



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

2022.

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülések kezdete: 2022. november 17. 8:15

Eredményhirdetés: 2022. november 17. 18:00

A BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán rendezett
2022. évi Tudományos Diákköri Konferenciát
támogatták:

BME Rektori Hivatal

BME VBK Dékáni Hivatal

BME Egyetemi Hallgatói Képviselő

Pro Progressio Alapítvány

Varga József Alapítvány

Dr. Pungor Ernő családja

eurofins WESSLING Hungary Kft.

Richter Gedeon Nyrt.

Egis Gyógyszergyár Zrt.

EUROAPI Hungary Kft.

MOL Nyrt.

Magyar Kémikusok Egyesülete

BME VEGY-ÉRTÉK Tehetségpont



Az NTP-HHTDK-22-0029 számú pályázat támogatásával megvalósuló program.

Időpont	Analitikai és Számítási Kémia szekció Ch. 308.	Anyagtudomány és Fizikai Kémia Szekció K. I. 34	Biokémia és Biotechnológia Szekció Ch. 201.	Kémiai és Polimer-technológia Szekció Ch. A. 10.	Szerves Kémia Szekció Ch. C. 14.	Időpont
8:15–8:30	Lőrincz Balázs	Farkas Szabolcs	Hajdú Dorottya Katalin	Ficzere Máté	Garami Kristóf Noel	8:15–8:30
8:30–8:45	Arany Dóra	Haffner Ádám Balázs	Bíró Adrienn	Furó Lili	Erdélyi Dóra	8:30–8:45
8:45–9:00	Kucsera Péter Mihály	Kiss Etelka	Dékány Gergely	Balogh Marcell János	Meiszer Enikő	8:45–9:00
9:00–9:15	Weber Márton	Szayly Kata	Tóth Tímea	Hegyi Mihály	Sári Éva Viktória	9:00–9:15
9:15–9:30	Fügedi Kata Dorina	Titkó Simon	Tóth Otília	Forján Lilla	Kovács Írisz Karolina	9:15–9:30
9:30–9:45	SZÜNET					9:30–9:45
9:45–10:00	Harcza-Pintér Zsófia	Molnár Alexandra	Csák Anna Pisch Barnabás	Nguyen Thuy Hong Ha	Kis Dávid	9:45–10:00
10:00–10:15	Barna Sára	Szalay Máté	Engel Botond	Fekete Dániel	Varga Bertalan	10:00–10:15
10:15–10:30	Gál Zsolt	Mihalovics Bence	Papp Tímea	Árvai Csaba	Unyi Zsombor	10:15–10:30
10:30–10:45	Gál Dalma	Varga Csaba	Jambrich Márton András	Koncz Medárd	Szabó Renáta	10:30–10:45
10:45–11:00	Kovács Máté Barnabás	Bors Adrienn Márta	Bogárdi Leticia	Orosz János Máté	Bogner Marcell Márk	10:45–11:00
11:00–11:15	SZÜNET					11:00–11:15
11:15–11:30	Szabó Fruzsina	Bicsak Richárd	Szilágyi Virág Róza	Ötvös Bettina	Schneider Anna	11:15–11:30
11:30–11:45	Farkas Erik		Borsos Nóra	Lőrincz László Tamás	Richter Dóra	11:30–11:45
11:45–12:00	Kertész Erik		Szajkó Milda Blanka	Bicsák Rozália	Györfi Sára	11:45–12:00
12:00–12:15	Zsiros Boldizsár		Bukovszki Laura			12:00–12:15
12:15–12:30			Madács Ágnes			12:15–12:30

Elnök: **Dr. Nyulászi László** egyetemi tanár, az MTA I. tagja
Titkár: **Becskereki Gergely** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Tóth Blanka** egyetemi docens
Dr. Makkos Eszter tudományos munkatárs
Külső tag: **Dr. Keszthelyi Tamás** tudományos főmunkatárs,
ELKH Wigner Fizikai Kutatóközpont

Helyszín: **Ch. 308.**

8:15 Lőrincz Balázs

Szupramolekuláris és katalitikus kémiában előforduló bonyolult molekuláris kölcsönhatások pontos modellezése

Témavezető: Dr. Nagy Péter tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

8:30 Arany Dóra

Új, automatizálható, nyomás alatti olvadáspontmérő-műszer fejlesztése

Témavezető: Dr. Körösi Márton egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

8:45 Kucséra Péter Mihály

B–B kötéshosszabbodás vizsgálata *klozo-karboránok* esetén

Témavezető: Dr. Kelemen Zsolt egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

9:00 Weber Márton

A „mentális ugrások” szerepe az NMR-spektroszkópia alapú kismolekulás szerkezetkutatásban

Témavezető: ifj. Dr. Szántay Csaba egyetemi magántanár
Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási Osztály

9:15 Fügedi Kata Dorina

Vatta- és grafitalapú szilárd fázisú extrakciós rendszerek fejlesztése és alkalmazása prosztatata- és emlőtumoros szövetek glükózaminoglikán tartalmának vizsgálatára

Témavezetők: Dr. Tóth Gábor tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI MS Proteomika Kutatócsoport
Dr. Turiák Lilla tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI MS Proteomika Kutatócsoport

9:30 Szünet

9:45 Harcsa-Pintér Zsófia

Konjugáció 3D és 2D aromás rendszerek közt: valóban létezik? A karborán-kapcsolt heterociklusok esete

Témavezető: Dr. Kelemen Zsolt egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:00 Barna Sára

Immobilizált antitestek vizsgálata Protein M és képkalkító felületi plazmon-rezonancia alkalmazásával

Témavezető: Dr. Gyurcsányi E. Róbert egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:15 Gál Zalán

Szénhidrátkeverékek vizsgálata közeli infravörös spektroszkópiával és sokváltozós adatelemzéssel

Témavezetők: Slezsák János egyetemi tanársegéd
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Gergely Szilveszter egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:30 Gál Dalma

Trifoszfánligandumok koordinációs képességének vizsgálata komplexképzési reakciókban

Témavezető: Dr. Kovács Ilona egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:45 Kovács Máté Barnabás

Foszfol vagy foszfetén? Melyik a megfelelő kanyar a potenciális energia felületen?

Témavezető: Dr. Kelemen Zsolt egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

11:00 Szünet

11:15 Szabó Fruzsina

Kobaltionok szorpciós kinetikájának és diffúziójának vizsgálata nagyaktivitású radioaktív hulladék-tároló potenciális befogadóközetén

Témavezető: Dr. Osán János tudományos főmunkatárs
ELKH EK Sugárvédelmi és Környezetfizikai Laboratórium

11:30 Farkas Erik

Famotidin heterogén kristályosítása segédanyagokkal

Témavezető: Dr. Pataki Hajnalka egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:45 Kertész Erik

Nehezebb pniktogén elemek kelátkomplexei: szerkezet, tautoméria, redoxi és optikai tulajdonságok

Témavezető: Dr. Benkő Zoltán egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

12:00 Zsiros Boldizsár

Nyújtott hatóanyagleadású tabletták in vitro kioldódásbecslése Raman-térképezéssel

Témavezető: Dr. Farkas Attila tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Elnök: **Dr. László Krisztina** egyetemi tanár
Titkár: **Kanyar Barnabás** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Klébert Szilvia** tudományos főmunkatárs
Dr. Szilágyi Imre Miklós habil. egyetemi docens
Külső tag: **Dr. Marthi Katalin** főtanácsadó, Pharma IT.

Helyszín: **K. I. 34.**

8:15 Farkas Szabolcs

Zeolitszerű imidazolát vázszerkezetek reakciódiffúziós jelenségei

Témavezető: **Dr. Lagzi István László** egyetemi docens
BME Fizika Tanszék

8:30 Haffner Ádám Balázs

A víz szerepe a fémklaszter-katalizált szén-dioxid elektroredukcióban – Oldószer, protonforrás vagy reakciópartner?

Témavezető: **Dr. Höltzl Tibor** c. egyetemi docens, tudományos főmunkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
ELKH–BME Számítógépvezérelt Kémia Kutatócsoport

8:45 Kiss Etelka

Molekuláris fotokapcsoló működési mechanizmusa

Témavezető: **Dr. Kubinyi Miklós** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:00 Szayly Kata

Az adhéziót befolyásoló tényezők poli(vinil-alkohol) hidrogél felszínén

Témavezető: **Gyarmati Benjámin Sándor** egyetemi docens
BME Fizikai kémiai és Anyagtudományi Tanszék

9:15 Titkó Simon

Kationos tenzidek mint potenciális korróziós inhibitorok kapszulázása mezopórusos szilikarétegekbe

Témavezető: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Molnár Alexandra

Electrospinning az enzimhelyettesítéses terápiában: α -Amiláz csapdázása polimer nanoszálakba

Témavezető: Dr. Balogh Diána egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék,
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

10:00 Szalay Máté

Töltések és a dőpolóatomok szerepe a rézklasztereken történő CO₂ redukcióra

Témavezető: Dr. Höltzl Tibor c. egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

10:15 Mihalovics Bence

Hatóanyag-leadás vizsgálata poliszukcinimid- és poli(vinil-pirrolidon)-alapú szálak mátrixokból

Témavezető: Dr. Szilágyi András egyetemi docens
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

10:30 Varga Csaba

Folyadékelegyek nyomás–hőmérséklet–sűrűség–összetétel adatainak meghatározására alkalmas automatizált mérőberendezés fejlesztése

Témavezető: Dr. Körösi Márton egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

10:45 Bors Adrienn Márta

Fényátersztést növelő, fotokatalitikus TiO₂-bevonatok előállítása szol-gél eljárással

Témavezető: Dr. Hórvölgyi Zoltán egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

11:00 Szünet

11:15 Bicsak Richárd

Eltérő lipidösszetételű permeabilitási rendszerek fizikai-kémiai jellemzése

Témavezető: Dr. Balogh György Tibor egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Elnök: **Dr. Salgó András** Professor Emeritus
Titkár: **Buda Kata** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Deák Veronika** egyetemi adjunktus
Dr. Feigl Viktória egyetemi adjunktus
Külső tag: **Dr. Ballagi András** c. egyetemi tanár

Helyszín: **Ch. 201.**

8:15 Hajdú Dorottya Katalin

Raman-spektroszkópia-alapú dinamikus tápanyagadagolási stratégiák kifejlesztése antitest termelő emlőssejtes tenyészetekben

Témavezető: Dr. Hirsch Edit tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:30 Bíró Adrienn

Egyidejű többszínű fluoreszcens jelölés optimalizálása fehérjestruktúrák vizsgálatára

Témavezető: Dr. Németh Krisztina tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI "Lendület" Kémiai Biológia Kutatócsoport

8:45 Dékány Gergely

Természetes lipídkiadat-alapú membránok permeabilitási viszonyainak vizsgálata

Témavezető: Dr. Balogh György Tibor egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

9:00 Tóth Tímea

Fermentációs folyamatok hatásának vizsgálata rozs glutén és FODMAP összetételére

Témavezető: Dr. Kormosné Dr. Bugyi Zsuzsanna egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

9:15 Tóth Otília

A dUTPáz enzim élettani hatásának vizsgálata CRISPR bázisszerkesztő módszerrel eukarióta sejteken

Témavezető: Dr. Vértessy G. Beáta egyetemi tanár, tanszékvezető, az MTA I. tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Csák Anna Pisch Barnabás

Tönkölybúza (*Triticum spelta*) és egyéb régi búza genotípusok összetételének és technológiai tulajdonságainak jellemzése és összehasonlító vizsgálata modern búzafajtákkal (*Triticum aestivum*)

Témavezetők: Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Dr. Németh Renáta egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Jaksics Edina PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

10:00 Engel Botond

A 4-nitrokinolin 1-oxid mutagenikus hatásának vizsgálata sejttenyészetben

Témavezetők: Dr. Németh Eszter tudományos munkatárs
ELKH TTK EI Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport
Dr. Szüts Dávid tudományos tanácsadó
ELKH TTK EI Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport

10:15 Papp Tímea

Fermentációs kísérletek az alginát ásvány kozmetikai célú felhasználására

Témavezető: Dr. Németh Áron egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi

Tanszék

10:30 Jambrich Márton András

A humán transzmembrán fehérje szerkezeti tér vizsgálata a TmAlphaFold adatbázis felhasználásával

Témavezető: Dr. Dobson László tudományos munkatárs
ELKH TTK EI Fehérje Bioinformatika Kutatócsoport

10:45 Bogárdi Leticia

Egy kombinált antitumor terápiás lehetőség vizsgálata KRAS mutáns sejtekben

Témavezető: Dr. Hajdinák Péter egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

11:00 Szünet

11:15 Szilágyi Virág Róza

Organikus és konvencionális körülmények között termesztett búzák élelmi rost összetétele és technológiai tulajdonságainak vizsgálata

Témavezető: Dr. Schall Eszter egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi

Tanszék

11:30 Borsos Nóra

Neutrofil granulocita-eredetű extracelluláris vezikulák hatása a monociták fagocitózisára, szuperoxid- és citokin termelésére

Témavezetők: Dr. Lőrincz M. Ákos egyetemi adjunktus

SE Élettani Intézet

Dr. Wunderlich Lívius egyetemi adjunktus

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi

Tanszék

11:45 Szajkó Milda Blanka

Vad aestivum fajták és fajtajelöltek rost- és rövid láncú szénhidrát-összetételének meghatározása

Témavezetők: Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Juhászné Szentmiklóssy Marietta Klaudia PhD-hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

12:00 Bukovszki Laura

Egy érzékeny, UdgX-alapú uracil-DNS-detektálás fejlesztése különböző organizmusokból származó, alacsony uraciltartalmú genomi DNS-mintákon

Témavezető: Dr. Békési Angéla egyetemi adjunktus

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

ELKH TTK EI Genom Metabolizmus Kutatócsoport

12:15 Madács Ágnes

Oldószerekkel tisztított pollenek összehasonlító vizsgálata közeli és középinfra-vörös spektroszkópiával

Témavezetők: Dr. Gergely Szilveszter egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Slezsák János egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Elnök: **Dr. Kun Róbert** habil. egyetemi docens
Titkár: **Bosits Miklós** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Szolnoki Beáta** egyetemi adjunktus
Dr. Imre Balázs tudományos munkatárs
Dr. Várdai Róbert tudományos munkatárs
Dr. Pusztai Éva egyetemi tanársegéd
Külső tag: **Dr. Fürcht Ákos** c. egyetemi docens

Helyszín: **Ch. A. 10.**

8:15 Ficzer Máté

Filmtabletták bevonatának vizsgálata valós időben gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Témavezető: Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:30 Furó Lili

Antioxidánsokban gazdag szőlőhéj kivonat stabilizáló képességének vizsgálata polietilénben

Témavezetők: Dr. Tátraaljai Dóra tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Pukánszky Béla Professzor Emeritus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

8:45 Balogh Marcell János

Macskamenta kevertetési extrakciójának optimalizálása

Témavezető: Dr. Vági Erika Mária egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

9:00 Hegyi Mihály

Biszfénol-A monomer előállítása poli(biszfénol-A-karbonát) hidrotermális depolimerizációjával

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

9:15 Forján Lilla

Karvedilol segédanyag kristályosítása

Témavezető: Dr. Pataki Hajnalka egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Nguyen Thuy Hong Ha

Apremilast gyógyszerhatóanyag-szintézis kulcsfontosságú intermedierének rezolválása

Témavezető: Dr. Mátravölgyi Béla egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:00 Fekete Dániel

Folyamatos olvadékggranuláláson alapuló rendszer koffeintartalmú tabletták előállítására

Témavezető: Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Árvai Csaba

Ullmann-típusú C–N kapcsolat vizsgálata biomassza-alapú 1,4–pentándiolban

Témavezető: Dr. Mika László Tamás egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

10:30 Koncz Medárd

Hibrid nanotöltőanyaggal erősített PP-kompozitok: szerkezet és tulajdonságok

Témavezető: Ferdinánd Milán PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

10:45 Orosz János Máté

Kapszaicinoidok és prekursoraik előállítása áramlásos kémiai rendszerekben

Témavezetők: Dr. Bálint Erika egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Mátravölgyi Béla egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:00 Szünet

11:15 Ötvös Bettina

2-Hidroxipropil- β -ciklodextrin módosítása politejsav égésgátlására

Témavezető: Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:30 Lőrincz László Tamás

Ultrahangos extrakció kinetikai vizsgálata kerti kakukkfű (*Thymus vulgaris* L.) modellnövényen

Témavezető: Dr. Vági Erika Mária egyetemi adjunktus
BME Környezeti és Kémiai Folyamatmérnöki Tanszék

11:45 Bicsár Rozália

Koffeintartalmú tabletták vizsgálata gépi látási rendszerrel

Témavezető: Dr. Nagy Zsombor Kristóf egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Elnök: **Dr. Faigl Ferenc** egyetemi tanár
Titkár: **Rávai Bettina** PhD-hallgató
Koordinátor: **Dr. Tóth Tünde** habil. egyetemi docens
Dr. Hirsch Edit tudományos munkatárs
Külső tag: **Dr. Gizur Tibor** c. egyetemi tanár, fejlesztési főmérnök, EVI Zrt.

Helyszín: **Ch. C. 14.**

8:15 Garami Kristóf Noel

Szulfonilhidrazon mint új kovalens kötőelem

Témavezető: Dr. Ábrányi-Balogh Péter c. egyetemi docens, tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

8:30 Erdélyi Dóra

Lipofil organokatalizátor alkalmazásának és visszaforgatásának vizsgálata aszimmetrikus szintézisekben

Témavezető: Dr. Kupai József egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dargó Gyula PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

8:45 Meiszter Enikő

A *Hafner*-azapentalén újrafelfedezése: az 1,3-bisz(dimetilamino)-2-azapentalén kémiai

Témavezető: Dr. London Gábor tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport

9:00 Sári Éva Viktória

Biológiailag aktív α -aminofoszfónátok szintézise

Témavezető: Dr. Keglevich György egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:15 Kovács Írisz Karolina

Várhatóan rákellenes 2-metil-1,3-benzodioxol vázrészt tartalmazó fenantridon alkaloid-analogonok szintézise

Témavezető: Dr. Kádas István c. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

9:30 Szünet

9:45 Kis Dávid

Egy új, természetes alapú oldószer fejlesztése és alkalmazása

Témavezetők: Dr. Kupai József egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dargó Gyula PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:00 Varga Bertalan

Visszaforgatható szénhidrátalapú koronaéterek előállítása és alkalmazása enantio-szelektív katalizátorként

Témavezető: Dr. Rapi Zsolt egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Unyi Zsombor

Fluoreszcens vegyülettár tervezése és szintézise önjelölő fehérjék vizsgálatához

Témavezető: Dr. Cserép Balázs Gergely tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport

10:30 Szabó Renáta

Fluoreszcens ligandumok előállítása G-fehérje kapcsolt receptorok jelölésére

Témavezető: Dr. Ábrányi-Balogh Péter c. egyetemi docens, tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

10:45 Bogner Marcell Márk

Ditieniletén konjugált dibenzopentalén rendszer szintézise molekuláris elektronikai felhasználásra

Témavezető: Dr. London Gábor tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport
Kalapos Péter Pál tudományos segédmunkatárs
ELKH TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport

11:00 Szünet

11:15 Schneider Anna

4-Szubsztituált ciklohexánamin-származékok szintézise és enzimatis vizsgálat

Témavezető: Dr. Hornyánszky Gábor egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

11:30 Richter Dóra

Cinkona-(tio)négyzetamid és -tiokarbamid organokatalizátorok szintézise, és átmeneti-fémekkel kombinált alkalmazása enantioszelektív reakciókban

Témavezető: Dr. Kupai József egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dargó Gyula PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:45 Györfi Sára

Aldehidek boránkatalizált reakciói

Témavezető: Dr. Soós Tibor tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Forman Ferenc PhD-hallgató
ELKH TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport

A DOLGOZATOK ÖSSZEFOGLALÓI

Szupramolekuláris és katalitikus kémiában előforduló bonyolult molekuláris kölcsönhatások pontos modellezése

Lőrincz Balázs, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Nagy Péter** tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A bio- vagy katalitikus kémiában nagy számban jelen lévő, pl. a reakciómechanizmust is jelentősen befolyásoló intermolekuláris kölcsönhatások kísérleti és számítógépes modellezés alapú vizsgálata is rendkívül bonyolult. Például számítási kémiában rutinszerűen alkalmazott sűrűségfunkcionál módszerek a távolra ható kölcsönhatásokat jelentős közelítésekkel tudják csak kezelni. Ezzel szemben a nagy pontosságú hullámfüggvény módszerek (pl. CC módszer – Coupled Cluster – csatolt klaszter) szisztematikusan pontosíthatók, de hagyományos formájukban 20-25 atomos molekulákra is már túlságosan számításigényesek. További nehézség, hogy a nemkovalens kölcsönhatások pontos modellezésére jóval kiterjedtebb bázisfüggvény-készletet kell alkalmaznunk.

A hullámfüggvény módszerek számítási igényének csökkentésére a BME Spektroszkópia Kutatócsoport is javasolt hatékony eljárásokat (LNO – Local Natural Orbital, lokális természetes pálya), így akár több száz atomos molekulák pontos vizsgálata is lehetővé vált [1]. Egy közelmúltban készült tanulmány azonban megmutatta, hogy a kiterjedt és polarizálható molekulakomplexek esetén az LNO–CC és további referencia módszerekkel számított kölcsönhatási energiák bonyolult esetekben nincsenek mindig összhangban [2].

A kölcsönhatási energiák számítását ezért tovább pontosítottam a kölcsönható régióba helyezett bázisfüggvények felhasználásával (nem atomcentrált – NAC bázisfüggvények). Mivel a korábbi, viszonylag kevés NAC-függvényeket hasznosító tanulmány csak kis méretű (10-20 atom) molekula komplexeket vizsgált [3], ezért több új NAC bázis alapú számítási protokollokat dolgoztam ki, melyek akár több száz atomos komplexekre is alkalmazhatók. Többek közt optimalizáltam a NAC-függvények helyzetét, számát, illetve exponenseit a leggyakrabban használt atomcentrált bázisfüggvény-készleteket kiegészítve olyan módon, hogy ez nagyobb és általánosabb szerkezetű molekulakomplexek esetén is alkalmazható legyen. Az új stratégiákat az LNO–CC-módszerekkel ötvözve kiterjedt szupramolekuláris komplexek kölcsönhatásának, valamint még nehezebben modellezhető organokatalitikus reakciók átmeneti állapotainak leírására hasznosítottam. Az eredmények alapján a kidolgozott NAC függvény technikák jelentősen növelik a molekuláris kölcsönhatások pontosságát, illetve csökkentik a teljes bázis határ eléréséhez szükséges számítási igényt.

Irodalomjegyzék

- [1] Nagy, P.R., Kállay, M., *J. Chem. Theory Comput.*, **15**, 5275 (2019)
- [2] Nagy, P.R., Al-Hamdani, Y.S. *et al.*, *Nat. Commun.*, **12**, 3927 (2021)
- [3] Matveeva, R., Erichsen, M.F., Koch, H. *et al.*, *J. Comput. Chem.*, **43**, 121 (2022)

Új, automatizálható, nyomás alatti olvadáspontmérő-műszer fejlesztése

Arany Dóra, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kőrösi Márton** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Dr. Székely Edit** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A szén-dioxid nyomás alatt bekövetkező olvadáspont-csökkenést kihasználják a polimerfeldolgozásban, de ismerete elősegítheti nagynyomású folyamatok (pl. PGSS) tervezését is. Az olvadási hőmérséklet meghatározására nagynyomású közegben általában kihívást jelent, hiszen nehezen hozzáférhető, nagy szaktudást igénylő berendezésekkel lehetséges. Legelterjedtebb mérési módszerek a vizuális megfigyelésen alapuló vizsgálatok, de a legtöbb információt a nagynyomású differenciális pásztázó kalorimetria (DSC) és a tranzitometria hordozza, azonban berendezései ritkák és drágák.

A munkám célja egy új, automatizálható, gáznyomás alatti szilárd-folyadék fázisátmenet detektálására alkalmas mérési módszer kidolgozása volt, a berendezés megépítésétől a mérési adatok felvételén és validálásán át azok teljeskörű kiértékelésig. Az új készülék működése az olvadás során végbemenő nyomásváltozáson alapul, amit a közeg szilárd mintába történő beoldódása indukál. A mérések során egy referencia és egy szilárd anyagot is tartalmazó mintatartó között kialakult nyomáskülönbséget rögzítettem differenciál manométer segítségével. A hőmérséklet fokozatos emelése során a két mintatartó közötti nyomás eleinte lineárisan változik, azonban amikor a minta elkezd olvadni, a felette lévő tér nyomása a közeg mintába történő oldódása miatt nagyobb mértékben lecsökken.

A készüléket ibuprofennel validáltam, melynek előnye, hogy nem csak az általam látóüveges cellában végzett mérési eredmények állnak rendelkezésre, hanem a szakirodalomban is megtalálhatók a szükséges referencia értékek. A regisztrált idő – hőmérséklet – nyomáskülönbség adatokra feldolgozó algoritmust dolgoztam ki, amely az olvadás kezdeti és végső hőmérsékletének automatizált meghatározását teszi lehetővé. A kiértékelést követően azt tapasztaltam, hogy az irodalmi és a nagynyomású látóüveges cellában végzett mérések során kapott adatok precízen reprodukálhatóak az új készülékkel, segítségével az olvadási hőmérséklet akár 100 mg mintából meghatározható 1,5 °C pontossággal. A kidolgozott módszer egy új, könnyen automatizálható és precíz lehetőséget biztosít az olvadási hőmérséklet meghatározására nagynyomású közegben, amely sokkal olcsóbb és gyorsabb mérést tesz lehetővé, mint a nagynyomású DSC, hasonló pontosság mellett.

B–B kötéshosszabbodás vizsgálata klozo-karboránok esetén

Kucsera Péter Mihály, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Konzulensek: **Dr. Buzsáki Dániel** tudományos munkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Szilágyiné Dr. Kertész Júlia egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A kémiai kötés és annak limitációi mindig is az érdeklődés középpontjában voltak és lesznek is jó darabig. Egy új, rendkívül hosszú kötés (kiváltképp C-C kötés) mindig nagy vitákat szokott indítani a tudományos életben. A mai napig egyik leghosszabb ismert C-C kötést *orto*-karborán származékban sikerült előállítani a megfelelő szubsztituenssel szterikus és elektronikus hatások következtében.

Célom volt ennek a jelenségnek vizsgálata a klaszter többi (C-B, B-B) kötéseire. A munkámat DFT számításokkal végeztem, ami mellett sikerült a laboratóriumi munkába is bekapcsolódni.

