével képesek vagyunk különböző organizmusokból származó DNS-minták uraciltartalmát meghatározni egy általunk kifejlesztett ELISA-szerű módszerrel.

Kutatásom célja ezen módosított UNG fehérje továbbfejlesztése volt, hogy *in situ* humán eredetű sejtvonalakban is jelölni tudjuk a genomi uracilt. Ehhez először emelkedett uracilszintet hoztam létre a sejtekben kemoterápiás szer (5-fluoro-2'-deoxiuridin) kezeléssel, valamint az *ung* gén RNS-interferencia általi csendesítésével. A kezelések optimalizálása után sikerült kimutatnom az uracilszint növekedését a DNS-preparátumban.

Ezt követően létrehoztam egy új konstrukciót a módosított UNG- és a SNAP-tag-fehérjék fúziójával. A SNAP-tag egy újonnan felfedezett módosított fehérje, amely irreverzibilis kovalens kötést képes létesíteni fotoaktiválható benzilguanin-származékokkal, ami fluoreszcencia megjelenését váltja ki, így lehetővé téve számunkra az uracilmolekulák rendkívül érzékeny jelölését és kimutatását. Az immunocitokémiai festési eljárást először baktériumokból, majd humán sejtekből származó mintákon optimalizáltam és validáltam.

Munkám során humán vastagbélrák-eredetű sejtek genomi uracilszintjét növeltem meg különböző kezelésekkel, majd ezt *in situ* sikeresen jelöltem egy általam létrehozott fehérjekonstrukcióval. A módszer továbbfejlesztésével elérhető akár egyedi uracilmolekulák specifikus jelölése, illetve vizsgálható az uracil genomi eloszlása szuperrezolúciós mikroszkópia segítségével. Kutatásainkat ebben az irányban folytatjuk, így módszerünk a jövőben lehetővé teszi a genomban dinamikus módon jelen levő uracil szerepének feltárását

^[1] Róna, G., Scheer, I., et al., Nucleic Acids Res. 2016 Feb 18;44(3):e28.

olyan sejtbeli folyamatokban, mint az immunoglobulin-gének szomatikus hipermutációja, vagy a rákellenes terápia hatására történő uracilbeépülés.

Új real-time képalkotó eszköz fejlesztése gyógyszeripari kristályosítás szabályozására

Bodák Brigitta, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Pataki Hajnalka** posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Marosi György egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A PAT (Process Analytical Technology, folyamatfelügyelő, és -analitikai technológia) elterjedésének következtében egyre nagyobb az igény valós idejű elemzésen alapuló eszközök fejlesztésére, a piacon kapható gyártók eszközeinél kedvezőbb áron, amely túlmutat a már meglévő rendszerek teljesítőképességén és korlátain.

Ezért munkám célja egy gyógyszeripari kristályosításban használható, képanalízisen alapuló eszköz fejlesztése, mely képes a gyógyszerhatóanyag morfológiájának (polimorfia, szemcseméret eloszlás, szemcsehabitus) szabályozására. A prototípushoz egy ipari kamerát alapul véve szoftveres fejlesztéseket valósítottam meg C# objektumorientált programozási nyelven az Aforge.NET keretrendszer felhasználásával. Ez a keretrendszer speciálisan fejlesztők és kutatók számára készült, számítógépes képalkotás és mesterséges intelligencia fejlesztésére. Az általam készített algoritmus alapján a létrehozott Windows platformon futó grafikus felületű program képes a kamera folyamat közben rögzített képén az individuális kristályok detektálására, a szemcseméret eloszlásának valós idejű meghatározására. A felhasználó számára a kapott eredmények szemléltetésére a megfelelő képszűrő-kombinációk alkalmazása után a szemcseméret eloszlás hisztogramon ábrázolható.

Kísérleti munkám során előre felépített kísérleti tervet követve, a kamerás képalkotó rendszert adott gyógyszerhatóanyag különböző szemcséinek kristályosító reaktorban való követésére optimaltam. Megállapítottam a képalkotást befolyásoló paraméterek (kristálméret, szuszpenzió sűrűség, keverési fordulatszám, kamera záridő, stb.) képminőségre gyakorolt hatását. A kristály tulajdonságok közül a méreteloszlás mellett vizsgáltam a kristályok habitusának azonosítási lehetőségeit is, szférikus és tűs kristályok elkülönítése céljából. A kristályhabitus felismerését neurális hálók alkalmazásával végeztem. A képelemző szoftver hatékonyságát végül carvedilol gyógyszerhatóanyag hűtéses kristályosításában teszteltem.

Határfelületi kölcsönhatások módosítása PET szál erősítésű PP kompozitokban

Fodor Hanna, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Renner Károly Péter** tudományos főmunkatárs
MTA TTK AKI Polimer Fizikai Kutatócsoport,
BME Fizikai Kémia és Anyagtudomány Tanszék

Jelen kutatómunka célja a határfelületi kölcsönhatások erősítése volt PET szállal töltött PP kompozitokban, illetve a felhasznált módszerek közül az optimális kombináció meghatározása a mechanikai tulajdonságok javításához. Ehhez hidegplazmás (fizikai) és oxidációs (kémiai) módszereket alkalmaztam, a szálakat bevonó sizingot is leoldottam, illetve különféle kapcsolóanyagok hatását is vizsgáltam a rendszerben. A változásokat felületi (FTIR), termikus (DSC) és mechanikai (szakítás) vizsgálatok segítségével értékeltem.

Mivel a felületkezelési módszerek alapvetően kis mennyiségek kezelését teszik lehetővé, így csak 1 mm-es préselt mintákat tudtam készíteni, melyeken az ütésállóság közvetlenül nem mérhető. A vizsgált paraméterek közül azt szerettem volna elérni, hogy a merevség ne csökkenjen, a szilárdság pedig akár növekedjen is.

A kutatás során a kapcsolóanyagok közül legtöbb esetben az MAPP-1 adta a legkedvezőbb eredményt, a GMAPP pedig a legkedvezőtlenebbet. Az MAPP-2-vel általában elfogadható tulajdonságokat sikerült elérni. Ennek valószínűleg az az oka, hogy a folyásindexük, tehát a móltömegük is jelentősen eltér a polimer vegyületeknek. Az MAPP-1 folyásindexe a legkisebb, tehát móltömege ennek a legnagyobb, míg a GMAPP-é a legkisebb. Funkciós csoport tartalmukban pedig nem térnek el különösebben. Ebből következik, hogy az MAPP-1 képes a leginkább interdiffúzióra a polipropilén mátrixban, így fizikai térháló kialakítására a komponensek közti adhézio nagymértékű növelése mellett. Bár kémiailag a GMAPP lenne elméletben a kedvezőbb, mivel az epoxi csoportok képesek reagálni a PET karboxil csoportjaival is, az MAPP pedig csak a hidroxil csoportokkal, kis móltömege révén mégsem tudta a kívánt hatást produkálni.

Ezek alapján az eredmények szerint az optimális kezelési és kapcsolási mód a peroxidos oxidáció és MAPP-1-gyel történő kapcsolás.

35 MPa-nál nagyobb szakítószilárdságot azonban semelyik módszerrel nem sikerült elérni, melyet feltehetően a töltőanyag szilárdsága limitál. Ha elérjük ezt az értéket, akkor a szál-mátrix adhézio növelésével már nem tudunk jobb mechanikai tulajdonságokat elérni.

Ahhoz, hogy a tanulmány bizonyítottan elérje célját, a továbbiakban a kidolgozott módszerek közül legjobbnak ítélték nagy mennyiségű alkalmazása következik majd, hogy az ütésállóság is közvetlenül mérhető lehessen Charpy módszerrel, illetve nagyobb szilárdságú PET szálakkal célszerű folytatni a kutatást.

Kristályos nanocellulóz előállítása, jellemzése és alkalmazása

Nagy Sebestyén, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Csiszár Emília** egyetemi docens

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A megújuló cellulóz alapú nyersanyagok hatékony és széleskörű felhasználására a világon mindenütt egyre nagyobb figyelem összpontosul. Az évente keletkező $1,8 \times 10^{12}$ tonna biomassza hagyományos felhasználási területeinek kutatása mellett az egyik legfontosabb irány a lignocellulózokat alkotó polimerek (cellulóz, hemicellulóz, lignin) kinyerése és ezekből - már viszonylag kis anyagmennyiségek felhasználásával - új tulajdonságú és magas hozzáadott értékű termékek előállítása, amelyeket a gyógyászatban, az analitikában, az elektronikai- és az élelmiszeriparban használhatnak leginkább. Főként a fából és a cellulóz alapú szálanyagokból kiindulva fizikai, kémiai vagy enzimmel segített folyamatok sorozatával juthatunk el a szerkezeti polimerekig.

A fás növények legfontosabb polimerje a cellulóz, amely β -D-glükopiranoz egységekből felépülő lineáris makromolekula. A cellulóz láncok aggregációja fibrillás szerkezeteket hoz létre, amelyek hosszútávú szerveződése kristályos struktúrák képződéséhez vezet. A kristályosság nem teljes, cellulóz forrástól függően kb. 50-90 %. A cellulózzal foglalkozó kutatások egyik ígéretes területe ezeknek a kristályos egységeknek a kinyerését célozza, és az így előállított ún. kristályos nanocellulóz lehetséges felhasználási területeit vizsgálja. Kristályos nanocellulózhoz leginkább a kevésbé rendezett cellulóz részek hidrolitikus bontásával juthatunk. Az így nyert kristályos nanocellulóz néhány nm átmérőjű és körülbelül 100 nm hosszúságú tűkristályokból áll, és egyedülálló módon ötvözi a cellulóz tulajdonságokat a nanoméretű anyagok különleges jellegzetességeivel.

Kutatómunkám során összehasonlítottam a fehérített pamutból, illetve lenből nyert nanocellulóz szuszpenziók és a szuszpenziókból öntött filmek tulajdonságait. Megvizsgáltam, hogyan hat a filmek tulajdonságaira a hozzáadott lágyító típusa és mennyisége. További vizsgálatok során a cellulózt keresztkötő amino-aldehid gyanta hozzáadásával térhálós nanocellulóz filmeket készítettem, majd széleskörűen jellemeztem azokat.

Modellhatóanyagok diffúziós koefficiensének közvetlen meghatározása amorf poli(3-hidroxibutirát) mátrixban

Szemerszki Dóra, IV. évf. (BSc)

Témavezető: Dr. Pukánszky Béla egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: Polyák Péter PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Az elmúlt években a hatóanyag hordozó mátrixok fejlesztése iránt mutatkozó érdeklődés számottevően megnőtt, amelynek háttérében elsősorban az áll, hogy a hordozó mátrixok fizikai, illetve kémiai tulajdonságainak finomhangolásával lehetővé válik az alkalmazni kívánt hatóanyag megfelelő koncentrációjának biztosítása a szerkezet különböző pontjain. A gyakorlati alkalmazások tehát megkívánják, hogy mennyiségileg meghatározzuk a hatóanyagnak az azt hordozó mátrixon kívülre történő diffúzióját, illetve ismerjük a leadási kinetikáját.

Ez utóbbit azonban számos - a hatóanyagtól, illetve a magától a mátrixtól függő fizikai, illetve kémiai - paraméter befolyásolja, melyek közül az egyik legfontosabb a hatóanyagnak az azt hordozó mátrixon belül mérhető diffúziós koefficiense. Diffúziós koefficiens mérésével korábban már számos kutató foglalkozott, ezek legnagyobb része permeációs vizsgálatokon alapult. Ezen mérések során a hatóanyag a vizsgált mátrixból készült filmen diffundál keresztül, ahol az anyagátadás sebessége feltételezhetően pozitívan korrelál egy permeációs paraméterrel, illetve az ebből közvetetten kiszámítható diffúziós koefficienssel. Dolgozatunkban egy olyan eljárásra szeretnénk javaslatot tenni, ami nem igényel előzetes permeációs vizsgálatokat és amorf poli(3-hidroxibutirát), PHB, mátrixban közvetlenül is kivitelezhető.

Az eljárás lényege, hogy a hatóanyag molekuláival telítjük az amorf (hatóanyag nélkül teljesen átlátszó) PHB filmünket, majd abból a kioldást csak a polimer film egyik élénél kezdjük meg: belemerítjük azt a kioldó közegbe. A kioldó közegbe kidiffundáló molekulák miatt a filmen belül koncentrációgradiens alakul ki, ami addig lesz jelen, amíg a filmből az összes hatóanyag ki nem oldódott. A koncentrációgradiens megfigyelése, illetve időfüggésének kvantitatív analízise közvetlenül is lehetséges, ha a modellhatóanyag elnyel a látható tartományban (színes). Ekkor ugyanis a filmről készített kép hexadecimális RGB színkódjaiból a film hatóanyag tartalmával pozitívan korreláló saturation paraméter (színtelítettség adott hullámhossznál) külön e célra fejlesztett MATLAB szoftverrel visszaszámolható, így kvantitatíve tudjuk jellemezni a film hatóanyag tartalmát adott hely illetve időkoordináta mentén. Fick második törvényét a mért adatokra illesztve a keresett diffúziós együttható közvetlenül is meghatározható.

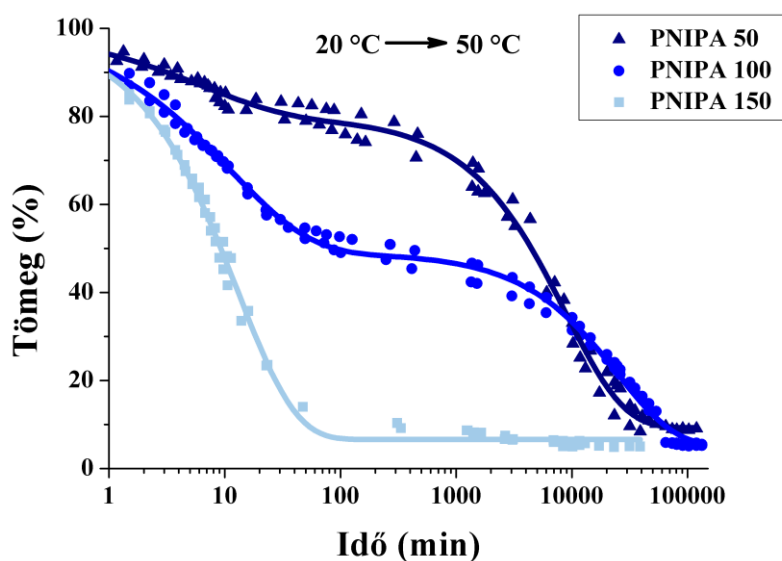
Hatóanyag-leadást befolyásoló kölcsönhatások lágy gélekben

Bérczes Virág, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Nagyné dr. László Krisztina** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Berke Barbara** PhD hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Napjaink egyik leginkább kutatott területei közé tartozik - sokrétű felhasználhatóságuknak köszönhetően - a környezeti hatásokra gyors, reverzibilis választ adó úgynevezett rezponzív anyagok viselkedésének tanulmányozása. Ezek az anyagok alkalmasak lehetnek pl. hatóanyag-leadásra és a környezetből jövő ingerek érzékelésére képes mikro- és nanoeszközök készítésére egyaránt. A poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPA) termoreszponzív hidrogél előnyösen használható ezekre a célokra, mert fázisátalakulási hőmérséklete az emberi test hőmérsékletének közelében van, ill. ez a hőmérséklet a duzzasztószer cél szerinti megválasztásával ugyancsak hangolható.



A hőmérséklet-indukált zsugorodás kinetikája az eltérő térhálósűrűségű gélekben

Munkám során arra kerestem választ, hogy a PNIPA gél keresztkötő-sűrűségének változtatása alkalmas-e a hatóanyag leadás befolyásolására. Háromféle térháló sűrűségű gélen a fenol és az ibuprofen volt a két próbamolekula. Vizsgáltam, hogy a térháló sűrűség hatása hogyan befolyásolja a gél és a hatóanyag közti kölcsönhatásokat és ezáltal a hatóanyag gélbeni kristályosodási tulajdonságait.

Köszönetnyilvánítás

A munka kapcsolódik a K115939 számú OTKA projekthez.

PLA/kitozán alapú szálak előállítása elektromos szálhúzással szövettenyésztési célokra

Lóvi Vilmos, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Pukánszky Béla** egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Kirschweng Balázs** PhD. hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Napjainkban az orvostudomány egyik legnagyobb problémája a betegség vagy baleset miatt sérült, vagy funkcióját ellátni képtelen szövetek, szervek pótlása, regenerációjuk elősegítése. A szervátültetésre várók listája igen hosszú, a donorok száma viszont nem elegendő, ezért a pácienseknek túl sokat kell várniuk, hogy állapotuk javuljon. Ebből kifolyólag jelentős figyelem övezi a mesterséges szövettenyésztést, mint alternatív lehetőséget. A módszer a páciens saját sejtjeinek, szöveteinek újratermelődését, regenerálódását segíti elő. Ehhez az egyik legfontosabb feltétel egy vázszerkezet, más néven scaffold létrehozása, mely támaszként szolgál a sejtek szaporodása során.

A vázszerkezeteknek többféle előállítási módszere is létezik, amik közül az egyik gyakran alkalmazott technológia az elektrosztatikus szálhúzás. Ennek során a polimer alapanyag oldatából elektromos áram hatására olyan szálakat képeznek, amelyek vastagsága a néhány mikrométertől egészen a nanométeres tartományig terjedhet. A folyamat során az oldószer elpárolog. A scaffoldok alapanyagaként felhasználnak többek között természetes és szintetikus biopolimereket, amelyek nem okoznak immunreakciót a páciens szervezetében. A különböző anyagtípusok kombinálásával azok előnyös tulajdonságai ötvözhetők.

Kutatómunkám célja PLA/kitozán keverék szálak előállítása és vizsgálata. Annak érdekében, hogy a két komponenst közös oldatukból dolgozhassam fel, a kitozánt ftálsav-anhidriddel reagáltattam. Az ojtás hatásfokát és a termék szerkezetét infravörös (FTIR) spektroszkóppal és NMR spektroszkóppal jellemeztem. Az ojtott kitozán és a politejsav közös oldatából húzott szálak jellemzőit infravörös spektroszkóppal és pásztázó elektronmikroszkóppal vizsgáltam.

A poli(3-hidroxi-butirát) enzimatisz degradációjának kvantitatív jellemzése kinetikai modellszámítások segítségével

Rudas Dorottya, IV. évf. (BSc)

Témavezető: Dr. Pukánszky Béla egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: Polyák Péter PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Az elmúlt évtizedben a biopolimerek iránti érdeklődés lényegesen megnőtt, aminek a háttérében elsősorban az áll, hogy segítségükkel megújuló forrásokra helyezhetjük át a pillanatnyilag főként fosszilis alapanyagbázisra épülő műanyagipart. Nem ez az egyetlen tényező adja azonban a biopolimerek jelentőségét: további fontos faktor, hogy a gyógyszeripar is egyre nagyobb érdeklődést mutat a biológiai úton lebomlani képes műanyag termékek iránt, segítségükkel ugyanis lényegesen leegyszerűsödik mind a gyógyszerformálás, mind pedig különböző implantátumok biokompatibilissá tételének feladata. Az *in vivo* alkalmazások azonban mind megkövetelik a polimer biodegradálhatóságát, lehetőleg úgy, hogy a degradáció ne eredményezzen toxikus metabolitumokat.

Mindezen kritériumoknak a poli(3-hidroxi-butirát) minden további nélkül eleget tesz, lebontása így az orvosbiológiai alkalmazások szempontjából is kiemelt jelentőséggel bír. Maga a lebontás számos eljárással kivitelezhető, gyakorlati jelentőséget azonban elsősorban azoknak tulajdoníthatunk, melyek nem igényelnek extrém körülményeket (semlegestől számottevően eltérő pH, olvadáspont fölötti hőmérséklet stb.), azaz lehetővé teszik a lebontás *in vivo* kivitelezését. Ideálisnak mutakozhat tehát pl. enzimek alkalmazása, ezek hőmérsékleti optimuma ugyanis jellemzően az emberi testhőmérséklet tartományában van, illetve a legnagyobb enzimaktivitás eléréséhez biztosítandó pH sem tér el számottevően a semlegestől. Az enzimkatalizált depolimerizáció időbeli lefutása megfelelő kinetikai modellekkel kielégítő pontossággal leírható, így az *in vivo* alkalmazni kívánt termék lebomlása tervezhetővé, jósolhatóvá válik. Az enzimkatalizált reakció lefutásának kvantitatív jellemzéséhez azonban ismernünk kell a komponensek (enzim, szubsztrát, termék) koncentrációinak időfüggését, illetve alkalmaznunk kell egy kinetikai modellt, amely lehetővé teszi a fent sorolt időfüggő koncentrációk számértékének becslését. Munkánkban bemutatjuk, hogy milyen mérési eljárásokkal válik kivitelezhetővé az enzimkatalizált lebomlás szempontjából kritikus komponensek mennyiségi analízise, illetve javaslatot teszünk egy olyan kinetikai modellre, amellyel kielégítő pontossággal leírható a depolimerizáció időbeni lefutása.

Műanyagok felületi tulajdonságainak módosítása hidegplazmás eljárással

Késmárki András, I. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Klébert Szilvia** tudományos főmunkatárs

MTA TTK AKI

Dr. Románszki Loránd tudományos munkatárs

MTA TTK AKI

A dolgozatom során a következő műanyagok plazmakezelésének hatásait tanulmányoztam: poliamid-6, polietilén, poli(éter-éter-ke-ton), polietilén-tereftalát, poli(metil-metakrilát) polioximetilén, polipropilén, politetrafluoroetilén. Ezeknek a gyakorlatban sokrétűen felhasználásra kerülő polimereknek a felületmódosítása jelentősen javíthatja a teljesítményüket, vagy akár új felhasználási módokat tehet lehetővé.

A polimerek felületét akadálykísülés elvén működő készülékkel(dielectric barrier discharge, DBD) kezeltem. Kémiai felületmódosító módszerekkel ellentétben ennek előnye a gazdaságosság mellett, hogy elkerülhető agresszív felületkezelő vegyszerek vagy illékony szerves oldószerek használata, amelyek környezetre káros hatással lehetnek. Más alternatív felületkezelő eljárásokkal szemben(mint például: lézer-, elektron-sugár, UV vagy gamma sugárzás), a hidegplazmás eljárások nem befolyásolják az anyag tömbi tulajdonságait. A választott módszer további előnye, hogy atmoszférikus nyomáson, levegőn történik a kezelés. Ennek nagy jelentősége van az iparban, mert alkalmazása sokkal olcsóbb, mintha hasonló alacsony nyomású plazmakezelést választatnának, mivel nem kell drága vákuum rendszert használni és amennyiben a termék kialakítási is engedi (pl.: fóliák, textilek) a plazmakezelési lépés könnyen beilleszthető folyamatos termelésbe is.

Az atmoszférikus DBD kezelés használata az iparban ugyan elterjedőben van, kutatási területeken főleg az alacsony nyomású technológiák felé terelődött a figyelem. Munkám során a DBD nem-egyensúlyi plazmakezelés felületre gyakorolt hatásait követtem figyelemmel. A kémiai és morfológiai változásokat atomerő mikroszkópiával, pásztázó elektron mikroszkópiával, peremszög méréssel, infravörös spektroszkópiával és röntgen fotoelektron-spektroszkópiával vizsgáltam.