Számításaim eredményeképp sikerült megjósolni, hogy a leghosszabb B-B kötések is két szomszédos bóratomon elektrondonorral való szubsztitúciójával lehet előállítani, különösképp anionos funkciós csoportokkal. Emellett a klaszter kötéseinek nyújthatóságára is általános trendeket sikerült felfedeznem.

A számításaim igazolására sikerült több vegyületet is előállítanom, azokból egykristály röntgendiffrakcióval kísérleti geometriai szerkezetet nyerni.

A „mentális ugrások” szerepe az NMR-spektroszkópia alapú kismolekulás szerkezetkutatásban

Weber Márton, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **ifj. Dr. Szántay Csaba** egyetemi magántanár
Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási Osztály

Konzulens: **Dr. Keglevich Péter** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék
Szigetvári Áron kutató fejlesztő
Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási Osztály

A tudományos állítások technikai korlátokból adódó bizonytalanságairól rendszerint beszámolnak a tudományos publikációk, viszont érdemtelenül kevés szó esik a kutatók által elkövethető gondolkodási hibákról és ezeknek pszichológiai vonatkozásairól. Ezek a tévedési lehetőségek a szerves részét képezik bármely természettudományos területnek, és többnyire az úgynevezett „mentális csapdákból” eredeztethetőek, illetve egy részük fakadhat szaktudásbeli hiányosságból is.

Ebben a dolgozatban az NMR-spektroszkópia alapú kismolekulás szerkezetmeghatározás példáján egy vázlatot kívánok nyújtani arról az igen komplex tanulási folyamatról, mely által bármely tudós szakértelme fejlődik. Ennek a fejlődésnek kulcselemei a „mentális ugrások”: azok a pillanatok, melyek során a kutató újradefiniálja saját szemléletét és megközelítését egy természettudományos probléma kapcsán. Ebben a kissé szokatlan dolgozatban három izgalmas NMR-alapú szerkezetfelderítési történetet mutatok be egy gyógyszeripari környezetben dolgozó és tanuló NMR-spektroszkópus tanulási folyamatának szempontjából.

Vatta- és grafit alapú szilárd fázisú extrakciós rendszerek fejlesztése és alkalmazása prosztatata- és emlőtumoros szövetek glükózaminoglikán tartalmának vizsgálatára

Fügedi Kata Dorina, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Tóth Gábor** tudományos munkatárs
Dr. Turiák Lilla tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI MS Proteomika Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Horváth Viola** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Napjaink legerősebb tumoros elváltozásai között szerepel a prosztaták és az emlők, így ezek molekuláris folyamatainak mélyebb megértése elengedhetetlen a hatékonyabb diagnosztikai eljárások kidolgozásához. A tumoros megbetegedések lefolyásában meghatározó molekulák a glükózaminoglikánok (GAG-ok), melyek ismétlődő diszacharid egységekből felépülő, lineáris, szulfatált poliszacharid láncok. Vizsgálatuk elterjedt módszere az enzimatiszti emésztés során keletkező diszacharid építőegységek HPLC-MS meghatározása. Az emésztés után elengedhetetlen a minták tisztítása, ez azonban a célvegyületek széles polaritási tartománya miatt számos kihívást tartogat. A szakirodalomban korábban nem volt példa a GAG-ok tisztítási módszereinek átfogó elemzésére.

Kutatómunkám során ezért célul tűztem ki egy olcsó és hatékony szilárd fázisú extrakciós (SPE) módszer fejlesztését kis mennyiségű biológiai mintákból kinyert heparán-szulfát (HS) és kondroitin-szulfát (CS) diszacharidok tisztítására. Ezután célom volt a fejlesztett módszert alkalmazva összehasonlítani prosztatata- és emlőrákos, valamint környező szövetek GAG összetételét.

Első lépésként **kifejlesztettem egy saját töltésű vatta-alapú HILIC szilárd fázisú extrakciós (SPE) módszert**. Optimaltam az alkalmazott állófázis típusát és mennyiségét, valamint a felviteli és elúciós oldószerek összetételét, mennyiségét és hőmérsékletét. Megállapítottam, a módszer kiválóan alkalmazható a polárisabb GAG diszacharidok tisztítására. Következő lépésben **kilenc grafit alapú SPE módszer** részletes vizsgálatát végeztem el és kimutattam, hogy ezen módszerek az apolárisabb GAG diszacharidok tisztítására alkalmasak. Mindezt figyelembe véve, **kifejlesztettem egy kombinált módszert** a két állófázis egymás utáni alkalmazásával, mely alkalmasnak bizonyult **GAG diszacharidok torzítatlan tisztítására kis mennyiségű komplex biológiai mintákból**.

Kutatómunkám második felében összehasonlítottam **jóindulatú prosztatata megnagyobbodásos, prosztatatarakos, emlőrákos és hozzá tartozó környező normál szöveti régiók CS, HS, valamint proteoglikán vázfehérje összetételét**. Megállapítottam, hogy mindkét szövettípus esetén **növekedés tapasztalható** a tumoros elváltozások kialakulásával a **HS és CS láncok összmennyiségében** egyaránt. A **HS szulfatációjának** mértéke mindkét szövet esetén **alacsonyabb** volt a tumoros régiókban, míg a **CS szulfatációja a prostataszövetekben alacsonyabb, az emlőszövetekben pedig magasabb** volt a tumoros régiókban a nem-tumoros szöveti részekhez képest. Emellett több azonos és eltérő irányú változás volt kimutatható a kitüntetett szulfatációs pozíciók betöltöttségében is.

A kifejlesztett módszerek segítségével kimutatott változások hozzájárulhatnak a tumoros elváltozások molekuláris folyamatainak megértéséhez, és nagy esetszámú validálásuk után hozzájárulhatnak újfajta diagnosztikai és kezelési módszerek fejlesztéséhez.

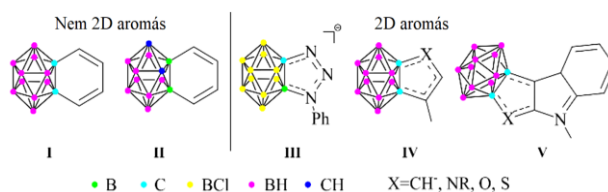
Konjugáció 3D és 2D aromás rendszerek közt: valóban léteznek? A karborán kapcsolt heterociklusok esete

Harcsa-Pintér Zsófia, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Buzsáki Dániel** tudományos munkatárs
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Az aromasság mint fogalom központi témája a kémiának. Az elmúlt években számos közlemény jelent meg különböző típusú aromás rendszerekről és azok lehetséges konjugációjáról. Munkám során karborán kapcsolt heterociklusok aromasságát vizsgáltam és bizonyítottam, hogy a korábbi elméletekkel ellentétben nagyon kismértékű konjugáció valósul meg a 2D és 3D aromás rendszerek közt.



Immobilizált antitestek vizsgálata Protein M és képkötő felületi plazmon-rezonancia alkalmazásával

Barna Sára, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Gyurcsányi E. Róbert** egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Bognár Zsófia** PhD-hallgató
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A Protein M egy univerzális antitestkötő fehérje, amely az antitest variábilis részéhez kapcsolódva képes megakadályozni az antitest-antigén komplex létrejöttét. [1] Ennek következtében alkalmas lehet általános reagensként antitest módosított felületek jellemzésére, illetve új kompetitív immunanalitikai eljárások kifejlesztésére is. A kutatómunka során célom a Protein M antitestkötő fehérje karakterizálása volt, nagy hangsúlyt fektetve a fehérje antitest-antigén kötést gátló hatására. A mérések során képkötő felületi plazmon rezonanciát (SPRi) alkalmaztam, amely módszer képes az antitest-antigén kölcsönhatások jelölésmentes, valós idejű és nagy áteresztőképességű nyomon követésére.

A vizsgálatokat fehérje antigének széles mérettartományában végeztem: NT-proBNP (8,5 kDa) < Spike Protein RBD (25 kDa) < cTnI (34,6 kDa) < CRP (125 kDa) < IgE (190 kDa) < SARS-CoV-2 VLP, többféle, az antigénekre specifikus antitestet felhasználva. A mérések során azt tapasztaltam, hogy az egyes antigének méretének növekedésével, a Protein M általi antigén kiszorítás mértéke is növekvő tendenciát mutat. A kisméretű (8-125 kDa) antigének esetén nem tapasztaltam szignifikáns különbséget az antigén kötődésének mértékében a Protein M-mel gátolt és a szabadon hagyott kötőhelyek között. Azonban a nagyobb méretű IgE-re specifikus antitest esetén a Protein M kötődése már több, mint 50%-kal csökkentette az antigén kötődését. A SARS-CoV-2 VLP vizsgálatoknál a Protein M-mel előzetesen blokkolt antitest a szabad kötési képesség kevesebb, mint 20 százalékának megkötésére volt alkalmas.

Ezek alapján feltételezhető, hogy a Protein M fehérje antigénkötés gátló hatása szterikus okokra vezethető vissza. Ennek bizonyítására NT-proBNP antigént biotiniláltam, majd sztreptavidinnel reagáltatva jelentősen megnöveltem a méretét. Az antigén a biotinilálás hatására nem veszítette el antitestkötő képességét, így meg tudtam határozni a megnövelt méretű antigénre is a szabad és blokkolt helyekhez való kötődés mértékét. A natív NT-proBNP-vel összehasonlítva az eredményeket látható, hogy a méretnövelés hatására a Protein M blokkoló hatása jelentősen megnövekedett. Ezzel sikerült bizonyítanom, hogy a Protein M fehérje az antigén-antitest komplex létrejöttét szterikus okok miatt gátolja.

1. RK Grover, X Zhu, T Nieusma, *et al.*, A structurally distinct human mycoplasma protein that generically blocks antigen-antibody union. *Science* **2014**, 343, 656-661.

Szénhidrátkeverékek vizsgálata közeli infravörös spektroszkópiával és sokváltozós adatelemzéssel

Gál Zalán, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Slezsák János** egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Dr. Gergely Szilveszter egyetemi docens

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A gyógyszer- és élelmiszeriparban gyakran van szükség nem csak tiszta komponensek, hanem különböző porkeverékek gyors, nagy áteresztőképességű vizsgálatára. A rezgési spektroszkópiai módszerek közül a közeli infravörös (near infrared, NIR) technika roncsolásmentesen képes nem csak kémiai, hanem egyes fizikai jellemzők meghatározására is. Kutatásom során különböző, eltérő fizikai és kémiai jellemzőkkel bíró szénhidrát alapú modellrendszereket vizsgálok NIR spektroszkópiával. Munkámban külön figyelmet szentelek a mintaelőkészítés mérési eredményeket befolyásoló aspektusának, nevezetesen az eltérő szemcseméret és a szétosztályozódás spektroszkópiai mérésekre gyakorolt hatásának. A vizsgált porkeverékek összeállításakor a céloom többek között az volt, hogy bennük az egyes monoszacharidok, illetve a belőlük felépülő diszacharidok arányát meg tudjam határozni az infravörös spektrumok alapján. A keverékekről az eltérő optikai rendszerű készülékkel felvett spektrumokat különböző spektrum-előkezelési és sokváltozós adatelemző módszerekkel értékelem ki. Céloom, hogy megtaláljam az alkalmazott készülékek és a kiértékelési módszerek olyan kombinációját, melyet a megfelelő spektrumszakaszokon és a megfelelő sorrendben alkalmazva a későbbiekben lehetővé válhat a vizsgált rendszerekhez hasonló porkeverékek NIR alapú minősítése akár kvalitatív, akár kvantitatív jellemzők alapján.

Trifoszfánligandumok koordinációs képességének vizsgálata komplexbépzési reakciókban

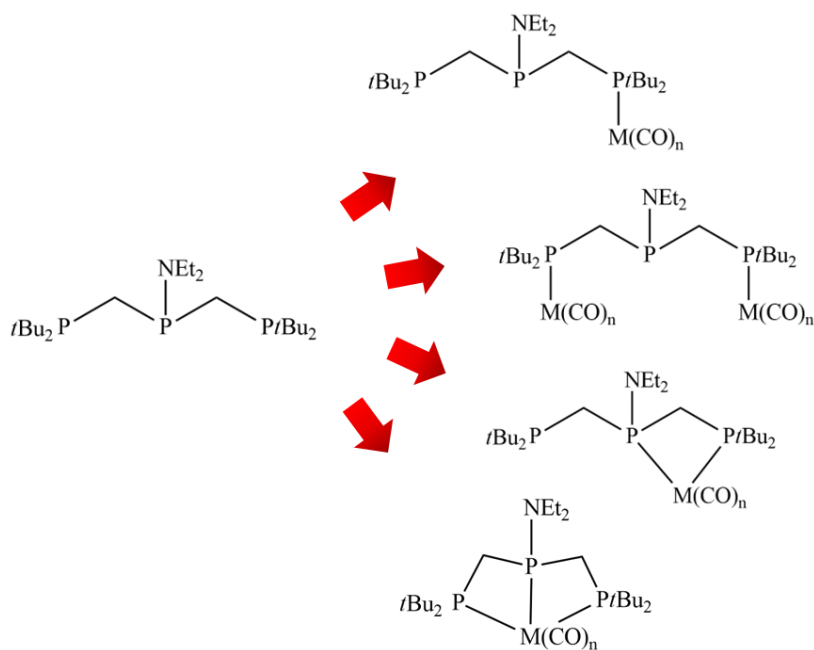
Gál Dalma, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kovács Ilona** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Konzulens: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A tercier foszfánligandumok (PR_3) jelentős szerepet játszanak az átmenetifém katalizált keresztkapcsolási reakciókban. Bár a foszfánok általában közvetlenül nem vesznek részt a reakciókban, de jelentősen befolyásolják a katalizátor központi fématomjának tulajdonságait. Koordinatív kötés kialakításának szempontjából σ -donorként és π -akceptorként viselkednek, így egy stabilabb kötést tudnak kialakítani a fémmel.

TDK-munkám során három foszforatomot tartalmazó $>\text{P}-\text{CH}_2-\text{P}(\text{NEt}_2)-\text{CH}_2-\text{P}<$ típusú trifoszfánligandum komplexképzési reakcióit tanulmányoztam. Először megvizsgáltam a különböző foszforatomok koordinációs képességeit, majd karbonil vegyületekkel, $\text{Cr}(\text{CO})_6$, $\text{Mo}(\text{CO})_6$, $\text{W}(\text{CO})_6$ és $\text{Fe}(\text{CO})_5$ reagáltattam a ligandumot. Arra kerestem a választ, hogy az ábrán szereplő lehetséges komplexek közül, melyek keletkezhetnek. A termékeket különböző spektroszkópiai módszerek, illetve egykristály röntgendiffrakciós mérések segítségével karakterizáltam.



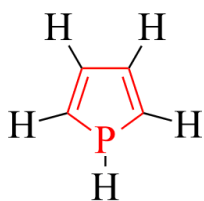
Foszfol vagy foszfetén? Melyik a megfelelő kanyar a potenciális energia felületen?

Kovács Máté Barnabás, II. évf. (MSc)

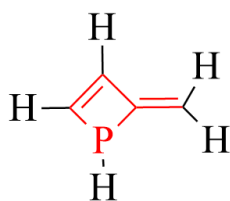
Témavezető: **Dr. Kelemen Zsolt** egyetemi adjunktus
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A foszfortartalmú heterociklusok régóta az érdeklődés központjában állnak, fontos felhasználási területük napjainkban az OLED-ek és a fotoelektronika. Emiatt fontos, hogy újabb és újabb ilyen vegyületeket szintetizáljunk és ezek fotofizikai tulajdonságait vizsgálatonak vessük alá.

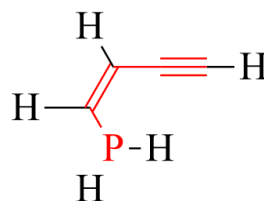
A Kasseli Egyetemen egy új szintézis módszerrel állítottak elő foszfor tartalmú heterociklusokat, azonban a reakcióban keletkező termékek körülményektől való függésére nem találtak egyértelmű magyarázatot. A számításhoz kémiai eszköztárával sikerült feltérképezni a mechanizmust és javaslatot is tudtunk tenni a reakciókörülmények megfelelő megválasztására, hogy a kívánt termékre tudják optimalizálni a reakciót. A végső gyűrűzáró lépésnél két izomer is keletkezhet, amit az *1. ábra* mutat be. A témából a Chemistry – A European Journal újságban jelent meg közleményünk, melyet volt lehetőségünk az újság borítóján is művészi módon megjeleníteni, ahol a mechanizmus vizsgálat fontosságára hívtuk fel a figyelmet, ezzel is mutatva jelentős hozzájárulásunkat a projekthez.



1H-Foszfol



Vinil-foszfetén



Allil-foszfán

1. ábra – Az 1H-foszfol, a Vinil-foszfetén és egy Allil-foszfán szerkezete, amelyek egymással konstitúciós izomeri viszonyban állnak

Kobalt-ionok szorpciós kinetikájának és diffúziójának vizsgálata nagyaktivitású radioaktív hulladék-tároló potenciális befogadókőzetén

Szabó Fruzsina, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Osán János** tudományos főmunkatárs
ELKH EK Sugárvédelmi és Környezetfizikai Laboratórium
Konzulensek: **Dr. Madarász János** egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Czömpöly Ottó PhD-hallgató
ELKH EK Sugárvédelmi és Környezetfizikai Laboratórium

Az agyagásványok fontos szerepet játszanak a nagyaktivitású hulladéktárolók gátrendszerében, hiszen fő összetevőként vannak jelen az agyagos befogadó kőzetekben. Jelen munka célja a természetes gátként szolgáló bodai agyagkő radionuklid-visszatartó képességének értékeléséhez kobre vonatkozó szorpciós és diffúziós tulajdonságok vizsgálata.

Kinetikai vizsgálatokat követően szorpciós izoterma felvételét végeztük porított, és előzetesen kondicionált vékonycsiszolat mintákon szintetikus pórusvíz felhasználásával. A közel azonos kötődési mechanizmus és a kötési helyek valószínű hasonlósága miatt a kobalt és nikkelt kationok szorpciós tulajdonságait kompetitív körülmények között is vizsgáltuk. A kísérleteket különböző koncentrációkon hajtottuk végre, mivel a kis mennyiségű kobalt meghatározása agyagos közegben mérés technikai nehézségeket hordoz magában. A kísérletek során a folyadékfázisban mérhető koncentrációkat ICP-OES-, TXRF- és IC-mérésekkel követtük, a szilárdfázisok vizsgálatát μ -XRF-mérésekkel végeztük.

A BAF-furatokon végzett szorpciós izoterma nagyon hasonló az irodalomban található egyéb agyagos formációkon végzett kísérletek eredményeihez. A kobalt nagy vastartalom melletti XRF-mérésénél adódó, korábban megfigyelt nehézségeket ki tudtuk küszöbölni. Szinkrotronos méréssel bizonyítani tudtuk az XRF-mérések PyMCA programmal történő kiértékelésének helyességét. A vékonycsiszolatokon végzett μ -XRF-méréseket kiértékelve korrelációvizsgálattal megállapítható, hogy a kobalt elsősorban a jellemző agyagásványokkal megegyező kémiai összetételű helyekre kötődik. Beigazolódott a kobalt és nikkelt hasonló szorpciós tulajdonságai, nagyon szép korreláció figyelhető meg mikroszkopikus mérések kiértékelése során. XANES-mérésekkel vizsgált csiszolatok spektrumai alapján megállapítható volt, hogy nem történt kicsapódás a folyadékfázisból, illetve a kobalt oxidációs állapotában nem történt szignifikáns változás a szorpció során.

Az áttörési geometriában végzett diffúziós kísérleteknél a kőzetben a kobalt jellegzetes lefutású profilja mérhető. A folyadékfázisok kobalt koncentrációjának mérési adataiból kiszámítottam a kobalt effektív és látszólagos diffúziós együtthatóját, illetve az áttörési időt is meghatároztam.

Famotidin heterogén kristályosítása segédanyagokkal

Farkas Erik, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Pataki Hajnalka** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszerhatóanyagok készítménytechnológiai segédanyagok jelenlétében végzett heterogén kristályosítása ígéretes kutatási irány a hatóanyag morfológiai tulajdonságainak javításában. A segédanyagok egyaránt befolyásolhatják a kristályos termék szemcseméretet, és szemcseméreteloszlását, kristályhabitusát, egyes esetekben adott kristályszerkezet kialakulását indukálhatják. Ilyen módon meghatározhatják a hatóanyagok oldódási sebességét és gördülékenységét, mindezzel megteremthetik a kíméletesebb és gazdaságosabb formulálási eljárás kialakítását. Ennek értelmében kutatómunkám célja a famotidin modellhatóanyag esetében olyan polimer segédanyag(ok) megtalálása és hatásainak részletes vizsgálata, mellyel a hatóanyag fizikai tulajdonságai (kristályalak, gördülékenység) nagymértékben javíthatóak.

A vizsgálandó segédanyagok körét a hatóanyaggal kialakítható másodlagos kölcsönhatások lehetőségével, valamint az oldhatóságok feltérképezésével határoztam meg. Így az előkísérletek során több segédanyaggal szűrővizsgálatot végeztem, majd a termelés adatok és a termékek mikroszkópos vizsgálatával (aggregátumképződés) a segédanyagok körét két polimerre, a mikrokristályos cellulózra (MCC) és a nátrium-karboxi-metil-cellulóz-mikrokristályos cellulózra (NaCMC-MCC) szűkítettem le. Itt a hatóanyag segédanyag felületére történő kristályosodását, azaz gördülékenység javító aggregátumok képződését tapasztaltam. A folyamatirányított kristályosítóban elvégzett méretnövelési lépésben a kedvezőbb NaCMC-MCC segédanyag hatását egy 3 faktoros kísérlettervvel tanulmányoztam. Vizsgáltam a hűtési sebesség, a segédanyag mennyiség, és az utókevertetési idő hatását a termelésre, kristáyméretre, habitusra és adagolhatóságra. A kapott termelés értékek alapján a polimer gócképző hatása miatt, gyors hűtési sebességnél jelentős, mintegy 30%-os termelésnövekedést tapasztaltam a polimer nélküli referencia kísérlethez képest. A termékek gördülékenységénél a referencia minta kedvező kategóriájából a termék polimerrel több esetben a *jó* és *kiváló* gördülékenységi kategóriába esett.

Összeségében megállapítható, hogy segédanyag segítségével sikerült a hatóanyag ugyanazon kristályformáját jó termeléssel, kiváló porreológiai tulajdonságokkal kristályosítani.

Nehezebb pniktogén elemek kelátkomplexei: szerkezet, tautomeria, redoxi és optikai tulajdonságok

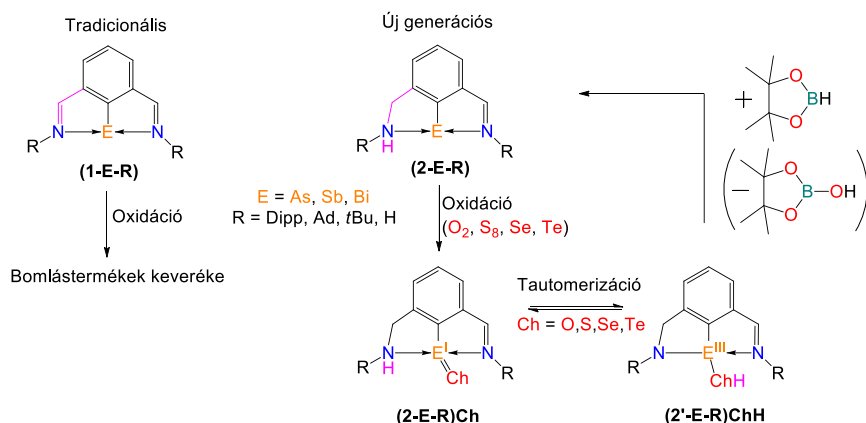
Kertész Erik, II. évf. (MSc)

Témavezető: Dr. Benkő Zoltán egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A fémorganikus és koordinációs kémia területén az elmúlt pár évtizedben élénk érdeklődés övezi a pniktogén csoportot (15. csoport), sokoldalú koordinációs és katalitikus tulajdonságaik miatt. Közel fél évszázada a nemesfém katalízis forradalmasította a kémiai szintéziseket. Azonban ezen, főleg d-mezőbeli fémek iránti hatalmas igény az évtizedek során jelentősen kimerítette a gazdaságosan kitermelhető lelőhelyeket, ami jelentős drágulásukhoz vezetett. Napjainkban a nehezebb pniktogének (As, Sb, Bi) virágkora alakul ki köszönhetően potens katalitikus tulajdonságaiknak, mely a főcsoportban igen ritkának tekinthető.

A főcsoportbeli elemek fémorganikus és komplexkémiajának egyik újabb, ígéretes kutatási területe a pniktogén elemeket formálisan +I-es oxidációs állapotban tartalmazó vegyületek, a Lewis-bázisokkal stabilizált pniktinidének (R–E, ahol E = P, As, Sb vagy Bi) tanulmányozása. 2010-ben Libor Dostál és munkatársainak sikerült N,C,N-ligandum által stabilizált nehezebb pniktinidén kelátokat előállítani.[1] Ezen kutatócsoporttal együttműködve újonnan szintetizált hagyományos és új generációs kelát-komplexek szerkezetét és tulajdonságait vizsgáltam. (1. ábra)

Az (1) és (2) típusú vegyületekben a pniktogén centrumot eltérő kölcsönhatások stabilizálják, így a komplexek szerkezete és reaktivitása is jelentősen eltér. Ezen vegyületek oxidálószerekkel való reakcióját követően eddig precedens nélküli tautomerizációt figyeltek meg. A reakció első lépésében a E^I centrum E^{III}-má oxidálódik, míg megfelelő redukáló ágenssel (például pinakolborán), a pniktogén centrum visszaredukálható. A szerkezet és tautomerizáció vizsgálata mellett, a vegyületek optikai tulajdonságainak megértése céljából TD-DFT számításokat végeztem.[2]



1. ábra. A vizsgáltat tárgyát képező kelát-komplexek

[1] P. Simon, F. de Proft, R. Jambor, A. Růžicka, L. Dostál, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* (2010) 49(32): 5468-5471. <https://doi.org/10.1002/anie.201002209>

[2] J. Zechovský, E. Kertész, V. Kremláček, M. Hejda, T. Mikysek, M. Erben, A. Růžicka, R. Jambor, Z. Benkő, L. Dostál, *Organometallics* (2022) 41(18): 2535-2550. <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.2c00236>

Nyújtott hatóanyagleadású tabletták *in vitro* kioldódásbecslése Raman-térképezéssel

Zsiros Boldizsár, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Farkas Attila** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Galata Dorián László** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszerkönyvekben előírt egyik legfontosabb minőségellenőrző analitikai teszt az *in vitro* kioldódásvizsgálat. A gyógyszeriparban terjedő folyamatos technológiájú gyártáshoz nehézkesen igazítható kioldódásmérés kiváltására alkalmas analitikai módszer kifejlesztésére törekedtünk, mellyel a kioldódásprofil a gyártás közben, at-line/in-line meghatározható.

TDK munkámban először alkalmaztunk Raman-térképezést az *in vitro* kioldódásprofil roncsolásmentes becslésére nyújtott hatóanyagleadású tablettáknál. A Raman-térkép tartalmazza a tabletták kioldódását meghatározó kémiai információkat. Megfelelő adatelemzési technikákkal ezek az információk számszerűsítve kinyerhetők a kémiai térképből.

Kísérleteink során a kioldódásprofil módosításához különböző mennyiségű és szemcseméretű hidroxipropil-metilcellulóz (HPMC) mátrixképzőt használtam, a nyújtott hatóanyagleadású tabletták készítésére. Felvettem ezen tabletták Raman-térképeit, majd meghatároztam a HPMC-koncentrációját a térképek egyes pontjaiban.

Ezután térképeket kétféle, a koncentrációk diszkretizálásán és waveleteken alapuló módszerrel hisztogramokká alakítottuk, melyeken főkomponens-analízist (PCA) végeztünk. Úgy találtuk, hogy az első két főkomponens-együttható értéke a HPMC koncentrációjával, illetve szemcseméretével függ össze.

Az egyes tabletták két főkomponens-együttható értékét bemeneti értéként használtuk mesterséges neurális hálók (ANN) tanításához, melyek kielégítő pontossággal jósolták meg a vizsgált tabletták *in vitro* kioldódásgörbéit.

A kísérleteinkben használt módszerek lefektetik az alapjait egy jóval nagyobb volumenű kioldódásbecslésnek, amint a Raman-térképezés gyorsan fejlődő technológiája lehetővé teszi minták sokaságának gyors elemzését, a technológia alkalmazhatóvá válhat folyamatos üzemben gyártott gyógyszerek gyorsabb at-line/in-line minőségellenőrzésére.

Zeolitszerű imidazolát vázszerkezetek reakció-diffúziós jelenségei

Farkas Szabolcs, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Lagzi István László** egyetemi docens
BME Fizika Tanszék

A legegyszerűbb reakció-diffúziós rendszerben a reagensek térben szeparáltak. Az egyik reagens egy gélben van elosztatva, míg a másik kívülről diffundál a gélbe. Az ilyen rendszerekben a reakció és diffúzió csatolása speciális lehetőséget nyújt bizonyos részecskék és kristályok szintézisére.

Reakció-diffúziós reakciók egy több mint száz éve ismert jelensége a Liesegang-jelenség, amely során a kísérleti elrendezéstől függően periodikus sávok, illetve gyűrűk képződnek a gélben, amelyeket rendszerint más-más méretű, esetleg morfológiájú részecskék alkotnak. A Liesegang-jelenség klasszikusan csapadékos reakcióra jellemző, viszont nemrég megfigyelték a jelenséget a zeolitszerű imidazolát vázszerkezet-8 (ZIF-8) esetében is, amely a szerves-fémkoordinációs vázszerkezetek (MOF) egy családjának tagja. A ZIF vegyületcsalád egyedülálló tulajdonságai miatt (nagy fajlagos felület, stabilitás) nagy érdeklődésnek örvend és ezért egy újfajta szintézismódszer fontos mérföldkő lehet a kutatási területen.

Munkám során a ZIF-8 esetén megfigyelt jelenség kibővítésével foglalkoztam, más átmeneti fémionok és a 2-metil-imidazol (2-met) reakciójának vizsgálatával egy klasszikus Liesegang kísérleti elrendezésében. A fémionok agarózgélben voltak elosztatva, a 2-met kívülről diffundált. Számos esetben periodikus csapadékképződés volt megfigyelhető. Több paraméternek (reagens- és géllkoncentráció, oldószerösszetétel) vizsgáltam a jelenségre gyakorolt hatását. Sikeresen állítottam elő korábban nem dokumentált periodikus sávszerkezetet és különleges gömb morfológiájú sávokat ZIF-67 esetén.

Eredményeim rávilágítanak a Liesegang-jelenség univerzális mivoltára és a jelenség még nem felfedezett részleteire, továbbá a ZIF-ek és ZIF-analógok egy újfajta szintézis módszerében rejlő lehetőségekre.

A víz szerepe a fémklaszter-katalizált szén-dioxid elektroredukcióban - Oldószer, protonforrás vagy reakciópartner?

Haffner Ádám Balázs, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Höltszl Tibor** tudományos főmunkatárs, c. egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
ELKH–BME Számítógépvezérelt Kémia Kutatócsoport

Munkámban a fémklaszter által katalizált szén-dioxid elektroredukciós folyamatok általános közegének számító víz szerepét értelmeztem kvantumkémiai számítógépes modellezés segítségével. Vizsgáltam az általánosan elterjedt számításos hidrogénelektrod-modell szisztematikus alkalmazhatóságát a számítások során, illetve, hogy mennyiben befolyásolja a kapott eredményeket az implicit oldószermodell alkalmazásával összehasonlítva az expliciten szimulált víz. Vizsgáltam továbbá, hogy az oldószer szerepén túl van-e a jelenlévő víznek esetlegesen reagens szerepe is a folyamatban, befolyásolja-e bármilyen mértékben a redukció lefolyását, a folyamat mechanizmusát vagy annak termodinamikai, illetve kinetikai paramétereit.

A számításaim azt mutatták, hogy a víz nem csupán oldószerként, illetve protonforrásként van jelen a redukció során, hanem szerepe összetett, így a szakirodalomban gyakran alkalmazott implicit vízmodellekkel kapott eredményekhez képest más mechanizmussal játszódik le a reakció. Az alkalmazott potenciál függvényében a víz reagál a katalizátor felületén, ezzel megváltoztatja a klaszter tulajdonképpeni aktív centrumát, mely tehát nem maga a csupasz rézklaszter, hanem a felületéhez kötött vizeket, valamint a fém oxidációját is figyelembe kell venni. Az érkező szén-dioxidot már az adszorpció során redukálja a katalizátor felületéhez kötött víz, ezt követően a klaszter felületéhez kötött vízmolekulák reagálnak tovább, miközben hidrogéngáz fejlődik. A molekuladinamikai vizsgálatok rámutattak továbbá arra, hogy akár egy vízmolekula explicit szimulációja esetén is más reakciók játszódnak le és más termékekhez jutunk, mint a gázfázisban vagy implicit oldószerben szimulált folyamatok esetén. A pontos számításokhoz tehát célravezető legalább az első oldószerhéjat expliciten szimulálni, hiszen sok esetben az nem csupán kvantitatív, de kvalitatív módon is megváltoztatja a reakcióút vonalakat lefutását. Munkám arra is rámutat, hogy pontosan milyen esetekben szükséges explicit vízzel számolni és milyen következtetések vonhatóak le implicit oldószerrel végzett számításokból.

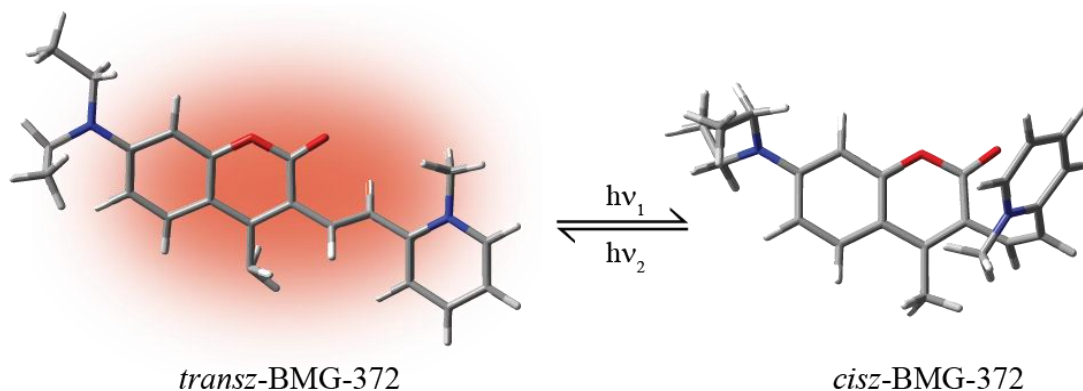
Molekuláris fotokapcsoló működési mechanizmusa

Kiss Etelka, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kubinyi Miklós** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Dr. Hessz Dóra** tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A fotokróm vegyületek különleges tulajdonsága, hogy adott hullámhosszú fénnel besugározva megváltozik a molekuláris szerkezetük. A reakció reverzibilis, a visszaalakulás történhet más hullámhosszú fény hatására vagy termikus úton. A fotokapcsolók olyan speciális fotokróm vegyületek, melyekre nem jellemző a termikus visszaalakulás, szerkezetüket tartósan megőrzik. Optikai szenzorokban és memóriákban, valamint gyógyszermolekulák célba juttatásában való alkalmazásuk új dimenziókat nyit az anyagtudomány és orvostudomány számára.

Kutatásaimban a 7-dietilamino-4-metil-kumarin-3-il-vinil-metilpiridin-1-ium-jodid (BMG-372) fotokapcsoló molekulát vizsgáltam, amely zöld fény hatására a stabilabb transz-formából citromsárga cisz-formává alakul át. UV-sugárzás hatására visszaalakul a narancssárga transz-formává. A BMG-372 új vegyület, a Természettudományi Kutatóközpontban állították elő.



Mivel a két forma színe eltérő, a fotoizomerizációs reakció mindkét irányba követhető UV-Vis abszorpciós spektroszkópia segítségével. A fluoreszcencia kísérletek azt mutatták, hogy a transz forma erősen emittál, ezzel szemben a cisz forma emissziója nem mérhető.

A gerjesztett állapotban végbemenő folyamatokat kémiai aktinometriás és fluoreszcencia kvantumhatásfok méréssel vizsgáltam. A kísérleti eredményeket összevettem a Tanszéken végzett kvantumkémiai számítás eredményeivel, mely igazolta a termikus visszaalakulás kis valószínűségét. A két forma szerkezetét optikai és NMR spektroszkópai módszerrel igazoltam.

Az adhéziót befolyásoló tényezők poli(vinil-alkohol) hidrogél felszínén

Szayly Kata, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Gyarmati Benjámín Sándor** egyetemi docens
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Stankovits József Gergely** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A szisztémás és helyi gyógyszeradagolás egyik népszerű módja a mukoadhézió tablettákkal és tapasztokkal különböző nyálkahártyákon keresztül megvalósuló hatóanyag leadás. A mukoadhézió során lejátszódó folyamatok tanulmányozása és megértése ezért igen fontos, ugyanakkor a biológiai mintákon végzett vizsgálatok a minták természetes diverzitása miatt nehézkes. Több kutatás is arra az eredményre jutott, hogy szintetikus nyálkahártya-analógok segítségével a mukoadhézió folyamata jól modellezhető lehet. A szintetikus analógok számottevő előnye a biológiai mintákhoz képest a könnyebb kezelhetőség és a jobb reprodukálhatóság. A polimer hidrogélek ígéretes nyálkahártya-analógok, mely elsősorban a természetes nyálkahártyához hasonlóan viszkoelasztikus sajátosságuknak köszönhető. Ezen rendszerek nyálkahártya-analóggént történő alkalmazásához nélkülözhetetlen az adhéziós viselkedésük minél átfogóbb megismerése, mely a szakirodalomban még csak kevés vizsgált terület.

A Lágymű Anyagok Kutatócsoport mesterséges nyálkahártya-analóg hidrogéleket fejlesztett ki az elmúlt években a mukoadhézió reprodukálható modellezésére. A témához kapcsolódóan saját kutatómunkám lényegi része poli(vinil-alkohol) (PVA) hidrogélek felszínén szilárd polimer tabletták tapadásának jellemzése, valamint a tapadást befolyásoló tényezők felderítése. A mérésekhez fagyasztás-olvasztásos módszerrel fizikailag térhálósított PVA géleket állítottam elő. Ezek a hidrogélek általam préselt polimer referencia tablettákkal egytengelyű nyúlással mértem az adhéziós munkát és az adhéziós erőt. Vizsgáltam milyen kapcsolat áll fenn az általam előállított hidrogélek adhéziós és reológiai tulajdonságai között, valamint, hogy a deformációsebesség változtatásának milyen hatása van a mért erőre és munkára. A hidrogélek viszkoelasztikus tulajdonságait kétféle módon, a polimer koncentráció, valamint a fagyasztás-olvasztás ciklusok számának változtatásával szabályoztam. Az elkészített hidrogéleket oszcillációs reológiai vizsgálattal és szakítószilárdságuk mérésével jellemeztem. A lágymű hidrogélek szakítószilárdságának méréséhez piskóta alakú próbatesteket öntöttem és egyedi befogási módszert dolgoztam ki. A hidrogélek merevségének és a tabletták típusának függvényében változott a mért adhéziós munka és erő, valamint a tönkremenetel típusa. A lágymű hidrogélek esetében a tabletták adhéziós elválása helyett a gél elszakadását, azaz kohezív tönkremenetelét tapasztaltam. Az adhéziós vizsgálatból számolt szakítószilárdság jól korrelált a piskóta alakú próbatestek szakítószilárdságával. A gélek merevségének növekedésével az adhéziós elválás volt jellemző és mind az adhéziós munka, mind az adhéziós erő maximumos görbe szerint változott.

A bemutatott kutatás a BME-EGA-02 számú projekt részeként az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatással, a TKP2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg.

Kationos tenzidek mint potenciális korróziós inhibitorok kapszulázása mezopórusos szilikarétegekbe

Titkó Simon, VII. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi tanár
BME VBK Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Márton Péter** PhD-hallgató
BME VBK Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Fodor Bálint applikációs csoportvezető
Semilab Félvezető Fizikai Laboratórium Zrt.

A korrózió elleni védelem új lehetőségét biztosíthatják az öngyógyító bevonatok, melyek sérülésük esetén is képesek ellátni funkciójukat. Kutatómunkám célkitűzése olyan pórusos, amorf szilícium-dioxid (szilika) alapú nanobevonatok fejlesztése volt cinkhordozókon, amelyek potenciálisan öngyógyító hatással rendelkeznek. A bevonatok öngyógyuló hatását kationos felületaktív anyag (CTAB) pórusrendszerben való kapszulázásával kívántam elérni, amely a bevonat sérülése esetén kiáramlik a pórusok belsejéből, és adszorbeálódik a sérülés következtében felszínre kerülő fém felületén, továbbra is védve azt a korróziótól. Az idő előtti kiáramlást a bevonatok hidrofobizálásával értem el.

A bevonatok szerkezetét, vastagságát, valamint a pórusokban csapdázódott kationos modellanyag mennyiségét vékonyrétegoptikai (optikai spektroszkópiai és ellipszometriai) módszerekkel tanulmányoztam. Felületét vízperemszögekkel, korrózióvédő hatását pedig polarizációs elektrokémiai tesztekkel jellemeztem.

Megállapítottam, hogy a mintegy 150 nm vastag, 40%-os porozitású bevonatok kb. 65-70%-a tölthető fel az inhibitormolekulákat modellező CTAB-val. A CTAB-val feltöltött és hidrofobizált rétegek korrózióvédő hatását jellemző korróziós áramsűrűség nagyságrenddel volt kisebb, mint amelyet a bevonat nélküli Zn esetén határoztam meg. Az elektrokémiai tesztek elvégzése megkarcolt bevonatokon is, melynek hatására romlott ugyan a korrózió elleni védelem, de bebizonyosodott, hogy a vizsgálati modell jó kiindulópont a munka továbbfejlesztéséhez.

Electrospinning az enzimhelyettesítéses terápiában: α -Amiláz csapdázása polimer nanoszálakba

Molnár Alexandra, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Balogh Diána** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék,
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Tóth Gergő Dániel** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A lizoszómális tárolási zavarok olyan örökletes betegségek, melyek következtében a szervezetben enzimhiányos állapot alakul ki. Ilyen típusú betegségek az összefoglalónéven krónikus hasnyálmirigy gyulladásként nevezett eltérő eredetű kórok. Amennyiben az ilyen betegségekben szenvedők nem kapnak megfelelő kezelést, az különböző súlyosságú tünetekhez vezethet, végstádiumban hasnyálmirigyrákhoz.

Az ilyen enzimhiányos állapotok kezelésére alkalmasak az enzimhelyettesítő terápiák (ERT), amelyek során külső forrásból származó enzimeket juttatnak a páciens szervezetébe. Krónikus hasnyálmirigy gyulladás esetében kombinált készítményeket alkalmaznak, melyek eltérő mennyiségekben lipázt, proteázt és amilázt tartalmaznak. Az enzimkészítmények fejlesztése során kiemelkedően fontos, hogy a formuláció során az enzim megőrizze katalitikus aktivitását, valamint, hogy ez az aktivitás a lehető legnagyobb mértékben hasznosuljon a terápia célterületén. Ezért nélkülözhetetlen a formuláció gondos megtervezése és optimalizálása, valamint fontos, hogy olyan analitikai eljárással rendelkezünk, amely ezeket a paramétereket megbízhatóan és gyorsan tudja vizsgálni.

Kutatómunkánk célja egy amiláz tartalmú nanoszálak preformuláció kifejlesztése volt, mely a jövőben alternatívaként szolgálhat a krónikus hasnyálmirigy gyulladás kezelését szolgáló készítmény kifejlesztéséhez. Célunk volt továbbá egy olyan analitikai módszer létrehozása, amely a készítmény enzimaktivitásának meghatározására alkalmas. Az enzimformula elkészítéséhez az amilázt elektrosztatikus szálképzéssel készített poli(vinil-alkohol) (PVA) és poli(vinil-pirrolidon) (PVP) nanoszálakba csapdáztuk.

Töltések és a dópolóatomok szerepe a rézklasztereken történő CO₂ redukcióra

Szalay Máté, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Höltzl Tibor** c. egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

A közelmúltban a megszámlálható számú fématómból felépülő ún. fémklaszterek a nanotudomány egyik legérdekesebb és legígéretesebb anyagaivá váltak, mert fizikai és kémiai tulajdonságaik jelentősen eltérnek az azonos atomokból álló tömbi anyagokétól. Az atomok kis száma miatt a fémklaszterek diszkrét energiaszintekkel rendelkeznek, így tulajdonságaik erősen méret-, töltés- és összetétel-függők, hiszen ezek kis mértékű változtatása is jelentősen befolyásolja az elektronszerkezetüket. Kémiai tulajdonságuk könnyű hangolhatósága miatt igen ígéretes katalizátorok lehetnek, melyek nemcsak számos, az iparban jelenleg is alkalmazott reakciót tehetnek hatékonyabbá, de akár a gazdaságos szén-dioxid redukció megvalósításához is hozzájárulhatnak. Egy közelmúltban megjelent publikáció szerint a rézklaszterek jól katalizálják a szén-dioxid termikus hidrogénezését [1], azonban az azóta folyó intenzív kutatások ellenére a reakció részletes mechanizmusa nem ismert.

Korábbi munkám során felderítettem a CO₂ gázfázisú Cu₄ klaszter által termikusan katalizált hidrogénezés reakciómechanizmusát és arra a következtetésre jutottam, hogy önmagában ez a klaszter nem eléggé hatékony katalizátor [2]. Azonban a néhány atomból álló klaszterek esetében egy atom kicserélésével (ún. dópolással), illetve töltésének megváltoztatásával, a rendszer elektronszerkezete erősen megváltozik, így megfelelő dópolóatom és töltés megválasztásával a katalitikus hatás is javítható. Ezért különböző átmeneti fémekkel dópolt [3], illetve különböző töltésű [4,5] rézklaszter alapú rendszereken végbemenő CO₂ redukciós reakcióját tanulmányoztam sűrűség funkcionál elméleten alapuló számításokkal, továbbá a töltés vizsgálatakor a lehetséges intermedierek IR spektrumát is összevettem dr. Joost Bakker (Radboudi Egyetem) kutatócsoportjával való együttműködésből származó kísérleti eredményekkel is. A számításokból megállapítható, hogy az egyes elektronszerkezeti módosítások hogyan és miért gátolják, vagy segítik elő a CO₂ redukcióját.

Az elektronszerkezet és a katalitikus hatás összefüggésének megértésével további információkat szerezhetünk, annak érdekében, hogy egy aktív és gazdaságos katalizátort tervezhessünk.

Hivatkozások:

1. C. Liu, B. Yang, E. Tyo, S. Seifert, J. DeBartolo, B. von Issendorf, P. Zapol, S. Vajda, L. A. Curtiss JACS. 2015, 137, 27, 8676–8679
2. M. Szalay, Szén-dioxid redukció reakciómechanizmusának felderítése Cu₄ klaszteren, BME-VBK TDK, Analitikai és Fizikai Kémia szekció, 2019
3. M. Szalay, D. Buzsáki, J. Barabás, E. Faragó, E. Janssens, L. Nyulászi, & T. Höltzl, 2021, 23(38), 21738–21747.
4. O. V. Lushchikova, M. Szalay, H. Tahmasbi, L. B. Juurlink, J. Meyer, T. Höltzl, & J. M. Bakker, Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, 23(47), 26661–26673.
5. O. V. Lushchikova, M. Szalay, T. Höltzl, & J. M. Bakker, Tuning the degree of CO₂ activation by carbon doping Cu_n⁺ (n=3–10) clusters: an IR spectroscopic study, Faraday Discussions, 2022.

Hatóanyag-leadás vizsgálata poliszukcinimid- és poli(vinil-pirrolidon)- alapú szálás mátrixokból

Mihalovics Bence, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Szilágyi András** egyetemi docens

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulens: **Tóth Gergő Dániel** PhD-hallgató

BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Az oldószeres elektrosztatikus szálképzés egy korszerű technológia polimerek feldolgozására. Az előállított polimer mátrixok nagy fajlagos felülettel rendelkeznek, így ideális hordozói lehetnek gyógyszer-hatóanyagoknak. A gyógyszerkészítmények gyártásának egyik fontos irányzata az amorf szilárd diszperziók előállítása. Az elektrosztatikus szálképzéssel előállított polimer mátrixok stabilizálhatják a hatóanyagot, ami a szokásos tárolási körülmények (5-25 °C) között instabil molekulák esetén fontos. A polimer tulajdonságaitól függően beállítható a hatóanyag-kioldódás kinetikája, ami pontos dózírozást tesz lehetővé.

A rifampicin egy instabil antibiotikum, amely már a levegő páratartalmát megkötve is képes hidrolizálni. A szem bakteriális megbetegedéseinek kezelésére használt szemcseppekben sem stabil a rifampicin, ezért felbontás után kevesebb, mint egy hétig használható csupán a készítmény. Ennek a problémának a megoldása lehet a rifampicint tartalmazó szilárd diszperzió készítése. Ez két úton valósítható meg. Előállíthatunk, gyorsan oldódó rendszereket, amikből a beteg saját maga képes elkészíteni a gyógyszert (rekombinációs szemcseppek). Vagy elnyújtott hatóanyag-leadású mátrixokat készítünk, melyeket szemészeti inzertekként használva elkerülhetjük a szemcseppek által okozott problémákat.

Munkám során poliszukcinimid és poli(vinil-pirrolidon) oldószeres elektrosztatikus szálképzését vizsgáltam különböző polimer arányok mellett. A két polimer vízben való oldhatósága eltér, ezért a keverékekből készült mátrixuk hatóanyag-leadó rendszerként használhatók (a hatóanyag-kioldódás profilja szabályozható). A poliszukcinimid kis molekulatömege miatt nehezen szálképezhető, ezért vizsgáltam a nagy molekulatömegű poli(vinil-pirrolidon) hatását a szálképezhetőségre. A szálképzéssel előállított mátrixok morfológiáját pásztázó elektronmikroszkópiával (SEM), hatóanyag-kioldódásukat UV-Vis spektrofotometriával vizsgáltam. Az eredményeket statisztikai módszerekkel is értékeltem, mivel a gyógyszerkészítmények minősítésénél fontos, hogy a lehető legjobban kizárjuk a szubjektivitást. Az analízis során a hatóanyag-leadó rendszerben a hatóanyag-eloszlás homogenitásának vizsgálatára helyeztem a fókuszot, mivel ez nagyban meghatározza az eredmények megbízhatóságát és a készítmény későbbi alkalmazhatóságát.

A bemutatott kutatás a BME-NVA-02 számú projekt részeként az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatással, a TKP2021 pályázati program finanszírozásában valósult meg.

Folyadékelegyek nyomás–hőmérséklet–sűrűség–összetétel adatainak meghatározására alkalmas automatizált mérőberendezés fejlesztése

Varga Csaba, II. évf. (MSc)

Témavezető: Dr. Kőrösi Márton egyetemi adjunktus

BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A szuperkritikus fluidumok, főként a szén-dioxid, ipari léptékben is felhasznált oldószerek. A szén-dioxid apoláris tulajdonságából eredő oldóképesség-beli korlátait jellemzően néhány százalékban hozzáadagolt egy, de egyes feladatoknál két segédoldószerral hidalják át. A Kutatócsoport korábbi kutatásai során több, szén-dioxidból és két szerves oldószerből álló terner rendszer fázisegyensúlyait vizsgálta látóüveges cellában. Térfogat- és nyomásváltoztatás segítségével vizsgálták ismert összetételű elegyek opálosodási és kitisztulási pontjait, amely munkába én is bekapcsolódtam. Az említett mérési módszer azonban korlátozottan alkalmas folyadékelegyek vizsgálatára. A légköri nyomáson és szobahőmérsékleten folyadék halmazállapotú elegyek kompresszibilitása a szén-dioxidot tartalmazó rendszerekénél lényegesen kisebb, rendkívül kicsi térfogat-változtatási is rendkívül nagy eltérést okozhat a nyomásban.

Kutatómunkám célja egy, szerves folyadékelegyek vizsgálatára alkalmas automatizált berendezés kialakítása. Ehhez laboratóriumi autoklávban homogén folyadékfázisú tiszta oldószerekkel és ismert összetételű elegyekkel végeztem izochor méréseket. A készülék fokozatos, lépcsőzetes fűtése során a hőmérséklet- és nyomásadatokat számítógép rögzíti. Elvégeztem a nyomás- és hőmérséklet távadók kalibrációját, valamint a berendezés izochor nyomás-hőmérséklet adatsorok rögzítésére való alkalmasságának igazolásához tiszta oldószerek (ciklohexán, etanol) izochor viselkedését vizsgáltam. Az izoterm mérési szakaszok nyomás-hőmérséklet adatainak ingadozását nagy mennyiségű (több száz) adatpár átlagolásával küszöböltem ki. A módszerfejlesztés jelen szakaszában a tiszta komponensek mérései kielégítő pontossággal adják vissza az irodalmi izochor vonalakat. A nyomástartó edény hőmérséklet- és nyomásfüggő térfogatkalibrációja után az aceton – 2-propanol elegyen vizsgáltam a módszer alkalmazhatóságát oldószerkelegyek esetén.