Mag/héj és üreges szén nanogömb/fém-oxid nanokompozitok

Bakos László Péter, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Justh Nóra** PhD hallgató

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dr. Szilágyi Imre Miklós tudományos munkatárs

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

A napenergia fotokatalízishez történő felhasználása egy környezetbarát módszer szerves szennyező anyagok lebontására és szennyvíz kezelésére. A félvezető-oxidok, mint a TiO_2 és a ZnO , elterjedt fotokatalizátorok, mivel kémiaiilag stabilak, nem-toxikusak és nagy reakciókészséggel rendelkeznek. A foto-gerjesztett töltéshordozók a gyors elektron-lyuk rekombináció miatt rövid életűek, tehát célszerű egy ko-katalizátor alkalmazása olyan fotokatalizátorok előállításához, melynél jobb lesz a töltés-szétválás és lassabb a rekombináció. A szén-alapú nanoanyagok (pl. nanocsövek, nanogömbök, fullerének, grafén), nagyon elterjedtek, köszönhetően nagy felületüknek, jó hő- és elektromos vezetőképességüknek, mechanikai és kémiai stabilitásuknak, így ideális anyagok ko-katalizátornak C/fém-oxid kompozitokban. A fém-oxidokat sokféle módszerrel lehet felvinni a különféle szénhordozók felületére, például atomi rétegleválasztással (ALD) is. Az ALD lehetővé teszi nanoszerkezetek felületének kényelmes és homogén bevonását, a réteg vastagsága nanométeres pontossággal szabályozható, így ez egy kiváló lehetőség lehet szén nanogömbök bevonására. A szén nanogömbök emellett alkalmasak lehetnek templátként szervetlen üreges gömbök előállításához, melyek speciális optikai, optoelektronikai, mágneses, elektromos, termikus, elektrokémiai, fotoelektrokémiai és katalitikus tulajdonságokkal rendelkeznek.

TDK munkám célja félvezető-oxid nanorétegek növesztése volt szén nanogömbökre, majd a szén templát kiégetésével üreges oxid nanogömbök előállítása. Az előállított mintákat TG-DTA/MS, FTIR, Raman spektroszkópia, XRD, SEM-EDX, TEM-SAED technikákkal vizsgáltam. Fotokatalitikus aktivitásuk feltérképezéshez metilnarancs festék oldatába raktam a mintákat, majd UV fényben figyeltem a festék bomlását UV-VIS spektroszkópiával.

A hidrotermális módszerrel előállított szén nanogömbökre TiO_2 -ot és ZnO -ot növesztettem ALD-vel 80 és 250 °C-on titán-tetraklorid [TiCl_4], dietil-cink [$(\text{CH}_3\text{-CH}_2)_2\text{Zn}$] és víz [H_2O] prekursorokat használva. A TG/DTA-MS vizsgálat alapján a szén gömbök bomlása héliumban 300 °C-on kezdődik, így biztonságosan tudtam 250 °C-on végezni az ALD-t a szén templát károsítása nélkül. A levegőben történő termoanalitikai vizsgálatból kiderült, hogy 600 °C-ig kiég a szén mag, így hevítéssel elő tudtam állítani a kompozitokból az üreges oxid gömböket. Az FTIR és Raman spektroszkópiái, valamint az EDX mérések alapján sikeres volt mind az ALD filmnövesztés a szén gömbökön, mind a szén eltávolítása a kiégetés során. Az XRD és a SAED mérések kimutatták, hogy ZnO már az ALD leválasztás után, míg a TiO_2 csak hevítés után lett kristályos (anatáz titán-dioxid és hexagonális cink-oxid). A SEM és a TEM mérések szerint a minták megtartották gömb alakjukat leválasztás és kiégetés után is, illetve a kiégetés után üreges szerkezetűek lettek. A fotokatalízis vizsgálatból kiderült, hogy a tiszta szén nanogömb és a szén nanogömb/félvezető-oxid kompozitoknál esetén nincs jelentős fotokatalitikus hatás, ellenben az üreges oxid gömböknél van.

Fluoreszcens szilícium-karbid nanokristályok felületmódosítása

Unyi Dániel, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Gali Ádám** egyetemi docens

BME Atomfizika Tanszék

Konzulens: **Beke Dávid** tudományos segédmunkatárs

MTA Wigner Jenő Fizikai Kutatóközpont

A szilícium-karbid (SiC) egy kémiailag inert és biokompatibilis indirekt félvezető. Nanoklaszterekként történő rozsdamarásos előállítása új alkalmazási lehetőségek előtt nyit kaput: az 1-4 nm-es kristályok stabil kolloidot képeznek vizes közegben, az élő sejtekben nincsen megfigyelt toxikus hatásuk, és emellett kiváló lumineszcens tulajdonságokkal bírnak, így ígéretes biomarkerek az *in vivo* képalkotásban. Az eddigi számítások és mérések szerint a lumineszcencia paramétereit a kristályfelületen található szerves csoportok határozzák meg.

Saját kutatómunkám során különféle felületű: karboxil, hidroxil és amin terminált SiC nanokristályokat hoztam létre, majd vizsgáltam spektroszkópai módszerekkel. A felületmódosító reakciók sikerességére és az azt követő lumineszcencia-változások magyarázatára a mért spektrumok, illetve szakirodalom alapján következtettem. Az irodalom mennyisége egyelőre csekély, hiszen SiC nanokristályokat csupán nemrégiben sikerült előállítani, így a kísérleti tervet jól ismert, rokon rendszereken végzett kísérletek alapján dolgoztam ki. A felületmódosító reakciókat követően kulcsfontosságú volt a visszamaradó, a méréseket ellehetetlenítő melléktermékek eltávolítása, amit az előállított nanokristályok kis mérete és vízdoldhatósága erősen megnehezített. Ehhez sikerült kidolgozni egy viszonylag egyszerű, szabályozott önszerveződésen alapuló elválasztási technikát.

Az elért eredmények segítettek információt szerezni a felület és a lumineszcencia kapcsolatáról, ezentúl pedig pontos felületi jelenségeket vizsgáló méréseket lehet végezni. Továbbá az aminált SiC nanokristályokat tartalmazó tiszta minta könnyen használható szelektív biológiai képalkotáshoz, hiszen számos protokoll ismeretes a szabad amincsoportok és fehérjék közötti kötés kialakítására. Az aminált felület létrehozásának módszere, az ún. szilanizálás temérdek egyéb felület létrehozására is alkalmas, köszönhetően a forgalmazott szilánvegyületek nagy számának. Eredményeim előremozdítják a SiC kvantumpöttyök, mint biomarkerek jövőbeli felhasználását, kifejlesztve ezzel egy új, olcsón előállítható és *in vivo* is biztonságosan alkalmazható fluoreszcens festékpótlót.

PHB/kitozán szálak előállítása elektromos szálhúzással mesterséges szövettenyésztési alkalmazásra

Kanyó László, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Pukánszky Béla** egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Kirschweng Balázs** PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Az orvostudomány egyik legnagyobb kihívása a sérülés, vagy betegség következtében elvesztett szövetek pótlása. A szervátültetés igen gyakran nem járható út, hiszen a beavatkozás veszélyes lehet, és a rendelkezésre álló donorok száma csekély. A mesterséges szövettenyésztés (tissue engineering, TE) megoldást jelenthet erre a problémára. A technika lényege, hogy a páciens saját sejtjei építik fel újra a sérült szöveteket, így a szervezetből való kilökődés eshetősége nem áll fenn, és nincs szükség donorra sem. A friss szövet megtartásához és három dimenzióban való növekedéséhez átjárható, pórusos vázanyagra (scaffold) van szükség, melyen a szaporítani kívánt sejtek könnyen megtapadhatnak, továbbá feladatuk ellátása után elbomlanak és kiürülnek a szervezetből.

A scaffoldnak több igényt is ki kell elégítenie. Mindenekelőtt biokompatibilisnek, azaz a szervezettel összeférhetőnek kell lennie. További létfontosságú tényező, hogy a sejtek könnyen meg tudjanak tapadni az előállított vázon, és hogy a scaffold az emberi szervezetben fellépő körülmények között degradálódjon és elbomoljon. Több szintetikus polimerről és mesterséges biopolimerről állapították meg, hogy biokompatibilis. Ezek a teljesség igénye nélkül a polietilén-glikol (PEG), polietilén-oxid (PEO), polivinil-alkohol (PVA), politejsav (PLA), és a polihidroxialkanoátok (PHA). Gyakran a vázanyagot nem tisztán egy polimerből állítják elő, hanem valamilyen más komponens, például ásványi anyagok, vagy természetes polimerek keverékéből. Ezzel az eljárással a scaffoldot olyan tulajdonságokkal ruházhatjuk fel, amikkel az alap polimer nem rendelkezik.

Dolgozatomban a polihidroxialkanoátok közé tartozó polihidroxibutirát (PHB) és kitozán keverékéből felépülő scaffoldok előállításával és jellemzésével foglalkozom. A komponensek emulziójából elektromos szálhúzással állítottam elő néhány mikrométer vastagságú szálakat. A szálak alkotta sűrű szövet alkotja a vázanyagot. Optikai mikroszkópiás vizsgálatokkal jellemeztem a szálhúzás alapanyagául szolgáló emulziókat, majd ezen értékelések alapján eldöntöttem, mely emulziókból valósítjuk meg a szálhúzást. Az előállított szálak vastagságát és szerkezetét optikai- és pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM) valamint infravörös spektroszkópiával (FTIR) vizsgáltam.

Égégátolt politejsav habok előállítása szuperkritikus széndioxiddal segített extrúzióval

Vadas Dániel, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin** tudományos segédmunkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A biopolimerek habosítása az elmúlt években óriási fejlődésen ment keresztül. A kutatások motivációja a műanyagipar fenntarthatóságát érintő kérdésekben keresendő. Az iparág függése a fosszilis energiahordozóktól, valamint a műanyag hulladékok által okozott környezeti károk is hosszú távú megoldást kívánnak. Kézenfekvő alternatíva a megújuló erőforrásokból előállítható, egyúttal biodegradálható polimerek használata. A fenntarthatóság egy másik megközelítési módja a termékek tömegének (ezáltal alapanyagigényének) a csökkentése, ami leghatékonyabban habosítással érhető el. A tudomány jelenlegi állása szerint a politejsav (PLA) habok válthatják ki a hatalmas mennyiségben gyártott polisztirol (PS) és polietilén (PE) habokat. Mindazonáltal, a kis sűrűségű PLA habok tömeggyártása nitrogén vagy szuperkritikus széndioxid felhasználásával mind a mai napig kihívást jelent, ennek oka a PLA eredendően kis ömledékszilárdsága. Mint a legtöbb szerves anyag, alapvetően a polimer habok is a könnyen éghető, tűzveszélyes kategóriába sorolandók. Többek között a PLA habok égégátolását is elengedhetetlen megoldani annak érdekében, hogy a csomagolóipar mellett a jármű-, elektronikai- és építőiparban egyaránt széleskörűen elterjedhessenek.

TDK munkám célja kis sűrűségű, égégátolt politejsav habok extrúziós habosítással történő előállítása és széleskörű jellemzése volt. A megfelelő habosíthatóság elérése érdekében a választott PLA alapanyagot lánchossznövelővel és gócképzőként funkcionáló rétegszilikáttal adalékoltam, az éghetőség csökkentését pedig megújuló erőforrásból származó szénforrást tartalmazó felhabosodó égégátoló adalékrendszerrel valósítottam meg. Az égégátoló hatékonyság fokozása érdekében az adalékrendszer alapját képző ammónium-polifoszfátot rezorcin-bisz(difenil-foszfát) oligomerrel kezelt keményítővel, valamint diammónium-foszfáttal és bórsavval kezelt cellulózzal kombináltam. Az alapanyagokat extrúzióval homogenizáltam, a különböző mennyiségben adalékolt granulátumokat pedig szuperkritikus széndioxiddal segített extrúziós habosítással alakítottam nagy porozitású zsinórtermékké. Az elkészült PLA habok morfológiai, termoanalitikai, továbbá mechanikai és éghetőségi tulajdonságait széleskörűen vizsgáltam.

Bízom benne, hogy a kutatásom során gyártott PLA habok előnyös tulajdonságaik révén nem csak a jármű-, elektronikai- és építőiparban, de számos más ágazatban is teret nyerhetnek, ezzel nagyban elősegítve a hagyományos, nem megújuló erőforrásokból előállított polimer habok lecserélését környezetbarát termékekre. .

Új numerikus számítási módszer a kristályos polimerek gócsűrűségének számítására izoterm kristályosodási görbéből

Fleischer-Radu Éva, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kállay-Menyhárd Alfréd** egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudomány Tanszék

A TDK dolgozatomban polipropilén (PP) minták kristályosodási tulajdonságait követtem nyomon. Ehhez optikai vizsgálatokat illetve kalorimetriás módszert alkalmaztam. Célom a kristályosodási folyamat során keletkező gócok számának meghatározása volt, mert ez a mennyiség kulcsfontosságú a termék optikai tulajdonságait tekintve. Munkám során kidolgoztam egy új számítási modellt, amellyel számítható a keletkező gócok száma kalorimetriás módon rögzített kristályosodási görbéből. Az új modell megbízhatóságát jelzi, hogy az általam kidolgozott modell és az optikai mérésekből számított gócsűrűség jó összhangban vannak.

Kontrollált hatóanyag-leadású gyógyszerhordozó rendszerek fejlesztése elektrosztatikus szálképzéssel

Fazekas Réka Árnika, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A mai gyógyszerkutatás jelentős kihívása, hogy az újonnan felfedezett hatóanyagok jelentős része rosszul, vagy egyáltalán nem oldódik vízben, emiatt gyakran ezek a hatóanyagok szilárd gyógyszerformákban nem kerülhetnek forgalomban. A gyógyszerformulálásnak ezért igen fontos feladata a hatóanyag kioldódás kontrollálása, javítása. Megfelelő gyógyszerformával beállítható a kívánt oldódási profil, ezáltal a hatóanyag biohasznosulása növelhető és javítható a beteg együttműködés.

Munkám során egy rossz vízoldhatóságú gyógyszerhatóanyag formulálási lehetőségeit vizsgáltam különböző biokompatibilis polimer mátrixokat alkalmazva hordozó rendszerként, valamint a polimerek kioldódás módosító hatását. Szilárd mikro- és nanoszálgyógyszerformákat állítottam elő elektrosztatikus szálképzéssel. Célom a hatóanyag amorf formában történő előállítása, valamint a nanoszálgyógyszerforma kialakítása volt, és ez által hatékonyan kontrollálható hatóanyag felszabadulást kívántam elérni. Kísérleteim során nyújtott hatóanyag leadású, valamint javított kioldódási tulajdonságokkal rendelkező rendszer fejlesztésével foglalkoztam. E gyógyszerformák tulajdonságainak vizsgálatára kioldási kísérleteket végeztem, valamint a hatóanyag morfológiáját vizsgáltam a kristályos referencia anyag tulajdonságaival összehasonlítva.

Poli(3-hidroxi-butirát) alapú scaffoldok előállítása és hatóanyag hordozó mátrixként történő alkalmazása

Bartha Katalin, IV. évf (BSc)

Témavezető: **Dr. Pukánszky Béla** egyetemi tanár

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Polyák Péter** PhD hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A poli(3-hidroxi-butirát) (PHB) egy biológiailag lebomló poliészter, amit számos baktérium termel energiaraktározás céljából. A PHB monomere, az (R)-3-hidroxi-butánsav, a vérben normál körülmények között is jelen van 0,3-1,3 mM koncentrációban, így nem meglepő, hogy a PHB egy biokompatibilis anyag. Biológiai degradációja és biokompatibilitása lehetővé teszi különböző orvosi alkalmazásait, többek között hatóanyag leadó rendszerként.

A PHB degradációja a szervezetben viszonylag lassú magas kristályossági foka következtében, ami megnehezíti a depolimerizáló enzimeknek a lebontást. A kristályossági fok a polimer számos farmakológiai tulajdonságát befolyásolja, mint a degradáció mechanizmusát és mértékét, a biokompatibilitást, a hatóanyag eloszlását és a hatóanyag leadás kinetikáját. Emiatt orvosi célokra alkalmasabb például a PHB poli(3-hidroxi-valerát)-tal alkotott, alacsonyabb kristályossági fokú kopolimere.

A dolgozat célja egy hatóanyag leadó rendszer létrehozása PHB-ból nedves szálhúzással. Az így előállított scaffoldban a szálak méreteloszlása homogénebb, mint elektrospinninggel előállított scaffoldban. A szálhúzás sebességének függvényében befolyásolható a szálvastagság, lineáris összefüggés figyelhető meg a szálhúzás sebessége és a szálvastagság között.

A kioldódási vizsgálatokat denaturált szeszen végeztük. A hatóanyag leadási vizsgálatokhoz választott modellhatóanyag a quercetin, ami a látható tartományban elnyeli a fényt. Ez lehetővé tette a kioldódás követését UV-Vis spektrofotométerrel. Mivel a PHB amorf fázisban van jelen, így kiküszöböltük a kristályos fázisnak a hatóanyag leadás kinetikájára gyakorolt hatását, valamint a degradációra gyakorolt gátló hatását. Vizsgáltuk továbbá a szálvastagság és a hatóanyag leadás sebessége között fennálló összefüggést, a szálvastagság növekedésével a hatóanyag kioldódásának időállandója nőtt.

Új uracil-DNS metabolizmus befolyásoló fehérjék kutatása

Herczeg Viktória, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Nagy Kinga** PhD. hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A DNS-ben megjelenő uracil egyike a leginkább elkerülendő hibáknak, így minden élő organizmusban több olyan mechanizmus létezik, melyek minimalizálják az uracil előfordulását a DNS-ben. Ebben a védelmi útban fő szerepet játszanak a dUTPáz és az uracil-DNS glikoziláz (UNG) enzimek [1]. A dUTPáz a dUTP/dTTP szint alacsonyan tartásával lecsökkenti az uracil DNS-be történő beépülésének valószínűségét, míg az UNG enzim kihalítja a már beépült uracilt. Emiatt meglepő, hogy léteznek olyan bakteriofágok, melyeknek a genomjában a timin helyett teljes mértékben uracil található. Mikael Skurnik és csoportja fedezték fel a Φ R1-37 bakteriofagot, ami *Yersinia* törzseket fertőz és képes megőrizni uracil-DNS-ét a baktérium uracil ellenes folyamatainak ellenére [2]. Munkánk során azt vizsgáljuk, hogy miként képes az uracil-DNS genommal rendelkező bakteriofág az uracil-DNS elleni harcra kiválóan felszerelt gazdasejtben túlélni és ilyen közegben szaporodni.

A bakteriofág túlélési stratégiáinak vizsgálatakor több független molekuláris biológiai technikát felhasználtunk: egyrészt a fág genomi könyvtárát felhasználva keresünk lehetséges inhibitorokat a baktérium UNG enzime ellen, másrészt a baktérium dUTPáz, timidilát-szintáz illetve UNG enzimjeinek „csaliként” való felhasználásával szeretnénk kölcsönható partnereket találni a fág fehérjéi között. Munkám során sikeresen letermeltem és tisztítottam a baktérium UNG és dUTPáz fehérjéit, enzimaktivitás, themoflour illetve CD mérés segítségével pedig megállapítottam, hogy a térszerkezetük megfelelő volt. Sikeresen kristályosítottuk a *Y. enterocolitica* dUTPáz fehérjéjét, így lehetővé válik a teljes térszerkezet meghatározása is. Kutatásunk másik felében a bakteriofág genomot vizsgáltuk *in vitro* és *in silico* módszerekkel. Fő célunk az volt, hogy a fág könyvtár segítségével túlélési kísérleteket végezzünk, mely során a fág azon génszakaszait kívántuk feltérképezni, melyek a magas uracil tartalmú DNS fennmaradását lehetővé teszi a sejten belül. Ehhez létrehoztunk egy kísérletes modellrendszert melyben nagyátersztő képességű túlélési esszé révén azonosíthatóak lesznek a bakteriofág túléléséért felelős gének és ezek fehérje termékei.

Mikroalga biofinomító upstream technológiájának fejlesztése és kinetikai modellezése

Fózer Dániel, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Németh Áron** egyetemi adjunktus

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Kiss Bernadett** tudományos segédmunkatárs

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Földünk töretlenül növekvő népessége az energiaigények emelkedését idézi elő, így ezt felismervén az elmúlt néhány évtizedben jelentős erőforrások összpontosultak a megújuló energiaforrásokban levő energiapotenciál hatékony kiaknázására. A biomasszákon belül kiemelt helyen szerepelnek a mikroalgák melyeket harmadik generációs biofinomítóknak feldolgozva széles skálát felölelő termékpaletta állítható elő belőlük (például bioüzemanyagok, gyógyszeripari alapanyagok, élelmiszerek, állati takarmányok). A mikroalgák a szárazföldi növényekhez képest számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek, ilyen a magas fotoszintetikus hatásfok és biomassza produktivitás, a nagyfokú biodiverzitás, a folyamatos üzemben megvalósítható fermentáció, valamint az atmoszféra CO₂ tartalmának csökkentése. A nagy volumenű fermentálást azonban mind az upstream mind a downstream folyamatoknál számos szűk keresztmetszet akadályozza. Az előbbinél ilyen a tenyésztés, ahol még nem elég robusztus a fotobioreaktorokban történő fermentálás, továbbá sokféleségükhöz képest elenyésző az izolált, magas tűrőképességgel rendelkező fajok száma, illetve mikroszkopikus sejtméretüknek köszönhetően nehéz a betakarításuk, míg az utóbbinál a konverziós utak komplexitása és egyes műveleti egységek kiugróan magas energiaigénye nehezíti a hatékony termelést.

TDK munkám során a vázolt problémák közül a tenyésztési folyamatok fejlesztésére fókuszáltam. Ehhez egy választott mikroalga törzs (*Chlorella vulgaris*) két izolátumának tenyésztését Student-féle t-próbával és fénytani faktoros kísérleti tervekkel (One-way ANOVA, Central Composite terv) vizsgáltam microplate-n, majd ezek eredményét léptéknövelést követően fotobioreaktorban verifikáltam. Utóbbiakban további technológiai paraméterek (levegőztetés, fényintenzitás) hatását is újabb faktoros kísérlettervekkel határoztam meg (2x3-as ortogonális terv). A kísérlettervek kiértékelésekor a biomassza produktivitás maximalizálását tartottam szem előtt. Mérési eredményeim alapján a készülékek által szabott korlátokon belül optimalám a mikroalgák tenyésztését majd modelleztem növekedésüket.

A kísérletekből nyert adatok segíthetnek a megvilágítási paraméterek sejtnövekedésre gyakorolt hatásainak megértésében, így a fotobioreaktorok megfelelő konfigurálásán keresztül tovább növelhető a mikroalgák biomassza produktivitása. Kísérleti munkámmal a mikroalga biofinomítók upstream problémáinak megoldásához sikerült hozzájárulnom.