Az elegy izochor vonalait három különböző összetétel mellett rögzítettem, kb. 30 °C- 50 °C hőmérséklettartományban. Az elegy komponenseinek az egyes izoterm mérési lépcsőkhöz tartozó nyomáson és hőmérsékleten érvényes sűrűségét a nemzetközi irodalomban leírt modellek alapján számítottam. Az egyes komponensek autoklávba mért tömege, az említett sűrűségek, illetve a nyomástartó edény térfogatának ismeretében becsülhető az elegyedést emelt nyomáson kísérő moláris térfogatváltozás. Az aceton – 2-propanol elegyen az elegyedési móltérfogat-változás a hőmérséklettől (és a nyomástól) nem mutatott éles függést, a mérések alapján számított értékek hasonlóak a légköri nyomáson leírt elegyedési móltérfogat-változásokhoz.

Fényáteresztést növelő, fotokatalitikus TiO₂-bevonatok előállítása szol-gél eljárással

Bors Adrienn Márta, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Hórvölgyi Zoltán** egyetemi tanár
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Konzulensek: **Márton Péter** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Sándor Bálint PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Munkám célja olyan mezopórusos titán-dioxid bevonatok előállítása volt szol-gél eljárással, amelyek mellett, hogy fotokatalitikus hatásúak, növelik transzparens hordozójuk fényáteresztését. A bevonatokat mártásos technikával állítottam elő, fényáteresztésüket a 400-800 nm-es tartományban felvett transzmittancia spektrumaikkal jellemeztem, amelyekből vékonyrétegoptikai modellekkel becsültem a bevonatok vastagságát és törésmutatóját. A bevonatok fotokatalitikus hatására pedig a nyitott pórusrendszerbe impregnált rodamin 6G molekulák UV-fény hatására, szilárd-levegő határfelületen végbemenő fotooxidációjának tanulmányozásából következtettem.

Az eredményeket elemezve megállapítottam, hogy a mártással előállított bevonatok telített vízgőz-atmoszférában történő utólagos „öregítése” megnöveli a minták fényáteresztését, mert nő a bevonatok porozitása, és csökken azok törésmutatója. Az „öregítés” során bekövetkező szerkezetátalakulást mutatja, hogy a telített vízgőz-atmoszférában kezelt bevonatok kevesebb rodamin 6G színezéket adszorbeáltak, amelynek oka az, hogy az „öregítés” következtében csökken a pórusok fajlagos felülete. A kompakt szilika védőréteggel is ellátott, rodamin 6G színezékkel impregnált minták UV-fénnyel történő besugárzását követően számottevő fotokatalitikus hatást tapasztaltam, és az üveglap fényáteresztését mintegy 2%-kal meghaladó integrált fényáteresztés növekedést is kimutattam. Ezzel szemben az utókezelés nélkül kialakított TiO₂-bevonatok 1,4%-kal csökkentették az üveglapok fényáteresztését.

Eltérő lipidösszetételű permeabilitási rendszerek fizikai-kémiai jellemzése

Bicsak Richárd, III. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Balogh György Tibor** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Vincze Anna** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A Biomimetikus Technológiák Kutatócsoportban egy CELSA (Central European Leuven Strategic Alliance) pályázat keretében nagy számú vegyület szövetspecifikus permeabilitását vizsgáljuk, az eredményeket pedig a KU Leuven keminformatikusai segítségével dolgozzuk fel, jellemzően *in silico* QSPR (Quantitative Structure-Property Relationships) modellek segítségével. Munkánk során fizikai-kémiai tulajdonságaikban diverz *htó*anyagok kereskedelmi forgalomban kapható, szövetspecifikus, poláros lipidrendszereken való penetrációs képességét, valamint az adott lipidmembrán visszatartását jellemző membránretencióját vizsgáljuk egy nagy áteresztőképességű, *in vitro* permeabilitási modell (PAMPA – Paralell Artificial Membrane Permeability Assay) segítségével. A mért adatokat az ACD/Labs Percepta predikciós szoftver által előrejelzett fizikai-kémiai paramétereivel összevetve, egyszerűbb matematikai összefüggéseket keresünk, míg a leuven-i csoport keminformatikai módszerekkel próbálja jellemezni a permeabilitási rendszerek viszonyát.

Raman-spektroszkópia-alapú dinamikus tápanyagadagolási stratégiák kifejlesztése antitest termelő emlőssejtes tenyészetekben

Hajdú Dorottya Katalin, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hirsch Edit** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Domján Júlia** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A monoklonális antitest-alapú gyógyszerkészítmények igen nagy jelentőséggel bírnak a gyógyszeriparban. Előállításuk azonban bioreaktoros emlőssejtes tenyészetekkel történik, amely igen komplex gyártástechnológiát igényel. Az innovatív, folyamatfelügyelő és analizáló technológiák alkalmazásával lehetőség nyílik a kritikus tenyésztési paraméterek valós-idejű monitorozására és szabályozására a megfelelő minőségű antitestek hatékony előállítása érdekében. Ezért kutatómunkám során adalimumab termelő kínai hörcsög petefészek sejtek bioreaktoros tenyésztését valósítottam meg és a kritikus tápanyagkomponenseket inline Raman spektroszkópia alkalmazásával valós-időben monitoroztam és szabályoztam.

A Raman-spektrumok kiértékelésére részleges legkisebb négyzetek módszerén alapuló regressziós modelleket fejlesztettem és sikeresen követtem a glükóz, arginin és laktát koncentrációját a bioreaktoros tenyésztési ciklusok során. A Raman-spektrumokból nyert valós-idejű információ alapján, egy automatizált rendszer segítségével, a sejtek fogyasztásának megfelelően adagoltam a tápanyagokat a bioreaktorba. A kidolgozott dinamikus tápanyagadagolási stratégiában a pillanatnyi glükóz, illetve arginin – mint indikátor aminosav – koncentráció alapján szabályoztam a glükóz oldat és a többkomponensű tápanyagoldatok beadagolását.

A kifejlesztett dinamikus tápanyagadagolási stratégia hatására hosszabb tenyésztési időt és magasabb élő sejt számot, így több antitest terméket sikerült elérni. Az eredmények bizonyítják, hogy az inline Raman-spektroszkópia alkalmas módszer biotechnológiai folyamatok valós-idejű monitorozására és szabályozására. Továbbá a valós idejű információ lehetőséget ad a folyamatok jobb megértésére és elősegíti a tenyésztési folyamatparaméterek optimalizálását.

Egyidejű többszínű fluoreszcens jelölés optimalizálása fehérjestruktúrák vizsgálatára

Biró Adrienn, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Németh Krisztina** tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI "Lendület" Kémiai Biológia Kutatócsoport

A sejtekben zajló folyamatok monitorozásához elengedhetetlen fontosságú a makromolekulák kölcsönhatásának és kolokalizációjának vizsgálata. Erre alkalmas technika a konfokális mikroszkópia, különböző fluoreszcens jelölésekkel. Arra, hogy a molekulák sejten belüli helyzetét minél pontosabban megfigyelhessük, a szuper-felbontású mikroszkópia ad lehetőséget, mely az Abbe-féle diffrakciós limit meghaladásával lehetővé teszi a 200 nm-nél kisebb struktúrák detektálását is. E módszerek esetében elvárás, hogy a jelölések biokompatibilisek, szelektívek és helyspecifikusak legyenek, illetve háttérmentes legyen a detektálás. Erre adnak lehetőséget a kémiai biológia terén elért eredmények, mint például az önjelölő enzimek alkalmazása. Kutatócsoportunkban fluoreszcens jelölésre alkalmas (fluorogén) festékeket állítanak elő, melyek irányában elvárás, hogy szuperfelbontású mikroszkópiára is alkalmasak legyenek. Ezek a festékek vagy bioortogonális funkciós csoporton keresztül kapcsolhatók a különböző önjelölő enzimek szubstrátjához sejtes környezetben, vagy eleve a szubsztráthoz kovalensen kapcsolt formában is használhatók. A megfelelő festékek alkalmazásával egy időben akár háromszínű fluoreszcens jelölés is megvalósítható. Éppen ezért célunk volt többszínű fluoreszcens jelölési eljárások optimalizálása élő sejteken. Ehhez először a kutatócsoport rendelkezésére álló, különböző festékek tesztelésére szolgáló plazmid-tár segítségével kellett olyan plazmidokat előállítanunk, melyekben a vizsgálandó, potenciális terápiás célpontnak tekinthető fehérjék kódoló szekvenciáját egy-egy önjelölő enzim kódoló szekvenciájával kapcsoljuk. Célunk továbbá megvizsgálni a plazmidok használhatóságát, az elkészített vektorok által meghatározott fehérjék kifejeződését emlős sejtekbe való transzfektálással, különböző kombinációkban fluoreszcens jelölések kivitelezése, fluoreszcens konfokális mikroszkópos és nanoszkópos felvételek készítése, majd a jelölések körülményeinek optimalizálása az újabb festékek és célfehérjék vizsgálatának megkönnyítése érdekében.

Természetes lipidkivonat alapú membránok permeabilitási viszonyainak vizsgálata

Dékány Gergely, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Balogh György Tibor** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Vincze Anna** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A gyógyszerkutatás korai fázisának egyik fontos feladata a hatékony szűrési lépések kidolgozása, mellyel a potenciális gyógyszerjelöltek köre leszűkíthető. Ennek egyik kiemelt iránya a hatóanyagok farmakokinetikai tulajdonságainak, így pl. a célzott szöveten történő hatóanyag felszívódásnak a vizsgálata, mely elsődlegesen in vitro rendszereken történik. Ilyen in vitro, 96-lyukú mérőtálca(plate)-alapú technika a PAMPA (Parallel Artificial Membrane Permeability Assay) rendszer, amely nagyszámú vegyület gyors és robusztus permeabilitás vizsgálatát teszi lehetővé biomimetikus, mesterséges lipidmembránokon.

A munkám célja különböző, kereskedelmi forgalomban elérhető szövetspecifikus lipidkeverékek (vér-agy gát-, máj- és szív- specifikus lipid extraktumok) alkalmazásával kémiaiag diverz gyógyszervegyület permeabilitási viszonyainak összehasonlítása a PAMPA rendszer segítségével. A gyógyszervegyületek eltérő fizikai-kémiai tulajdonságaik alapján (molekulatömeg, sav-bázis karakter, lipofilitás, oldhatóság, poláris molekulafelszín) várhatóan különböző mértékben képesek felszívódni az egyes szövetekben. A munka további célja tehát olyan fizikai kémiai paraméterek azonosítása statisztikai és egyéb keminformatikai módszerekkel, melyek várhatóan fontos szerepet játszanak az adott szövetekre vonatkozó felszívódási folyamatok leírásában.

Fermentációs folyamatok hatásának vizsgálata rozs glutén és FODMAP összetételére

Tóth Tímea, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Kormosné Dr. Bugyi Zsuzsanna** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Dr. Tömösközi Sándor** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A gabonafélék az alapvető élelmiszerek csoportjába tartoznak, és világszerte fogyasztják őket. Napjainkban a legjelentősebb gabonafélék mind termesztés, mind fogyasztás szempontjából a búza, a kukorica és a rizs, de kisebb mennyiségben a cirok, árpa, zab, rozs és köles számos variációja is megtalálható. A búza után a rozs a sütőipar második legfontosabb nyersanyaga, alkalmazása táplálkozás-élettani előnyeinek köszönhetően növekvő népszerűségnek örvend. Kiváló ételmi rost és bioaktív tápanyag forrás. Előnyös tulajdonságai mellett azonban glutén tartalma miatt a cöliákiában és egyéb gluténhez köthető rendellenességekben szenvedőknél fogyasztása káros hatásokat vált ki. Emellett jelentős mennyiségben fruktánt és egyéb FODMAP komponenseket tartalmaz.

A FODMAP-ok olyan kisméretű szénhidrátok, amik emészthetetlenek az emberi szervezet számára és baktériumok által fermentálódnak a bélben, fogyasztásuk összefüggésbe hozható az irritábilis bélszindróma (IBS) tüneteinek kialakulásával. A fent említett betegségek világszerte jelentős közegészségügyi és társadalmi-gazdasági kihívást okoznak, kezelésükhöz pedig elengedhetetlen a kiváltó komponenseket elkerülő diéta. Az ilyen fajta diétákban a rozs alapvetően nem alkalmazható, így a fogyasztók elesnek a táplálkozás-élettani előnyeiktől is. Éppen ezért szükséges olyan helyettesítő alapanyagok használata, amik glutént és FODMAP-okat nem, vagy csak kis mennyiségben tartalmaznak, de megfelelő minőségű és mennyiségű vitamint, ásványi anyagot, komplex nem FODMAP szénhidrátot és fehérjét biztosítanak. Legegyszerűbben úgy lehet alacsony FODMAP-tartalmú, illetve gluténmentes termékeket készíteni, ha elkerüljük a magas FODMAP-tartalmú és a gluténtartalmú alapanyagok használatát. A legújabb kutatások azonban azt célozzák, hogy különböző biotechnológiai módszerek segítségével változtassák meg ezen gabona összetevők mennyiségét és/vagy összetételét, így csökkentve azok élelmiszerbiztonsági kockázatát a táplálkozási előnyök megőrzése mellett. Az egyik irány ezek közül a fermentációs technikák alkalmazása, amit például kovászolással, enzimes kezelésekkel hajtanak végre. Búza esetében ígéretes eredmények születtek mind a glutén, mind a FODMAP-komponensek ilyen módszerekkel történő degradációjában. Az egyre nagyobb jelentőséggel bíró rozs esetében azonban kevés ilyen irányú vizsgálat történt.

A jelenlegi munka célja a fermentációs folyamatok hatásának vizsgálata rozs glutén és FODMAP összetételére. Ennek érdekében fajtaazonos rozslisztből készült egyszerű fermentált modellmátrixokon vizsgáltam a glutén és FODMAP-tartalom alakulását immunanalitikai és elválasztástechnikai módszerekkel.

A dUTPáz enzim élettani hatásának vizsgálata CRISPR bázisszerkesztő módszerrel eukarióta sejteken

Tóth Otília, IV. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Vértessy G. Beáta** tanszékvezető, egyetemi tanár, az MTA I. tagja
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Konzulens: **Nagy Nikolett** PhD-hallgató
ELKH TTK EI Genom Metabolizmus Kutatócsoport

A dUTPáz a nukleotid metabolizmusban fontos szerepet játszó enzim, melynek feladata a dUTP hidrolízise dUMP-vé és pirofoszfáttá. Katalitikus aktivitása révén kettős szerepet tölt be, egyrészt csökkenti a sejtbeli dUTP/dTTP arányt, másrészt a keletkezett dUMP szubsztrátként szolgál a timidilát-szintáz enzim számára, így hozzájárul a dTTP *de novo* bioszintéziséhez [1]. Ha a dUTP/dTTP arány magas, hasonló szerkezetük következtében dUTP is beépülhet a genomba. A DNS-ben található uracil kivágását az UDG enzimesalád tagjai, az UNG és a SMUG1 enzimek végzik. Amennyiben az uracil bázis mennyisége megnő a DNS-ben, a báziskivágó javítás következtében kettős száltörések alakulhatnak ki, mely timinmentes sejtthálához vezethet. Míg az *Ung* *-/- Smug1* *-/-* genotípusú egerek életképesek, és genomjuk uracil tartalma szignifikánsan magasabb a vad típusú egerekéhez képest [2], addig a *Dut* gén kiütése embrionális letalitást okoz [3]. A csoport jelenlegi eredményei alapján az *Ung* *-/- Smug1* *-/- Dut* *-/-* genotípusú egerek nem életképesek. Ezért azt tűztém ki célul, hogy katalitikusan inaktív dUTPáz enzimmel rendelkező *Ung* *-/- Smug1* *-/-* genotípusú MEF sejteket állítok elő, hogy vizsgáljam a dUTPáz enzim funkcionalitását. Katalitikusan inaktív enzimet CRISPR bázisszerkesztés alkalmazásával hoztam létre, mely során a

szerkeszteni kívánt genomi régiót egy gRNS szekvencia jelöli ki specifikusan, majd citozin dezamináció révén a kijelölt citozin bázis timinre cserélődik. A dUTPáz katalitikus aktivitásához szükséges vízmolekula koordinálását egy konzervált aszpartát aminosav teszi lehetővé, melyet *E.coli*-ban aszparaginra cserélve a szubsztrát kötésének képessége megmarad, viszont a hidrolitikus aktivitása határozottan lecsökken [4]. A tervezett mutáció a D100N volt, mivel egér sejtekben ez a mutáció felel meg a katalitikus aktivitásért felelős aszpartát aminosav cseréjének. D100N heterozigóta MEF sejtekből kiindulva a tervezett homozigóta genotípusú sejtek előállítása során vélhetően megváltozott kromoszómaszámú sejteket kaptam. Ennek igazolására kariotipizálást, illetve áramlási citometria alkalmazásával a DNS-tartalom meghatározását végeztem. Továbbá annak bizonyítására, hogy a dUTPáz enzim inaktív, dot blot módszerrel mértem a genomi uracil tartalmat, emellett vizsgáltam a dUTPáz enzim mRNS expresszióját RT-qPCR módszerrel az előállított D100N sejtvonalon.

Irodalomjegyzék:

- [1] B. G. Vértessy and J. Tóth, *Acc. Chem. Res.*, vol. 42, no. 1, pp. 97–106, Jan. 2009.
- [2] L. Alsøe et al., *Sci. Rep.*, vol. 7, no. 1, p. 7199, Dec. 2017.
- [3] H. Pálkás et al., *Biomolecules*, vol. 9, no. 4, p. 136, Apr. 2019.
- [4] O. Barabás, V. Pongrácz, J. Kovári, M. Wilmanns, and B. G. Vértessy, *J. Biol. Chem.*, vol. 279, no. 41, pp. 42907–42915, Oct. 2004.

Tönkölybúza (*Triticum spelta*) és egyéb régi búza genotípusok összetételének és technológiai tulajdonságainak jellemzése és összehasonlító vizsgálata modern búzafajtákkal (*Triticum aestivum*)

Csák Anna, VII. évf. (BSc)

Pisch Barnabás, VII. évf. (BSc)

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Dr. Németh Renáta egyetemi adjunktus

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Jaksics Edina PhD-hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A különféle gabonák, mint például a búza, évezredek óta alapvető élelmiszer alapanyagának számítanak. Legnagyobb mennyiségben termesztett fajai a közönséges búza vagy kenyérbúza (*Triticum aestivum*) és a durumbúza (*Triticum durum*). Emellett egyre nagyobb figyelem irányul az „ősi” búzafajokra, mint például a tönkölybúza (*Triticum spelta* L.). Számos, sok esetben felületesnek, marketing jellegűnek tekinthető állítást fogalmaznak meg a régi búzák táplálkozási értékével és technológiai tulajdonságaival kapcsolatban. Azonban ezek tudományos mélységű igazolása hiányos. A Gabonatudományi és Élelmiszertudományi Kutatócsoport, valamint a martonvásári Agrártudományi Kutatóközpont közös kutatást indított ennek a területnek a feltérképezésére. Ennek a projektnek egy részét képezi kutatómunkánk, melynek fő célja, hogy összetételi és technológiai vizsgálatok segítségével összehasonlítsuk ősi búzafajok (*Triticum spelta* L., *Triticum petropavlovskyi*) és alfajok (*Triticum aestivum* subsp. *compactum*/*macha*/*sphaerococcum*), valamint a modern közönséges búza (*Triticum aestivum* subsp. *aestivum*) nemesítési vonalainak és fajtáinak jellemzőit, vizsgáljuk azok változékonyságát és azonosítsuk a termesztésben és a nemesítésben esetlegesen előnyt jelentő tulajdonságokat.

A célkitűzés megvalósításához a rendelkezésünkre álló, martonvásári fajtafenntartásból és nemesítésből származó nagyszámú régi búza fajok/alfajok és közönséges búza fehér liszt mintákból reológiai (amilolitikus állapot, viszkozus tulajdonságok) vizsgálatokat, teljes őrlményeikből a rost összetétel (β -glükán tartalom) jellemzését végeztük. Az esésszám értékekben számottevő különbség nem mutatkozott, a viszkozus tulajdonságok eredményei alapján nagy változékonyság látható fajok között az egyes minták között. Mindezt az adatokon elvégzett klaszteranalízis is alátámasztotta. A β -glükán tartalom vizsgálata során a közönséges búza minták között eltérések mutatkoztak, azonban átlagértékeik alig tértek el a tönköly és egyéb ősbúza mintákkal végzett mérések eredményeitől.

Összességében elmondható, hogy a mintákat nagy változékonyság jellemzi, azonban általános megállapításokhoz ismernünk kell a genetikai változékonyságon kívül a minták stabilitását és pontos termesztési körülményeit is. Ahhoz, hogy egy átfogó képet kapjunk a téma kapcsán, a projekt keretein belül éppen folyamatban lévő további kutatások eredményeire is szükség van, melyek elvégzésével bővebb információhalmaz fogja kiegészíteni a munkánkat.

A kutatómunkát „A tönkölybúzában rejlő genetikai, összetételi és feldolgozóipari lehetőségek feltárása” című OTKA 135211 pályázat támogatta. A bemutatott kutatás kapcsolódik az Innovációs és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból támogatott TKP2021 pályázati program, BME-EGA-02 számú projekt szakmai célkitűzéseinek megvalósításához.

A 4-nitrokinolin 1-oxid mutagenikus hatásának vizsgálata sejttenyészetben

Engel Botond, I. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Németh Eszter**, tudományos munkatárs
ELKH TTK EI Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport
Dr. Szüts Dávid, tudományos tanácsadó
ELKH TTK EI Genomstabilitás Lendület Kutatócsoport

A 4-nitrokinolin 1-oxid (4-NQO) egy vízoldható karcinogén vegyület, a tudományos kutatásokban gyakran alkalmazott mutagén. A 4-NQO két fő módon fejt ki a mutagenikus hatását: egyrészt biotranszformáció révén kialakult metabolitja kovalens kötést képes kialakítani a DNS-sel. Ezen elváltozások fő javító útvonala a nukleotid kivágó javító mechanizmus (NER). Másrészt a felszabaduló reaktív oxigánszármazékok (ROS) reagálnak a DNS bázisaival, első sorban a guanin bázis 8-as helyzetben történő hidroxilációját okozva.

A 4-NQO-t kezdetben UV-sugárzás mimikálására használták, később pedig dohányzás hatására kialakuló tumorokhoz hasonló tumorok kísérleti egerekben történő indukálására. Azonban humán sejtekben nem ismert a 4-NQO teljes genomra gyakorolt pontos hatása, és nem tanulmányozták a 4-NQO mutagenikus hatását a nem kódoló régiókban.

Munkám célja a dohányzás által kiváltott mutagenézis mimikálása 4-NQO segítségével. Ehhez a Genomstabilitás Kutatócsoportban kifejlesztett kísérleti módszereket alkalmazom. Két választott modellrendszerben, humán (TK6) és csirke (DT40) limfocita sejtvonalakon teszteltem a szer hatását. Előbbi előnye, hogy humán modell, utóbbi pedig azért előnyös, mert számos DNS javítási útvonalakban hibás genotípus is rendelkezésre áll, így szükség esetén azok is vizsgálhatóak. Az IC₅₀ értékeket sejtleletkéességi mérésekkel határoztam meg. Az izogénikus sejtvonalakat 4 héten keresztül, hetente egy dózis 4-NQO adagolásával kezeltem. A kezelt sejtpopulációkból egy sejt klónozást végeztem, és sejtvonalanként három mintából genomi DNS-t preparáltam. A szer hatására bekövetkezett mutációkat teljes genom szekvenálással határoztuk meg. Az eredményeket az irodalmi adatokkal vettem össze, mely során fény derült a 4-NQO által kiváltott mutagenézis mechanizmusának részleteire.

Fermentációs kísérletek az alginít ásvány kozmetikai célú felhasználására

Papp Tímea, IV. évf. (Bsc)

Témavezető: **Dr. Németh Áron** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Tóth Pál** PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Napjainkban jelentős figyelem irányul a fermentált kozmetikai alapanyagok kutatására, valamint felhasználására, amelynek oka többek között fenntarthatóságuk, egyediségük és hatékonyságuk. A tejsav az egyik legsokoldalúbb fermentáció útján előállított kozmetikai alapanyag, ami gyengéd hámlasztóként elősegíti a felső hámréteg sejtjeinek megújulását, ezáltal fokozza a bőr elasztin és kollagén termelését, amely csökkenti a megjelenő ráncokat. A tejsavat bőrfehérítő tulajdonságából adódóan túlzott melanin termelés okozta pigment foltok kezelésére is használják.¹

Az alginít a Kárpát – medencében előforduló ásvány, amely fosszilis alga biomasszából és tufából keletkezett, nagy szerves anyag tartalmú olajpala kőzet. Az ásvány humán - biológiai alkalmazhatóságáról és tulajdonságairól kevés információ áll rendelkezésre. Viola Stropfová és munkatársai *Lactobacillus fermentum* törzssel², valamint Hlubeňová, K. *L. reuterivel* különböző állatmodelleken végzett kísérleteik alapján az alginít, tejsav termelő baktériummal előállított probiotikus fermentumhoz adva pozitív hatást fejtett ki gasztroenterálisan az állatokra.³ Mindazonáltal a kutatások nem tértek ki a bőrre gyakorolt hatásokra.

A kozmetikai iparág az egyik leggyorsabban növekvő iparág napjainkban, ezért célul tűztük ki egy olyan innovatív készítmény kifejlesztését, amely az alginít bőrre gyakorolt hatásának vizsgálatán alapszik, különböző tejsav termelő törzsekkel kiegészítve.

Az eredmények alapján az alginít pozitív hatással volt a jótékony baktérium törzsek szaporodására, növelte a BacTrac készülékkel mért relatív impedancia változást a tápközegben (M%), és az elektród felszínén (E%), emellett kétszeresére növelte a BacTrac-os fermentációk során a biomassza szárazanyag tartalmát. Az alginites fermentumok azonban közvetlenül a bőrön alkalmazva rosszabb hidratáló hatással bírtak, mint az alginít mentes lizátumok. Az eredményeim azt mutatják, hogy az alginít kozmetikai célú felhasználásának van jövője, indirekt alkalmazásának előnyei a probiotikus törzsek eredményein látszanak (hiszen fokozta a hasznos kultúrák képződését), de direkt alkalmazása és jótékony hatása további kísérleteket igényel.

¹ Abd Alshaeb., et al., Lactic acid applications in pharmaceutical and cosmeceutical industries, Journal of Chemical and Pharmaceutical Research, pp. 729-735, 2015, 7:(10).

² V. Stropfová, et al., Evaluation of Probiotic *Lactobacillus fermentum* CCM 7421 Administration with Alginate in Dogs, Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature, 2017

³ D. Mudroňová, et al. The effect of probiotic lactobacilli and alginate on the cellular immune response in salmonella infected mice, Folia Veterinaria, pp. 61-66, 61,2, 2017

A humán transzmembrán fehérje szerkezeti tér vizsgálata a TmAlphaFold adatbázis felhasználásával

Jambrich Márton András, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Dobson László** tudományos munkatárs
ELKH TTK EI Fehérje Bioinformatika Kutatócsoport

A feltekeredés (folding) probléma a biológia több mint 60 éves megválaszolatlan kérdése, ami arra keresi a választ, hogyan határozza meg egy fehérje aminosav szekvenciája annak térszerkezetét. A kísérletes technikák fejlődésével a megoldott fehérjeszerkezetek száma exponenciálisan nő, azonban a feltekeredés biofizikai leírására nem létezik olyan modell, ami belátható időn belül képes meghatározni akár csak egyetlen fehérje szerkezetét. A DeepMind 2020-ban kifejlesztett mély gépi tanuláson alapuló módszere, az AlphaFold2 (AF2) hatalmas mértékben javította a szerkezetbecslés pontosságát, és már egy évvel a megjelenése után is megreformálni látszik a szerkezeti biológia területét.

Mind a kísérletes, mind a számítási módszerek esetén szűk keresztmetszetet jelent a transzmembrán (TM) fehérjék szerkezetének meghatározása. Ezen fehérjék peptidlánca két különböző környezetben halad át, vízdoldható és lipoldható környezetben. Ezen körülmények között a feltekeredés leírásához speciális biofizikai megfontolásokat kell alkalmazni, amely figyelembe veszi az eltérő fázisokat, továbbá ezen fehérjék kísérletes szerkezetmeghatározása is speciális körülményeket kíván meg. Bár a TM fehérjék a teljes humán proteom 25-30%-át teszik ki, továbbá ezek a leggyakoribb gyógyszer-célpontok, mégis mindössze a megoldott szerkezetek ~4 százaléka tartozik ebbe a csoportba, és a számítógépes becslések pontossága is elmarad ezen fehérjék esetén a globuláris fehérjékhez képest.

Bár az AF2 minden fehérjének képes modellezni a szerkezetét, de mint minden módszer, ez is hibával terhelt lehet. TM fehérjék esetében a hibák egyik fő forrása lehet, hogy a tanítás során az ismert TM szerkezetek száma nagyon alacsony volt. A nemrég fejlesztett TmAlphaFold adatbázis tartalmazza az AF2 által becsült TM fehérje szerkezetek membrán lokalizációját, valamint listázza azokat a szerkezeti hibákat, amelyek téves becslésre utalnak. Ezek az adatok lehetővé teszik az AF2 által becsült TM fehérje szerkezetek proteom szintű analizisét.

Munkám során bemutatom, hogyan változtatta meg az AF2 a humán TM fehérjék szerkezeti terének lefedettségét, továbbá megmutatom, melyek azok a TM fehérjék és fehérjecsaldók, amelyeknél az AF2 pontossága alacsonyabb és nem rendelkeznek kísérletesen megoldott szerkezettel, ugyanis ezen fehérjék szerkezetének megoldásából profitálhat a legtöbbet a szerkezeti biológia és a gyógyszerhatóanyag fejlesztés.

Egy kombinált antitumor terápiás lehetőség vizsgálata KRAS mutáns sejtekben

Bogárdi Letícia, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Hajdinák Péter** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Makk-Merczel Kinga** PhD-hallgató
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A híres német biokémikus, Ottó Heinrich Warburg a 20. század elején megállapította, hogy a különböző eredetű rákos sejteket a normál sejtekhez képest egy nagyságrenddel nagyobb glükózfogyasztás jellemez. Az oxidatív foszforiláció és az anaerob glikolízis együttes zajlása, más néven a hibrid metabolikus állapot hozzájárul ahhoz, hogy a rákos sejtek képesek legyenek alkalmazkodni a különböző stressztényezőkhez. Így a Warburg-effektus szabályozásának megismerése kulcsfontosságú a tumorprogresszió gyenge és támadható láncszemének azonosításához.

A RAS fehérjecsalád tagjai kulcsszereppel bírnak a sejt túlélés, proliferáció és differenciáció folyamatainak modulálásában. A humán tumorok 20-30%-ában található a RAS család tagjait aktiváló mutáció. A mutáns KRAS izoformát hordozó tumorok rendkívül agresszívok, az anti-EGFR terápiákkal szemben komoly rezisztenciával bírnak. A KRAS mutáns sejtekben a PKM2 (piruvát-kináz M2) izoenzim hiperaktiválódik, és a glükóz-transzporter GLUT1 expresszióját indukálja, így KRAS gén aktiváló mutációja komoly szerepet játszik a Warburg-anyagcsere kialakulásában.

Kutatócsoportunk keretein belül zajló korábbi vizsgálatok során a szakirodalomban fellelhető kísérletes adatok alapján egy matematikai modellt építettünk, amely a KRAS mutáns rákos sejtek metabolizmusát szabályozó hálózat főbb elemeit tartalmazza. A regulációs hálózat viselkedésének leírásán túl rendszerbiológiai elemzésünk egy kombinált antitumor terápiás lehetőséget javasol a KRAS mutáns rákos sejtek elleni küzdelemben. Prediktáltuk, hogy a farmakológiai aszkorbát és az autofágia gátlószereként ismert klorokin együttes alkalmazása képes lehet blokkolni mind a KRAS, mind az mTOR útvonalakat.

Kutatásunk során célul tűztük ki a csoportunk által korábban már előre jelzett farmakológiai aszkorbát és klorokin kombinált kezelés hatásosságának vizsgálatát KRAS mutáns hasnyálmirigy-tumoros sejtvonalakon. Kezdetben életképesség-méréssel meghatároztuk a kezelőszerek hatásos koncentrációit. Ezt követően tanulmányoztuk a farmakológiai aszkorbát és a klorokin hatásmechanizmusát, különös tekintettel az oxidatív stresszre és az autofágiára.

Összefoglalóan elmondhatjuk, hogy a farmakológiai aszkorbát és a klorokin együttes alkalmazása egy nagy potenciállal bíró kombinált kezelés lehet az egyébként komoly drogrezisztenciával jellemzett KRAS mutáns tumorok esetében. A kutatás fontosságát alátámasztja, hogy a KRAS mutációt hordozó daganatos betegek rendkívül rossz prognózissal rendelkeznek, így célzott terápiájuk jelenleg is az egyik legintenzívebben kutatott területnek tekinthető.

Organikus és konvencionális körülmények között termesztett búzák élelmi rost összetételi és technológiai tulajdonságainak vizsgálata

Szilágyi Virág Róza, I. évf. Msc

Témavezető: **Dr. Schall Eszter** egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Konzulens: **Dr. Tömösközi Sándor** egyetemi docens
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Európában a közönséges búza (*Triticum aestivum* L.) a legelterjedtebb élelmezésre felhasznált gabonafaj. Azonban egyre nagyobb figyelem fordul azokra a gabonákra, melyek több egészségtámogató összetevőt tartalmazhatnak és amik potenciálisan kevesebb vegyszerrel kezelve termesztethetők, úgy mint a tönkölybúza (*Triticum spelta* L.). Azonban a tönkölybúzára vonatkozóan számos, tudományosan nem, vagy csak részben igazolt állítás fogalmazódott meg. Emellett kevés kísérletileg bizonyított információ érhető el a környezetbarát termesztési módszerekkel való előállításának alkalmasságáról. A BME Gabonatudományi és Élelmiszermínőség Kutatócsoport és a martonvásári Agrártudományi Kutatóközpont közösen indított kutatásához kapcsolódó dolgozatom fő célja a termesztési körülmény vizsgálata a tönkölybúza, a közönséges búza és ezek keresztezéseiből előállított kísérleti vonalak egyes tulajdonságaira. Ehhez organikus és modern agrotechnika alkalmazásával termesztett 8 tönkölybúzát, 5 közönséges búzát és 11 kísérleti vonalat vizsgáltam. A rostok közül a β -glükán (enzimes módszer) és az arabinoxilán (gázkromatográfiás módszer) tartalmat vizsgáltam, továbbá a reológiai tulajdonságok közül az esésszámot (ejtőtestes viszkoziméter) és a komplex viszkozitást (gyors viszkoanalizátor-RVA) jellemeztem. A különbségek jellemzésére statisztikai módszereket alkalmaztam. Eredményeimből megállapítható, hogy a rostok mennyisége az irodalomban leírtaknak megfeleltethető a búza fajok esetében, értékeik pedig összemérhetők. A fajokon belül a fajták között nagy különbségek nincsenek, azonban a keresztezési vonalak sokkal változatosabb képet mutatnak, néhol kiemelkedő mennyiséggel. A reológiai tulajdonságokban jobban különválasztható a két faj, és jellemzően a tönkölybúza viszkozitása az alacsonyabb. A kísérleti vonalak szintén nagyobb változatosságot mutatnak és általában értékeik a két búza faj között helyezkednek el. A termesztési mód hatását vizsgálva megállapítottam, hogy a vizsgált paraméterekben nincs jelentős különbség a konvencionális és organikus termesztéssel előállított búzák között. A legnagyobb különbség a két termesztés között az esésszám értékeknél figyelhető meg. Összességében eredményeim alapján a fajok és fajták közötti különbség nagyobb mértékű, mint a termesztési mód hatása. A vizsgált paramétereket azonban nem csak a különböző fajok/fajták/vonalak között érdemes vizsgálni, hanem különböző évjáratokon is, ami a munkám elsődleges továbblépését jelenti. A kutatómunkát a 135211 számú OTKA pályázat támogatta, emellett kapcsolódik a TKP 2021 pályázati program, BME-EGA-02 és a BME TKP-BIO 2020 projekt célkitűzéseinek megvalósításához.

Neutrofil granulocita-eredetű extracelluláris vezikulák hatása a monociták fagocitózisára, szuperoxid- és citokin termelésére

Borsos Nóra, I. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Lőrincz M. Ákos** egyetemi adjunktus

SE Élettani Intézet

Dr. Wunderlich Lívius egyetemi adjunktus

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A sejt eredetű extracelluláris vezikulák (EV) a sejtek közötti kommunikáció újonnan felfedezett, önálló formáját jelentik. Munkacsoportunk a neutrofil granulocita (PMN) immunsejtekből származó extracelluláris vezikulák különböző populációit jellemezte eddig: a nyugvó sejtől spontán módon (spEV), apoptotikus úton (apoEV), illetve opszonizált zymosan hatására képződő (ozEV) vezikulákat. Korábbi megfigyeléseink alapján a különböző EV-k eltérő hatást váltanak ki, ha más nyugvó neutrofil granulocitákhoz adjuk őket: ozEV-k pro-inflammatórikus, míg az spEV-k és apoEV-k inkább anti-inflammatórikus irányban befolyásolták őket. Kutatásom során a munkacsoportunk által jellemzett PMN EV-k hatását vizsgáltam primer monociták fagocitózisára, szuperoxid- (ROS) és citokin termelésére. Eredményeink alapján a neutrofil granulociták által spontán és apoptózis során termelt EV k késleltetik a monocita sejtek szuperoxid-termelését és fagocitózist azonban sem a szuperoxid-termelés mértékét, sem a fagocita kapacitást nem befolyásolják. A TNF- α mennyiségében növekedést figyeltünk meg aktiválás hatására keletkező vezikulák mellett, míg az IL-8 citokin mennyisége spontán és apoptotikus EV hatására csökkent, de itt is nőtt ozEV kezelésnél. Eredményeink rámutatnak arra, hogy a neutrofil, az őt érő környezeti ingerek hatására képes megváltoztatni a termelt EV-k biológiai tulajdonságait, és eltérő hatásokat kifejteni a monocitákra. Ez a hatás pedig egyaránt függ az anyasejt állapotától és a célsejt aktiváltságától is.

Vad aestivum fajták és fajtajelöltek rost- és rövid láncú szénhidrát-összetételének meghatározása

Szajkó Milda Blanka, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: Dr. Tömösközi Sándor egyetemi docens

Juhászné Szentmiklóssy Marietta Klaudia PhD-hallgató

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

A búzanemesítés és -termesztés során a 20. század végére a terméshozam és a technológiai tulajdonságok mellett egyre nagyobb figyelmet kaptak a táplálkozási szempontok, így például a bioaktív összetevők és a rostok mennyisége és minősége a gabonákban. Az elmúlt évtizedekben a táplálkozási szempontból előnyösebb gabonák iránti igény jelentősen megnövekedett, és az új fajok nemesítése mellett előtérbe került a régebbi, nem nemesített fajták vizsgálata és táplálkozási értékének meghatározása. Ezen fajták tulajdonságainak feltérképezése után dönthető el, hogy mely régi búzafajták, tájfajták termesztésével, illetve nemesítésben való felhasználásával érdemes foglalkozni.

Munkám során vad aestivum fajtákkal dolgoztam. Ezek közé több alfajhoz tartozó búzafajták sorolhatók, mintáim nagy része *Triticum aestivum* ssp. *compactum* volt, de egy *T. aestivum* ssp. *macha* és egy *T. aestivum* ssp. *sphaerococcum* mintát is vizsgáltam. Ezen búzafajták összetételére vonatkozóan kevés információ áll rendelkezésre a szakirodalomban. A munkám célja a búza fő rostalkotó komponenseinek, az arabinoxilánoknak, valamint az egyes fogyasztók számára egészségügyileg hátrányos fermentálható szénhidrátok (FODMAP) mennyiségi meghatározása és változékonyságuk vizsgálata nemesítő intézetből származó vad aestivum fajtákban és fajtajelöltekben.

Három vad aestivum fajta és 9 fajtajelölt lisztjeit és teljes őrlményeit vizsgáltam, melyek a martonvásári MTA-ATK Mezőgazdasági Intézetéből származtak. A vad aestivum mintákon kívül egy közönséges búza és egy tönkölybúza mintát is mértem, a vad aestivum minták eredményeit ezekkel hasonlítottam össze. A szénhidrát monomereket folyadékkromatográfiás módszerrel, az arabinoxilán-tartalmat gázkromatográfiás módszerrel határoztam meg.

Az mérések eredményei alapján a vad aestivum fajták és vonalak arabinoxilán-tartalma között változékonyság figyelhető meg, de a kapott értékek jellemzően a vizsgált tönkölybúza és közönséges búza fajták között helyezkednek el. A vad aestivumok rövid láncú szénhidrát-összetétele eltér a tönköly- és kenyérbúzáétól. Az eredményeim újdonsága, hogy a vad aestivum rost- és rövid láncú szénhidrát-összetételének jellemzésével a nemesítők számukra kedvező táplálkozási tulajdonságú vonalakat használhatnak fel munkájuk során.

Munkám kapcsolódik „A tönkölybúzában rejlő genetikai, összetéti és feldolgozóipari lehetőségek feltárása” című OTKA 135211, TKP2021 pályázati program, BME-EGA-02 és a BME TKP-BIO 2020 projekt célkitűzéseinek a megvalósításához.

Egy érzékeny, UdgX-alapú uracil-DNS-detektálás fejlesztése különböző organizmusokból származó, alacsony uraciltartalmú genomi DNS mintákon

Bukovszki Laura IV. évf (BSc)

Témavezető: Dr. Békési Angéla egyetemi adjunktus
BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
ELKH TTK EI Genom Metabolizmus Kutatócsoport

Konzulens: Holub Eszter PhD-hallgató
ELKH TTK EI Genom Metabolizmus Kutatócsoport

A genetikai információt hordozó DNS négy kanonikus bázist - timin, adenin, guanin és citozin –, illetve ún. nem-kanonikus bázisokat és bázismódosításokat tartalmaz. Ilyen például az 5-metil-citozin, 8-oxo-guanin, vagy az uracil. Utóbbi tulajdonképpen egy, a timinnel teljesen megegyező bázispár-képzési hajlamú, demetilált timin, mely normálisan az RNS-ben fordul elő. A DNS-be egyrészt replikáció során kerülhet timinanalóggént emelkedett dUTP/dTTP esetén, másrészt a DNS-beli citozin dezaminálásaként spontán, vagy enzimkatalizálta reakció útján az AID/APOBEC fehérjecsald tagjai által, melyek magasabb rendű élőlényekben az adaptív immunrendszer működéséhez elengedhetetlenek [1, 2]. A dezaminálásból származó U:G hibaspárok javítás nélkül, replikáció után fixált pontmutációkhoz vezetnek. A DNS-beli uracil (U:A, ill. U:G) javítása mindenekelőtt a báziskivágó javítás (base excision repair - BER), ill. esetenként a hibaspárjavítás (mismatch repair - MMR) folyamatok által történhet. A BER első lépését egy uracil-DNS-glikoziláz (UDG) végzi, mely hasítja a bázis és a cukor-foszfát gerinc közötti N-glikozidos kötést, egy abázikus helyet (AP-hely) létrehozva. Emlősökben a fő UDG az uracil-N'-glikoziláz (UNG) [3].

Annak ellenére, hogy a DNS-beli uracil általában hiba, az elmúlt évtizedben egyre több tanulmány támasztja alá, hogy néha mégis élettani vagy fejlődésbiológiai szereppel bírhat (4,5). Így egyre erősebb igény jelentkezett különböző modellorganizmusok genomi uraciltartalmának érzékeny kimutatására. Ehhez számos módszert dolgoztak ki [6] többek között a kutatócsoportunkban is [7]. A laborunkban használt U-DNS szenzorokat elsősorban inaktív UNG mutáns alapján fejlesztették, amelyeket csepp blot, immunocitokémiás, valamint genom szekvenálási eljárásokban sikerrel alkalmaztak drogkezelt, magas uracil-tartalmú humán rákos sejtvonalak esetén [7]. A fiziológiához közelebb álló alacsony uracil-tartalmú minták kvantitatív mérésére ezek a szenzorok kevésbé voltak alkalmasak, ezért fordultak egy különleges, az U-DNS-sel kovalens adduktot képző, *Mycobacterium smegmatis*-ban újonnan felfedezett UDG, azUdgX felé [7].

Kísérleteim során a laborban korábban előállított biotinilált Avitag-UdgX szenzor konstruktot használtam egyelőre csepp blot alkalmazásokban, két modellrendszerben is. Egyrészt a zebrahalm embrionális fejlődésében, másrészt az U-DNS javítás enzimeiben mutáns egér szöveteken és sejtvonalakon. Az új UdgX szenzor egyértelműen nagyobb érzékenységűnek bizonyult. Ezzel együtt, kvantitatív szempontjából a szenzorfehérje termelése és tisztítása valamint a csepp blot alkalmazása további optimalizálást igényelt, amit a jelen TDK munkában szintén megcéloltunk.

Oldószerekkel tisztított pollenek összehasonlító vizsgálata közeli és közép infravörös spektroszkópiával

Madács Ágnes, I. évf. (MSc)

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

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Slezsák János egyetemi tanársegéd

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

Az utóbbi években egyre több kutatás foglalkozik a virágporcsomók (angolul *bee pollen*) vizsgálatával. Ez egy méhészeti termék, mely a pollen mellett tartalmaz némi nektárt és a méh nyálszekrécióját, mely a beporzási folyamata során keveredik a mintába összetapasztó elemként. Mivel a méhészetek képesek nagyobb mennyiségben előállítani ezt az anyagot, így jogosan merül fel az a kérdés, hogy milyen területeken alkalmazhatnánk. Egyik ilyen például a pollen legkülső rétegét (ún. exint) alkotó sporopollenin kinyerése, a mintából. Ez egy rendkívül ellenálló biopolimer, melynek elsődleges feladata a virágok hímivar-sejtjeinek védelme mindenfajta külső hatástól. Az exin összetétele és struktúrája pollenfajtánként eltér, alapvetően ez adja a mikroszkópikus fajta azonosítás alapjait is, tehát sejthető, hogy a sporopollenin esetében is inkább egy anyagtípusról, mint teljesen egyező anyagról beszélhetünk. A letisztított exinburok egyrészt alkalmazható mikrorészecskéként, mely rugalmas, pollen típusonként egységes, a felületén található funkciós csoportok pedig változatos felhasználásra adnak lehetőséget, másrészt használható mikrokapszulaként is, a felületén lévő természetes módon kialakult nanocsatornáknak köszönhetően, melyeken keresztül bejuttathatjuk a belsejébe a kívánt anyagot, melynek a biohasznosulása az emberi szervezetben így jóval nagyobb lesz.

Ezért foglalkozott nem régiben egy magyar kutatók által írt tanulmány azzal, hogy milyen oldószeres kezelések segítségével lehet a lehető legtisztább sporopolleninburokot elérni virágporcsomókból kiindulva. Az én célom, hogy az ő munkájuk eredményeképp létrejött, extrahált mintákat megvizsgálva közeli és közép infravörös spektroszkópiával feltárjam annak lehetőségeit, hogy a gyors, roncsolásmentes mérési technológiák mennyire alkalmasak ennek a tisztítási folyamatnak a nyomon követésére. A napraforgó és repce pollenek méréséből származó látható és közeli infravörös (Vis-NIR), illetve csillapított teljes reflexiós Fourier-transzformációs közép infravörös (ATR FT-IR) spektrumokat matematikai előkezeléseknek (normálásoknak, simítással kombinált deriválásoknak) vetettem alá, majd a sokváltozós adatelemzés eszközeivel dolgoztam fel, feltárva a botanikai különbségek és az oldószeres kezelések hatásait.

Filmtabletták bevonatának vizsgálata valós időben gépi látás és mesterséges intelligencia segítségével

Ficzere Máté, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Galata Dorián László** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A filmbevonás egy gyakran alkalmazott művelet különféle gyógyszerkészítmények gyártása során. Bonyolultsága miatt bevonás közben gyakran ellenőrzik a tablettákat, azonban az elkészült termék vizsgálata is kulcsfontosságú annak érdekében, hogy ne kerüljenek bevonási hibával rendelkező tabletták forgalomba.

A filmbevonás a korábbi szakaszos módszerek mellett már megvalósítható folyamatos technológia alkalmazásával is. A folyamatos filmbevonás egy gazdaságosabb, termelékenyebb megoldás a filmtabletták előállítására, ugyanakkor az elkészült tabletták megfelelőségének vizsgálata ez esetben is hagyományos módon történik. Ennek során a tabletták egyedileg nem kerülnek átvizsgálásra, így akár nem megfelelő bevonatú készítmény is forgalomba kerülhet, amely funkcionális bevonatok alkalmazása esetén befolyásolhatja a hatóanyag-leadást is.

Munkám célja egy olyan mérési módszer kifejlesztése volt, mellyel az elkészült tabletták 100%-os átvizsgálása megvalósítható valós időben. Hipotézisem az volt, hogy egy gépi látáson, mesterséges intelligencián és képelemzésen alapuló módszer képes lehet a tabletták bevonási hibáinak felismerésére és kategorizálására, illetve a tabletták bevonatvastagságának meghatározására. A bevonási hibák felismerését YOLOv5 neurális hálózattal, míg az átmérő mérését klasszikus képelemzéssel hajtottam végre. Végül ellenőriztem, hogy az általam kifejlesztett módszerek rendelkeznek-e akkora áteresztőképességgel, hogy in-line módon integrálhatóak legyenek egy folyamatos gyártósorba.

Először előállítottam a szükséges tablettákat, majd végrehajtottam filmbevonásukat. Ezután létrehoztam egy részükből a valós bevonási hibákat modellező tablettacsoportot. A róluk készült képek segítségével tanítottam a YOLOv5 algoritmust, mellyel ezután a futószalagon haladás közben ismerttettem fel a tabletták hibáit. A tabletták átmérőjének méréséhez a filmbevonás során vett mintákat használtam fel, és a képelemzéssel kapott adatokat a gyógyszeripari gyakorlatnak megfelelően a mérlegen mért tömegnövekedésükkel vettem össze. Végül végrehajtottam a módszerek lehetséges méretnövelésének vizsgálatát, feltérképezve a bennük rejlő további potenciált. Az így kialakuló rendszer felhasználásával lehetőség nyílik az elkészült filmtabletták 100%-os átvizsgálására valós időben.

Antioxidánsokban gazdag szőlőhéjkivonat stabilizáló képességének vizsgálata polietilénben

Furó Lili, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Tátraaljai Dóra** tudományos munkatárs
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Dr. Pukánszky Béla Professzor Emeritus
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Konzulens: **Takács Kata** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

A műanyagok újrahasznosítása egyre nagyobb hangsúlyt kap napjainkban. A fizikai újrahasznosítás során azonban számos nehézséggel kell szembenézni. Az egyik ilyen nehézség, a polimerek degradációja, kémiai szerkezetének megváltozása. Ahhoz, hogy a polimer több ciklust kibírjon a feldolgozógépekben és a felhasználás során, hatékony stabilizátor-csomagokat kell alkalmazni. A természetes eredetű adalékanyagok alkalmazása csökkenti a műanyag termékek esetleges egészségkárosító hatását, ezért célul tűzttem ki egy olyan természetes kivonat felhasználását, amelynek előállítása viszonylag egyszerű, gyors és költséghatékony.

Munkám során borászati melléktermékből, szőlőhéjból kivont, antioxidánsokban gazdag kivonatot alkalmaztam nagysűrűségű polietilén többszöri feldolgozásához, annak érdekében, hogy megtudjam, felhasználható-e feldolgozási stabilizátorként az iparban jelenleg a legnagyobb mennyiségben használt fenolos antioxidáns helyett. Phillips típusú polietilént alkalmaztam, amelynek a degradációja hosszúláncú elágazások kialakítását eredményezi. Ez együtt jár a polimer folyóképségének csökkenésével és a műanyag termék mechanikai tulajdonságainak romlásához vezet. Az alkalmazott szőlőhéj kivonat koncentrációját 0 és 1000 ppm között változtattam hét lépésben. Mivel az ipari antioxidáns csomagok mindig tartalmaznak valamilyen szekunder antioxidánst, 1000 ppm kereskedelmi foszfor tartalmú antioxidánst is adagoltam a mintákhoz. Minden koncentrációnál hatszori degradatív extrúziót végeztem. Az így kapott nagyszámú mintát infravörös spektroszkópiával, a folyóképség mérésével, a maradék termooxidatív stabilitás vizsgálatával és a szín mérésével jellemeztem.