Alacsony fehérje expressziót okozó ABCG2 mutációk keresése köszvényes betegekben

Mózner Orsolya, III. évf.(BSc)

Témavezetők: **Dr. Sarkadi Balázs** kutató professzor

MTA TTK Enzimológiai Intézet

Zámbó Boglárka PhD hallgató

MTA TTK Enzimológiai Intézet

Konzulens: **Dr. Vértessy G. Beáta** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A köszvény kialakulásának előfeltétele a megemelkedett szérum húgysav szint, azaz a hiperurikémia, mely – pontosan nem ismert mechanizmusok révén – vezethet a köszvényes rohamhoz, illetve vesekőhöz, valamint gyorsítja a vesével kapcsolatos keringési betegségek kialakulását. Az ABCG2 az ABC-típusú multidrog transzporterek közé tartozó fehérje, amely többek között urátot is transzportál. A fehérje a vese proximális tubulusaiban, valamint a bélben is megtalálható, ezen kívül számos szövetben – például a vér-agy gáton és a placentán - fontos szerepet tölt be a káros anyagok transzportjában. Az ABCG2 fehérje a húgysav szekréció és abszorpció egyensúlyának fenntartásában vesz részt, amely a fehérje hibája esetén az abszorpció irányába tolódik, ezáltal hiperurikémiához és köszvényhez vezethet.

Kutatócsoportunk csatlakozásom előtti áramlási citometria alapú vizsgálatainak eredményei szerint számos köszvényes betegnek alacsonyabb az ABCG2 fehérje szintje az átlagoshoz képest a vörösvértestek membránjában. A szakirodalomban a fehérje több variánsa (így a V12M, Q141K) ismert, amelyek esetében a fehérje szintje csökkenhet, vagy a transzporter funkciója károsodhat.

Céлом az említett korábbi kutatások során kiugróan alacsony ABCG2 fehérje expressziót mutató betegek és kontroll donorok vérmintáiból DNS izolálása és a fehérjét kódoló régió genetikai vizsgálata volt. Munkám során több mintában sikerült megtalálnom a fehérje ismertebb, gyakori variánsait, a Q141K-t és a V12M-et. Ezek mellett más mutációkat is találtam, melyek magyarázatot adhatnak a jelentősen alacsonyabb, akár felére csökkent ABCG2 fehérjeszintre a vörösvértestek membránjában. Az egyik beteg vérmintájában egy stop variánst sikerült kimutatnom az egyik allélon (R236X), amely a fehérje korai terminációjával és lebomlásával jár. Másik két – a normál átlaghoz képest mintegy felére csökkent expresszióval rendelkező - mintában pedig egy eddig a szakirodalom számára ismeretlen mutációt (M71V) találtam, heterozigóta formában. Munkámból kiindulva kutatócsoportunkban elkezdődött az M71V mutáció hatásának vizsgálata az ABCG2 fehérje stabilitására és traffickingjére, valamint tervezem a továbbiakban nagyobb számú köszvényes és normál vérmintán qPCR-es módszerrel a mutáció előfordulását vizsgálni. Lehetséges, hogy ez a mutáció a magyar populációban gyakoribb, mint azt az adatbázisokban leírták, és fontos tényező lehet Magyarországon a hiperurikémia, valamint a köszvény kialakulásában.

Tartós quercetin táplálékkiegészítés mérsékeli a koronária hálózat hipertónia indukálta előnytelen átépülését

Lónyi Flóra, II. évf. (MSc.)

Témavezetők: **Dr. Monori-Kiss Anna** tanársegéd

Semmelweis Egyetem Klinikai Kísérleti Kutató Intézet

Dr. Nádasy György egyetemi docens

Semmelweis Egyetem Élettani Intézet

Konzulens: **Dr. Szarka András** egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A quercetin egy igen gyakori bioflavonoid, melyről laboratóriumunk korábbi kísérletes munkáiban bebizonyította akut értágító hatását koronária arteriolákon, valamint a tartós quercetin táplálékkiegészítés kedvező hatását a kiserek biomechanikai és farmakológiai remodelingjére és hálózati tulajdonságaira. Felmerült a kérdés, hogy a tartós quercetin táplálékkiegészítés kísérletes patkány hipertónia modellben képes-e mérsékelni a koronária kiserek hipertóniára jellemző hálózati átrendeződését?

Kísérletsorozatunk során 180 g-os hím Wistar patkányokat két csoportba osztottunk. Az egyik csoport (HQ, n=8) nyolc héten át ivóvízbe szuszpendált quercetin kezelést (30 mg/ttkg), míg a másik csoport (HK, n=8) ivóvizet kapott. A kezelés 28. napján ozmotikus minipumpát ültettünk a hát bőre alá, amely angiotenzin II-t adagolt 28 napig 200 ng/perc/ttkg dózisban mindkét csoportban. Az összesen nyolc hét kezelési idő letelte után az a. carotis communis kanülálásával vérnyomást mértünk, majd videomikroszkópos feltárással képeket készítettünk a kipreparált és perfundált koronária hálózatról, melyeket képanalízisnek vetettünk alá.

A quercetin kezelés csökkentette a patkányok vérnyomását (HK: $161 \pm 7/122 \pm 6$ Hgmm, HQ: $137 \pm 10/110 \pm 10$ Hgmm), és a 100 g testtömegre normalizált szívtömeget (HK: $0,29 \pm 0,03$ g, HQ: $0,27 \pm 0,02$ g, ns.). A szegmentális tortuozitás a quercetin kezelés hatására jelentősen csökkent (HK: $1,3 \pm 0,2\%$, HQ: $0,4 \pm 0,06\%$, $p < 0,01$). A hatás leginkább a közepesen (2-8%, HK: 76 szegmens, HQ: 33 szegmens) és súlyosan tortuóz (8% felett, HK: 10 szegmens, HQ: 1 szegmens) szegmensek számának csökkenésében jelentkezett. Megfigyeltük a falvastagság kismértékű növekedését 200 μ m feletti belső átmérőknél a quercetinnel kezelt csoportban ($p < 0,01$). A HK csoport hálózataiban megjelentek az extrém nagy átmérők (600-800 μ m), míg a HQ csoportban ez elmaradt ($p < 0,01$). A többszörös és komplex elágazások száma a HQ csoportban csökkenő tendenciát mutatott ($3,2 \pm 0,5$ vs. $2,3 \pm 0,6$, ns.). A hálózat rendezettségét jelző hálózati tortuozitás csökkent (HK: $14 \pm 0,1\%$, HQ: $11 \pm 0,01\%$, $p = 0,01$). A hálózati anomáliák, melyek a hipertóniás hálózatokra jellemzőek (szöglettorések, párhuzamos lefutás, „visszacsapó” ágak, keresztezett kicserélési terület, megcsavarodó elágazás) száma a HQ csoportban jelentősen csökkent (HK: $6,8 \pm 0,7$ db, HQ: $3,6 \pm 0,7$ db, $p < 0,01$).

Következtetésképp elmondható, hogy mindkét csoportban a kialakult hipertónia jelentősen torzította a koronária kiserek hálózati struktúráját. Quercetin tartós kezelése azonban mérsékeli az előnytelen remodeling folyamatokat, de teljesen nem akadályozza meg.

Újszerű antimaláriás célpont: a CCT enzim katalízisének és annak szabályzásának molekuláris alapjai

Hajdú Fanni, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Nagy Gergely Nándor** egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A malária korunk egyik legpusztítóbb fertőző betegsége, a halálesetek döntő többségét a *Plasmodium falciparum* parazita faj okozza. A napjainkban alkalmazott terápiás szerekre rezisztens parazita törzsek elterjedése miatt a jelenlegitől eltérő hatásmechanizmusú antimaláriás szerek azonosítása égető jelentőségű^[1]. A paraziták *de novo* foszfatidilkolin bioszintézise egy igazolt újfajta antimaláriás célpontnak számít^[2]. Ezen útvonal sebességmeghatározó lépését a kutatócsoportban vizsgált^[3,4] CTP:foszfofokolin citidililtranszferáz (*PfCCT*) katalizálja. A *PfCCT* enzim aktivitásának szabályozása egy autoinhibíciós mechanizmus révén valósul meg, mely az enzim reverzibilis membrán kölcsönhatásán alapul. Az enzim működésének megértését nagyban segítik a nemrégiben közölt fehérjeszerkezetek és biokémiai vizsgálatok^[5], ugyanakkor továbbra sem egyértelmű, hogy milyen kölcsönhatás befolyásolja közvetlenül az enzim aktivitást.

Kutatómunkám során a *PfCCT* enzim kulcsfontosságú szerkezeti elemeinek működését elemeztem kinetikai valamint izotermális titrációs kalorimetria alapú egyensúlyi ligandum kötés mérések alapján. Rámutattam, hogy az enzim egy konzervált aktív helyen elhelyezkedő lizin oldallánca szerepet játszik mindkét szubsztrát kötődésében illetve átalakításában. Emellett a vizsgált katalitikus domént tartalmazó fehérje konstrukció C-terminális végének rövidítésével illetve itt eszközölt helyspecifikus mutációk létrehozásával megmutattam, hogy az enzim αE hélix szegmense alapvető hatással van az enzim katalízisre valamint a CTP szubsztrát kötődésre. Ezen eredmények lehetővé teszik a *PfCCT* katalitikus mechanizmusának mélyebb megértését, emellett alapot adnak ahhoz a feltételezéshez, hogy az αE hélix szerkezeti elem várhatóan részt vesz az enzim aktivitás autoinhibíciós szabályzásában is.

[1]World Health Organization, Malaria, 2014.

[2]I. Petersen, R. Eastman, M. Lanzer, FEBS Lett. 2011, 585, 1551–1562.

[3]G. N. Nagy, L. Marton, A. Contet, O. Ozohanics, L.-M. Ardelean, A. Révész, K. Vékey, F. D. Irimie, H. Vial, R. Cerdan, et al., Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 2014, 53, 13471–6.

[4]L. Marton, G. N. Nagy, O. Ozohanics, A. Lábás, B. Krámos, J. Oláh, K. Vékey, B. G. Vértessy, PLoS One 2015, 10, e0129632.

[5]J. Lee, S. G. Taneva, B. W. Holland, D. P. Tieleman, R. B. Cornell, J. Biol. Chem. 2014, 289, 1742–1755.

Komplex tejsavó hasznosítás: a propionsav alternatíva

Vidra Aladár, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Németh Áron** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Összefoglalva, a tejsavón történő fermentációra a *Propionibacterium freudenreichii* az alkalmasabb, mert jóval rövidebb idő alatt hasznosítja a laktózt mint a *Propionibacterium acidipropionici*.

Tejsavó hasznosítás során ahol a tejsavó laktóztartalmát *Lactobacillus*okkal vagy egyéb mikrobákkal elfogyasztják vagy átalakítják tejsavvá, a tejsav hasznosítására a *Propionibacterium acidipropionici* az alkalmasabb. Igaz hogy pár órával tovább tart a fermentáció, de nagyobb aerotoleranciája miatt előnyösebb ennek használata.

TDK munkám során sikerült felállítani olyan kinetikai modellt, amely –néhány további kísérlettel való verifikálás után – talán alkalmas a propionsav fermentációk általános leírására lehetőséget teremtve ezzel a további kísérletek (pl.: rátáplálás, folytonos technika) megtervezéséhez.

A Parkinson-kór biomarker fehérjéinek szerkezeti és funkcionális jellemzői

Csaplár Marianna, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Oláh Judit** tudományos főmunkatárs

MTA TTK Enzimológiai Intézet Sejtarchitektúra kutatócsoport

A központi idegrendszeri betegségek, mint például a Parkinson-kór kialakulásában meghatározó szerepet játszanak a rendezetlen fehérjék. Az MTA-TTK Enzimológiai Intézetében a Sejtarchitektúra kutatócsoport azonosított egy agyspecifikus fehérjét, a TPPP/p25-öt (Tubulin Polymerization Promoting Protein/p25), mely nem rendelkezik 3D szerkezettel, és az α -szinukleinnel való patológiás kölcsönhatása révén elősegíti annak aggregációját, toxikus oligomerek képződését, ami végül a Parkinson-kórra és egyéb szinukleinopátiákra jellemző neuronális és gliális zárványtestek kialakulásához vezet. A TPPP/p25 az ún. „neomorphic moonlighting” fehérjék prototípusa, melyek mind fiziológiás mind patológiás funkció ellátására képesek azáltal, hogy eltérő partner fehérjékkel hatnak kölcsön. A specifikusan az oligodendrocitákban kifejeződő TPPP/p25 fő fiziológiás partnere a mikrotubuláris hálózat, melynek stabilitását és dinamikáját mikrotubulus kötegelő és acetilációt növelő aktivitása révén befolyásolja. A TPPP/p25 kifejeződése kulcsfontosságú az oligodendrocita sejtek differenciációja során, ezáltal nélkülözhetetlen a mielinhüvely kialakításához. A TPPP/p25 fiziológiás (tubulinnal való) illetve patológiás (α -szinukleinnel való) komplexeinek kialakításában szerepet játszó szegmensek (interface) azonosítása alapvető fontosságú specifikus gyógyszermolekulák kifejlesztéséhez, hiszen így módon lehetséges a patológiás folyamatok befolyásolása a fiziológiás funkció megváltozása nélkül. Ezen innovatív stratégia kidolgozása a Sejtarchitektúra kutatócsoport egyik fontos kutatási projektje.

Ezekbe a kutatásokba kapcsolódtam be, célom volt a változatos biokémiai és biofizikai vizsgálati módszerek elsajátítása, majd ezek alkalmazása a csoportban rekombináns technológiával előállított biomarker fehérjék és mutánsaik szerkezeti és funkcionális jellemzése érdekében. A humán rekombináns TPPP/p25-öt és α -szinukleint, valamint ezek deléciós illetve csonkolt mutánsait *E. coli*-ban termeltettem, majd izolálás után szerkezetüket cirkuláris dikroizmussal és fluoreszcens spektroszkópiával vizsgáltam. Ezen vizsgálatok alátámasztották a kutatócsoport korábbi eredményeit, miszerint a TPPP/p25 fehérje rendezetlen (random coil), azonban a középső CORE régió képes másodlagos szerkezetet kialakítására. A TPPP/p25 mutánsok α -szinukleinnel való kölcsönhatását ELISA-val és affinitás kromatográfiával vizsgálva azt tapasztaltam, hogy bár a CORE régiót érintő bizonyos szegmensek deléciója (59-62,147-156) csökkentik a két fehérje közötti kölcsönhatást, de nem képesek azt teljesen megszüntetni. Ugyanakkor a cirkuláris dikroizmus és turbidimetriás mérések eredményei azt mutatták, hogy az TPPP/p25 azonos szegmenseinek deléciója a TPPP/p25 fiziológiás partnerével, a tubulinnal való kölcsönhatást nem befolyásolták. Ezen eredmények rámutatnak a rendezetlen TPPP/p25 fehérje konformációs változékonyságára, és arra, hogy a fiziológiás és patológiás kötőfelszínének kialakításában több szegmens is szerepet játszhat. Gyógyszertervezés szempontjából a patológiás körülmények között kialakult fehérje komplex kötőfelszíne a specifikus gyógyszercélpont, ezen komplex vizsgálata volt kutatómunkám fő célja a patológiás kölcsönhatás kialakulása szempontjából kulcsfontosságú aminosav szakaszok tekintetében módosított mutáns TPPP/p25 és α -szinuklein biomarker fehérjék segítségével.

Szerkezeti genomikai célpontok azonosítása a humán transzmembrán proteomban

Varga Julia Kornélia, I. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Tusnády Gábor** tudományos főmunkatárs

MTA TTK EI Membránfehérje Bioinformatika Kutatócsoport

Dr. Vértessy Beáta tanszékvezető egyetemi tanár

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer tudományi tanszék

A transzmembrán fehérjék a humán proteom 25-30%-át teszik ki; fontos szerepet játszva az élő szervezetek működésében, részt vesznek sejt-sejt kapcsolatok kialakításában, jelátvitelben, a membrán két oldala közötti anyagtranszportban. Egészségügyi szempontból is jelentősek, hiszen a ma piacon levő gyógyszerek 60-70%-a transzmembrán fehérjéken keresztül fejti ki a hatását. Mindezen tulajdonságok ellenére, az ismert fehérjeszerkezetek mindössze 2%-a tartozik transzmembrán fehérjékhez. Ennek oka, hogy ezek a fehérjék speciális tulajdonságaik - leginkább oldhatóságuk - miatt, a ma széles körben elterjedt szerkezet-meghatározási módszerekkel, mint a röntgenkristallográfia és NMR, nehezen vizsgálhatóak. A fehérjék szerkezetének minél pontosabb ismerete fontos például gyógyszerkutatáshoz, fehérje-fehérje kölcsönhatások mechanizmusának megértéséhez, fehérjék funkciójának és működésének megértéséhez.

A munka során a cél egy olyan automatikus munkafolyamat felállítása volt, amely alkalmas annak meghatározására, hogy mely humán transzmembrán fehérjék szerkezetének megoldása jelentené a legnagyobb hozzájárulást a szerkezeti tér lefedettségének növeléséhez. Ehhez elsősorban meg kellett állapítani, hogy mely humán transzmembrán fehérjéknek ismert már a szerkezete a teljes transzmembrán régiót lefedően, valamint, hogy mely fehérjék modellezhetőek a már meglevő szerkezetek alapján. A modellezhetőség megállapításához a legmodernebb algoritmusokat, rejtett Markov-modell alapú szekvenciaillesztést, valamint transzmembrán fehérje specifikus foldfelismerő programot használtam. A nem ismert szerkezetű és nem modellezhető fehérjéket a humán homológjaik száma szerint rangsorolva létrehozható volt egy olyan lista, amely fehérjék szerkezetének a megoldása a lehető legtöbb, még nem modellezhető fehérje modellezését tenné lehetővé.

Az eredményeket szabadon hozzáférhető adatbázisban töltöttük fel az internetre (<http://tstmp.enzim.ttk.mta.hu/>), ahol az adatok több szempont szerint kereshetőek, böngészhetőek, valamint az adatszetek letölthetőek. Mivel az egész folyamat automatizált, ezért az adatbázis folyamatosan frissíthető, karbantartható a forrásadatbázisok új kiadásait követve.

Folyamatos üzemű nedves granulálási eljárás fejlesztése

Tordai Klaudia Teréz, IV. évf.(MSc)

Témavezetők: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A keményítő enzimatis hidrolízisével kapott szőlőcukor jelentős mennyiségben kerül felhasználásra az élelmiszeriparban, ugyanakkor gyógyszeripari felhasználása sem elhanyagolható például tabletták segédanyagaként. Azonban a kristályosítással kapható, nagy finom por frakciót tartalmazó szőlőcukor nem megfelelő gördülékenységű és tablettázhatóságú, ami komoly nehézségeket okozhat pl. adagolásakor szállításakor, vagy feldolgozásakor. Az ilyen típusú szőlőcukor hajlamos a beboltozódásra, összeáll tömbökké, így nem adagolható megfelelően, valamint préselés során kis szilárdságú tabletták készíthetők csak belőle.

Munkám célja az volt, hogy technológiát dolgozzak ki egy jól gördülő, jól tablettázható szőlőcukor granulátum előállítására, mely technológia lehetőség szerint folyamatos üzemű gyártásra is alkalmas. Kísérleteim során egy szakaszos nedves granulálási eljárás mellett új típusú folyamatos nedves granulálási eljárást is fejlesztettem. Részletesen vizsgáltam a folyamatos nedves granulálási technológia paraméterfüggését, továbbá azt, hogy az utókezelések (pl. szárítás, őrlés módja), milyen hatással vannak az előállított granulátumok minőségére. A szőlőcukor granulátumok nedvességtartalmát termogravimetriával, gördülékenységét kifolyási sebesség mérővel, szemcseméret eloszlását lézerdiffrakcióval, kristálymorfológiáját differenciális pásztázó kalorimetriával és Raman spektroszkópiával vizsgáltam. A granulátumokat tablettáztam, majd mértem a gyártott tabletták törési szilárdságát, és összehasonlítottam a granulátatlan porból gyártott tabletták szilárdságával. A vizsgálatok alapján megállapítottam, hogy a kidolgozott technológia megfelelő minőségű terméket eredményez, és méretnövelés után integrálható a folyamatos szőlőcukor gyártás technológiai sorába.

Fermentációs úton történő xilit előállítás búzaszalmából

Rozbach Margaréta, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Barta Zsolt** egyetemi adjunktus

BME- Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Mai világunkban egyre fontosabb szerephez jutnak a környezetbarát vagy más néven „zöld” technológiáknak, melyek lényegesen kevesebb terhet rónak környezetünkre, valamint törekednek a megújuló nyersanyagforrások kihasználására. Így jelent meg a XXI. században a kőolaj finomítás mintájára az úgynevezett biofinomítás is. A biofinomító olyan integrált egységet jelent, amely képes biológiai alapanyagokból hasznos termékeket előállítani. A biofinomítás nyersanyaga lehet a lignocellulóz alapú biomassza. A lignocellulóz a Földön bőséges mennyiségben előforduló, igen olcsó nyersanyag, melynek felhasználásával, értéknövelt termékeket, különböző vegyipari és élelmiszeri ipari alapanyagokat is előállíthatunk. Az értéknövelt termékek közé sorolható a xilit is, amely egyre nagyobb népszerűségnek örvend. A xilit természetes poliol, amit az élelmiszeriparban édesítőszerként használnak fel. Kémiai úton történő előállítása bonyolult és költséges folyamat, valamint alacsony termék hozamot eredményez. A mikrobák segítségével végzett xilóz- xilit konverzió, ehhez képest viszonylag egyszerű megoldást nyújthat, amely során toxikus katalizátorokat sem kell felhasználni.

Munkám során nyersanyagként búzaszalmát használtam fel, melyet savas hidrolízisnek vettem alá, így felszabadítva a lignocellulózban található xilózt. Célom xilit előállítása volt, ezért a kapott hidrolizátumokon *Hansenula anomala* törzsszel xilit fermentációt végeztem.

Kezdetben híg kénsavas kezelésekkel búzaszalma hidrolizátumokat állítottam elő. A savas kezeléseket 121°C és 140°C- on, különböző időtartamokkal (5, 30 és 55 perc), össztömegekkel, savkoncentrációkkal (0,5; 1; 1,5 és 2) illetve szárazanyagtartalommal végeztem (5 és 10%). Célom a lehető legnagyobb xilóz hozamhoz tartozó optimális körülmények megállapítása, illetve minél nagyobb xilóz koncentráció elérése volt. Emellett figyelemmel kísértem azt is, hogy a kezelések során milyen koncentrációban keletkeztek a későbbi xilit fermentációra káros hatással lévő inhibitor molekulák. A kapott hidrolizátumokat detoxikációs műveleteknek vettem alá, majd *Hansenula anomala* törzs segítségével fermentáltam. A fermentációk során vizsgáltam a xilit koncentrációt, hozamot és produktivitást.