Eredményeim azt mutatták, hogy a kivonat nagyon hatékony volt feldolgozási stabilizátorként. Már 250 ppm adagolása mellett meg tudta akadályozni a polimer folyóképségének csökkenését a hat egymást követő extrúzió során. Hosszú távú maradékstabilitást azonban nem biztosít a polietilénnek, az oxidációs indukciós idő a várttól elmarad, valamint a kivonat jelentősen elszínezi a polimert, különösen a 250-1000 ppm koncentrációtartományban. Az elszíneződés a másodlagos nyersanyagok piacán azonban megszokott jelenség, az adalék elterjedését ez nem biztos, hogy befolyásolná.

Macskamenta kevertetési extrakciójának optimalizálása

Balogh Marcell János, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Vági Erika Mária**, egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Az extrakciós technológiák költségigényének jelentős része magához az extrakciós lépéshez köthető, így elengedhetetlen megismerni a folyamat kinetikáját és a termék minőségét befolyásoló tényezők hatását a hozamra.

A macskamenta (*Nepeta cataria*) gyógynövényként való felhasználása több évszázados múltra tekint vissza a népi gyógyászatban, leveleiből, virágaiból teát, tinktúrát főznek, aminek nyugtató, fájdalomcsillapító hatása van, ételek ízesítésére, valamint színezékként is használatos [1], [2]. Széleskörű farmakológiai hatással bír, többek között antidepresszáns, lázcsillapító, görcsoldó, légúti megbetegedések ellen is hatékony. Intenzíven kutatott terület a rovarriasztó hatása, amivel a szintetikus vegyszer alapú rovarűző szereket ki lehetne váltani [3]. Jellegzetes magatartásváltozást vált ki a macskákból, akikre pszeudo-narkotikus hatást gyakorol, az állatok ugrálni, játszani kezdenek a növényvel. A macskamenta illóolajai antioxidáns, antibakteriális és gombaellenes hatással rendelkeznek, elsősorban a macskamenta nemzetséget (*Nepeta*) jellemző molekula, a nepetalakton miatt, ami az iridoid típusú monoterpének csoportjába tartozik, de jelentős mennyiségben tartalmaz flavonoidokat, polifenolos vegyületeket, tanninokat és szteroidokat egyaránt [4].

Munkám során macskamenta kevertetési extrakciójának optimalizálását végeztem laboratóriumi körülmények között. Vizsgáltam a folyamat kinetikáját különböző extrakciós idők (15, 30, 45, 60, 90, 120, 180 perc) mellett, 40%, 70%, 96% és abszolút etanol oldószerek felhasználásával, valamint vizsgáltam az oldószer víztartalmának és az extrakció idejének hatását az extrakciós hozamra nézve 3² kísérletterv segítségével. Továbbá vizsgáltam a változó paraméterek hatását a kivonatok összpolicfenol tartalmára, illetve műszeres analitikai módszerek segítségével összehasonlítottam a különböző extraktumok biológiailag aktív komponenseinek mennyiségi változását.

[1] A. Sharma, G. A. Nayik, and D. S. Cannoo. *Plant and Human Health: Pharmacology and Therapeutic Uses*, **2019**, 3, 285–299.

[2] J. Bruneton. *Pharmacognosy: Phytochemistry Medicinal Plants*, **1999**, 2, 589-294

[3] M. E. Davies, D. Tsyplenkov, V. J. J. Martin. *preprint*, **2021**

[4] A. Sharma, R. Cooper, G. Bhardwaj, D. S. Cannoo. *Journal of Ethnopharmacology*, **2021**, 268.

Biszfénol-A monomer előállítása poli(biszfénol-A-karbonát) hidrotermális depolimerizációjával

Hegyi Mihály, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Kőzelné Dr. Székely Edit** egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Béri János** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Korunk nagy kihívása a folyamatosan növekvő gazdaság igényeinek, és környezetünk véges erőforrásainak összehangolása. A műanyagok esetén számos különleges tulajdonságuk mellett jelentős problémát jelent, hogy lebomlásuk a természetben sokszor nehezen, vagy egyáltalán nem megy végbe, emellett a környezetbe kikerülő műanyag hulladék sokféle környezetvédelmi és egészségügyi kockázatot hordoz. A műanyagok újrahasznosítása lehetőséget teremt a hulladék visszacsatornázására a gazdaság vérkeringésébe alapanyagként. Fontos eszköz ebben a törekvésben a közvetlen újrafelhasználás mellett a konverziós technológiák területe, vagyis a műanyag hulladék kémiai átalakítása az ipar számára hasznosítható anyagokká. A konverziós technológiák csoportjába tartozik a hidrotermális depolimerizáció, melynek lényege, hogy az alapanyagot magas hőmérsékletű és nyomású vízben reagáltatva a polimer monomerjét, vagy más értékes bomlástermékeit nyerjük vissza.

A poli(biszfénol-A-karbonát) egy műszaki műanyag, különleges tulajdonságai miatt speciális alkalmazási területei az autóipartól az optikai adathordozókig terjednek. Az irodalomban csak szakaszos hidrotermális depolimerizációját vizsgálták jellemzően 250-350 °C hőmérsékleten 1-2 órás reakcióidő mellett. Sokféle és nagymennyiségű oldott bomlástermék keletkezését figyelték meg 5 - 8,24% maximális biszfénol A monomerhozam mellett. [1-2]

Dolgozatom célja egy olyan eljárás fejlesztése, melyben a poli(biszfénol-A-karbonát)-ból hidrotermális depolimerizációval biszfénol-A nyerhető ki. A megtervezett és megvalósított fél-folyamatos berendezésben megfelelő tartományban szabályozott átlagos tartózkodási idő (1-3 perc), hőmérséklet (300 °C), nyomás (12 MPa) és segédáram (0,45 mol/dm³ koncentrációjú NaOH-oldat) mellett a polimer teljes konverziója elérhető. A folyadéktermék feldolgozására kidolgozott kicsapásos kristályosítással kombinálva az optimalizált hidrotermális depolimerizációt 55% preparatív monomerhozamot értem el jó ismételhetőség mellett. Az így kristályos formában kinyert biszfénol-A monomer termék tisztasága kiemelkedő, további tisztítási lépések nélkül is 94%-os.

- [1] H. Tagaya, K. Katoh, J. I. Kadokawa, and K. Chiba, *Polym. Degrad. Stab.*, 1999, 64, 289-292.
- [2] X. Zhao, L. Zhan, B. Xie, and B. Gao, *Chemosphere*, 2018, 207, 742-752.

Karvedilol segédanyagok kristályosítása

Forján Lilla, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Pataki Hajnalka** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Szabó-Tacsi Kornélia** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Gyógyszerhatóanyagok segédanyagok jelenlétében végzett heterogén kristályosítása hatékony alternatívája lehet a hatóanyag fizikai tulajdonságainak módosítására. A leggyakrabban alkalmazott készítménytechnológiai segédanyagok (polimerek) a kristályosodás mechanizmusának módosításával változtatható a hatóanyag szemcsemérete, szemcseméret-eloszlása, szemcsealakja, kontrollálható a kristályszerkezet. Ezen fizikai tulajdonságok javíthatják az adott hatóanyag felszívódását, kedvezőbb porreológiai tulajdonságok miatt feldolgozhatóságát. A gyártás során alkalmazott formulálási lépések száma ezáltal leredukálható, mellyel energia- és költséghatékonyabbá válik. A segédanyagok kristályosításban betöltött szerepére több szakirodalmi példa létezik, ám pontos mechanizmus magyarázatok máig vitatottak, ennek ismeretében kutatómunkám célja egy modern gyógyszerhatóanyag segédanyagok kristályosítása, kedvezőbb terméktulajdonságok elérésére.

Karvedilol szakaszos hűtéses kristályosítását végeztem Polivinil-Pirrolidon (PVP K90) segédanyag alkalmazásával, mely során vizsgáltam a segédanyag kristályosításban betöltött szerepét, a különböző folyamatparaméterek függvényében. Előkísérleteim alapján a PVP hatóanyag aggregációt elősegítő hatását tapasztaltam, így a továbbiakban 2 változós kísérlettervben vizsgáltam a hűtési sebesség és a polimer koncentráció hatását a termék szemcseméretére, szemcseméret-eloszlására és habitusára, valamint az ezekből adódó gördülékenységre. Oldhatósági kísérleteket végeztem különböző polimer arányokkal, az ideális oltási hőmérséklet kiválasztására. A kísérletterv eredményeiből megállapítottam, hogy a polimer nélküli referencia termékhez képest a polimer a vizsgált paraméter térben (0,1 °C/perc–1 °C/perc, 2–10 %) a termelést csekély mértékben módosította (89% → 78%), gyors hűtés és oltás mellett aggregálódást tapasztaltam. Oltás nélkül gyors hűtési sebességek mellett a rendszer nem kristályosodott. A hatóanyag kristályszerkezete egyik kísérleti beállításnál sem változott, minden esetben a kinetikailag preferált polimorfot azonosítottam. A továbbiakban az aggregálódás elősegítésére kísérletsorozatot végeztem számos hűtési beállítással (0,1 °C/perc; 0,29 °C/perc; 0,55 °C/perc; 1 °C/perc) állandó polimerkoncentráció mellett, melyben vizsgáltam az oltás szerepét. Az eredmények alapján a polimer aggregálódást elősegítő hatása oltás nélkül, kis hűtési sebességek mellett vált jelentőssé, így az oltásnak szignifikáns hatása volt. A szférikus kristályaggregátumokból álló termék gördülékenysége több kategóriát javítva kedvező minőségű lett.

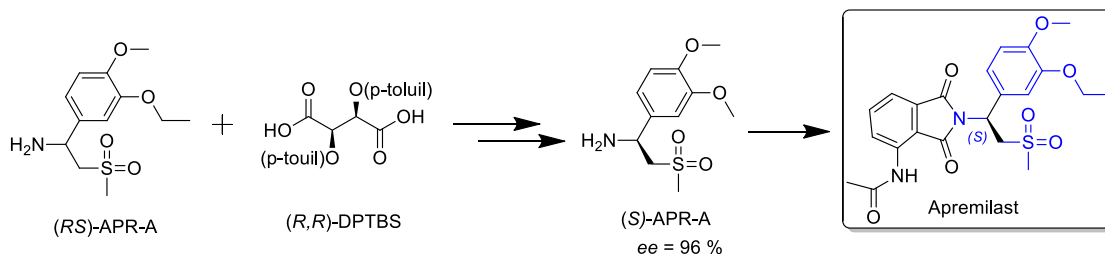
Apremilast gyógyszerhatóanyag-szintézis kulcsfontosságú intermedierének rezolválása

Nguyen Thuy Hong Ha, IV. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Mátravölgyi Béla** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjainkban a kismolekulás gyógyszerhatóanyagok körülbelül ötven százaléka rendelkezik aszimmetria centrummal [1]. A gyógyszeriparban a sztereoizomerek szétválasztása, külön-külön tiszta formában történő nagytisztaságú előállítás és részletes vizsgálata alapvető feladat. Erre a célra ma már számos technológiai módszer ismert. Közülük is gyógyszeripari környezetben a leggyakrabban alkalmazott módszer a diasztereomersópár-képzésen alapuló rezolválás.

Kutatócsoportunkban az elmúlt években gyógyszeripari megbízások és alapkutatási projektek keretében számos diasztereomersópár-képzésen alapuló rezolválási eljárást fejlesztettek ki. Egyike ezeknek az Apremilast gyógyszerhatóanyag (APR) kulcsfontosságú intermedierének az APR-A, primeramin-származéknak a racém keverékből történő kinyerése [2]. Az APR hatóanyag kívánt biológiai hatás kiváltására kizárólag az *S*-enantiomer rendelkezik. Az APR kereskedelmi forgalomban Otezla gyógyszer néven található meg, melynek kiemelkedő jelentősége van az arthritis psoriatica, psoriasis és a Behcet-kór kezelésekor [2]. Kutatómunkám céljából, az APR-A intermedier enantiomereinek szétválasztására alkalmas rezolválóágensek körének kibővítése, és a nem hasznos enantiomer további hasznosítási lehetőségének vizsgálata. Hatékony rezolválószernek az *(R,R)*-di-*para*-toluill-borkősavat (DPTBS) találtam, mely könnyen hozzáférhető és ipari környezetben is használható, könnyen regenerálható. Kísérleti munkámban az eljárás különböző meghatározó paramétereinek felderítésére és optimalizálására fókuszáltam. Eredményül egy olyan kristályosításon alapuló rezolválási eljárást fejlesztettünk, mellyel magas enantiomertisztasággal (*ee* 96%) és jó termeléssel kapható meg a kívánt enantiomer. Ezen felül további vizsgálatokat végeztem az APR-A rezolváló ágensként való hasznosítására, elsősorban atropizomer vegyületek enantiomereinek elválasztásában. Rezolválószerként való hasznosításban egy fenilpirrol alapvázú, primeramid- és karboxil-csoportokat tartalmazó atropizomer vegyület (CF₃-CPBA) esetén értem el kimagasló eredményeket.



[1] E. Francotte, Contemporary analysis of chiral molecules, *LCGC Europe* 29 (suppl) (2016) 31-37.

[2] F. Faigl, J. Doubsky, R. Klvana, J. Richter, E. Fogassy, B. Mátravölgyi, Á. Mizsák, A Method of chiral resolution of the key intermediate of the synthesis of Apremilast and its use for the preparation of the pure Apremilast, *W0216161996A1 patent* (2016)

Folyamatos olvadék granuláláson alapuló rendszer koffeintartalmú tabletták előállítására

Fekete Dániel, IV. évf. BSc

Témavezető: **Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Záhonyi Petra** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A folyamatos technológiák egyre nagyobb szerepet töltenek be a vegyiparban. Az egyik legnagyobb jele ennek, hogy a hagyományosan szakaszos gyártást preferáló gyógyszeripar területein is kezd teret nyerni magának ez a gyártási módszer. Ez köszönhető a folyamatos gyártás megannyi előnyének, illetve annak, hogy az elmúlt évtizedekben jelentősen megnőtt a folyamatos technológiák fejlesztésével foglalkozó kutatások száma.

A folyamatos technológiák közül az ikercsigás granulálás egy alternatív megoldása lehet a jelenleg leggyakrabban használt szakaszos granulálásnak. A granulálás egy, a gyógyszeriparban gyakran alkalmazott eljárás, mely alkalmas porkeverékek porfolyási tulajdonságainak és tablettázhatóságának javítására, továbbá elkerülhetővé teszi a különböző szemcseméretű alkotók fajtázódását is. Az olvadék granulálás, mely a granulálás egyik fajtája, különösen ígéretes technológia. Az eljárás során a részecskék aggregálása egy olyan kötőanyag jelenlétének köszönhető, melyet olvadáspontja közelébe vagy fölé melegítenek, így a hatóanyag megolvasztása vagy víz hozzáadása a rendszerhez elkerülhető.

TDK munkám során koffein-tartalmú porkeverék folyamatos olvadék granulálását valósítottam meg polietilén-glikol kötőanyaggal egy ikercsigás készülékben. Céлом egy integrált folyamatos rendszer megalkotása volt, mely az adagolást és az olvadék granulálást követően a folyamatos hűtést, őrlést („regranulálást”) és tablettázást is tartalmazza. Munkám során sikerrel létrehoztam a fent említett folyamatos rendszert, melynek segítségével javítottam a kezdeti, koffein hatóanyag tartalmú keverék porfolyási tulajdonságait és tablettázhatóságát. A granulátumokat és a belőlük készített tablettákat analitikai vizsgálatoknak vettem alá, hogy megtaláljam a rendszer optimális működési paramétereit, továbbá a rendszert valós időben, in-line is nyomon követtem. Végül a rendszer méretnövelését is sikerrel hajtottam végre.

Ullmann-típusú C–N kapcsolás vizsgálata biomassza-alapú 1,4–pentándiolban

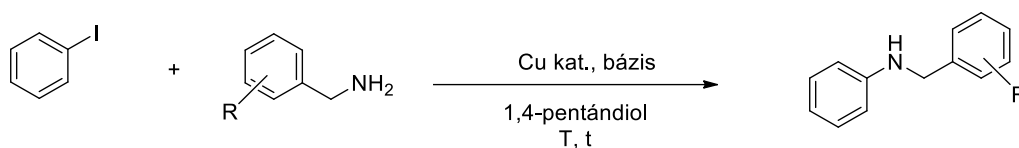
Árvai Csaba, II. évf. (MSc)

Témavezető: Dr. Mika László Tamás egyetemi tanár
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

A különböző aril–halogenideknek Ullmann-típusú aminálása rendkívül hatékony módszer különböző potenciálisan biológiailag aktív *N*-artalmú vegyületek előállítására.¹ Nem meglepő tehát, hogy a finomkémiai és gyógyszeripari területeken igencsak megnőtt a reakció jelentősége elmúlt években. A reakció hatékonyságát több fontos paraméter is befolyásolja, úgymint az alkalmazott réz–só katalizátor, a bázis és az oldószer. Utóbbi helyes megválasztásával a szintézis környezetbarátabb megvalósítására nyílik lehetőség.²

Az 1,4–pentándiol (1,4–PDO) egy nem illékony, átlátszó folyadék, amely a biomassza alapú C₅ platform molekulák, mint például a levulinsav és a γ -valerolakton, katalitikus hidrogénezésével állítható elő. A vegyület alacsony gőztenzióval rendelkezik még magas hőmérsékleten is, továbbá két hidroxil csoportja lévén ligandumként alkalmazható a réz katalizátornál. Az 1,4–PDO potenciálisan alkalmazható Ullmann–kapcsolások során oldószerként, így kiváltva az illékony és elterjedtebben alkalmazott oldószereket, mint például a dimetil–szulfoxidot vagy a dimetilformamidot.³

Előadásomban bemutatom az 1,4–pentándiol oldószerben elvégzett Ullmann-típusú C–N kapcsolások eredményeit, amely kutatómunka során számos paraméter hatását vizsgáltam a hozamra. A reakció egyenlete és a körülményei általánosan az 1. ábrán láthatóak. A vizsgált paraméterek közé tartozott az alkalmazott réz katalizátor, a bázis, a hőmérséklet, különböző oldószer szennyezők és az aromás gyűrű szubsztituenseinek hatása a reakció eredményességére.



1. ábra

Referenciák:

¹ Kwong, F. Y.; Klapars, A.; Buchwald, S. L. *Org. Lett.* **2002**, 4, 581–584.

² Orha L.; Tukacs J. M.; Gyarmati B.; Szilágyi A.; Kollár L.; Mika L. T. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2018**, 6, 5097–5104.

³ Árvai, C.; Mika, L. T. Ullmann-type C–N coupling reaction in 1,4-pentanediol, a biomass based solvent 48th International Conference of SSCHE, May 23–26, 2022, Tatranske Matliare, Slovak Republik. Abstract id: 34, ISBN: 978-80-8208-070-7

Hibrid nanotöltőanyaggal erősített PP-kompozitok: szerkezet és tulajdonságok

Koncz Medárd, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Ferdinánd Milán** PhD-hallgató
BME Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék

Többféle nanotöltőanyag polimerekben történő együttes alkalmazásakor egyenletesen diszpergált szerkezettel, valamint kiemelkedően nagy merevséggel és szilárdsággal rendelkező szerkezeti anyagok állíthatók elő. Számos, szakirodalomban megjelent publikáció legalábbis így módon számol be a hibridizáció nanokompozitok fejlesztésében mutatott jelentőségéről. A tanulmányok szerzői több esetben a komponensek egy adott anyagi jellemzőre gyakorolt szinergikus hatására is felhívják figyelmünket.

A szakirodalomban található, általános érvényűnek vélt kijelentések további igazolása, esetleg cáfolata érdekében polipropilén mátrixú kompozitokat készítettünk egy új, kereskedelmi forgalomban kapható hibrid nanotöltőanyag és egy referenciaként szolgáló mikroméretű erősítőanyag, talkum felhasználásával. A nanotöltőanyag átfogó jellemzése során bizonyítást nyert, hogy annak két komponene a szepiolit és laponit, felülete pedig egy kvaterner ammóniumsóval van kezelve. Bár a nanotöltőanyag feldolgozás során kis, anizotróp szemcsék formájában egyenletesen osztható el a mátrixban, aggregációval már kis töltőanyagtartalom esetében is számolni kell. Az aggregátumok jelenléte, valamint a felületkezelésből eredő elégtelen feszültségátvitel miatt a nanotöltőanyag a polipropilén mátrix tulajdonságait a talkumhoz képest csak mérsékelten javította.

Vizsgálati eredményeink felhívják a figyelmet arra, hogy a hibridizáció nem okvetlenül jelent megoldást a nanokompozitok előállításánál felmerülő homogenizálási problémákra, továbbá arra, hogy a többféle társítóanyagot tartalmazó hibrid szerkezeti anyagok teljesítménye nem minden esetben felel meg az elvárásoknak, a komponensek szinergikus hatása gyakran elmarad.

Kapszaicinoidok és prekurzoraik előállítása áramlásos kémiai rendszerekben

Orosz János Máté, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Bálint Erika** egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Mátravölgyi Béla egyetemi adjunktus

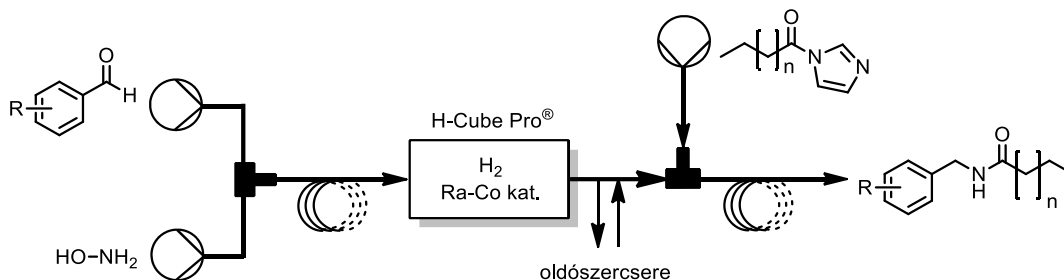
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Rávai Bettina** PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A kapszaicint, mint a csípős paprika fő hatóanyagát széles körben alkalmazzák a gyógyszer- és az élelmiszeriparban egyaránt. Kutatómunkám során célul tűztük ki kapszaicin-származékok szintézisét áramlásos kémiai rendszerekben, mely során a hagyományos szintézisekhez képest egy gyorsabb és nagyobb hozamú technológia kifejlesztésére törekedtünk. Továbbá célunk volt a kapszaicinoidok mezőgazdasági alkalmazhatóságának vizsgálata.

A kapszaicinoidok háromlépéses szintézisét egy folyamatos, áramlásos kémiai rendszerben terveztük megvalósítani. Ehhez első lépésben célunk volt különböző benzaldehidekből kiindulva aldoximok képzése, melyeket folyamatos hidrogénező reaktoron (H-Cube Pro®) átvezetve, a megfelelő benzil-aminokká kívántunk alakítani. Az aminokat aktivált, hosszú szénláncú karbonsavszármazékokkal Asia® rendszerben acilezve jutottunk a kapszaicinszármazékokhoz.



Az egyes lépések optimalizálását modellreakciókon keresztül végeztük, melyek során több paraméter (áramlási sebesség, hőmérséklet, nyomás) hatását vizsgáltuk. A reakciókat kromatográfiás (GC, HPLC) és tömegspektrometriás (GC-MS) módszerekkel követtük, a termékeket oszlopkromatográfia segítségével tisztítottuk. Az előállított vegyületek szerkezetét ^1H , ^{13}C NMR és nagyfelbontású tömegspektrometriás (HRMS) vizsgálatokkal igazoltuk.

A kapszaicinoidok *Fusarium graminearum* gombafajra gyakorolt gombaölő hatását együttműködés keretében teszteltük, továbbá vizsgáltuk a kapszaicinoidok komplexképzését hidroxipropil- β -ciklodextrinnel, a nagyobb vízoldhatóság és biocid hatás növelése érdekében.

2-Hidroxipropil- β -ciklodextrin módosítása politejsav égésgátlására

Ötvös Bettina, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Decsov Kata Enikő** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A környezetvédelem jelentőségének növekedésével egyre nagyobb igény mutatkozik arra, hogy a tartós fogyasztási cikkek megújuló alapanyagokból készüljenek. Ezzel együtt jelentősen megnőtt a politejsavból készült tartós termékek iránti kereslet. A politejsav biodegradálható és jó mechanikai tulajdonságokkal rendelkezik, azonban olvadékcsepegési tulajdonsága miatt égésgátlása egyes műszaki területeken biztonságtechnikai szempontokból elengedhetetlen.

Számos módszer közül a foszfortartalmú, felhabosodó égésgátló rendszerek használata terjedt el leginkább. A gyakran alkalmazott ammónium-polifoszfát (APP) pentaeritrit (PER) adalék kombináció környezetbarát alternatíváját jelenthetik a megújuló eredetű szenesedő komponenst tartalmazó égésgátló rendszerek.

A ciklodextrinek (CDk) megújuló forrásból állíthatók elő és alkalmasak szénforrásnak felhabosodó égésgátló rendszerekben. Közülük a β -ciklodextrinek használata különösen elterjedt kedvezőbb árak miatt, továbbá zárványkomplex képzési tulajdonságuk miatt a többi adalékanyag homogén eloszlását is segíthetik a polimer mátrixban.

A kutatócsoportunkban végzett munka korábbi eredményei rámutattak, hogy a 2-hidroxipropil-béta-ciklodextrin alaki tényezője is számottevően befolyásolja az égésgátló kompozit tulajdonságait; APP alapégésgátló mellett a mikroszálás szerkezetű CD jobb eredményeket ért el az éghetőségi vizsgálatokon, mint a por formájában alkalmazott adalék.

Munkám során egy új égésgátló adalékot állítottam elő a politejsavhoz (PLA), amelyhez szenesedő ágensként foszforos szilánnal (PSil) felületkezelt 2-hidroxipropil-béta-ciklodextrint (HPBCD-t) alkalmaztam. A megfelelő oldószer kiválasztása után a reagenseket különböző arányban tartalmazó adalékokat infravörös spektroszkópiával (IR) és termogravimetrikus analízissel (TGA) vizsgálva kiválasztottam a megfelelő összetételt. A választott PSil:HPBCD arány mellett kétféle adalékot készítettem; egyikben por, másikban mikroszálás szerkezetű HPBCD-t alkalmazva. Az adalékokat APP alapégésgátló mellett ömledékkeveréssel PLA mátrixba ágyaztam, majd a kompozitokból mintalapokat préseltem. A kétféle kompozit termikus és éghetőségi jellemzőit az égésgátlót nem tartalmazó PLA-val és a csak APP alapégésgátlót tartalmazó PLA kompozitokéval vetettem össze. A kompozitokon elvégzett éghetőségi vizsgálatok eredményei azt mutatják, hogy mindössze 3% PSil-lel felületkezelt, mikroszálás szerkezetű HPBCD adagolása a 15% APP-t tartalmazó PLA kompozitok oxigénindexét 25%-ról 37,5%-ra növeli, továbbá mintegy 50%-kal mérsékli a PLA hőkibocsátási maximumát. A PSil-lel kezelt HPBCD mikroszál kedvező hatását elsősorban az APP-vel mutatott fokozott fizikai és kémiai kölcsönhatással, valamint a megnövelt szenesedési képességgel és termikus stabilitással magyaráztam, amelyek együtt megnövelt szerkezeti integritású, hatékony tűzgátló védőréteg kialakulásához járulnak hozzá.

Ultrahangos extrakció kinetikai vizsgálata kerti kakukkfű (*Thymus vulgaris L.*) modellnövényen

Lőrincz László Tamás, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Vági Erika Mária** egyetemi adjunktus
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Konzulens: **Béri János** PhD-hallgató
BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék

Az ultrahangos extrakció egy lehetséges zöld alternatívája a konvencionális extrakciós eljárásoknak. Segítségével csökkenthető a folyamat idő-, oldószer-, és energiaigénye. Az ultrahang hatására fellépő intenzív keveredés és kavitációs jelenségek befolyásolják a szilárd-folyadék anyagátadást és annak sebességét. A folyamatot jellemzően két fő szakaszra bontják: egy kezdeti meredek felfutású szakaszra, ahol a felületi leoldódás dominál, és egy ezt követő, feltehetően szilárd tömbfázisból történő lassabb diffúziós és kioldódási szakaszra [1].

Munkám során a kerti kakukkfű szakaszos ultrahangos extrakcióját vizsgáltam 99,8 %-os etil-alkohol extrahálószerrel, 1:15 [g kakukkfű/ml] aránnyal, 666,67 W/l energiasűrűség mellett. Vizsgálataimat 302, 315, valamint 333 K temperálás mellett végeztem el, 0,1–0,2 és 0,5–0,63 mm-es szemcseméretű kakukkfűfrakciókon. Minden hőmérsékleten, mindkét frakció esetén öt mérési pont készült (1, 3, 5, 10 és 20 percig). Minden mérés háromszori belső mintavétellel és mérési pontonként három ismétléssel történt, az eredmények mérési bizonytalanságának vizsgálatára.

Eredményeim az említett klasszikus extrakciós folyamatokra jellemző két fő szakasztól eltértek. A felfutási szakasz nem megfigyelhető, az első mérési pontnál jellemzően 50% feletti a kihozatal a maximális hozamhoz [g extrakt/ 100 g száraz növény; Y] viszonyítva (1. táblázat). A folyamat feltérképezésére az irodalom-

Szemcseméret [mm]	T [K]	$Y_{1\text{ perc}}/Y_{\text{max}}$ [-]
0,5-0,63	333	0,624
	315	0,479
	302	0,463
0,1-0,2	333	0,815
	315	0,733
	302	0,788

1. táblázat: 1 percig végzett ultrahangos extrakció relatív termelése

ban eddig alkalmazott empirikus és analitikus ultrahangos extrakcióra korábban alkalmazott egyenletek [2-3] vizsgálatával kimutatható az első szakasz hiánya a mérési tartományban. Vagyis megfelelően magas energiasűrűség mellett a lemosást közel pillanatszerűen meg lehet valósítani. Mivel a mérés hőmérsékletétől függetlenül tapasztalható a jelenség, feltételezhető, hogy hőérzékeny anyagok extrahálásakor a módszer hatékonyan alkalmazható.

- [1] Petrović S. S. és munkatársai, "Comparative analyses of the diffusion coefficients from thyme for different extraction processes," *Journal of the Serbian Chemical Society*, 77. kötet, 6. kiadás, oldalak 799–813, 2012, doi: [10.2298/JSC110616009P](https://doi.org/10.2298/JSC110616009P).
 [2] Tao Y. és munkatársai, "Kinetic modeling of ultrasound-assisted extraction of phenolic compounds from grape marc: Influence of acoustic energy density and temperature," *Ultrason Sonochem*, 21. kötet, 4. kiadás, oldalak 1461–1469, 2014, doi: [10.1016/j.ultsonch.2014.01.029](https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2014.01.029).
 [3] Ali A. és munkatársai "Ultrasound-assisted extraction of natural antioxidants from betel leaves (Piper betle): Extraction kinetics and modeling," *Separation Science and Technology (Philadelphia)*, 53. kötet, 14. kiadás, oldalak 2192–2205, Sep. 2018, doi: [10.1080/01496395.2018.1443137](https://doi.org/10.1080/01496395.2018.1443137).

Koffeintartalmú tabletták vizsgálata gépi látási rendszerrel

Bicsár Rozália, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Nagy Zsombor Kristóf** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Mészáros Lilla Alexandra** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A gyógyszeripar jelenleg egy paradigmaváltási folyamaton megy keresztül, mely során a hagyományos, szakaszos technológiák helyett a folyamatos technológiák kerülnek előtérbe. Ez a folyamat olyan modern analitikai eszközöket igényel, melyek a folyamatfelügyelő és elemező rendszer (PAT) részeként alkalmazhatók, valamint hozzájárulnak a termékbe tervezett minőség (QbD) szemléletének megvalósulásához. A folyamatos technológiák esetében a folyamatok megértésében és szabályozásában jelentős szerepe van a valós idejű adatgyűjtésnek, a gyártás során végbemenő folyamatok követésének és a többváltozós adatelemzési módszerek alkalmazásának.

A gépi látási rendszereket széles körben alkalmazzák számos iparágban, azonban gyógyszeripari felhasználása még nem elterjedt. Kutatásom célja kísérletekkel igazolni a gépi látási rendszerek relevanciáját PAT eszközként a gyógyszeriparban, szilárd gyógyszerformák minőségellenőrzésére. Kísérleteim során koffein modellhatóanyagot tartalmazó tablettákat vizsgáltam gépi látási rendszerrel. Különböző préserő szinteken állítottam elő tablettákat, melyekről fényképeket készítettem látható (VIS) megvilágításban. A képek feldolgozását és elemzését MATLAB környezetben futó algoritmus segítségével végeztem. Az általam vizsgálni kívánt paramétereket a préserő, a törési szilárdság, a porozitás, a szétesési idő és az *in vitro* kioldódás profilok képezték. A felsorolt paraméterek meghatározásához hullámszerű matematikai képleteken (waveleteken) alapuló algoritmust alkalmaztam, majd parciális legkisebb négyzetek módszerét és mesterséges neurális hálókat alkalmazva prediktív modelleket készítettem. Ezen paraméterek esetében referencia módszerekként hagyományos, off-line mérési módszereket alkalmaztam.

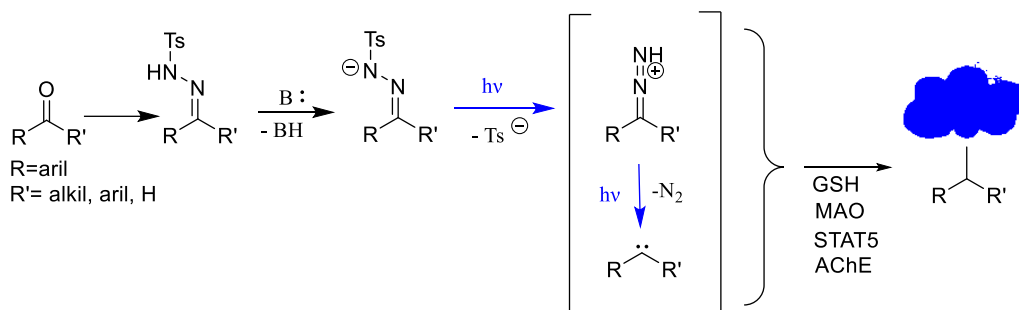
A munkám során elért eredmények alapján a gépi látási rendszerek hasznos eszközei lehetnek a jövőben a tabletták átfogó minőségellenőrzére a folyamatos gyártási technológiák esetében.

Szulfonilhidrazon mint új kovalens kötőelem

Garami Kristóf Noel I. évf. (MSc)

Témavezető: Dr. Ábrányi Balogh Péter tudományos munkatárs, c. egyetemi docens
ELKH TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport

Napjainkban egyre bővül az olyan vegyületek gyógyszerkémiai és kémiai biológiai fejlesztése, melyek adott célfehérjéhez vagy egyéb más, a szervezetben található makromolekulához kovalens módon kapcsolódnak. Az elmúlt évtizedek kutatásai arra világítottak rá, hogy a kovalens kötődést eredményező módszerek közül számos eljárással rendkívül precízen és szelektíven befolyásolható a fehérjék működése, és a vegyületek kötődésének szabályozhatósága ma már nem kérdéses. A kovalens jelölés szabályozható módon is megvalósítható fénnnyel történő aktiválás hatására. Célunk egy olyan új fotoaktiválható funkciócsoport fejlesztése volt, amely segítségével hatékony fehérjejelölés érhető el, és amely széleskörben alkalmazható, és akár a fehérje ligandumának szerkezetébe is „rejtethető”. Kutatómunkám során sikeresen előállítottam egy hozzávetőleg 40 hidrazonból álló vegyülettárat, és igazoltam, hogy tagjai fotoaktiválás hatására GSH-adduktot képeznek.



A vegyületek szintézisét egyszerűen, általában jó termeléssel valósítottam meg. A fotoaktiválás hullámhosszát, a megvilágítás idejét, az alkalmazott pH-t és puffert optimalizáltam. Előállítottam gyógyszerkémiai és kémiai biológiai szempontból érdekes vegyületeket is, melyek egy része kötőelemként használható fel arra, hogy valamilyen kismolekulás nagyaffinitású próbavegyületre, hatóanyagra kapcsoljuk, és ezáltal azt fotoaktiválhatóvá tegyük. Előállítottam továbbá olyan biológiailag aktív szulfonilhidrazonokat, és biológiailag aktív karbohidrazonok szulfonilhidrazon analógjait, melyek potenciálisan alkalmazhatóak fotocímkéhez akár a szerkezet módosítása nélkül is. A biológiailag aktív vegyületeket a kutatócsoportban és együttműködő partnereink segítségével teszteljük a megfelelő fehérjecélpontokon.

Lipofil organokatalizátor alkalmazásának és visszaforgatásának vizsgálata aszimmetrikus szintézisekben

Erdélyi Dóra, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Kupai József** egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

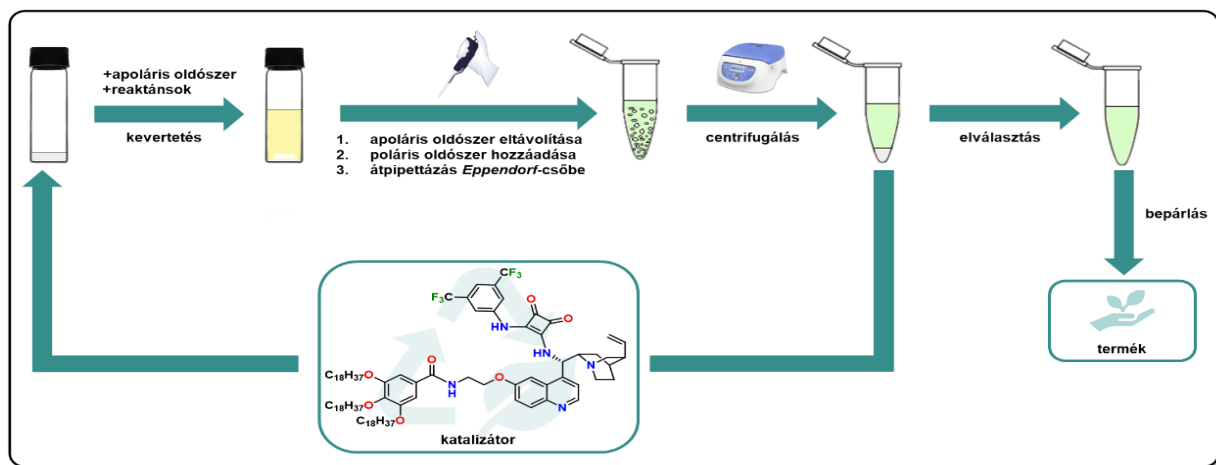
Dargó Gyula PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Napjainkban egyre nagyobb népszerűségnek örvendenek a királis, bifunkcionális organokatalizátorok, melyekkel aszimmetrikus reakciókat lehet enantioszelektíven katalizálni. Ez a vegyiparban, különösen a gyógyszeriparban kiemelten fontos lehet, hiszen a molekula két enantiomerje teljesen eltérő biológiai hatással rendelkezhet.

A katalizátorok visszaforgatása mind környezetvédelmi, mind gazdaságossági szempontból igen fontos feladat. Munkám során egy oktadecil oldalláncokkal módosított cinkona-négyzetamid típusú organokatalizátort állítottam elő, majd alkalmaztam *Michael*-addíciós reakciókban, melyek között szerepelt például az izomgörcsoldó hatású baklofen királis intermedierjének előállítása is.

A katalizátor visszaforgatásakor annak lipofil karakterét használtam ki. Apoláris oldószerekben homogén katalízist valósítottam meg, amely több szempontból előnyösebb a heterogén katalízisnél. A reakció lezajszódása után az apoláris oldószer polárisra cseréltem, majd a kivált katalizátort centrifugálással választottam el a terméket, valamint a reakcióelegy többi komponensét oldó poláris oldószerből. Az így visszanyert katalizátort még négy reakcióciklusban alkalmaztam a katalitikus aktivitás jelentős csökkenése nélkül, kiváló termelés (82–96%) és enantiomerfelesleg (90–92%) értékek elérése mellett.



A *Hafner*-azapentalén újrafelfedezése: az 1,3-bisz(dimetilamino)-2-azapentalén kémiája

Meiszter Enikő, II. évf. (MSc)

Témavezető: **London Gábor** tudományos munkatárs

ELKH TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport

Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető

BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

Hafner és munkatársai 1974-ben sikeresen szintetizáltak egy azapentalén származékot, az 1,3-bisz(dimetidamino)-2-azapentalént (továbbiakban azapentalén). Később, *Heinz-Gerd Kläs* az akkoriban rendelkezésre álló eszközökkel tanulmányozta a molekula tulajdonságait és kémiáját, azonban ezt követően a molekula feledésbe merült.

Kutatómunkám célja az azapentalén szintézis eljárásának kidolgozása és a molekula átfogó jellemzése, illetve reaktivitásának feltérképezése volt. Ehhez elsőként optimalizáltam az eljárást azapentalén előállítására, majd az előállított azapentalént és annak savak hatására bekövetkező reverzibilis protonásódási folyamatának, (anti)aromassági és elektronikai tulajdonságait széleskörűen jellemeztük mérésekkel, illetve elméleti kémiai számításokkal.

Az azapentalén előállítását követően szelektív halogénkési eljárásokat (klórozás, brómozás, jódozás) dolgoztam ki, majd az így előállított halogén származékokat *Suzuki* és *Sonogashira* keresztkapcsolási reakciókba vittem, mely során sikeresen előállítottam trifenil-azapentalént és kétféle, egyszeresen és kétszeresen TIPS-acetilénnel kapcsolt brómozott származékot is. A halogénezési reakciók mellett az azapentalén reaktivitását feltérképeztem más elektrofil szubsztitúciós reakciókban is. Előállítottam formilezett azapentalént, valamint azokapcsolási reakcióba is vittem, mely során 6 új, különböző erősségű elektron donor- és akceptor-csoportokkal szubsztituált azo-azapentalén állítottam elő, melyek *cisz-transz* izomerizációját UV-Vis spektroszkópián vizsgáltam besugárzás hatására.

Biológiailag aktív α -aminofoszfónátok szintézise

Sári Éva Viktória, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Keglevich György** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulensek: **Varga Petra Regina** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Bősze Szilvia tudományos munkatárs
ELTE–ELKH Peptidkémiai Kutatócsoport

Az irodalom szerint, az α -aminofoszfónátok előállítását általában valamilyen katalizátor jelenlétében és oldószerben hajtják végre, terhelve ezzel a környezetet. Kutatócsoportunk célkitűzése a reakciók környezetbarát módon való megvalósítása. Mivel az α -aminofoszfónátokat az α -aminosavak struktúrális P-analógjaiként tartják számon, potenciális bioaktivitással rendelkezhetnek. Munkánk során új típusú α -aminofoszfónátok szintézisét tűztük ki célul. Dolgozatomban benzilamin, benzaldehid-származékok és dietil-foszfát Kabachnik-Fields reakciójában dietil-bezilamino-benzilfoszfónátokat állítottunk elő, melyeket, amin-komponensként felhasználva, paraformaldehiddel és különféle foszfor-reagensekkel egy második Kabachnik-Fields kondenzációban új, két foszfor-funkciót tartalmazó vegyületeket állítottunk elő. A bioaktivitás tesztelésén kívül a reakció körülményeinek optimalizálása, valamint az új vegyületek szerkezetének teljes körű azonosítása is feladatomból volt.

Várhatóan rákellenes 2-metil-1,3-benzodioxol vázrészt tartalmazó fenantridon alkaloidanalogonok szintézise

Kovács Írisz Karolina, I. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kádas István** c. egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulensek: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dr. Simon András egyetemi docens
BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Dr. Varró Gábor kutató vegyészmérnök
Richter Gedeon Nyrt.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszékének *N*-heterociklusok és alkaloidok szintézise kutatócsoportjában hosszú ideje foglalkoznak várhatóan rákellenes fenantridon alkaloid analogonok szintézisével. A fenantridon alkaloidok az *Amaryllidaceae*-alkaloidok egyik fontos alcsoportja, amelynek képviselői közül több bizonyítottan tumorelleses hatású, korlátozott mértékű izolálhatóságuk miatt viszont szükségessé vált az említett alkaloidok és analogonjaik szintetikus előállítása. Kutatócsoportunkban a célunk a fenantridonváz „A” gyűrűjének többféle szubsztituálásával hozzájárulni a fenantridon alkaloidok szerkezet-hatás összefüggéseinek még pontosabb feltérképezéséhez. Bekapcsolódva ebbe a munkába olyan 2-metil-1,3-benzodioxol-származékok szintéziseit kaptam feladatul, melyekből a tanszéken korábban kidolgozott szintézislépések kisebb-nagyobb módosításával fenantridon alkaloid analogonok állíthatók elő. A TDK-munkám során előállított intermedierekről jelen dolgozatomban számolok be. A kulcsintermedierek hatékony előállítása után további négy szintézislépést sikerült megvalósítanom, a közttermékek szerkezetét NMR segítségével azonosítottam.

Egy új, természetes alapú oldószer fejlesztése és alkalmazása

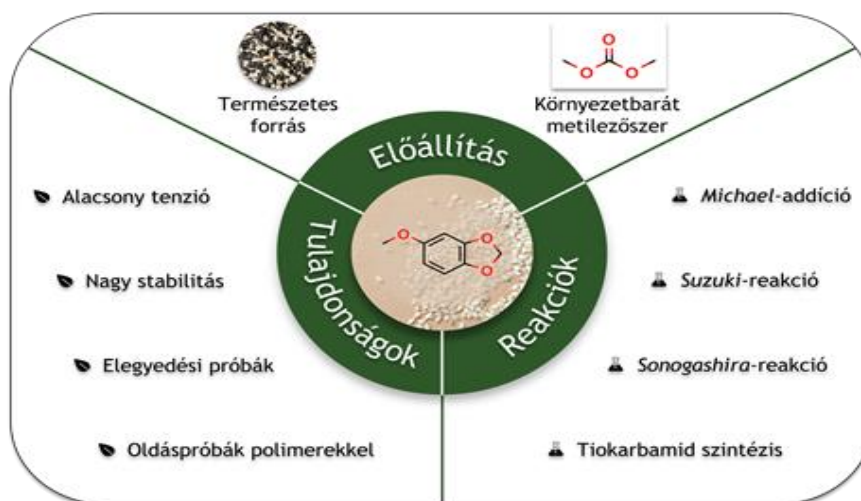
Kis Dávid, IV. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Kupai József** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Dargó Gyula PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A vegyiparban számos területen alkalmaznak oldószereket. Oldószereket használhatnak reakcióközegként a reagensek oldására, valamint a termékek elválasztása és tisztítása során is. Jelentős oldószerhasználónak számít a gyógyszeripar, ahol az ipari eljárások során a felhasznált anyagok tömegének akár 90%-a is oldószerekből származhat.⁴

A környezetvédelmi előírások szigorodásával egyre nagyobb figyelmet kapnak az alternatív oldószerek, amelyek képesek lehetnek kiváltani a hagyományos, jelentős környezetkárosító hatással bíró szerves oldószereket. Az alternatív oldószereknek számos előnyös tulajdonsága van. Általában alacsony a tenziójuk, így kisebb a légkörbe való kikerülésük valószínűsége, nem mérgezőek, nem gyúlékonyak és számos esetben biológiai alapú forrásból vagy vegyipari melléktermékekből előállíthatók.

Munkám során célom volt egy, a fent említett előnyös tulajdonságokkal bíró alternatív oldószer előállítása több különböző módszerrel. A kutatás során sikeresen meghatároztam az oldószer legfontosabb fizikai tulajdonságait, és vizsgálatokat végeztem az oldószer stabilitására vonatkozóan. Az előállított oldószert sikeresen alkalmaztam olyan szén–szén kapcsolási reakciókban, mint a *Suzuki*- és a *Sonogashira*-reakció, illetve az aszimmetrikus *Michael*-addíció, továbbá kiváló oldószernek bizonyult tiokarbamid típusú aszimmetrikus organokatalizátorok szintézise során is.



⁴Constable, D. J. C.; Jimenez-Gonzalez, C.; Henderson, R. K. *Org. Process Res. Dev.* **2007**, *11*, 133–137.

Visszaforgatható szénhidrátalapú koronaéterek előállítása és alkalmazása enantioszelektív katalizátorként

Varga Bertalan, II. évf. (MSc)

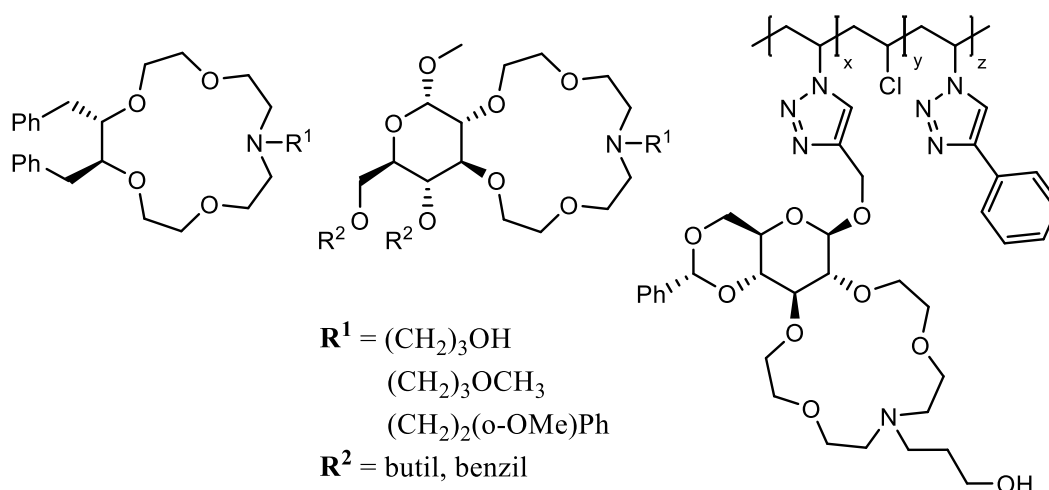
Témavezető: **Dr. Rapi Zsolt** egyetemi adjunktus
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Kutatómunkám célja olyan optikailag aktív koronaéterek szintézise volt, melyek alkalmazhatóak fázistranszfer katalizátorként, valamint az egyes reakciók végeztével hatékonyan visszanyerhetők. A katalizátorok visszaforgatásának megoldására két stratégiát választottam: a makrociklusok bázikus nitrogénatomján keresztüli sósavas sóképzést és extrakciót, illetve a szilárd hordozóhoz kötést.

Munkám során előállítottam négy D-glükóz-, illetve három (2S,3S)-1,4-difenilbután-alapú, savas közegben stabil makrociklust, valamint egy propargilcsoportot tartalmazó lariat étert sikeresen rögzítettem azidcsoportokkal módosított PVC-hez.

Az előállított koronaétereket különböző folyadék-folyadék, illetve folyadék-szilárd fázistranszfer rendszerekben alkalmaztam katalizátorként. A reakciók során általában kis mértékű aszimmetrikus indukciót váltottak ki, azonban néhány esetben közepes mértékű szelektivitást tapasztaltam (67% ee-ig). A folyadék-folyadék fázisú *Darzens*-kondenzációban és epoxidálásban a glükózalapú katalizátorok bizonyultak szelektívebbnek, a szilárd-folyadék kétfázisú reakciókban pedig a difenilbután-alapúak. Néhány kiválasztott reakcióban a katalizátorokat hidroklorid-sóként visszanyertem (80-99%-ban), és többszöri felhasználásuk során közel állandó termelést és szelektivitást tapasztaltam.

A szilárd hordozóhoz rögzített makrociklust egy folyadék-folyadék-szilárd, és egy folyadék-szilárd-szilárd háromfázisú reakcióban vizsgáltam, melyekben közel racém összetételű termékeket kaptam. A regenerált katalizátorok FTIR spektrumai alapján a polimeren *Darzens*-kondenzáció esetén nem történt kimutatható változás, MIRC-reakció során azonban kis mértékben módosult.



Fluoreszcens vegyülettár tervezése és szintézise önjelölő fehérjék vizsgálatához

Unyi Zsombor, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Cserép Gergely** tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport
Konzulensek: **Dr. Kele Péter** tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport
Dr. Németh Krisztina tudományos főmunkatárs
ELKH TTK SZKI Kémiai Biológia Kutatócsoport

Kutatómunkám során fluoreszcens jelzővegyületekkel ellátott önjelölő fehérje szubsztrátokat állítottam elő, mellyel a továbbiakban a beépítés hatékonyságának összehasonlítása és többszínű fehérjelölések megvalósítása a cél. A hat kiválasztott fluoreszcens molekula közül mindegyik szintézise sikeres volt, és ezen molekulákat sikeresen kapcsoltam különböző önjelölő fehérje (Halo-, SNAP-, CLIP-tag) szubsztrátokhoz. A célul kitűzött 17 molekula közül (egy már rendelkezésre állt) eddig 13 molekulát sikeresen előállítottam, a maradék 4 molekulának a szintézise folyamatban van.