Az ösztrogén receptor szerepe a plazmamembrán kalcium ATP-áz 4b izoforma expressziójának szabályozásában emlőtumor sejtekben

Hollósi Anna, IV. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Enyedi Ágnes** tudományos tanácsadó

Semmelweis Egyetem II. Patológia Intézet

Konzulens: **Varga Karolina** tudományos segédmunkatárs

Semmelweis Egyetem II. Patológia Intézet

Az élő sejtek számára nélkülözhetetlen az intracelluláris Ca^{2+} háztartás fenntartása. A Ca^{2+} jelátvitel számos sejtélettani funkciót befolyásol, mint például a migráció, túlélés, sejthalál vagy az osztódás. Tumoros sejtekben a Ca^{2+} jelátviteli folyamatokat végző fehérjék kifejeződése megváltozik, aminek a következtében a sejtek Ca^{2+} háztartása felborul. A dinamikus egyensúly fenntartásában nélkülözhetetlenek a plazmamembrán Ca^{2+} ATP-ázok (PMCA), amelyek feladata az alacsony intracelluláris Ca^{2+} szint biztosítása.

Csoportunk munkatársai korábban azt tapasztalták, hogy az ösztrogén receptor (ER) pozitív MCF-7 emlőtumor sejtek kismértékben fejezik ki a PMCA4b izoformát, hisztone-dezacetiláz inhibitor (HDACi) kezelés hatására viszont a PMCA4b fehérje expressziója nagymértékben fokozódik. Az alacsony PMCA4b expresszió különböző ingerekre hosszan fenntartott Ca^{2+} jelet eredményez, amely csak a kezelések hatására normalizálódik. Ezzel ellentétben az ER negatív MDA-MB-231 sejtvonalban magas PMCA4b expressziót figyeltek meg, melyet a HDAC inhibitor kezelés csak kismértékben befolyásol.

Munkánk során tanulmányoztuk, hogy az ER által közvetített jelátviteli utak befolyásolják-e a PMCA fehérjék kifejeződését emlőtumor sejtekben. Ezért vizsgáltunk egy ER pozitív és egy ER negatív emlőtumor sejtvonalon ösztradiol (E2) illetve ER gátlók hatásait a PMCA fehérjék expressziójára. Azt tapasztaltuk, hogy az ER pozitív MCF-7 sejtekben az E2 fokozza, míg az ER-gátló fulvestrant gátolja a PMCA4b izoforma kifejeződését. Továbbá a HDAC inhibitorok hatása is kisebb mértékű a PMCA4b kifejeződésre, ha a kezeléssel párhuzamosan gátoljuk az ER-t. Ezzel ellentétben az ER negatív MDA-MB-231 sejtek PMCA4b expresszióját nem befolyásolja az E2 jelenléte vagy hiánya, sem önmagában vizsgálva, sem HDAC inhibitor kezelés esetén.

Vizsgálatainkból arra következtethetünk, hogy az ER jelpálya szerepet játszik a PMCA4b fehérje expressziójának szabályozásában, és részben felelős a HDAC inhibitorok által kiváltott fokozott PMCA4b termelésért is. Az ER gátlása az emlőtumorsejtek kezelésének régóta alkalmazott eszköze, hiszen az infiltráló emlőkarcinómák 70-80%-a ER pozitív. Manapság több kutatás zajlik, ahol a hagyományos terápiákat HDAC inhibitor kezeléssel kombinálják. Új terápiás protokollok kifejlesztéséhez fontos megértenünk, hogy ezek a drogok, hogyan változtatják meg a tumorsejtek működését, többek között a tumorsejtek Ca^{2+} homeosztázisát.

Genetikai rizikótényezők vizsgálata magyar Alzheimer kóros betegekben

Csabán Dóra, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Molnár Mária Judit** egyetemi tanár, intézetvezető

Genomikai Medicina és Ritka Betegségek Intézete

A neurodegeneratív betegségek jelentősége egyre nagyobb korunk idősödő társadalmában. A betegségek genetikai rizikófaktorai iránti érdeklődés is fokozódik, hiszen ezek szűrése lehetővé teheti a betegségek prevencióját. Az apolipoprotein E (*APOE*) genetikai variánsainak a késői kezdetű sporadikus Alzheimer kór kifejlődésére gyakorolt hajlamsító hatása jól ismert. Az ϵ 4/4 genotípus mintegy 20-szorosára növeli a rizikót. A *TREM2* gén a 2-es típusú myeloid sejteken expresszálandó triggering receptort kódolja. A gén által kódolt fehérje az immunrendszer sejtjeinek aktiválásában vesz részt. Egyes SNV –inek neurodegenerációban játszott szerepe nem teljesen tisztázott. A mikrogliaknak mint a központi idegrendszer-specifikus szöveti makrofágjainak aktivitása függ a *TREM2* géntől, illetve a gén neuroinflammációban betöltött szerepét igazolja, hogy expressziója a mikrogliaon akár 50-szer magasabb lehet, mint a szöveti makrofágokon. A *TREM2* G140A (p.R47H) SNV-t mint fontos rizikó faktort Alzheimer (AD) és Parkinson-kór, valamint familiáris frontotemporális demencia (FTD) esetén is felvetették már. Az *APOE* és *TREM2* gének mellett folyamatban van egy további rizikófaktor az *MTHFR* C677T SNV vizsgálata is, amely újabb kutatások szerint szintén korrelációt mutat az Alzheimer-kór kialakulásával.

Vizsgálatunk során a magyar demens betegeknél a *TREM2* G140A és az *MTHFR* C677T SNV jelenlétének feltérképezése a variánsok és a demencia közötti asszociáció keresése a célunk. Valamint az *APOE* ϵ 4 allélja mint ismert genetikai rizikótényező azonosítása a fenti kohortban és a genetikai rizikótényezők hatásának összehasonlító elemzése.

Kohortunkban 150 demenciával diagnosztizált és 100 nem demens, 70 évnél idősebb kontroll egyén DNS mintáját vizsgáltuk meg. Célzottan a *TREM2* G140A, az *MTHFR* C677T SNV-re és az *APOE*- ϵ 4 allélra.

A demencia kohortban 3 betegnél találtunk a *TREM2* génben heterozigóta mutációt, míg a kontroll csoportban nem volt jelen ez a ritka variáció. Az *APOE* ϵ 4 alléljának frekvenciája a demens betegeknél 23,3 %, a kontroll csoportban pedig csak 6,3% volt. Habár a vizsgált *MTHFR* SNV heterozigóta formában nem mutat jelentős eltérést a két kohortban, a homozigóta mutáció (T677T SNV) megjelenésében viszont megfigyelhető szignifikáns eltérés a különböző demencia típusok esetén.

Vizsgálataink megerősítették, hogy az AD kialakulásának rizikófaktor a *TREM2* G140A, de a vizsgált betegcsoportokban előfordulása alacsony, míg az *APOE* genotipizálása ebben a kohortban is igazolta a ϵ 4 allélt mint rizikótényezőt. Tehát a *TREM2* G140A és az *MTHFR* C677T SNV gyengébb rizikófaktorok számítanak hazánkban, mint az *APOE* ϵ 4 allélja.

Innovatív talajjavítás hulladékokból és melléktermékekből előállított bioszénnel és komposzttal szabadföldi kísérletekben

Kirchkeszner Csaba, II. évf.(MSc)

Témavezetők: **Dr. Molnár Mónika** egyetemi adjunktus

BME VBK Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Dr. Feigl Viktória egyetemi adjunktus

BME VBK Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszer-tudományi Tanszék

Konzulens: **Dr. Rékási Márk** osztályvezető

MTA Agrártudományi Kutatóközpont Talajtani és Agrokémiai Intézet,
Talajkémiai és Anyagforgalmi Osztály

Magyarországon mindig is nagy szerepet játszott a mezőgazdasági termelés, aminek szükséges feltétele a hazánkban található termőtalajok minőségének hosszú távú megőrzése, leromlott talajaink javítása, és a szennyezett területek (talajok) remediációja. Hazánk mezőgazdasági adottságai Európai Unió összehasonlításban is átlag felettiek, azonban figyelembe kell vennünk, hogy évről évre egyre több magyarországi mezőgazdasági területet sújtanak a talajdegradációs folyamatok (például szikesedés, a talaj vízgazdálkodásának szélsőséges változása, tápanyag-tartalom csökkenése). Ezeknek eredményeképpen óriási területek válnak termőképtelenné, ahol a talaj javítása hosszú távon, jó hatásokkal általában nem érhető el a hagyományos talajjavítási módszerekkel. A különböző szerves hulladékokból, melléktermékekből pirolízissel előállított bioszén alkalmazása környezetvédelmi technológiákban, köztük a leromlott talajok javításában, egyre jelentősebb kutatási téma napjainkban.

Tudományos diákköri munkám fő célkitűzése – a talajvédelem és hulladékhasznosítás kiemelt jelentőségű problémaköréhez kapcsolódva – egy olyan talajjavítási technológia megalapozása volt, amely a mezőgazdasági és ipari termelés során nagy mennyiségben képződő szerves hulladékok és melléktermékek felhasználásával javítja a leromlott szerkezetű, rossz tápanyag-gazdálkodási tulajdonságokkal rendelkező homoktalajok minőségét.

Kutatásaim során gabonahéj és papírgyártási szennyvíziszap pirolízisével gyártott bioszén, valamint kommunális szennyvíziszapból és mezőgazdasági melléktermékekből előállított komposzt különböző kombinációinak hatását vizsgáltam leromlott szerkezetű, karbonátos homoktalajra. Az őrbottyáni modellterületen, kisparcellás kísérletekben tanulmányoztam és értékeltem a bekevert bioszén és komposzt hatását mind a talaj fizikai-kémiai, biológiai és ökotoxikológiai jellemzőire, mind a termőképességére. A komplex környezetanalitikai és ökotoxikológiai monitoring rendszer alkalmazásával, mind a pozitív, javító hatásokat, mind pedig az esetleges káros, gátló hatásokat mértem.

A komplex metodika eredményei egyértelműen mutatták a bioszén kedvező hatását, mind a talaj víz- és tápanyag-gazdálkodási jellemzőire, biológiai aktivitására, mind a termőképességre.

Tudományos diákköri munkám során sikerült megalapozni egy olyan innovatív talajjavítási technológiát, amely lehetővé teszi a leromlott szerkezetű karbonátos homoktalajok minőségének javítását. Mindezt a mezőgazdasági és ipari termelés során jelentős mennyiségben keletkező szerves melléktermékek (például gabonahéj, papírgyártási szennyvíziszap) környezetbarát, tervezett és tudatos konverziójával, majd felhasználásával tehetjük meg. Az innovatív technológia utat nyit a fenntartható mezőgazdaság és a környezetbarát hulladékhasznosítás irányába.

Gluténmentes termékfejlesztés új irányai: hajdinalisztek tápértékének és tésztaik reológiai viselkedésének célzott módosítása

Roznár Petra, IV. évf.(BSc)

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Németh Renáta** PhD hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A lisztérzékenység (cöliákia) a társadalom körülbelül 1%-át érintő autoimmun betegség, melynek tüneteit egyes gabonafélékben (búza, árpa, rozs) található fehérjék váltják ki. A leggyakoribb ételérzékenységgént tartják számon, melynek egyetlen jelenleg ismert kezelési módja a gluténmentes diéta. A piacon jelenleg elérhető gluténmentes alapanyagok és termékek minősége, választéka és mennyisége jelentősen elmarad a hagyományos búzaalapú termékektől. A tápértéknövelés hagyományos módjai, mint a teljes kiőrlésű, vagy rostdús alapanyagok alkalmazása hátrányosan érintheti a technológiai tulajdonságokat és a végtermékminőséget. A biodiverzitás, a tápértéknövelés és a választékbővítés szempontjából előnyös alternatív megoldást jelenthet kiscabonák (pl.: köles, cirok), illetve álgabonák (pszeudocereáliák, pl.: hajdina, amaránt, quinoa) őrleményeinek felhasználása gluténmentes sütő- és tésztaipari termékek előállítására. A technológiai tulajdonságok javításának ígéretes megoldása lehet a rostdús őrleményekben található nem keményítő jellegű szénhidrátok pl. arabinoxilánok) közötti keresztkötések kialakítása.

Munkám célja a hajdina őrlemény frakcióinak laboratóriumi előállítása, a magvak és őrleményeik összetételi jellemzése, valamint a technológiai tulajdonságok vizsgálata és módosítása pentozán adagolással és enzimes kezeléssel. Meghatároztam a minták nyersfehérje, hamu, nyerszsír és élelmi rost tartalmát. A tészta konzisztenciájának célzott módosítását pentozán (AX) izolátum adagolásával, illetve enzimes kezeléssel (POX) végeztem. A hajdina lisztek (teljes őrlemény és fehérliszt) reológiai tulajdonságait és a tészta konzisztencia kezelése hatására bekövetkező változását dagasztási elven működő mikro-valorigráfos mérés technikával vizsgáltam. A lisztek és a belőlük készült natív és kezelt tészta fehérjeegység összetételi jellemzéséhez SDS-PAGE módszert használtam.

A teljes kiőrlésű lisztek a fehérlisztnél értelemszerűen kedvezőbb tápértékkal rendelkeztek. Enzimadagolás hatására mindkét őrleménytípusnál jelentősen javultak a dagasztási tulajdonságok, erősebb tészta szerkezet alakult ki. Az arabinoxilán adagolása lényegesen gyengébb tészta minőséget eredményezett vélhetően a viszkozitás változása miatt, melyen az enzimadagolás sem javított jelentősen. Az eredmények alapján valószínűsítettük, hogy az enzimkezelés a fehérjeegység összetételben okozott változást, de ezt az elektroforézis vizsgálatok eredményei nem támasztották alá. A tészta állomány tulajdonságai és annak változása ígéretes a hajdinalisztek alkalmazása szempontjából, azonban a jelenségek magyarázata a kutatás folytatásának legfontosabb célkitűzése.

Folyamatos gyógyszeripari homogenizáló rendszer fejlesztése, valós idejű Raman kontroll megvalósításával

Nusser Dávid György, III. évf.(BSc)

Témavezető: **Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Csontos István** egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A demográfiai változások, a készítményekkel szembeni növekvő minőségi elvárások és az ehhez kapcsolódó fejlesztési költségek megugrása révén a gyógyszeripar napjainkban olyan új kihívásokkal szembesül, amik a jelenlegi működési modell átalakítását teszik szükségessé. Erre válaszul indult meg a legújabb technológiák iparági integrációja, melyek közül a legnagyobb változást a tradicionálisan szakaszos gyártás folyamatossá tétele, illetve az ehhez szükséges valós idejű analitika és a visszacsatolások megvalósítása jelenti.

A munkám során egy komplex, Raman kontroll alapú, folyamatos, homogenizáló rendszer fejlesztését tűztem ki célul, ami a fent leírt új kihívásoknak egyszerre felel meg. A berendezés egy gravimetrikus, illetve egy volumetrikus adagolót, egy folyamatos homogenizálót és egy in-line Raman szondát foglal magában. A rendszer a por alapú gyógyszerek formulálásánál azért egyedülálló, mert – bár technológiailag nagyon hasznos – idáig ezen a területen nem készült Raman-jel felhasználó visszacsatolás. Munkám két fő részből tevődik össze: egy szoftveres fejlesztésből, ami magában foglalja az eszközök (mérleg, PLC, adagoló) közötti kommunikáció megalkotását és a Raman-jel alapú visszacsatolás integrációját, valamint a rendszer gyógyszeripari felhasználhatóságát érintő tesztelésből.

A rendszer kulcsát képező adagolóval végzett kísérletek során tapasztalt pontosság, robusztusság, stabilitás alapján megállapítható, hogy a berendezés teljesíti az FDA szabványban előírt határértékeket, így a gyógyszergyártásban is használható porok adagolására. Ezenkívül a folyamat monitorozásával nyert információk révén meghatároztam a kis szemcseméretű poroknál fellépő kitapadás pontos nagyságát, és vizsgáltam egy olyan „okos” technológia megvalósíthatóságát, ami a jelenség kompenzálása révén tovább csökkentené a selejt mennyiségét.

A folyamatos homogenizáló rendszer megalkotása fontos előrelépést jelent a por alapú gyógyszerek formulálásánál, hiszen az in-line analitika segítségével a jól kontrollált gyártás megvalósításán túl, a minőségbiztosítás is ugrásszerűen javulhat, lehetőséget teremtve a valós idejű felszabadítás elérésére, ami a cégek számára egyszerre eredményez időbeli és anyagi megtakarítást. Ezért a homogenizálási lépést – egy futószalag segítségével – közvetlenül a tablettázógéppel kívánjuk összekapcsolni, ezáltal megvalósítva a por alapú készítmények folyamatos formulálását.

Gőz-folyadék egyensúlyi adatok konzisztenciájának vizsgálata egy új módszerrel

Kolarovszki Zoltán, IV. évf. (BSc)

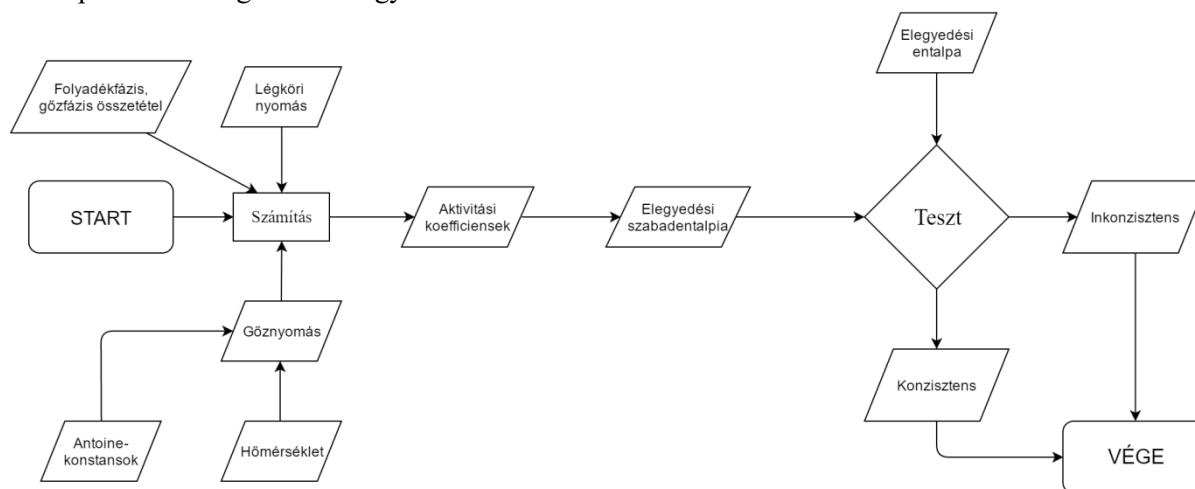
Témavezető: **Dr. Mika László Tamás** tanszékvezető egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: **Havasi Dávid** egyetemi tanársegéd

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Folyadékkelegyek desztillációs szeparációjához elengedhetetlenül fontos a megfelelő tervezés, mivel igen nagy az energiaigényük. A megfelelő tervezéshez szükség van a rendszert alkotó komponensek, elegyek termodinamikai tulajdonságainak ismeretére, mint például a gőz-folyadék egyensúlyi adatokra. Ezen a területen továbbra is kiemelten fontos az adatok mérési úton történő meghatározása, mivel sok esetben számításos módszerrel nem modellezhető megfelelően az adott rendszer. A mérési adatokat viszont szükséges megvizsgálni, hogy azok összhangban vannak-e a megfelelő termodinamikai törvényszerűségekkel, amelyekre hőtani összefüggésekből származtatható ún. termodinamikai konzisztenciatesztet alkalmaznak. Ezen tesztek azonban különböző elhanyagolásokat tartalmaznak, és használhatóságuk esetenként korlátozott, pl. nagy forráspontkülönbségű biner elegyek esetében.



1. ábra. Egy konzisztencia-teszt elvégzéséhez szükséges mennyiségek és kapcsolatok.

Munkám célja nagy forráspontkülönbségű elegyekre is alkalmazható konzisztenciateszt kidolgozása, amelyhez az irodalomban rendelkezésre álló adatok mellett egy saját kísérletsorozattal meghatározott gőz-folyadék egyensúlyi adatsort is felhasználtam.¹

¹ Havasi, D.; Pátzay, G.; Kolarovszki, Z.; Mika, L. T., *J. Chem. Eng. Data*. **2016**, 61, 3326–3333.

ATR-UV/Vis és Raman spektroszkópián alapuló visszacsatolások szabályozás fejlesztése

Tacsi Kornélia, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Pataki Hajnalka** MTA posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kutatómunkám során a gyógyszeripari kristályosítás olyan nem modell alapú szabályozási lehetőségének megvalósításán dolgoztam, melyben a kívánt polimorf módosulat előállítását inline Raman és ATR-UV/Vis spektrométerek alkalmazásával végeztem. A visszacsatolások szabályozás alapját a két analitikai módszerrel folyamat közben rögzített spektrumok azonnali kiértékelése adja, illetve az ebből számolt pontos polimorf koncentráció. Munkám során elsődleges feladatom az ATR-UV/Vis spektroszkóp kalibrációs összefüggésének meghatározása, valamint a berendezés folyamat közbeni kiértékelő programjának tesztelése, továbbá az inline Raman és ATR-UV/Vis spektrométerek kombinációjának felhasználásával megvalósított szabályozás hatékonyságának előzetes vizsgálata. Ezen új kettős inline módszeren alapuló nem modell bázisú visszacsatolások szabályozás, a folyamatfelügyelő, és –analizáló technológiák irányelveinek megfelelően a kristályosítás szabályozásának egy újabb, a szakirodalomban eddig nem publikált hatékony lehetőségét hordozza.

A dolgozatomban összegzésre kerül az ATR-UV/Vis többváltozós kalibrációjának menete, valamint az MLR módszerrel meghatározott kalibrációs konstansok és a modell offline validálását követő inline tesztelések eredményei. Ehhez a spektrumok rögzítését végző, tanszéken fejlesztett UVComm és RamanComm programokat használtam, melyek tesztelése is feladataim között szerepelt. Vizsgáltam a Raman spektrumok legkisebb négyzetek módszerével (CLS) történő kiértékelésének pontosságát, mely során előre betáplált referencia spektrumok segítségével számolható a rendszerben lévő komponensek spektrális koncentráció értékei. A kristályosítások során felvett UV/Vis és Raman spektrumok folyamat közbeni feldolgozását a RAUV programmal végeztem, mellyel lehetőségem nyílt a kristályosításokat mennyiségileg is elemezni és vizsgálni a későbbi szabályozás hatékonyságát.

Félüzemi abszorpció mérőberendezés tervezése

Kató Zoltán, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Angyalné Dr. Koczka Katalin** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Tudományos diákköri munkám keretében egy olyan mérőberendezést terveztem, amely alkalmas az abszorpció jelenségének vizsgálatára. Az eszköz a Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék DCs épületében található laboratóriumában kerül majd felhasználásra, döntően hallgatói mérésekhez. Az oszlopban acetonnal szennyezett levegőáram vízzel történő, ellenáramú abszorpciója játszódik le.

Munkám során elvégeztem az abszorpciós oszlop méretezését, valamint meghatároztam a laboratóriumi körülmények között alkalmazható folyadék- és gázáramok mennyiségére és összetételére vonatkozó határokat. A meghatározott korlátok alapján megadtam a tervezett hallgatói mérés paramétereit, majd az eredményeket Aspen Plus V8.0 professzionális folyamatszimulátorral ellenőriztem. A tervezés során nagy hangsúlyt fektettem a már rendelkezésre álló anyagok felhasználására valamint a hatályos környezet- és munkavédelmi jogszabályok betartására. Az oszlop méretezése után annak tervrajzát is elkészítettem AutoCAD 2007 programmal. A terveket átadtam kivitelezésre.

A továbbiakban ismertettem a mérés tervezett folyamatát, melyhez egy hallgatói segédletet is készítettem. A készülékkel a hallgatók egy olyan jelenséget vizsgálhatnak laboratóriumi mérés keretében, melyet a vegyipar számos területén alkalmaznak.

Cellulóz-éterek szálképezhetőségének vizsgálata váltóáramú elektrosztatikus szálképzéssel a spironolakton oldódásának gyorsítására

Farkas Balázs, I. évf.(MSc)

Témavezetők: **Dr. Balogh Attila** tudományos segédmunkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Marosi György egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az utóbbi évtizedek gyógyszerkutatásainak eredményeként egyre nagyobb számban kerülnek felfedezésre vízben gyengén oldódó hatóanyagok, mely nem kielégítő terápiás hatást eredményezhet a szervezetben. Szilárd diszperziókká formulálva ezeket a hatóanyagokat a kioldódás jelentősen javítható a hidrofil polimer hordozó és az amorf hatóanyag nagyobb oldhatóságának köszönhetően. A változatos szilárd diszperziós előállítási módszerek között ígéretes lehetőség az oldószeres elektrosztatikus szálképző technológiák alkalmazása, mely során egy polimer és a hatóanyag oldatából nagyfeszültségű elektrosztatikus erőter hatására szálas szövetek képződik, így az amorf forma mellett a nagy fajlagos felület is az oldódást segíti.

Cseh kutatók nemrégiben rámutattak, hogy ha az elterjedten alkalmazott egyenáramú nagyfeszültségű áramforrást váltóáramra cseréljük, akkor az egyszerűbb szálgyűjtés mellett az elérhető termelékenység is többszöröződik (Pokorny et al. 2014). Ennek ellenére a módszer felhasználását eddig jóval kevesebb közleményben vizsgálták.

Az előzőek alapján a kutatómunkám célja szálas amorf szilárd diszperziók előállítása volt váltóáramú oldószeres elektrosztatikus szálképzéssel a rossz vízoldhatóságú spironolakton modellhatóanyag kioldódásának gyorsítására, melyhez cellulóz éter alapú polimereket használtam fel. A cellulózéterek nagy jelentőséggel bírnak 'a gyógyszer technológia területén', mivel a forgalomban levő amorf szilárd diszperziós gyógyszerkészítmények kétharmadába ezeken a polimereken alapul. Váltóáramú oldószeres elektrosztatikus szálképzéssel azonban ez idáig nem dolgoztak fel ilyen típusú anyagokat.

Az alkalmazott segédanyagok helyes megválasztásának köszönhetően a többszörös termelékenység mellett is kiváló minőségű szálas terméket lehetett előállítani a cellulózéterek felhasználásával. A kristályossági vizsgálatok (DSC, XRD) kimutatták, hogy a hatóanyag amorf formában volt jelen a szálakban. A kioldódás vizsgálatok során a szálképzett amorf szilárd diszperziók figyelemre méltó javulást mutattak a kristályos hatóanyag és a forgalmazott spironolakton tablettá hatóanyag-leadásához képest. Az eredmények igazolják, hogy a váltóáramú oldószeres elektrosztatikus szálképzés alkalmas módszer lehet a nagy fajlagos felületű szilárd diszperziók gyógyszeripari előállítására.

Raman spektroszkópia alkalmazása önerősített polipropilén kompozitok roncsolásmentes szerkezetvizsgálatában

Decsov Kata Enikő, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár

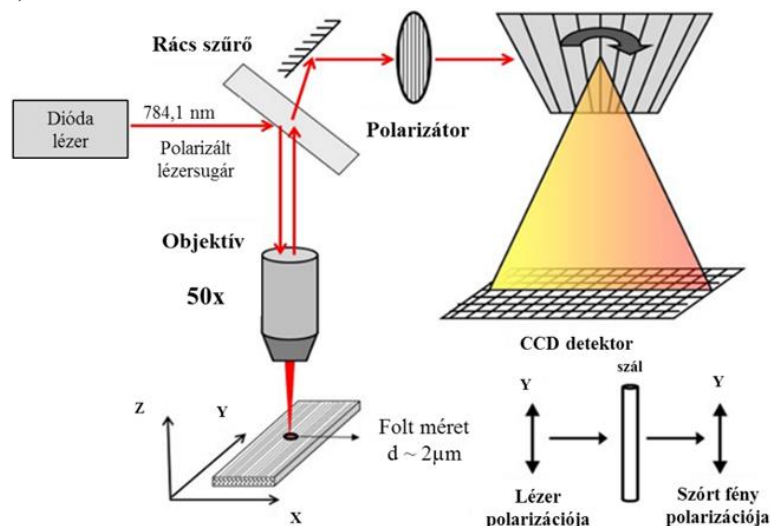
BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin** tudományos segédmunkatárs

BME VBK Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az önerősített polimer kompozitok kiválóan ötvözik magukban a kompozit anyagok egyedülálló mechanikai erősségét és a homogén műanyag termékek könnyű újrahaznosíthatóságát. Az önerősített polipropilén kompozit esetén a beágyazott szálak és az azokat körülvevő mátrix is polipropilén típusú polimerből készülnek.

Ezen anyagok mechanikai teljesítőképességét nagyban meghatározzák a gyártási körülmények, mint a hőmérséklet és a hőtartási idő. Kutatómunkám során különböző hőmérsékleten konszolidált iPP erősítőszálból és etilén komonomert tartalmazó iPP mátrixból álló önerősített kompozit mintákat vizsgáltam hagyományos és nem destruktív Raman-spektroszkópai és kisméretű röntgenszórás (SAXS) mérésekkel. Munkám célja a polimer kompozitok szilárdságának roncsolásmentes becslésére alkalmas módszer kidolgozása és validálása volt. Az erősítő szálak orientációfokának polarizált Raman spektroszkópai analízisét a szála jellemző nagymértékű anizotrópia teszi lehetővé (1. ábra). Olyan alkalmas kemometria módszert dolgoztunk ki, amelynek segítségével a mátrixba ágyazott iPP szálak Raman spektrumai alapján becsülhető és modellezhető a lehetséges molekuláris orientáltság, és közvetetten a kompozit mechanikai teljesítőképessége (pl. húzó rugalmassági modulusz) is.



2. ábra Reflektív mérési elrendezés

A kidolgozott módszer eredményei összehasonlíthatónak bizonyultak a SAXS és a destruktív módszerekkel kapott eredményekkel is. A transzmissziós Raman spektroszkópián alapuló módszer ígéretesnek bizonyul gyártásközi minőségellenőrzésében történő felhasználására, valamint a kompozit gyártási paramétereinek - Raman jelen alapuló - visszacsatolt szabályozásának megvalósítására.

A fedőkőzetet alkotó agyagásvány átalakulása szuperkritikus szén-dioxid hatására

Hegyalvi Csaba, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Székely Edit** egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: **Dr. Szabó Zsuzsanna** tudományos munkatárs

Magyar Földtani és Geofizikai Intézet Geokémiai és Laboratóriumi Főosztály

A szén-dioxid föld alatti tárolása egy potenciálisan nagy léptékben alkalmazható átmeneti megoldás a légkör szén-dioxid szintjének állandósítására és ezzel a rohamos hőmérséklet emelkedés csökkentésére. A módszer alkalmazása előtt azonban globális környezetvédelmi szempontok és a gazdasági megfontolások mellett a helyi megvalósítás biztonságosságát is kritikusan mérlegelni kell. A hosszútávú biztonságos tárolás megítélése szempontjából meghatározó jelentőségű, hogy az alkalmazott geológiai modellek, szoftverek a lehető legpontosabban írják le a valós folyamatokat. TDK munkám célja, hogy a fedőkőzetek egyik Magyarországon jellemző agyagásványát kísérletesen vizsgáljam száraz szén-dioxid (lesajtoláshoz közeli terület), vízzel telített szén-dioxid (gázsapka területe) és szén-dioxid nyomás alá helyezett vizes szuszpenzióként (a tároló legnagyobb része, az injektálási ponttól messzebb).

Mérési módszert dolgoztam ki a három fenti rendszer esetére, amelyben fontos szempont volt a megfelelő hőmérséklet és nyomás biztosítása (80 °C, 100 bar), szuszpenziós rendszerben a keveredés és a mintavételezés megvalósítása. A kísérleti rendszerek összeállítása számos gyakorlati problémát vetett fel, amelyeket többségében sikerült megoldani. A szilárd és a folyadékfázis megbízhatóbb elválasztása érdekében a jövőben ultraszűrő membrán beépítését tervezem a reaktorba.

A szilárd fázisok releváns vizsgálatához hosszabb (több hónapos) kísérleti időkre lenne szükség véleményem szerint, a most elvégzett mérések a víztartalom változását jelezték csak előre, ami nem elegendő a geológiai időtávlatban lezajló változások megértéséhez. A folyadékmintákban a kationok koncentrációja gyorsan növekedett, már egy óra alatt számottevő változások történtek, néhány napos mérési időkkel már fontos, több nagyságrendnyi ionkoncentráció változást mutattam ki. Az atmoszférikus referencia kísérletekhez képest számottevően eltérő kép alakult ki a koncentráció profilok vizsgálata során. A vizes fázisok vizsgálatával a tároló vízzel telített legnagyobb részében lejátszódó folyamatokról rövid kísérleti idővel információt kaphatunk, aminek az érzékenysége sokkal nagyobb, mint a szilárd fázis vizsgálatából azonos idő alatt nyerhető eredmények. A tapasztalatok és eredmények beillesztése a geokémiai folyamatok modellezésére alkalmas szoftverbe jelenleg is folyamatban van.

Hagyományos és osztófalas desztilláló kolonnák szabályozhatóságának összehasonlító elemzése

Tarjáni Ariella Janka, I. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Mizsey Péter** egyetemi tanár

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Munkám során hagyományos és osztófalas desztilláló kolonnák irányítástechnikai viselkedését vizsgáltam az Aspen Plus folyamat-szimulátor és a MATLAB numerikus programcsomag segítségével. A vizsgált konstrukciók között szerepelnek a hagyományos direkt és indirekt kolonna-kapcsolások illetve az ezeknek megfelelő két osztófalas kolonna, melyek közül az egyikben az elválasztófal az oszlop felső, a másikban az oszlop alsó részén helyezkedik el. Az esettanulmányok során különböző szeparációs indexű háromkomponensű alkoholelegyek elválasztására alkalmas technológiákat vizsgáltam.

Az eljárás során elkészítettem az alkohol elegyeket elválasztó desztilláló oszlopok rigorózus modelljét az Aspen Plus professzionális folyamat-szimulátor segítségével. Az egyes rendszerek dinamikus viselkedésének vizsgálatát az Aspen Dynamics szoftverrel végeztem. A Control Design Interface modul segítségével meghatároztam az egyes rendszerek dinamikus viselkedésére jellemző állapotegyenlet mátrixokat. Ezek alapján a frekvenciafüggő irányítástechnikai mutatókat a MATLAB használatával számoltam. Ezzel a módszerrel három különböző frekvenciafüggő irányítástechnikai mutatót határoztam meg, ezeket a statisztikából ismert D-függvénnyel (Desirability function) integráltam egy mutatóvá, így képezve az összehasonlítás alapját az egyes technológiák között.

Galagonya kivonatok készítése, elemzése, valamint szív és érrendszerre történő hatásának vizsgálata

Kubovics Márta, IV. évfolyam (BSc)

Témavezető: **Dr. Székely Edit** egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: **Huszár György** termeltetési vezető

Taravis Baromfi és Élelmiszeripari Kft.

Dolgozatom célja a hagyományos gyógynövényként ismert galagonya szív és érrendszerre történő hatásának vizsgálata egy olyan területen, amelyről tudomásunk szerint még nem készültek tanulmányok.

Évek óta fennálló probléma a baromfihús feldolgozó iparágazatban, hogy a lerövidített nevelési idő miatt az állatok szervezeti szilárdsága nem megfelelő. A feldolgozó üzemben – az állatvédelmi törvény előírásainak megfelelően - elektromos árammal kábítják el vágás előtt a baromfikat. Az áramütés hatására a mellcsúcsban, a belső filében a nem kellően kifejlődött, megerősödött hajszálerek megpattannak, bevérzéseket okoznak, amelyeket a piaci igényeknek megfelelően el kell távolítani. Az így keletkező mellnyesedék gazdasági értéke jóval alacsonyabb a legértékesebb húsrésznél, a mellfilénél. Célunk itatási kísérletekkel alátámasztani, hogy a szív és érrendszerre bizonyítottan jótékony hatásokkal rendelkező galagonya alkalmazásával csökkenthető a bevérzés mértéke.

Munkám során labor méretű Soxhlet, félüzemi Soxhlet és félüzemi szuperkritikus széndioxidos extrakciót végeztem. Az elkészített kivonatok összehasonlítottam az elért kihozatal alapján, illetve analitikai vizsgálatokat végeztem a biológiailag aktív komponensek feltérképezésére. Mértem a kivonatok szabadgyökfogó képességét, polifenol-, flavonoid-, tannin- és zsírsavtartalmát. A szakirodalom alapján a szív és érrendszerre gyakorolt jótékony hatás nagy részben a polifenoloknak köszönhető. Az analitikai vizsgálatok során a polifenolok mennyisége az irodalmak alapján a vártak megfelelő volt, azonban a flavonoidokat csak kis mennyiségben tartalmaztak a kivonatok, míg az extraktok antioxidáns hatása közepesnek mondható a referenciaként használt butil-hidroxi-toluolhoz képest.

Az itatási kísérlet során 100 csirkén vizsgáltuk a 96%-os etanol oldószerrel kivont félüzemi Soxhlet extraktból készített oldat hatását a bevérzés mértékére. Referenciaként 100 olyan csirkét használtunk, amelyeknek nevelési körülményei között az egyetlen számottevő különbség az itatott anyag volt.

Az itatási kísérletek eredményesnek bizonyultak, a Minőség ellenőrzési osztály által végigkövetett vizsgálatban láthatóan csökkent a bevérzés mértéke, illetve a keletkezett mellnyesedék mennyisége nagyjából háromszoros mértékű a kezeletlen csoport esetén.

Az itatási kísérletek eredményei alapján a galagonya alkalmazható csirkék esetében a mellhúsban keletkező bevérzés mértékének csökkentésére, azonban további kísérletek szükségesek a hatás növelésére és a piacképes terméket eredményező formuláció kialakítására.

Hangyasav-gamma-valerolakton gőz-folyadék egyensúlyának vizsgálata

Hajnal Ádám, IV. évf.(BSc)

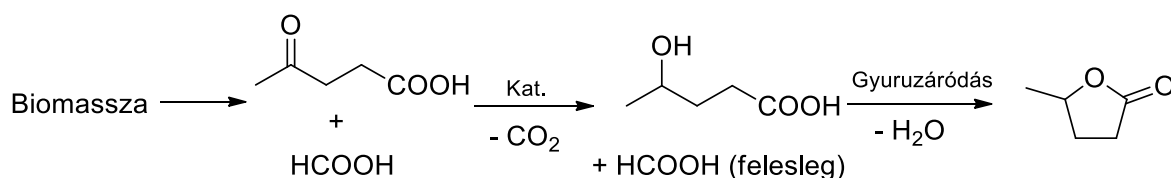
Témavezető: Havasi Dávid egyetemi tanársegéd

Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Konzulens: Dr. Mika László Tamás tanszékvezető egyetemi docens

Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Az elmúlt években számos kutatásban foglalkoztak különféle, úgynevezett platform molekulák előállításával és felhasználásával. Ezek közül nagyon előnyös tulajdonságokkal rendelkezik a γ -valerolakton (GVL), amely élelmiszeripari, mezőgazdasági és háztartási hulladékokból is előállítható. A GVL egy lehetséges előállítása a levulinsav transzfer hidrogénezése 4-hidroxivaleriánsavvá, ami spontán gyűrűzáródással GVL-ná alakul¹. A reakcióhoz hidrogénforrásként a biomasszából a levulinsav mellett képződő hangyasav is hasznosítható (1.ábra)



3. ábra: A γ -valerolakton előállítása a levulinsav transzfer hidrogénezésével

A reakció során feleslegben alkalmazott hidrogéndonor egy része a termékelegyen marad, így az ekvimoláris mennyiségben képződő GVL és víz mellett hangyasav is jelen van. Az elegy komponenseinek hatékony elválasztására alkalmas lehet egy desztillációs eljárás, melyhez alapvető a rendszert alkotó elegyek termodinamikai adatainak, pl. gőz-folyadék egyensúly ismerete. A komponensek biner elegyei közül a H_2O -GVL² és a H_2O -HCOOH elegyek gőz-folyadék egyensúlyi adatait már meghatározták. Kutatómunkám célja a hiányzó HCOOH-GVL elegy gőz-folyadék egyensúlyának teljes koncentrációtartományban történő kísérleti meghatározása és különféle aktivitási koefficiens modellekhez párhuzamosíthatási paraméterek kiszámítása.

Kísérleteim alapján megállapítható, hogy a GVL-HCOOH rendszer elválasztása során nem kell a desztilláció szempontjából meghatározó azeotróp-képződéssel számolni.

¹Fábos, V.; Mika, L.T.; Horváth I. T., *Organometallics*, **2014**, 33, 181.

²Havasi, D.; Mizsey, P.; Mika, L. T., *J. Chem.Eng. Data*, **2016**, 61, 1502

Növényi kivonat finomítása antiszolvens kristályosítással

Czeczon Zsombor IV. évf. (BSc)

Témavezető: Dr. Székely Edit egyetemi docens
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A modern gyógyászatban egyre nagyobb hangsúlyt kap a gyógynövények használata a betegségek kezelése és a fizikai állapot javítása érdekében. A gyógynövény ipar Európában és ezen belül hazánkban is nagy múlttal rendelkezik. Egy fontos hazai gyógynövény a fekete nadálytő, amelynek jótékony hatásai közé tartozik a bőr és nyálka összehúzó hatása, melyet a sebek kezelésénél használnak. A növényben többek között allantoin található, mely serkenti a vérrellátást, növeli a sejtek regenerációs folyamatait, hám- és sejtképző hatása gyorsítja a sebgyógyulást. A készítményeket már elterjedten használják a piacon, melyek kenőcs, krém vagy tinktúra formában vásárolhatóak meg. A készítményeket továbbá sebek, zúzódások, ficamok, csonttörések, reumatikus ízületi gyulladás és rándulások gyógyításában alkalmazzák. Alapanyagként a gyártás során általában a növény levelét és/vagy gyökerét használják. A termékek forgalmazását a pirrolizidin alkaloidok miatt korlátozzák, mely vegyületek hepatotoxikus hatásúak. A forgalmazás korlátozása adja a témám alapötletét, melynek célja a jelentősen csökkentett alkaloid tartalmú termékek előállítása és ezzel a készítmények szélesebb körben való alkalmazhatóságának biztosítása.

Témám során a fekete nadálytő gyökér extrakciójával és az extraktumok antiszolvens kristályosításával foglalkoztam. Különböző extrakciós módszerekkel készítettem fekete nadálytő kivonatokat, ilyen a Soxhlet-extrakció és a hagyományos kevertetési extrakció. A kevertetési extrakció kivonatait szén-dioxid gáz antiszolvens kristályosítással dolgoztam tovább. A kevertetési extrakció során oldószerként etanolt, metanolt és acetont használtam. A gáz antiszolvens kristályosítás értelmét az adja, hogy a kevertetési extrakció során felhasznált oldószerek polaritása a bevezetett szén-dioxid hatására megváltozik. A bevezetett szén-dioxidtól egyre apolárisabbá váló oldószer oldóképessége a poláris komponensek iránt lecsökken, így megkezdődik a poláris komponensek kiválása az oldatból. A módszer így optimalizálás után szelektív elválasztásra is lehetőséget teremt. Növényi kivonatok antiszolvens továbbfeldolgozásával a szakirodalom csak az utóbbi évtizedben kezdett el foglalkozni, és hazánkban ezek az első ilyen kísérletek. A termékeket az allantoin tartalmuk alapján minősítettem, melyhez HPLC módszert alkalmaztam.

”Mesterséges földgáz” előállítása Sabatier reakcióval, megújuló energia felhasználásával

Fajoyomi Christopher Rotimi, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Mizsey Péter** egyetemi tanár

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Az egyre növekvő aggodalmak a globális felmelegedéssel kapcsolatban felkeltették a figyelmet, hogyan lehetne csökkenteni a szén-dioxid és egyéb üvegházhatású gázok emisszióját. A probléma súlyát jól érzékelteti, hogy a 2015. december 12-én elfogadott párizsi klímaegyezményt nem kevesebb, mint 195 ország írta alá. A klíma megállapodást aláíró államok vállalták, hogy 2100-ig 2°C alatt tartják a föld átlaghőmérséklet-emelkedését, emellett elkötelezték magukat, hogy törekedni fognak arra, hogy $1,5^{\circ}\text{C}$ alá csökkentsék ezt az értéket. Ezen célok eléréséhez az egyik legfontosabb eszköz a megújuló energiák használata.

A megújuló energiaforrások nagy problémája, hogy jelen pillanatban nem, vagy csak nehezen lehet tárolni azok energiáját. A hagyományos energiatermelő rendszerek, mint az atomerőmű, széntüzelésű erőmű stb., nem elég rugalmasak. Ezért például a manapság Európában nagyon elterjedt szélerőművek, nem csak akkor nem termelnek áramot, amikor nem fúj a szél, hanem akkor sem amikor az elektromos hálózat túlterhelt. Az ilyen esetekben lehetne jó megoldás a szélerőművek lekapcsolása helyett eltárolni azt az energiát, amit nem lehet bevezetni a már túlterhelt hálózatokba.

Dolgozatom témája egy olyan új technológia bemutatása, ami egy lehetséges megoldása lehet az elektromos energia tárolásának azáltal, hogy az elektromos energiát H_2 előállításra használjuk és ezt a hidrogént reagáltatjuk a levegőből, vagy főbb pontforrásokból nyert CO_2 -dal, metán gázt előállítva. A dolgozat célkitűzése az volt, hogy megállapítsam, hogy egységnyi bevitt energiából az előállított metánt felhasználva a megújuló energia hány százalékát lehetséges a metán elégetésével felhasználni. Ezen dolgozatban a metán előállító reaktort Chemstations ChemCAD nevezetű programjával modelleztem.

Paksi Atomerőmű radioaktív hulladékának nukleáris spektroszkópai vizsgálata

Ráskai Ákos, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Gresits Iván** tudományos főmunkatárs
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tankészék
Konzulens: **Dr. Vajda Nóra** laborvezető
RADANAL Kft.

Munkám során a Paksi Atomerőmű Zrt. radioaktív hulladékából transzurán hasadóanyagokat (^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu) határoztam meg. Az alkalmazott alfa-spektroszkópia aprólékos mintaelőkészítést igényel, néhány cm átmérőjű forrástartó felületére „végtelen vékony” rétegben kell az aktinidák radioaktív izotópjait leválasztani. Vagyis a minta néhány kilogrammjából izotópok nanogrammjait.

Munkám célja az, hogy az egyetemi tanulmányaim során tanultakat kamatoztatva, valamint új tudásanyagot szerezve ismerjem meg az alfa-spektroszkópai mérésekhez kapcsolódó radiokémiai átalakításokat, az alfa-forrás készítésének módszereit, valamint a gamma-spektroszkópiát, mint a radioaktív izotópok nyomon követésének egyik módszerét. Az alfa-sugárzó izotópokat a Paksi Atomerőmű Zrt.-ből származó, felszabadítani kívánt szilárd bórax minta feltárását követően UTEVA gyantát alkalmazó extraktív kromatográfiás módszerrel választottuk szét. A forráskészítés módszerei közül a mikroszapadékos, valamint az elektrokémiai módszereket vizsgáltam, melyekkel Pu-forrásokat készítettem. Ezen felül az elektrokémiai forráskészítéshez Am-tartalmú modell oldatokkal az elektrolízis paramétereit optimalizáltam. Méréseimet a RadAnal Kft.-nél végeztem szakmai gyakorlatom ideje alatt, az adatok egy részét a cégnél, másik felét az egyetemen értékeltem ki.

Az atomerőművi radioaktív hulladékok változatos összetételben tartalmaznak radioaktív izotópokat. A leginkább problémás összetevők az alfa-sugárzó aktinidák, közülük elsősorban az urán és a transzurán elemek. Minden szempontból nagyon veszélyesek, ugyanis toxicitásuk mellett az élő szervezetben lerakódva nagy energiájú alfa-sugárzással terhelik a szöveteket. Kimutathatóság szempontjából az a nehezítő körülmény, hogy rendszerint kis vagy nyomnyi mennyiségben találhatók a hulladékban, ami azonban nem jelenti, hogy aktivitásuk és okozott környezetterhelésük is ilyen kismértékű. Alfa-sugárzó izotópok kimutatására jelenleg rendelkezésre álló legjobb módszer az alfa-spektroszkópia, ami viszont hosszadalmas mintaelőkészítést igényel. A forrás elkészítésénél az egyik legfontosabb szempont, hogy a minta közelítőleg végtelen vékony rétegben kerüljön fel a forrástartóra, hogy az alfa-kvantumok mintán belüli úgynevezett önabszorpcióját minimalizáljuk. Ezen forráskészítési eljárások sok hibalehetőséget rejtenek a hosszú radiokémiai elválasztási folyamatban, viszont jobb módszer híján ezzel kell megbirkóznunk. Problémát jelent, hogy a pontos meghatározás érdekében az említett kis mennyiséget lehetőleg teljes mértékben kell a hulladék nagy tömegéből szelektíven elválasztani és detektálni, ami rendkívül nehéz feladatnak bizonyul.

Drogextrakciós üzem termelésének az optimalizálása

Mihály Zsolt, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Lelkes Zoltán** ügyvezető
Optasoft Kft.

Napjainkban, ha egy termelő vállalat versenyképes akar lenni, akkor elengedhetetlen, hogy az erőforrásait a legnagyobb mértékben kiaknázza. Ma már nem egyszerűen csak vállalatok, hanem összetett ellátási láncok versenyeznek egymással. Az ellátási láncokat logisztikai, elosztási és termelési hálózatok alkotják, amelyeknek elemei a termelősorok, valamint állomások. A teljesítmény növelésének a szempontjából lényeges, hogy ezen elemeknek a hatékonyságát vizsgáljuk, illetve hogy meghatározzuk az optimális működésükhöz szükséges körülményeket. A munkám célja egy olyan szimulációs szoftver kidolgozása, amelynek segítségével sorok és állomások teljesítménye egyszerűen javítható.

A dolgozat keretében egy gyógynövény-extrakcióval foglalkozó üzem teljesítményét vizsgálom. Optimalizáltam a késztermékkészletet és vizsgáltam a gyártásközi készlet mennyiségének a hatását. A tanulmány keretében figyelembe veszem a feldolgozási idők és a vevői igény változékonyságát. A vizsgálatokhoz analitikus matematikai módszereket és szimulációs módszereket egyaránt használok. A szimuláció elvégzéséhez szükséges szoftvert magam fejlesztettem az AIMMS modellezési nyelvben.

Új, akridin egység tartalmú királis koronaéter alapú szelektorok szintézise és alkalmazása

Petró József Levente, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Tóth Tünde** egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

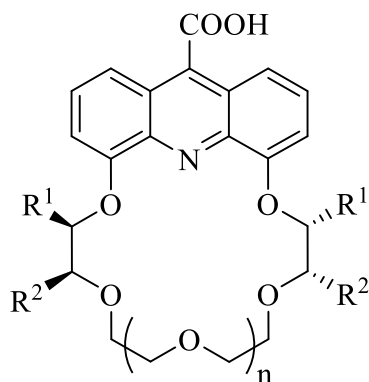
Konzulensek: **Dr. Huszthy Péter** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Németh Tamás doktorjelölt

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

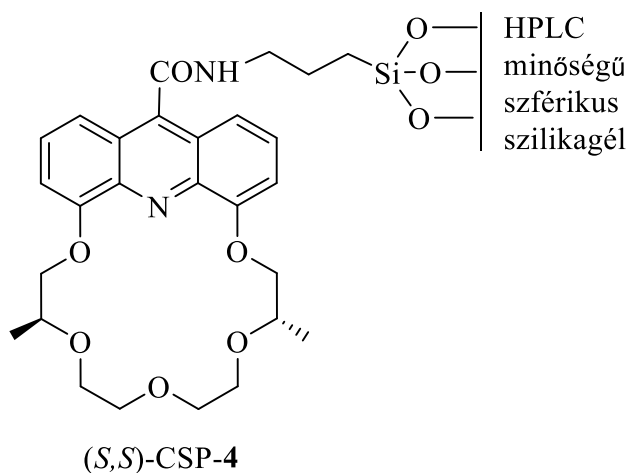
Tudományos diákköri munkámat akridin egységet tartalmazó királis koronaéterek szintézise és alkalmazása témakörében végeztem. Az analóg vegyületekkel történő korábbi sikeres enantiomer-szeletivitási vizsgálatok eredményét figyelembe véve célul tűztem ki az (S,S)-**1**, az (S,S)-**2** és az (R,R)-**3**, az akridin gyűrű 9-es helyzetében karboxilcsoportot tartalmazó, kiralitáscentrumaikon metilcsoportokkal rendelkező 18-korona-6-éter (n=1) valamint 21-korona-7-éter (n=2) típusú makrociklusok szintézisét. Az (S,S)-**1** koronaétert kovalens kötésekkel szilikagélhez rögzítettem, és az így kapott királis állófázis [(S,S)-CSP-4] (*Ábra*) sikeresen választotta el HPLC-vel a racém [1-(α -naftil)etil]amin enantiomerjeit.



(S,S)-**1**: n=1 R¹=H, R²=Me

(S,S)-**2**: n=2 R¹=H, R²=Me

(R,R)-**3**: n=2 R¹=Me, R²=H



Ábra

Újfajta makrociklusos receptorok: pillérearén-alapú kemoszenzor az adenzin-5'-trifoszfát szelektív detektálására

Kozma József, IV. évf.(BSc)

Témavezető: **Dr. Bitter István** ny. egyetemi tanár

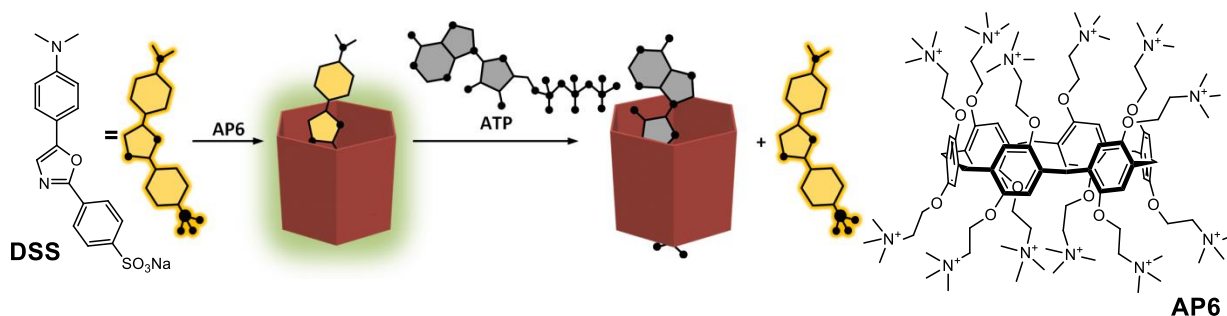
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Bojtár Márton** PhD. hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A szupramolekuláris analitikai kémia fontos területe az indikátorkiszorításon alapuló kemoszenzorok fejlesztése. Ezekben kiemelkedő szerepük van a makrociklusos vegyületeknek, melyek már a szupramolekuláris kémia megjelenése óta igen fontosak a szintetikus receptorok körében. Kemoszenzorként történő alkalmazásukhoz szükség van egy detektálható jelre, ami gyakran a fluoreszcencia. Mivel a makrociklusok jelentős része nem fluoreszkál, egy fluoreszcens indikátormolekulára is szükség van az analit optikai detektálásához.

A pillér[n]arének n darab ($n=5,6,\dots$) hidrokinon egységet tartalmaznak, melyeket metilén-hidak kötnék össze para-helyzetben. Egyszerű szintézisük és széleskörű gazdaságos tulajdonságaik ellenére ritkán alkalmazzák őket szupramolekuláris analitikai rendszerekben. Munkám során vízzel oldható, kationos pillér[6]arének szintézisét tűztem ki célul, amelyek 12 ammónium végcsoportot tartalmaznak (**AP6**), és mint lehetséges nukleotid szenzorok jönnek számításba indikátor-kiszorítás elvén működő rendszerekben. Ehhez anionos fluoreszcens indikátormolekulákra van szükség, mint a pyranine és a dapoxyl-szulfonsav Na-só (**DSS**), amelyek előzetes vizsgálataim alapján komplexet képeznek a pillér[6]arénnel. Az így kapott rendszer fluoreszcens kemoszenzorként alkalmazható az adenzin-5'-trifoszfát (**ATP**) szelektív detektálására egyéb nukleotidokkal szemben.



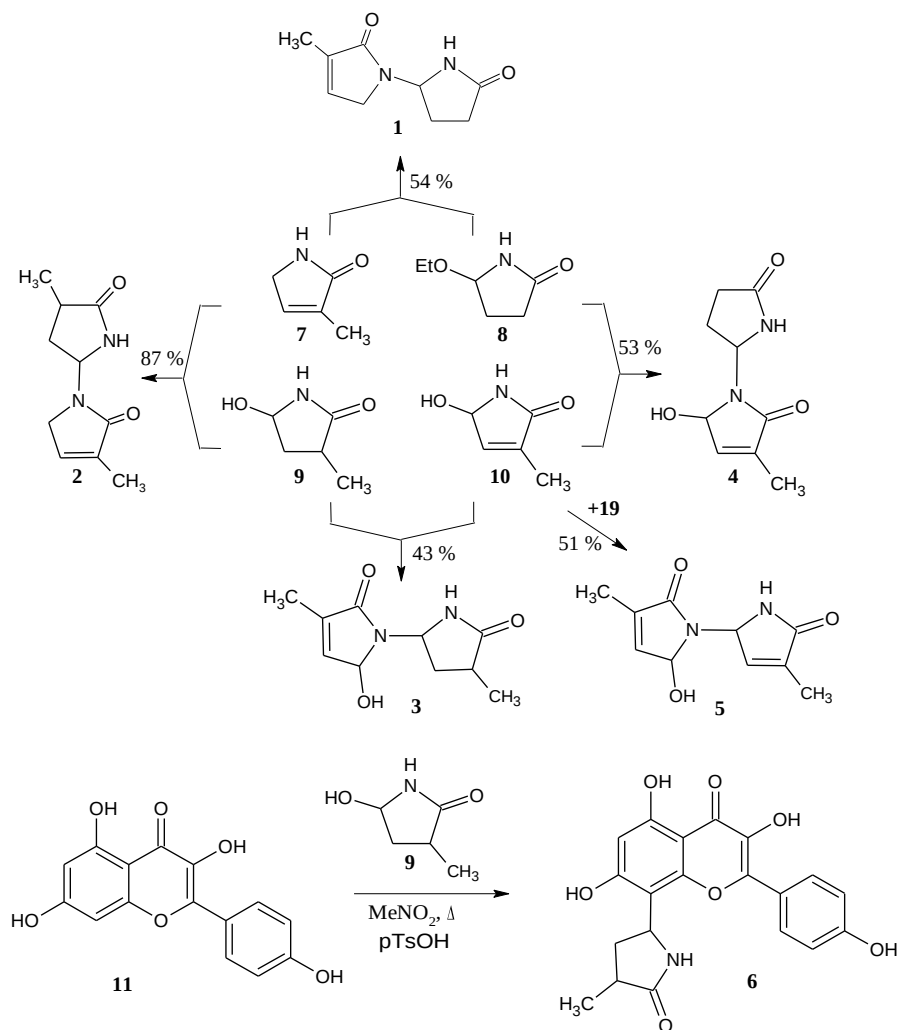
A fehér liliom laktám-gyűrűt tartalmazó alkaloidjainak első, racém szintézise

Nagy Sándor, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Hazai László** egyetemi magántanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Ilkei Viktor** PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő Alkaloidkémiai Kutatócsoportban a legújabb kutatások során olyan *N*-acilimíniumionokon keresztül megvalósítható reakciókkal foglalkoznak, melyek célja a természetben is megtalálható *N* heterociklusos egységet tartalmazó alkaloidok előállítása. Munkám során megvalósítottam a fehér liliom (*Lilium candidum*) öt aminál szerkezeti részt tartalmazó alkaloidjának (**1-5**) és egy flavonoid alkaloidjának, a lilalinnak (**8**) az első szintézisét.



Váratlan, bázis hatására bekövetkező átrendeződési reakció a 3-acetil-2-metil-3,4-dihidro-2H-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid származékok körében

Gyűjtő Imre, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Porcs-Makkay Márta** laborvezető

Egis Gyógyszergyár Zrt.

Konzulensek: **Dr. Volk Balázs** hatóanyagfejlesztési igazgató, c. egyetemi docens

Egis Gyógyszergyár Zrt.

Dr. Simig Gyula ny. kutatási igazgató, egyetemi magántanár

Egis Gyógyszergyár Zrt.

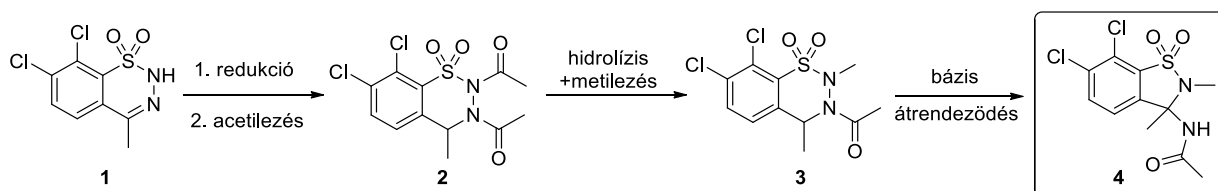
Dr. Nyulászi László tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Dr. Nagy József egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az Egis Gyógyszergyárban már közel két évtizede foglalkoznak ftalazinon-származékokhoz hasonló 2H-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid alapvázat tartalmazó vegyületek szintézisével és farmakológiai vizsgálatával. A Hatóanyagfejlesztési főosztályon a központi idegrendszerre ható anyagok kutatása során tanulmányozták a vegyületcsoport redukciós, acetilezési és alkilezési reakcióit, hogy potenciális PAM aktivitással rendelkező *N,N'*-diszubsztituált molekulákat állítsanak elő. Munkám alapját ezen kutatások során észlelt egyik meglepő reakció képezi, melynek során megkísérelték a 3-acetil-7,8-diklór-2,4-dimetil-3,4-dihidro-2H-1,2,3-benzotiadiazin-1,1-dioxid (**3**) acetilcsoportját LiAlH_4 jelenlétében etilcsoporttá redukálni, azonban nem a várt 3-etil-származék keletkezett, hanem a reagens bázisként viselkedett és gyűrűszűkülés történt. Más bázisok jelenlétében is azonos átrendeződés ment végbe, így szükségessé vált a reakció részletes tanulmányozása. Ezért célul tűztük ki a reakció kiterjeszthetőségének a vizsgálatát a 4-es helyzetben más szubsztituenseket hordozó analóg vegyületekre. Továbbá kísérleteket végeztünk az átrendeződés optimális reakciókörülményeinek meghatározására. Sikertől találni olyan reakciókörülményeket, amelyek magas termeléssel, reprodukálhatóan biztosítják **4** és vele rokon szerkezetű vegyületek keletkezését.



Pirrolidon gyűrűt tartalmazó flavonoid alkaloidok biomimetikus szintézise

Spaits András, II. évf.(MSc)

Témavezető: **Dr. Hazai László** egyetemi magántanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

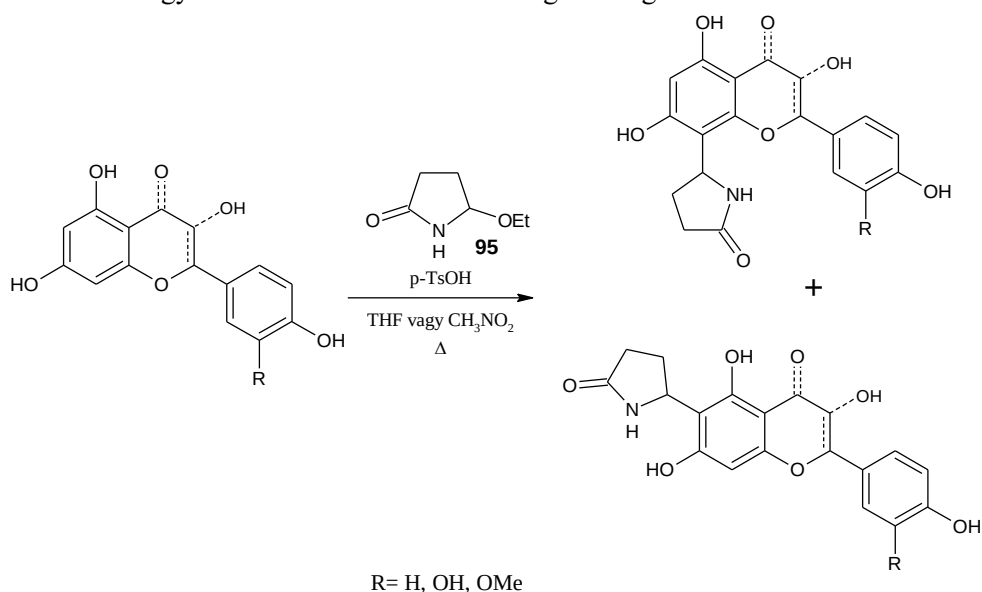
Konzulens: **Ilkei Viktor** PhD. hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő alkaloid-kémiai kutatócsoportban a legújabb kutatások során olyan *N*-aciliminiumionokon keresztül megvalósítható reakciókkal foglalkoznak, melyek célja a természetben is megtalálható *N*-heterociklusos egységet tartalmazó alkaloidok előállítása. Ilyen típusú vegyületeket ölel fel a flavonoid alkaloidok családja, melyek közül számos képviselő szintézise még nem megoldott.

Munkám céljával a drakoszeфин A és B, a 8-(2''-pirrolidinon-5''-il)-kvercetin, a 8-(2''-pirrolidinon-5''-il)-(-)-epikatechin, a 6-(2''-pirrolidinon-5''-il)-(-)-epikatechin, valamint a 8-(2''-pirrolidinon-5''-il)-izoramnetin flavonoid alkaloidok előállítását a megfelelő flavonoid alapvegyületekből kiindulva a kutatócsoportban korábban kidolgozott eljárással. A célvegyületeim szintéziséhez szükséges amidokarbinol reagenst (**95**) szukcinimid nátrium-borohidriddel megvalósított részleges redukciójával állítottam elő. Az 5-etoxi-2-pirrolidont (**95**) katalitikus mennyiségű *para*-toluolszulfonsav jelenlétében (p-TsOH) reagáltattam a megfelelő flavonoiddal nitrometánban vagy tetrahidrofuránban forralva. A reakcióban az A-gyűrűben szubsztituált C6- és C8-regioizomer flavonoid alkaloidok keveréke keletkezett, melyet preparatív HPLC technika segítségével választottak szét.

A drakoszeфин A és B esetén az előállított vegyületek sztereoizomerjeit királis HPLC technikával választották el, majd a vegyületekről HPLC-UV, HPLC-ECD és ECD spektrumok készültek, melyek segítségével az enantiomer viszonyban álló izomerpárok azonosíthatóak voltak. A célvegyületek közül négyet fizikai-kémiai és farmakológiai vizsgálatoknak is alávetettek.



***P*-Sztereogén centrumot tartalmazó foszfin-oxidok alkalmazhatóságának vizsgálata enantioszelektív katalitikus *Wittig*-reakcióban**

Juhász Kinga, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Bagi Péter** posztdoktor

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

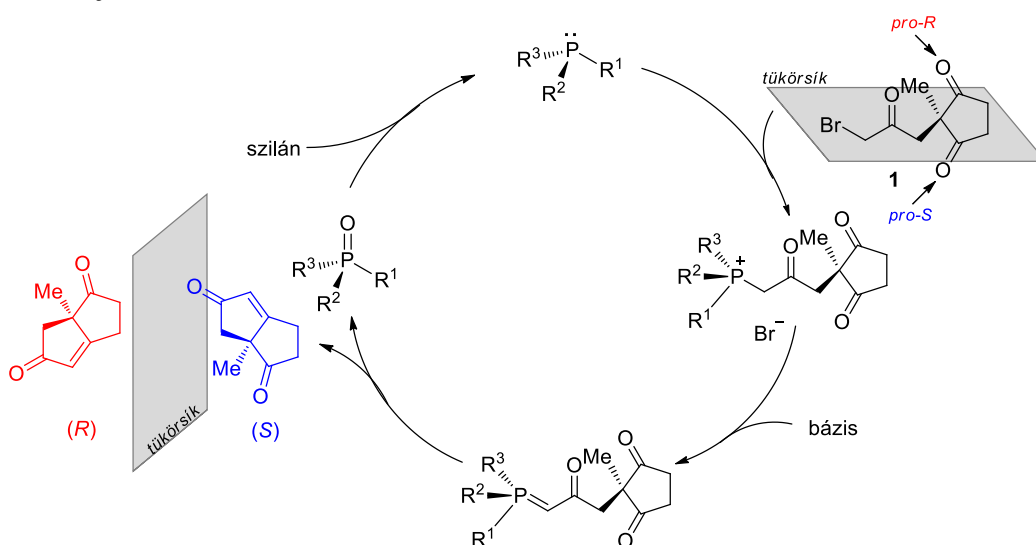
Konzulens: **Dr. Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A szintetikus szerves kémiában a szén-szén kettőskötés létrehozására az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás a *Wittig*-reakció, amelynek azonban egyik legnagyobb hátránya, hogy a megfelelő foszfint sztöchiometrikus mennyiségben kell alkalmazni, és így ekvivalens mennyiségben képződik a megfelelő foszfin-oxid melléktermékként. Az elmúlt években *O'Brien* és munkatársai kidolgozták a *Wittig*-reakció katalitikus változatát, amelyhez katalitikus mennyiségű foszfint alkalmaztak. A reakció során a reakcióelegyhez feleslegben adott szilán felelős a melléktermékként keletkező foszfin-oxid foszfinná történő folyamatos deoxigénezéséért.¹

A *Wittig*-reakció egyik kevésbé ismert változata az aszimmetrikus *Wittig*-reakció, amely során a megfelelő prokirális karbonil-vegyületből kiindulva ekvivalens mennyiségű királis foszforvegyülettel állítják elő a kívánt optikailag aktív terméket. Az aszimmetrikus *Wittig*-reakciónak szintén létezik katalitikus változata, azonban az irodalomban eddig kizárólag királis vázat tartalmazó foszfin-oxidokat alkalmaztak pre-katalizátorként.

TDK munkám fő célkitűzése az volt, hogy gyűrűs illetve aciklusos *P*-sztereogén centrumot tartalmazó foszfin-oxidok alkalmazhatóságát vizsgáljuk aszimmetrikus katalitikus *Wittig*-reakcióban. Emellett célunk volt annak a feltárása, hogy az alkalmazott foszfin-oxidok szerkezete, illetve a reakciókörülmények hogyan befolyásolják a termelést és az enantioszelektivitást a megfelelő prokirális karbonil-vegyület (**1**) aszimmetrikus katalitikus *Wittig*-reakciója során.



Heteroaromás vegyületek trifluormetilzése

Győrfi Nándor Zsolt, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Kotschy András** igazgató

Servier Kutatóintézet Zrt.

Dr. Hegedűs László tudományos főmunkatárs

MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

A trifluormetilezett aromás vegyületek alkalmazása egyre gyakrabban fordul elő az anyagtudományban, az agro- és a gyógyszerkémiaiában. Az igény az aromás trifluormetil-származékokra egyre jobban növekszik, annak ellenére, hogy a trifluormetil-csoport kialakítása kihívást jelent szintetikus és gazdasági szempontból egyaránt. Emiatt intenzív kutatás folyik újabb trifluormetilező eljárások után. Az aromás trifluormetil-származékok előállítása történhet ún. kimerítő fluorozással, dezoxofluorozással és fémkatalizált C-CF₃ kapcsolással. A kapcsolási eljárásokat a trifluormetil-forrásként használt reagens szerint három csoportba lehet sorolni: gyökös, elektrofil és nukleofil trifluormetilezés. A folyamatok kivitelezése lehet termikus, fény- vagy fém által aktivált.

A elmúlt évtizedekben előtérbe kerültek a fém felhasználásával végzett C-C kötés kialakításával járó trifluormetilezési eljárások. Ezen belül is réz(I)-halogenidekkel kivitelezett eljárások fejlesztésével sikerült elérni, hogy már a sztöchiometrikus mennyiségnél kevesebb fém is elegendő. A réz(I)-katalizált reakciók során különböző reagensok használhatóak trifluormetil-forrásként. A legelső eljárásokban nehezen kezelhető CF₃I-t használtak, de később előtérbe került a trifluormetil-trimetilszilán (TMS-CF₃), mert stabil és könnyen kezelhető reagens. Használatával enyhébb körülmények között is végrehajtható a trifluormetilezés.

Az egyik ismert [1] eljárást 3,5-dijód-4-alkoxipiridineken alkalmazva egy érdekes mellékreakciót figyeltek meg. A reakcióban a piridin oxigénjén lévő alkilcsoport átvándorolt a piridin nitrogénjére és 4-piridionná rendeződött át. Az irodalomban a legközelebbi analógia a 2-benziloxipiridinek átrendeződési reakciója [2].

Munkánk során a már ismert réz(I)-katalizált eljárás alkalmazhatóságát vizsgáltuk alkoxi-jódpiridineken. A trifluormetilezett vegyületek szintéziséen kívül, vizsgálatokat is végeztünk a megfigyelt átrendeződés mechanizmusáról.

[1] Gonda, Z.; Kovács, S.; Wéber, C.; Gáti, T.; Mészáros A.; Kotschy A.; Novák Z, *Organic Letters* **2014**, 16, 4268.

[2] Carolyn E. A. et al., *Journal of Organic Chemistry* **2008**, 73, 6425.

Foszfínatok és foszfonátok előállítása észteresítési reakciókkal

Henyecz Réka, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

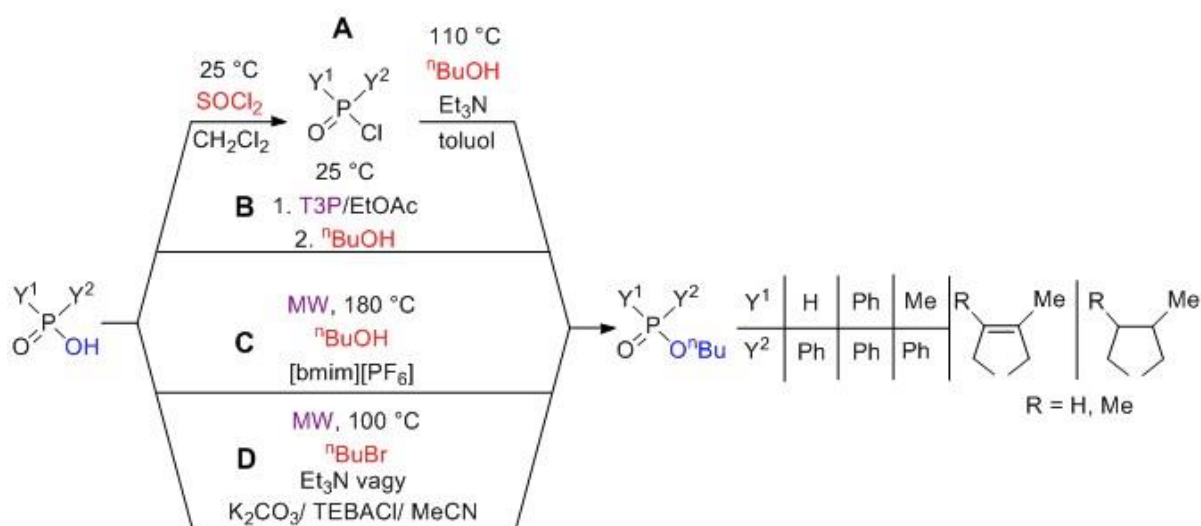
Konzulens: **Dr. Kiss Nóra Zsuzsa** egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A foszfinsavak foszfínatokká történő közvetlen átalakítása fontos kutatási terület. Az elmúlt években környezetbarát módszerként a mikrohullámú (MW) körülmények között megvalósított direkt észteresítés és az alkilező észteresítés került kidolgozásra. [1]

Kutatómunkánk során egy új módszert fejlesztettünk ki foszfinsavak észteresítésére a T3P[®] reagens (ciklikus propilfoszfonsav-anhidrid) felhasználásával. Azt találtuk, hogy a foszfinsavak észteresítése ekvivalens T3P[®] jelenlétében enyhe körülmények között hatékonyan végbemegy. Továbbá, reakcióképes foszfinsavak észteresítése esetén kevesebb T3P[®] reagens is elegendő. A T3P[®] reagens használatát amidálásokra is kiterjesztettük.

A kidolgozott módszereket (A, B, C és D) esettanulmányokon keresztül hasonlítottuk össze. Értékeljük az egyes módszerek előnyeit és hátrányait, alkalmazhatósági körét, továbbá a reakciótípusokat zöld-kémiai mérőszámokkal is jellemeztük.



[1] Keglevich, G.; Kiss, N. Z.; Mucsi, Z.; Jablonkai, E.; Bálint, E. *Green Proc. Synth.* **2014**, 3, 103.

Aspidospermán vázas indol alkaloidok organokatalitikus, divergens szintézise

Angyal Péter, III. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Soós Tibor** igazgató, tudományos főmunkatárs

MTA Természettudományos Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet

Varga Szilárd tudományos munkatárs

MTA Természettudományos Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet

Konzulensek: **Martin Gábor** vegyészmérnök

MTA Természettudományos Kutatóközpont, Szerves Kémiai Intézet

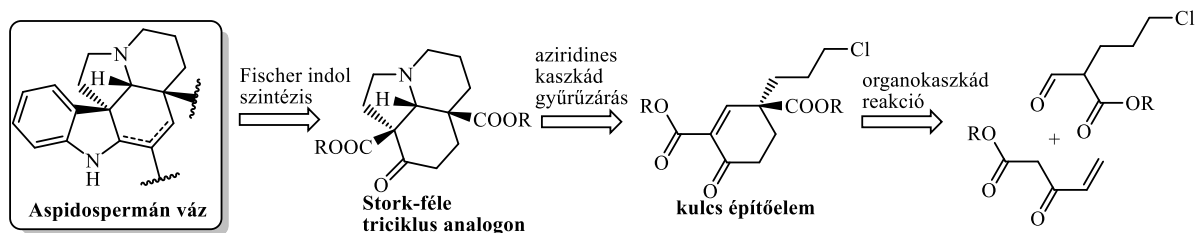
Dr. Kupai József egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Komplex, természetes vegyületek szintézisében egy újszerű és hatékony megoldás lehet az organokaszád reakciók alkalmazása, segítségével érélyes körülmények és átmenetifémek használata nélkül valósíthatunk meg aszimmetrikus reakciókat.^[1] Kutatócsoportunkban korábban olyan kinin alapú tiokarbamid, illetve négyzetsavamid katalizátorokat fejlesztettek, amelyek hatékonyak enantioszelektív és diasztereoselektív reakciók végrehajtásában.

Jelen munkánk során enantioszelektív, organokatalitikus Michael-aldol-kaszád reakcióban állítottunk elő ciklohexén származék építőelemet. Ez az értékes vegyület – a megfelelő helyeken lévő funkciós csoportjainak köszönhetően – kiindulópontja lehet a pentaciklusos vázrendszer tartalmazó Aspidospermán vázas indol alkaloidok divergens szintézisének.^[2] Kulcslépéseink a váz kialakításában – az építőelem szintézisét követően – egy aziridinnel végrehajtott, gyűrűfeszültségét kihasználó kaszkád reakció, illetve a kapott tricikluson az indol részlet kialakító Fischer-féle indol szintézis^[3] (1.ábra).

1. ábra Aspidospermán váz retroszintetikus analízise



A nagy hatékonyságú kaszkád reakciók segítségével – csupán néhány szintetikus lépéssel – grammos tételeben állítottuk elő a Stork-féle triciklus analogonját. A szintézis megtervezésénél fontos szempont volt, hogy a pentaciklusos intermedierek számos alkaloid előállításához lehessen elágazási pont. Így több szerkezetileg részben eltérő Aspidospermán vázas vegyület szintézise valósítható meg.

[1] S. B. Jones, B. Simmons, A. Mastracchio, D. W. C. MacMillan; *Nature*, **2011**, 475, 183–188.

[2] J. M. Lopchuk; *Progress in Heterocyclic Chemistry*, Vol 23 (eds: G. W. Gribble, J. A. Joule) Elsevier, Oxford, **2011**, 1–25.

[3] G. Stork, J. E. Dolfini; *J. Am. Chem. Soc.*, **1963**, 85, 2872–2873.

Foszfinsavak észteresítése fenol-származékokkal ionos oldószer jelenlétében

Tihanyi Inez, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

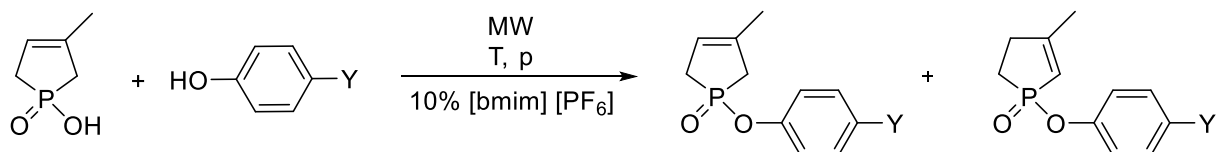
Dr. Kiss Nóra Zsuzsa egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Rádai Zita** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kutatócsoportunkban hagyománya van a foszfinsavak alkoholokkal történő észteresítésének [1], fenol-származékokkal azonban eddig még nem sikerült észteresítéseket megvalósítani [2]. A szakirodalomban is csak néhány példa található aril-foszfinátok szintézisére. Kutatómunkám során elsődleges célunk az irodalomban korábban nem ismert aril-foszfinátok előállítása volt. Elsődlegesen foszfinsavak fenolokkal történő direkt észteresítését vizsgáltuk mikrohullámú körülmények között, ionos oldószer jelenlétében. Először optimalizáltuk a reakciókörülményeket, vizsgáltuk az ionos oldószer mennyiségének és minőségének hatását a reakció kimenetelére, majd új származékokat állítottunk elő.



Y = H, Cl, CH₃, OCH₃

Eredményeink alátámasztása érdekében végeztünk vakpróbákat, illetve termikus összehasonlító kísérleteket is. Ezt követően az új aril-foszfinátokat előállítottuk a hagyományos, savkloridon át történő módszerrel is.

[1] N. Zs. Kiss; Gy. Keglevich; *Tetrahedron Lett.*, 57, 971-974, **2016**.

[2] [10] Gy. Keglevics; E. Bálint; N. Zs. Kiss; E. Jablonkai; L. Hegedűs; A. Grün; I. Greiner; *Curr. Org. Chem.*, 15, 1802-1810, **2011**.

Palládium katalizált P–C kapcsolási reakciók vizsgálata

Huszár Bianka, V. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

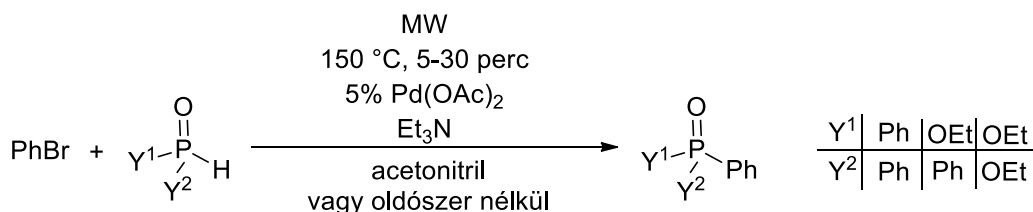
Dr. Kiss Nóra Zsuzsa egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjainkban a környezetvédelem igen fontos szempont a szerves szintézisek megvalósítása során. A több mint 30 éve a Hirao által felfedezett első P–C kapcsolási reakció során aril- és vinil-halogenideket reagáltattak dialkil-foszfítokkal tetrakis(trifenilfoszfín)palládium katalizátor és trietil-amin jelenlétében [1]. Azóta számos eljárás kidolgozása valósult meg, vizsgálták a kapcsolási reakciókat különféle Pd-katalizátor/ligandum rendszer alkalmazásával, illetve alternatív megoldásként mikrohullámú (MW) körülmények között [2].

Kutatócsoportunk korábban sikeresen megvalósította aril-bromidok és >P(O)H-funkciót tartalmazó vegyületek kapcsolási reakcióját Pd(OAc)₂ jelenlétében direkt hozzáadott P-ligandum nélkül MW körülmények között [3,4].

Munkám során a zöldkémia törvényeit szem előtt tartva tanulmányoztuk brómbenzol és dietil-foszfít, etil-fenil-H-foszfínát, illetve szekunder foszfín-oxidok kapcsolási reakcióját. Célunk volt a kiindulási foszforvegyület optimális mennyiségének meghatározása, valamint a kapcsolás mechanizmusának feltérképezése.



[1] Hirao, T.; Masugana, T.; Ohshiro, Y.; Agawa, T.; *Tetrahedron Lett.*, 21, 3595, 1980

[2] Jablonkai, E.; Keglevich, Gy.; *Org. Prep and Proc. Int.*, 46, 281, 2014

[3] Jablonkai, E.; Keglevich, Gy.; *Tetrahedron Lett.*, 54, 4185, 2013

[4] Keglevich, Gy.; Jablonkai, E.; Balázs, L.B.; *RSC Adv.*, 4, 22808, 2014

(S)- α -feniletilaminofoszfónátok és származékaik előállítása Kabachnik-Fields reakcióval mikrohullámú körülmények között

Kalocsai Dorottya, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Bálint Erika** tudományos munkatárs

MTA-BME Szerves Kémia és Technológia Tanszéki Kutatócsoport

Dr. Keglevich György tanszékvezető egyetemi tanár

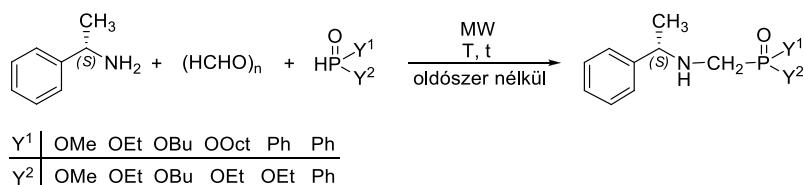
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Tajti Ádám** PhD hallgató

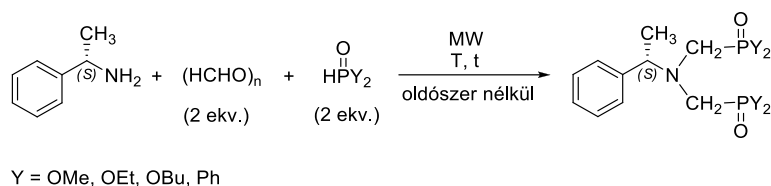
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az α -aminofoszfónátok és származékaik, mint az α -aminosavak P-analógjai, potenciális bioaktivitásuk miatt, széleskörű tudományos érdeklődésre tartanak számot.

Munkánk során (S)- α -feniletil-aminból kiindulva optikailag aktív mono és bisz α -aminofoszfónátokat, α -aminofoszfínátokat, valamint α -aminofoszfín-oxidokat állítottunk Kabachnik-Fields reakcióval [1]. A kondenzációkat hatékonyan hajtottuk végre oldószer és katalizátor nélkül, mikrohullámú körülmények között. Célunk új vegyületek szintézise, illetve a reakciók optimalizálása volt. A mono származékokat (S)- α -feniletil-amin, paraformaldehid és a megfelelő $>P(O)H$ regensek kondenzációjával kaptuk.



A bisz termékekhez kétszeres Kabachnik-Fields reakcióval jutottunk, mely során az amin két ekvivalens paraformaldehiddel és két ekvivalens $>P(O)H$ vegyülettel reagáltattuk.



A termékeket NMR, illetve HRMS vizsgálatokkal, valamint forgatásméréssel jellemeztük.

A bisz α -aminofoszfín-oxidból deoxigénezéssel királis kétfogú P-ligandumot állítottunk elő, melyet Pt-komplex képzésben hasznosítottunk.

[1] Keglevich, G.; Bálint, E. *Molecules*, **2012**, *17*, 12821-12835.

Szintetikus metalloporfirinek előállítása és alkalmazása gyógyszervegyületek biomimetikus oxidációjában

Ignác Gergő, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Balogh György Tibor** laborvezető

Richter Gedeon Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium

Konzulensek: **Dr. Kupai József** egyetemi adjunktus

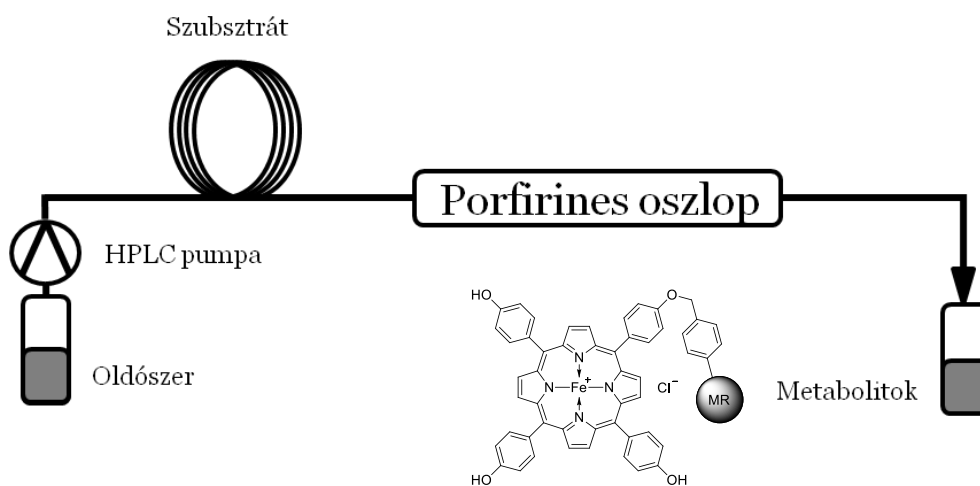
BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

Földi Tamás PhD hallgató

BME Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

A szervezetben jelenlévő endogén és exogén anyagok lebontásában kiemelkedő szerepe van a citokróom P-450 elnevezésű izoenzimcsaládnak. Az aktív centrum magjában lévő protoporfirin IX egység szintetikusán előállított metalloporfirin származékokkal modellezhető. Kutatócsoportunk célja egy olyan *in vitro* rendszer kifejlesztése, amely rövid időn belül, robusztusan képes gyógyszerjelölt molekulák metabolitjainak előállítására.

A modell első fázisa szűrés jellegű, ahol HPLC-MS mérésekkel azonosítjuk az egyes anyagokat, ez egy méretnövelési lépést követően alkalmas lehet a technika áramlásos kémiai rendszerbe való integrálásra (1. ábra). Porfirinek ezen elven való felhasználása egy teljesen új megközelítés, amire még nem találtunk példát a szakirodalomban.



1 ábra.

A szerzők köszönik az OTKA (nyilvántartási szám: PD-108462, K-81127) és a Richter Gedeon Nyrt. anyagi támogatását!

Foszfínatok hidrolízisének vizsgálata

Harsági Nikoletta, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Kiss Nóra Zsuzsa egyetemi adjunktus

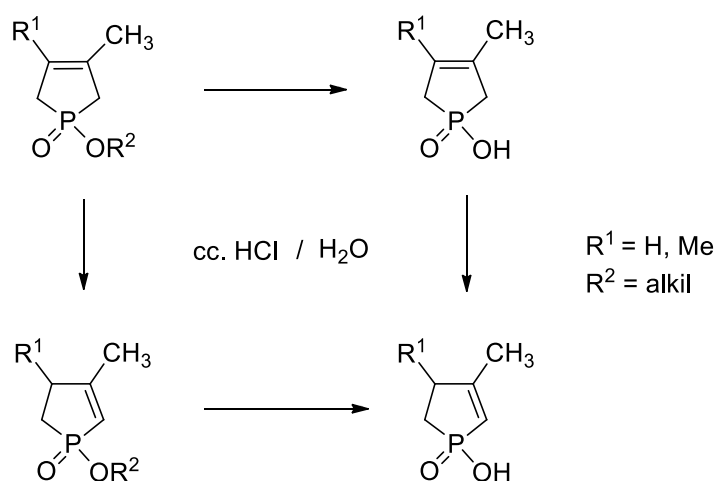
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Rádai Zita** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A foszfinsav-észterek hidrolízise nem egyszerű feladat, ráadásul az irodalomban számos esetben nem közölnek pontos reakciókörülményeket, illetve a körülmények túlzóak, tehát egy fekete doboznak tekinthető. A feladatom gyűrűs foszfínatok hidrolízisének vizsgálata volt.

Kísérleteket végeztem különböző foszfinsav-észterek savas hidrolízisére. Vizsgáltuk az ionos oldószerek hatását a reakció lejátszódására. Első lépésben egy kiválasztott modellvegyület az 1-etoxi-3-metil-3-foszfolén-1-oxid hidrolízisén optimáltuk a reakciókörülményeket. A megfelelő sav-víz arányt megtalálva monitoráltuk a reakció lejátszódását. A hidrolitikus reakció során izomerizációt is tapasztaltunk.



Optimális savkoncentráció mellett a hidrolízist más észterekre is kiterjesztettük. A hidrolízis környezetbaráttá tétele érdekében, mikrohullámú körülmények között is vizsgáltuk ezt a reakciót, ez esetben *p*-toluol-szulfonsav katalizátor alkalmazásával.

1-Fenilpirrol alapvázú, atropizomer foszforamidok előállítása és vizsgálata

Kiss Ágoston, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Mátyavölgyi Béla tudományos munkatárs

MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

Konzulens: **Hergert Tamás** PhD hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Faigl Ferenc csoportjában már több éve folynak kutatások 1-fenilpirrol alapvázú, axiális aszimmetrialelemű vegyületek szintézisére. Az ilyen atropizomer vegyületek széles körben alkalmazhatók aszimmetrikus szintézisekben ligandumként vagy organokatalizátorként. Az ilyen enantioszelektív reakciók során értékes, az egyik enantiomerben dúsabb szekunder alkoholokat kapunk, amelyek királis, biológiailag aktív molekulák előállítása során kulcsintermedierek lehetnek. A kutatásba bekapcsolódva kísérleteket végeztem – az irodalomban még nem publikált – enantiomertiszta, optikailag aktív foszforamid típusú katalizátor előállítására 1-[2-karboxi-6-(trifluormetil)fenil]-1*H*-pirrol-2-karbonsavból kiindulva. Elsőként egy 1-fenilpirrol alapvázú diamin-származék intermediert állítottam elő – melynek szintézisét racemizáció megtörténte nélkül lehetett megvalósítani – a fent említett dikarbonsavból kiindulva. Munkám során a dikarbonsav karboxilcsoportjainak szelektív észteresítése után, a funkciók megfelelő továbbalakításával, több lépésben szintetizáltam a diamin-származék vegyületet kutatócsoportunk korábbi eredményeire támaszkodva. Ezt követően, naft-1-il-magnézium-bromid és dietil-foszfit reakciójával, majd egy oxidációs lépés és savklorid képzés után sikerrel állítottam elő irodalmi analógia alapján egy foszfinsav-kloridot-származékot.

Ez után következett a célvegyület szintetizálása, melyet a diamin-származék és foszfinsav-klorid-származék vegyületek reagáltatásával kaptam meg. Az újonnan előállított bifunkciós atropizomer molekulát sikeresen teszteltem benzaldehid és dietil-cink enantioszelektív addíciós reakciójában, mint katalizátorligandum.

7-Foszfano-2,3-dihidro-1H-benzofosfepin szintézise és redukciójának megvalósítása

Cseresnyés Dóra, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Keglevich György** tanszékvezető egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Kovács Tamara** PhD hallgató

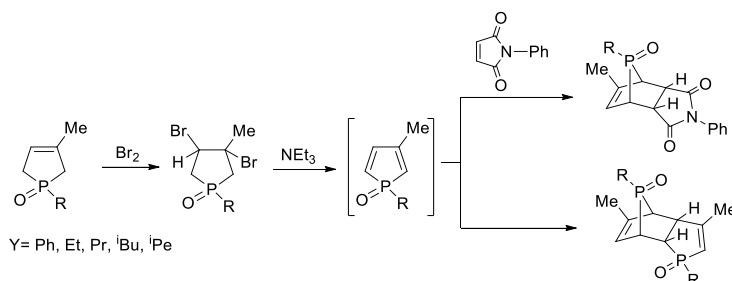
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A foszfortartalmú vegyületeknek az ipari felhasználás terén kiemelkedő a gyógyászatban (például antibiotikumok, illetve citotoxikus szerek), a növényvédőszer- és a műanyagiparban (lágyítók, illetve égésgátló adalékok) betöltött szerepük.

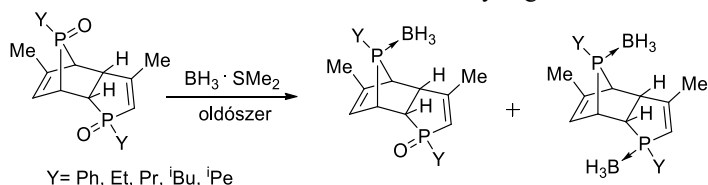
A P-heterociklusok fontos intermediereként szerepelhetnek szintézisekben és trivalens formában P-ligandok lehetnek. A foszforheterociklusok között az öt- és hattagú heterociklusoknak és az előbbieken belül a foszfoloknak nagy jelentőségük van. Az irodalomból ismeretes, hogy a foszfolok dién tulajdonsággal rendelkeznek, így dienofilek jelenlétében belőlük, áthidalt, feszült gyűrűvel rendelkező foszfin-oxidok, ún. 7-foszfano-2,3-dihidro-1H-benzofosfepin-származékok állíthatók elő. Ezek az áthidalt foszforheterociklusok energiaközlés hatására fragmentációs foszforilezési reakciókba vihetők.

Továbbá, a 7-foszfano-2,3-dihidro-1H-benzofosfepinből redukcióval foszfinok szintetizálhatók, melyekre jellemző a jó koordinációs készség, ezért katalizátor ligandként is szóba jöhetnek átmenetifém-, például Pt-, és Rh-komplexekben, melyek hidroformilezési reakciók katalizátorai lehetnek.¹

Kutatócsoportunkban már régóta tanulmányozzák az áthidalt P-heterociklusok szintézisét, redukcióját, fragmentációját és az így képződő reakcióképes intermedierek hasznosítási lehetőségeit.^{2,3} Ebbe a kutatásba bekapcsolódva, TDK munkám során főként P-alkil szubsztituált foszfolén-oxidból kiindulva 7-foszfano-2,3-dihidro-1H-benzofosfepin-származékokat szintetizáltunk.



A vegyületcsalád további feltérképezése céljából célul tűztük ki az előállított foszfano-2,3-dihidro-1H-benzofosfepin-származékok borán-dimetilszulfiddal megvalósított redukciójának vizsgálatát. Tanulmányozni kívántuk a molarány, a hőmérséklet, a reakcióidő és az oldószer mennyiségének hatását a reakció szelektivitására nézve. A korábbiakkal ellentétben³ – a zöldkémiai szempontokat is figyelembe véve – a redukciókat a reakciókörülmények optimalizálásával és az alkalmazott oldószer mennyiségének csökkentésével végeztük.



(1) Csók, Z.; Keglevich, G.; Petőcz, G.; Kollár, L. *J. Org. Chem.* **1999**, 586, 79.

(2) Kovács, T.; Fülöp, L. Sz.; Keglevich, G. *Heteroatom Chem.*, **2016**, 27, 83-90.

(3) Keglevich, G. Chuluunbaatar, T.; Ludanyi, K.; Toke, L. *Tetrahedron* **2000**, 56, 1.

Indeno[1,2-b]fluorén-6,12-dion molekulaváz kialakításának vizsgálata

Bognár Zsolt, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Mátravölgyi Béla tudományos munkatárs

MTA-BME Szerves Kémiai Technológia Kutatócsoport

Konzulens: **Hergert Tamás** PhD hallgató

Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Tudományos Diákköri munkámat a Szerves Kémia és Technológia tanszéken végeztem. Céлом új, metoxi szubsztituenssel rendelkező indenofluorén váz szintézise volt, dimetil-szukcinátból kiindulva. Mivel az alkoxi funkciós csoportok jó elektronküldő sajátsággal bírnak, ezért kedvező elektronikai és optikai tulajdonságokat várunk ettől a molekulától, felhasználása akár szerves alapú fénykibocsátó diódákban (OLED), vagy térősitésű (OFET) tranzistorokban is elképzelhető. Az alkoxi szubsztituens továbbá számos variációra lehetőséget kínál, így a téma széles körű további kutatás alapjául szolgálhat.

Gamma-valerolakton alapú ionos folyadékok előállítása és jellemzése

Józsa Máté, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Mika László Tamás** tanszékvezető egyetemi docens

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki tanszék

Konzulensek: **Tukacs József Márk** egyetemi tanársegéd

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki tanszék

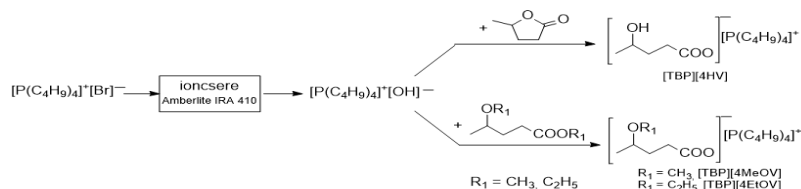
Orha László kutatóvegyész

Izotóp Intézet Kft.

A vegyiparban óriási mennyiségben használnak oldószereket, amelyeknek jelentős része, magas tenzióval rendelkező illékony szerves vegyület. Ezekből évente csak az EU 28 tagországát tekintve, több mint 7 millió tonna kerül ki környezetünkbe, amely nemcsak környezetvédelmi, hanem komoly gazdasági problémát is jelent. A zöld kémia kiemelt célkitűzése a szintézisekben alkalmazott oldószerek elhagyása ill. ha alkalmazásuk elengedhetetlen, olyan alternatívákkal történő helyettesítése, melyek kevésbé toxikusak és alacsony tenzióval rendelkeznek. Ezeknek az elvárásoknak tesznek eleget a γ -valerolakton (GVL) alapú ionos folyadékok, amelyek részben megújuló nyersanyagforrásból előállíthatóak. GVL alapú ionos folyadék rendszereket a kutatócsoport már korábban kifejlesztett, és széleskörűen jellemzett.^{1,2} Ezek a tetraalkil-ammónium kationból és valerát-alapú anionból álló sók alacsony reakcióhőmérséklet esetén stabil oldószerek pl. hidrogénezési reakciókhoz, azonban 95 °C felett hőbomlást szenvedhetnek, ami felhasználásuk szempontjából döntően meghatározó.

Kísérleteim célja olyan újszerű GVL-alapú ionos folyadékok előállítása és tulajdonságainak vizsgálata, melyek tetraalkil-ammónium kation helyett, termikusan jóval stabilabb tetraalkil-foszfónium alapú kationt tartalmaznak.

Munkám során eljárást dolgoztam ki a foszfónium alapú valerát típusú ionos folyadékok hatékony előállítására (1. ábra), továbbá jellemeztem az előállított ionos folyadékokat gőznyomásuk, viszkozitásuk, sűrűségük és vezetőképességük alapján.



1. ábra

¹ Strádi, A., Molnár, M.; Szakál, P.; Dibó, G.; Gáspár, D.; Mika, L. T. *RSC Adv.* **2015**, 5, 72529.; Strádi, A.; Molnár, M.; Óvári, M.; Richter, F. U.; Dibó, G., Mika L. T, *Green Chem.*, **2013**, 15, 1587.

² Fegyverneki, D.; Orha, L.; Láng, G.; Horváth, I. T., *Tetrahedron*, **2010**, 66, 1078.

Acetilszalicilsav teljesen folyamatos szintézise és formulációja elektrosztatikus szálképzés alkalmazásával

Domokos András, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Balogh Attila** tudományos segédmunkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Dr. Marosi György** egyetemi tanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Rapi Zsolt tudományos munkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A legtöbb nagy iparág az utóbbi évtizedekben a folyamatos gyártásra rendezkedett be, míg a gyógyszeripar továbbra is szakaszos alapon működik. Habár ily módon költségesebb és lassabb a gyártás, valamint a termék minősége is ingadozhat, a szigorú hatósági szabályozás gátat szab a szemléletváltásnak. A folyamatos rendszerekben kialakuló állandósult állapot valós idejű követésével, és azonnali visszacsatolással a termék minősége állandó értéken tartható. A folyamatos üzemű gyógyszeripari berendezések beruházási és működtetési költsége kisebb, nincs szükség kiterjedt raktárkapacitásra az intermedierek tárolásához, és az egyes lépések közti feldolgozások elhagyásával a gyártás folyamata is felgyorsul.

A hatóanyagok szintézisének folyamatos áramlásos reaktorokban történő kivitelezésére számos példa található, azonban a szintézissort követő gyógyszerformuláció közvetlen, megszakítás nélküli megvalósítása már nagyobb kihívásnak bizonyult a kutatók számára. A Massachusetts Institute of Technology (MIT) laboratóriumában bemutatott egyetlen ilyen példában a hatóanyag szintézisének és formulációjának összekapcsolását a klasszikus műveletek folyamatosításával érték el, ráadásul a végső feldolgozás a hatóanyag kémiai stabilitása szempontjából előnytelenebb olvasztásos módszerrel történt [1].

Az elektrosztatikus szálképzés egyedülálló lehetőséget nyújt a szintézis felől érkező hatóanyag-tartalmú folyadékelegy azonnali átalakítására száraz terméké, mely egyszerűen tablettázható. A folyamat közönséges körülmények között kíméletesen történik, akár az illékonyak nem tekinthető oldószerek is eltávolíthatók a nagyfeszültség hatására húzott mikro- és nanoszálak képződése során. A szálak polimer mátrixa révén egyúttal a hatóanyag-leadás módja igény szerint megválasztható az ultragyorstól a nyújtott kioldódásig.

Mindezeket figyelembe véve munkánk célja egy olyan laboratóriumi gyártóberendezés kialakítása volt, mellyel demonstrálható az áramlásos reaktor közvetlen összekapcsolhatósága az elektrosztatikus szálképzéssel. Modellreakcióként az acetilszalicilsav szintézisét választottuk ecetsav-anhidridet alkalmazva reagensként, ahol a melléktermék magas forráspontú ecetsavat szükséges eltávolítani a termék egyidejű formulálásával.

A szalicilsav savkatalizált acilezésének optimalizálása után a folyamatos reaktorban képződő reakcióelegy feldolgozhatóságát vizsgáltuk elektrosztatikus szálképzéssel. A kapott vízben jól oldódó polimer szálakban a hatóanyag fizikai állapotát differenciális pásztázó kalorimetriával vizsgáltuk. Kapilláris elektroforézis mérésekkel igazolható volt, hogy a szálak ecetsavtartalma a hatósági határérték alatt volt, továbbá a HPLC mérések a forgalmazott készítménnyel közel azonos tisztaságot mutattak.

[1] S. Mascia és társai, End-to-end continuous manufacturing of pharmaceuticals: Integrated synthesis, purification, and final dosage formation, Angew. Chemie - Int. Ed. 52 (2013) 12359–12363.

Cukoralapú epoxi komponens kontrollált előállítás PAT reaktorban

Dénes Márk, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Csontos István** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Dr. Rapi Zsolt** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Farkas Attila PhD hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kutatómunkámat a BME Szerves Kémia és Technológia Tanszéken a Gyógyszer-, Környezeti- és Biztonságtechnológiai Anyagok Kutatócsoportban végeztem. Feladatom egy új, cukoralapú epoxigyanta-komponens szabályozott előállításának kidolgozása volt egy PAT („Process Analytical Technologies”, FDA irányelv) elvek szerint kialakított laboratóriumi folyamatirányított rendszerben.

A rendszer sajátosságát az adja, hogy a reakcióelegy kémiai változásait Raman spektrometriás módszerrel nyomon követhetjük, a spektrumokat valós időben kemometriai módszerekkel (CLS, PLS, stb.) kiértékelhetjük, megállapítva az elegy pillanatnyi összetételét. Az összetétel alapján beavatkozhatunk a folyamat végrehajtásába a hőmérséklet, az adagolás, stb. megváltoztatásával. Így az adott folyamathoz optimális körülményeket biztosítva gyorsabbá és hatékonyabbá válik a technológia.

A célvegyületet korábban a kutatócsoport tagjai abból a célból szintetizálták, hogy környezetbarát, égésgátolt epoxigyantát állítsanak elő a repülőgépipar számára¹. A széles körű felhasználást azonban a magas előállítási költség és a méretnövelés során fellépő (biztonságtechnikai) problémák gátolták.

Munkám során sikerült a szintézis allilezési lépését az eredeti eljárásnál *kiszámíthatóbbá* és *biztonságosabbá* tenni; az ezt követő epoxidálásra pedig egy *környezetbarátabb* és *költséghatékonyabb* megoldást kidolgozni. Az így továbbfejlesztett eljárás lehetőséget biztosít a biztonságos méretnövelésre és méretnövelt PAT alapú, szabályozott gyártásra.

¹ <http://www.ch.bme.hu/kutatas/reszletek/projekt/1/>

D-Glükopiranozid alapú királis koronaéterek szintézise és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként

Pálvölgyi Ádám Márk, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Bakó Péter** egyetemi magántanár

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Rapi Zsolt tudományos munkatárs

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A modern kémia egyik legnagyobb kihívását az enantiomertiszta vegyületek előállítása jelenti. Ebben egyre fontosabb szerep jut az aszimmetrikus szintéziseknek, hiszen a reakciók alkalmazása gazdasági és környezetvédelmi szempontokból egyaránt előnyös. Kutatómunkám során könnyen hozzáférhető és olcsó természetes anyagokból kiindulva olyan monoszacharid alapú királis koronaétereket állítottam elő, amelyek fázistranszfer reakciókban katalizátorként alkalmazva aszimmetrikus indukciót válthatnak ki. Munkám fő célja az volt, hogy olyan, minél nagyobb enantiomertisztaságú vegyületeket állítsak elő, amelyek biológiai aktivitással rendelkeznek vagy potenciálisan királis intermediereként alkalmazhatók.

D-Glükózból kiindulva két különböző szintézisstratégiát alkalmazva három α -D-glükopiranozid alapú és két β -D-glükopiranozidból felépülő koronaétert állítottam elő. A glikozidos hidroxilcsoporton lévő szubsztituens típusát és térállását, valamint a lariat egységet változtatva vizsgáltam, hogy a koronaéterek szerkezete hogyan befolyásolja a katalitikus hatást. Ezen kívül sikeresen előállítottam egy L-treitol alapú makrociklust is.

Az új, D-glükóz makrociklusokat különféle fázistranszfer reakciók katalizátoraként alkalmaztam. Ezekben a vizsgált lariat éterek jelentős mértékű aszimmetrikus indukciót generáltak, amelynek eredményeként több esetben 90%-nál is nagyobb enantiomerfelesleggel keletkeztek a megfelelő termékek. Az eredmények alapján összefüggéseket állapítottam meg a koronaéterek szerkezete és az általuk kiváltott katalitikus hatás között.

Emellett részletesen foglalkoztam szubsztituált benzilidénmalonitrilek és dietil-brómmalonát ciklopropángyűrű képződésével járó reakciójával (MIRC-reakció), valamint helyettesített *transz*-kalkonok és dietil-acetoximalonát Michael-addíciójával. Sikertől összefüggéseket megállapítanom a szubsztituensek helyzete, minősége és a kiváltott aszimmetrikus indukció mértéke között. Ezen reakciók során is több esetben 90%-os, vagy annál is nagyobb enantiomertisztasággal izoláltam a termékeket.

Továbbá sikeresen optimalizáltam 2'-hidroxikalkon aszimmetrikus gyűrűzárási reakcióját, amelynek sikeres enantioszelektív megvalósítása az irodalomban még nem ismeretes. Az optimalizálás eredményeként a flavanon terméket több alkalommal is sikerült 40-50%-os enantiomerfelesleggel kinyernem.

A munkám során előállított optikailag aktív flavanon biológiai aktivitással bír, a királis epoxiketonok, ciklopropán-származékok és Michael-adduktok pedig jelentős királis intermedierek lehetnek biológiailag aktív vegyületek szintéziséhez.

Furfural homogénkatalitikus hidrogénezésének vizsgálata

Bohus Márton, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Mika László Tamás** tanszékvezető egyetemi docens

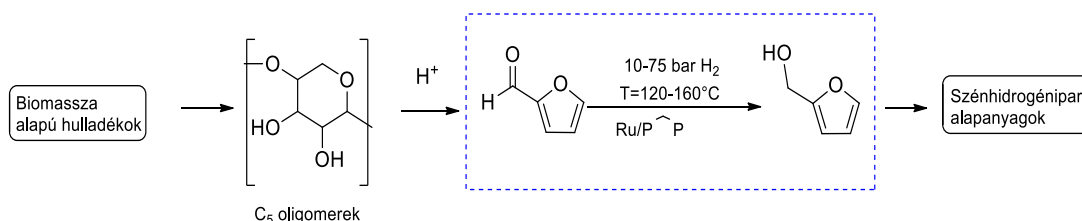
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki tanszék

Konzulens: **Tukacs József Márk** egyetemi tanársegéd

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki tanszék

Az utóbbi években intenzív kutatások folynak olyan biomassza alapú ill. biomassza-hulladékból előállítható platformmolekulák szintézisére, amelyek lecserélhetik, vagy átvehetik a jelenleg fosszilis alapon előállított szerves kémiai építőkövek technológiában betöltött szerepét. Ilyen sokrétű építőelem lehet a furfuril-alkohol, melynek előállítására a legmegfelelőbb eljárás a furfural katalitikus hidrogénezése. Irodalmi adatok alapján a furfural furfuril-alkohollá történő átalakítására legtöbbször heterogén katalizátorrendszert alkalmaztak, viszont homogén, nagy szelektivitású, hozzáadott oldószer mentes rendszerre még nem közöltek adatokat. Kutatómunkám célja egy olyan nagyhatékonyságú és szelektivitású homogén-katalizátorrendszer kidolgozása, amely hozzáadott oldószer nélkül alkalmas a furfural redukálására furfuril-alkohollá, továbbá alkalmas a termék-elválasztás utáni újrafelhasználásra.

Kísérleteimmel igazoltam, hogy kétfogú foszfin ligandumok ruténium(III)-acetilacetonáttal képzett katalizátorrendszerében sikeresen végbement a furfural redukciója, és a kifejlesztett rendszer alkalmas az újrafelhasználásra. Részletes vizsgálataim kiterjedtek a megfelelő ligandum azonosítására, továbbá a ligandum/fém arány, a hidrogén nyomás és a reakció hőmérsékletének aktivitásra és szelektivitásra gyakorolt hatásának vizsgálatára.



Optimális reakció körülmények között oldószermentesen, melléktermék képződése nélkül 99.9% konverzióval sikerült előállítanom a furfuril-alkoholt. A legnagyobb aktivitást a Ru(acac)₃/Ph₂P(CH₂)₄PPh₂ (Ru/BDDP) homogén katalizátorrendszerrel értem el (TOF = 6273 h⁻¹), amely az újrahasznosítás során tizenkét cikluson keresztül megtartotta aktivitását.