A kutatócsoportban az általam előállított jelzővegyületeket különböző sejtvonalakon, módosított fúziós fehérjéken és több különböző festékkombinációval vizsgáltuk. Bár a kísérletek még folyamatban vannak, néhány fontos tapasztalatot már most le tudunk vonni. Minden önjelölő fehérje szubsztrát esetében volt olyan festék, amellyel hatékony jelölést tudunk megvalósítani. Emellett tapasztaltunk eltérést a különböző festékekkel módosított szubsztrátok beépítési hatékonyságában (a jelölés intenzitásában és a háttér okozta jel/zaj arányban is), és ugyanazon jelzővegyület másként viselkedett az önjelölő fehérjével módosított fehérjétől függően is. Végül a legjobbnak ítélt jelzővegyület-kombinációkkal hatékony két-, illetve háromszínű jelölést sikerült megvalósítani.

Fluoreszcens ligandumok előállítása G-fehérje kapcsolt receptorok jelölésére

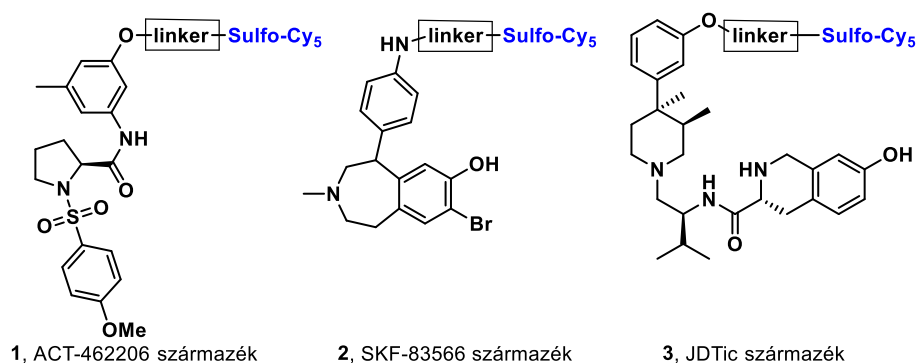
Szabó Renáta, II. évf. (MSc)

Témavezetők: **Dr. Ábrányi-Balogh Péter** tudományos munkatárs, c. egyetemi docens
ELKH TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Dr. Németh András György tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Gyógyszerkémiai Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Kupai József** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az 1990-es évektől kezdődően drámaian megnőtt az opioidokkal történő visszaéléshez, illetve túladagoláshoz köthető kórházi kezelések és halálesetek száma. Az Egyesült Államokban 2021-ben közel 108 ezer ember halt meg vényköteles, valamint tiltott opioid túladagolás következtében.¹ A szerhasználati zavarokban szenvedők kezelésére sikeresen alkalmaznak μ -opioid-receptort célzó hatóanyagokat, mint buprenorfin, a metadon vagy a naltrexon. Az ismert gyógyszerek mellékhatásai miatt azonban az új terápiás célpontok azonosítására irányuló kutatások aktív területnek számítanak.²

Kutatócsoportunk a KOKI Molekuláris Neurobiológiai Laboratóriumával együttműködve kidolgozott egy új nagyfelbontású mikroszkópos eljárást, amely során fluoreszcens molekulák segítségével nanométeres pontossággal lehet farmakológiai méréseket végezni receptorokon, ioncsatornákon vagy akár enzimeken is.³ A PharmacOSTORM módszer segítségével jobban megérthetjük különböző betegségek neurobiológiai összefüggéseit, így hozzájárulhatunk az opioid-válság okozta túladagolás és függőség kezeléséhez is.

Munkám során célul tűztem ki az orexin (1), a D₁-dopamin (2), valamint a κ -opioid (3) G-fehérje kapcsolt receptor célpontra fókuszált fluoreszcens ligandumok előállítását (1. ábra).



1. ábra: A TDK munkám során előállítani kívánt fluoreszcens ligandumok

A ligandumok pontos szerkezetét, illetve a festékhez (Sulfo-Cy5) történő összekapcsoláshoz szükséges linker típusát előzetesen in silico dokkolási kísérletekkel határoztam meg.

¹ Naprakész, széleskörű online adatok epidemiológiai kutatásokról az USA-ban, www.wonder.cdc.gov

² Rasmussen, K.; White, D. A.; Aciri, J. B. *Neuropsychopharmacol.* **2019**, *44*, 657–659.

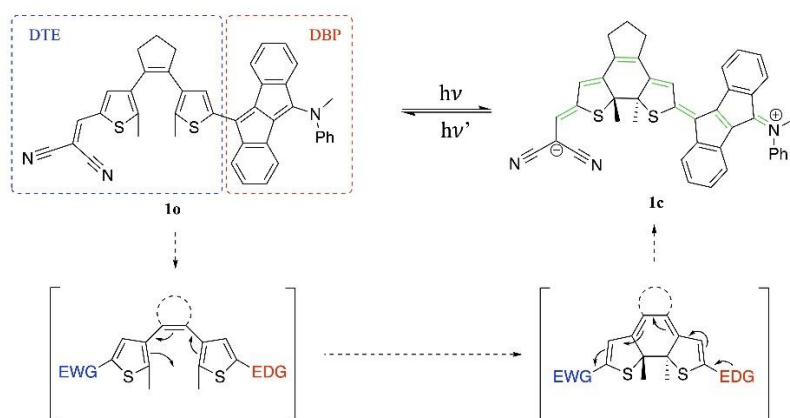
³ Prokop, S.; Ábrányi-Balogh, P. *et al. Nat. Commun.* **2021**, *12*, 1–19.

Ditieniletén konjugált dibenzopentalén rendszer szintézise molekuláris elektronikai felhasználásra

Bogner Marcell Márk, II. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. London Gábor** tudományos munkatárs
ELKH TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport
Kalapos Péter Pál tudományos segédmunkatárs
ELKH TTK SZKI Funkcionális Szerves Anyagok Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Hegedűs László** habil. egyetemi docens, tanszékvezető
BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék

A napjainkban használt tranzisztorok analógiájára terveztünk és állítottunk elő egy új, potenciális unimolekuláris egyenirányító rendszert. Az általunk javasolt rendszerben egy elektronszívó csoportot tartalmazó ditieniletén (DTE) kapcsolót kötöttünk össze egy elektronküldő csoporttal funkcionizált dibenzo[*a,e*]pentalén (DBP) szerkezettel. Elméleti kémiai számításaink alapján, a molekulában (**1**) létrejövő elektronszerkezet, konjugációs mintázata a fotokapcsoló részlet működésén keresztül jelentősen befolyásolható. Fotokapcsolás hatására várhatóan csökkenni fog a dibenzo[*a,e*]pentalén részlet antiaromás karaktere a periférián megtalálható elektronküldő és elektronszívó csoportok között kialakuló elektronikus kommunikáció miatt. Kutatásunk során sikerrel szintetizáltuk a célmolekulát (**1**, *1. ábra*), így lehetőségünk nyílt a rendszer általános szerkezeti és fotokémiai vizsgálatára is.



1. ábra: Ditieniletén kapcsoló izomerizációja, illetve a tárgyalt célmolekula.
(EWG= elektronszívó csoport, EDG= elektron küldő csoport)

4-Szubsztituált ciklohexánamin-származékok szintézise és enzimatis vizsgálat

Schneider Anna, II. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Hornyánszky Gábor** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

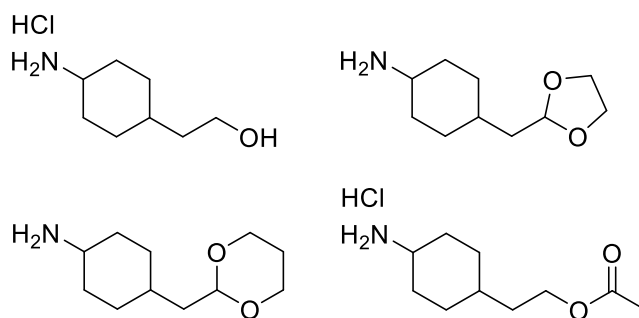
Konzulens: **Dr. Poppe László** egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A Bioorganikus Kémiai Kutatócsoportban már több éve folyik kutatás transzamináz enzimek felhasználására szerves kémiai reakciókban. Az irodalomban számos (*R*)-, illetve (*S*)-szelektív transzamináz is fellelhető, melyeket már régóta alkalmaznak királis aminok rezolválására, illetve enantioszelektív előállítására.

A kutatócsoportban behatóan vizsgálták a *cisz*- és *transz*-4-aminociklohexán-származékok izomerizálásának lehetőségét transzaminázok segítségével. Megállapították, hogy megfelelő *cisz*-szelektív transzamináz és ekvimoláris mennyiségben alkalmazott keton jellegű aminakceptor jelenlétében a *cisz*- és *transz*-4-aminociklohexánecetsav-etil-észter (CACE+TACE) elegy a 4-aminociklohexánecetsav-etil-észter (4-OCE) intermediéren át előnyösen izomerizálható a *transz*-izomerré. Az eredmények alapján a Richter kutatóival közösen szabadalmi bejelentést is tettek.

Kutatómunkám keretében a szabadalom kiterjeszthesége érdekében célul tűztük ki és sikeresen megvalósítottuk 4-aminociklohexilcetsavból kiindulva a 4-aminociklohexiletanol, majd ennek védett aldehid- és acetilszármazékának előállítását. Az előállított vegyületek tisztaságát gázkromatográfiával ellenőriztük, szerkezetüket NMR spektroszkópiával igazoltuk. Az enzimvizsgálatok alapján megállapítható, hogy a korábban felismert dinamikus izomerizáció az általam előállított vegyületeken is működik.

A munka felhasználásával magyar és PCT szabadalmi bejelentés is készült.



1. Ábra: Az előállítandó célvegyületek

Cinkona-(tio)négyzetamid és -tiokarbamid organokatalizátorok szintézise, és átmenetifémekkel kombinált alkalmazása enantioszelektív reakciókban

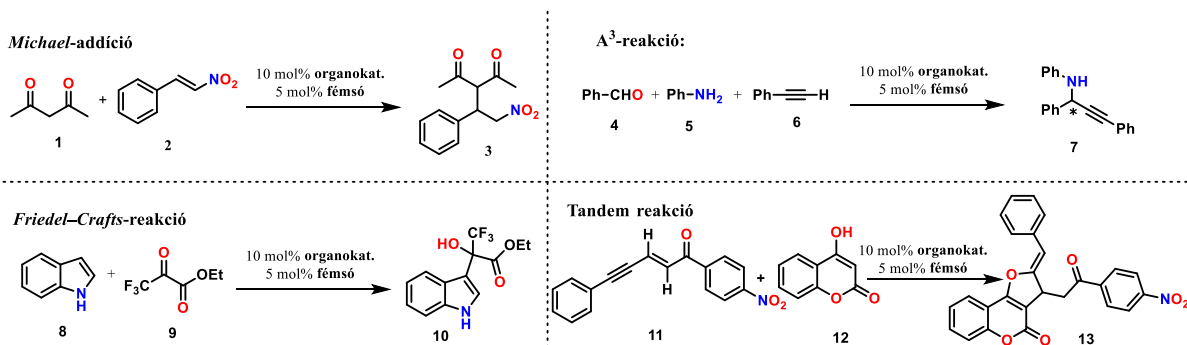
Richter Dóra, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Kupai József** egyetemi docens
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Konzulens: **Dargó Gyula** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Az enantioszelektív reakciók megvalósításának két fontos módszere a fémkatalízis és az organokatalízis. Mindkettő sajátos előnyökkel rendelkezik, a kettő kombinálásával azonban lehetőség nyílt új típusú szerves szintézisek megvalósítására is.

Munkám során célom volt cinkonaalkaloid-alapú organokatalizátorok és átmenetifém-sók kombinálásának tanulmányozása többféle reakciótípusban. Ennek érdekében először előkísérleteket végeztem a katalizátor egységek aktivitásának meghatározására, majd egy tandem reakciót vizsgáltam, ahol egy organokatalitikus lépést követő átmenetifém katalizált lépéssel biológiailag aktív vegyület előállítására van lehetőség „egy-üst” reakcióban (1. ábra). Organokatalizátorként cinkona-(tio)négyzetamidot és -tiokarbamidot használtam réz-, nikkel-, és ezüst-acetát átmenetifém-sókkal kombinálva. Az organokatalizátorokat *Michael*-addícióban alkalmaztam kiváló termeléssel és enantioszelektivitással. A fém katalitikus aktivitásának vizsgálata A^3 -reakcióban történt, ahol gyengébb termelést értem el, azonban a mindkét katalitikus módon végrehajtható *Friedel–Crafts*-reakcióban ismért kiemelkedő termelést és jó enantioszelektivitást tudtam elérni. A tandem reakcióban elért eredmények tükrözik az előkísérletek tapasztalatait, miszerint az organokatalizátor egység aktívabb marad a kombinált katalizátorban, mint a fém egység. Azért, hogy jobban megértsem a katalizátor működését és aktivitását mind számítási kémiai módszerrel, mind kísérleti úton, műszeres analitikai vizsgálattal, meghatároztam a keletkező organokatalizátor–átmenetifém komplex szerkezetét.



1. ábra: Organokatalizátorok átmenetifém-sókkal kombinált alkalmazása

Aldehyde boránkatalizált reakciói

Győrfi Sára, III. évf. (BSc)

Témavezetők: **Dr. Soós Tibor** tudományos főmunkatárs
 ELKH TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Forman Ferenc PhD-hallgató
 ELKH TTK SZKI Organokatalízis Kutatócsoport
Konzulens: **Dr. Bölcskei Hedvig** c. egyetemi docens
 BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

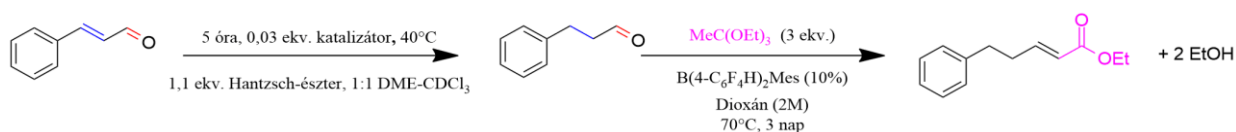
Munkámat az Eötvös Loránd Kutatási Hálózat Természettudományi Kutatóközpontjában végeztem az Organokatalízis Kutatócsoportban.

TDK-munkám során két önmagában is újszerű borán katalizált aldehidátalakításon dolgoztam. Ezek közül az első egy szelektív redukció, ami a mai modern organokatalízis egy fontos kutatási területe. Ebben a reakcióban telítetlen aldehideket redukáltam Hantzsch-észterrel boránkatalizátor jelenlétében, és ezzel szelektíven telített aldehideket állítottam elő. Ezzel a reakciótípussal a már a XX. században számos cikk foglalkozott, de ezek a reakciók egytől egyig fémkatalizátor mellett működtek ^[1,2,3]. Áttörő eredményt értek el a témában Benjamin List és társai ^[4], mivel neki sikerült fémkatalizátor nélkül aldehideket szelektíven redukálni. Azonban ez a módszer korlátozott funkciós csoport tolerancia mellett működött, és közép magas katalizátor mennyiség mellett, ellenben a mi módszerünkkel, ami 0,3% katalizátor mennyiség mellett széleskörben működik szelektíven.

Munkám során elsősorban a reakció körülményeinek optimalizálásával, a kiterjeszthetőség elkészítésével és a kiindulási aldehidek előállításával foglalkoztam. Optimalizáltam többek között a katalizátort mind mennyiségileg, mind minőségileg, az oldószert, az időt, a hőmérsékletet, a koncentrációt, a redukálószer mennyiségét és minőségét. A kiterjeszthetőség vizsgálata során összesen 25 terméket állítottam elő, ezek közül az irodalomban korábban nem ismert termékeket izoláltam FLASH kromatográfia segítségével.

A második reakció a tavalyi TDK-munkámban már tárgyalt aldol kondenzáció, ahol alifás aldehideket alakítottam át α,β -telítetlen észterekké. Ezt tovább fejlesztettem a két reakció (szelektív redukció és aldol kondenzáció) egymás utáni lejátszódásával, mint együstreakeció, ami egy újszerű eredmény, mivel a korábbi irodalomban fahéjaldehid származékokból csak fémkatalízis mellett sikerült α,β -telítetlen észtereket előállítani.

A munkám során kiértékeléshez 300 MHz-es NMR-készüléket, gázkromatográfiát, és vékonyréteg-kromatográfiát használtam, míg feldolgozáshoz FLASH oszlopkromatográfiát.



[1] Y. Gao, J. Wang, A. Han, S. Jaenicke, G. K. Chuah, Catal. Sci. Technol. 2016, 6, 3806–3813.

[2] Y. Himeda, N. Onozawa-Komatsuzaki, S. Miyazawa, H. Sugihara, T. Hirose, K. Kasuga, Chem. - A Eur. J. 2008, 14, 11076–11081.

[3] T. Song, Y. Duan, Y. Yang, Catal. Commun. 2019, 120, 80–85.

[4] J. W. Yang, M. T. Hechavarria Fonseca, B. List, Angew. Chemie - Int. Ed. 2004, 43, 6660–6662.

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

Zöld és Fenntartható Szekció

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülés kezdete: 2022. november 17. 9:15

Eredményhirdetés: 2022. november 17. 18:00

ZÖLD ÉS FENNTARTHATÓ SZEKCIÓ

Időpont	<i>Zöld és Fenntartható Szekció</i> K. F. 81.
9:15–9:30	Bíró Bence
9:30–9:45	John Benedek
9:45–10:00	Kudronné Berta Eszter
10:00–10:15	Lukács Nóra
10:15–10:30	<i>SZÜNET</i>
10:30–10:45	Cseni Viktória
10:45–11:00	Szöllősi Anna
11:00–11:15	Golyán András Péter

Elnök: **Dr. Keglevich György** egyetemi tanár
Titkár: **Pokol Júlia** PhD-hallgató
Koordinátorok: **Dr. Molnár Mónika** egyetemi docens
Dr. Suplicz András egyetemi adjunktus
Tag: **Huszár Bianka** PhD-hallgató

Helyszín: **K. F. 81.**

9:15 Bíró Bence

Út az energiaválságból egy fenntartható energiagazdálkodásba – Magyarország és a szomszédos országok villamosenergia-ellátásának nagy felbontású szimulációja és elemzése

Témavezető: Dr. Aszódi Attila egyetemi tanár
BME Nukleáris Technikai Intézet

9:30 John Benedek

Hulladékok energetikai célú hasznosítása

Konzulens: Szücs Botond PhD-hallgató
BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

9:45 Kudronné Berta Eszter

Textilhulladék hasznosítása az építőiparban

Konzulensek: Perlakiné Dr. Patkó Csilla egyetemi adjunktus
BME Épületszerkezetek Tanszék
Dr. Kemes Balázs egyetemi adjunktus
BME Középülettervezési Tanszék
Dr. Nagy Balázs egyetemi adjunktus
BME Építőanyagok és Magasépítés Tanszék
Nagy Attila Balázs laboratóriumvezető
BME Épületszerkezetek Tanszék

10:00 Lukács Nóra

Reciklált PET-habok előállítása és égésgátlása

Témavezető: Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:15 Szünet

10:30 Cseni Viktória

Alginátalapú adalék fejlesztése politejsav égésgátlásához

Témavezető: Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

10:45 Szöllősi Anna

Folyami mikroműanyag-szennyezés mérési módszertan fejlesztése

Konzulensek: Dr. Baranya Sándor egyetemi docens, tanszékvezető

BME Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Ermilov Alexander Anatol PhD-hallgató

BME Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Pomázi Flóra PhD-hallgató

BME Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Dr. Toldy Andra egyetemi tanár

BME Polimertechnika Tanszék

Gere Dániel PhD-hallgató

BME Polimertechnika Tanszék

11:00 Golyán András Péter

Hidropóniás mikroököld termesztése

Témavezető: Dr. Balázs Bence head of biotechnology

bedrock.farm Mezőgazdasági Kft.

**Út az energiaválságból egy fenntartható energiagazdálkodásba –
Magyarország és a szomszédos országok villamosenergia-ellátásának nagy
felbontású szimulációja és elemzése**

Bíró Bence (MSc)

Témavezető: **Dr. Aszódi Attila** egyetemi tanár
Nukleáris Technikai Intézet

Az európai országok villamosenergia-ellátása számos kihívás előtt áll, mint például a karbonsemlegesség elérése, a növekvő árak megfékezése és az orosz fosszilis energiahordozóktól való függés csökkentése. Ezen célok eléréséhez minden európai ország villamosenergia-rendszerének komoly változásokon kell átesnie mind műszaki, mind környezetvédelmi, mind gazdasági, mind pedig társadalmi célok szem előtt tartása mellett. Szimulációim a lehetséges forgatókönyvek elemzésével ehhez az úthoz szolgáltatnak elengedhetetlen adatokat a magyar és az európai villamosenergia-rendszerről és annak jövőjéről. Az eredmények a döntéshozók és a társadalom segítségére lehetnek a helyes, megvalósítható és fenntartható út megtalálásához.

A kutatásom során a magyar és a szomszédos országok villamosenergia-rendszerének numerikus elemzését végzem el. A munkám magába foglalja a 2030-as rendszerszintű villamosenergia-fogyasztás feltérképezését, a villamosenergia-termelésre jellemző műszaki, gazdasági és környezeti paraméterek begyűjtését, feldolgozását és értékelését, órás felbontású szimulációk felépítését az Energy Exemplar Plexos elnevezésű modellező környezetében, a szimulációk kiértékelését műszaki, ellátásbiztonsági és környezetvédelmi szempontok alapján, valamint az eredményekre vonatkozó részletes érzékenységi vizsgálatokat.

Hulladékok energetikai célú hasznosítása

John Benedek Energetikai mérnöki (BSc)

Témavezető: **Szücs Botond** PhD-hallgató
Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

Dolgozatomban a hazai hulladékkezelés helyzetét, és a benne rejlő lehetőségeket vizsgálom, középpontban az energetikai hasznosítással. A környezetvédelem és a fenntartható fejlődés megköveteli, hogy nagyobb figyelmet fordítsunk a hulladékhasznosításra, ezt az igyekezetet különböző törvényi keretek is segítik. A jelenlegi helyzetről, és a hazánkban kívánatos, előírt fejlődési irányokról az „Országos Hulladékgazdálkodási Terv 2021-2027” [1] című kiadványban olvashatunk részletesen, ez fontos alapját képezi a dolgozatnak. Választ keresek arra, hogy jelenleg az energetikai hasznosításnak milyen súlya van a hulladékiparban, és milyen szerepe lehet majd a jövőben. Ismerni kell ehhez, hogy milyen mennyiségű és minőségű hulladék keletkezik Magyarországon, és azt milyen módon kezelik, különös tekintettel a jelenleg alkalmazott energetikai hasznosítási technológiákra. A keletkezett hulladékmennyiségek megismerésén túl fontos a keletkezés helyszíne is. A hulladékpiramis elgondolás megjelöli a különböző hulladékkezelési módok kívánatosságát. [2] A legjobb megoldás, ha sikerül megelőzni a hulladék keletkezését, ezt követően jön az újrahasználat, újrahasznosítás, majd az energetikai hasznosítás, és végül az ártalmatlanítás. Ezek alapján azt lehet mondani, energetikai hasznosításra csak az a hulladék kerülhet, amelyik az előnyösebb kezelési módokra nem alkalmas. Ezt figyelembe véve keresek új lehetőségeket hazánkban, a hulladékok energetikai hasznosítására. Ahhoz, hogy végül javaslatot tudjak tenni hulladékhasznosító művek létesítésére, az elérhető technológiák legfőbb jellemzőit és korlátait ismerni kell, ezért végig veszem, hogy napjainkban milyen műszaki megoldások alkalmasak a különböző típusú hulladékok energetikai hasznosítására. A vizsgált technológiák között szerepel az égetés (előkezelés nélküli égetés; válogatást, előkezelést követő égetés; együttégetés), a pirolízis és a gázosítás, a plazmatechnológia, valamint külön említésre kerülnek a depóniagáz hasznosításához és a szennyvíziszapok energetikai hasznosításához kapcsolódó műszaki eljárások. A technológiai lehetőségek megismerése után, figyelembe véve: a keletkező hulladék mennyiségét és minőségét, a keletkezés területi sajátosságait, a hazai irányelveket és szabályozásokat, javaslatot teszek új hulladékhasznosító erőművekre.

Irodalom:

[1] Országos Hulladékgazdálkodási Terv 2021-2027

<https://kormany.hu/dokumentumtar/orszagos-hulladekgazdalkodasi-terv-2021-2027>

[2] Molnár Szabolcs (2020): „Hulladékból konnektorba” A települési szilárd hulladék energetikai hasznosításának lehetőségei. (Magyar Mérnöki Kamara Kiadványsorozata 58. FAP-2020/112-ENT, Budapest) 21-22.

Textilhulladék hasznosítása az építőiparban

Kudronné Berta Eszter (MSc)

Konzulensek: **Perlakiné Dr. Patkó Csilla** egyetemi adjunktus
BME Épületszerkezetek Tanszék
Dr. Kemes Balázs egyetemi adjunktus
BME Középülettervezési Tanszék
Dr. Nagy Balázs egyetemi adjunktus
BME Építőanyagok és Magasépítés Tanszék
Nagy Attila Balázs laboratóriumvezető
BME Épületszerkezetek Tanszék

Környezettudatosságra törekvő emberként napi szinten gondolkodom a háztartásomban keletkező hulladékok minimalizálásának lehetőségein, mely kérdéskör az adott hulladékká váló anyag előállításának körülményeitől, használatának szükségességén át a hulladék hasznosíthatóságáig nagyon összetett problémahalmaz. Egyik ilyen sűrűn előforduló hulladékként jelennek meg az elhasználandó textiljeink. Mérnökhallgatóként az is foglalkoztat, hogy az ipar hogyan tudja az ipari mennyiségű textilhulladékot kezelni, például az építőiparban. Dolgozatomban erre a kérdésre keresem a választ: hogyan lehet a meglévő, nagy mennyiségű textilhulladékból olyan terméket létrehozni, mellyel az építkezések ökológiai lábnyoma jelentősen csökkenthető. Ehhez tanulmányoztam a ruhaipar közelmúltban történt átalakulását, a fast fashion pazarlásáról és a megoldási kísérletekről (Mengyán Eszter: Helló, slow fashion!, Ginkgo Kiadó, 2021; Csalár Bence: A fenntartható divat kézikönyve, BOOOK Kiadó, 2022). Ezek után példákat és tudományos kísérleteket kerestem a textilhulladék építőipari felhasználására. Ezeket összehasonlítottam természetes alapú hőszigetelő anyagokkal – itt sokszor támaszkodom Bozsaky Dávid: Építési hőszigetelő anyagok című könyvére (TERC Kiadó, 2017), hogy jobban megérthessem, miként viselkedne a nagyrészt természetes eredetű textilhulladék.

Méréseket végeztem a Fandaro gyár szabászati textilhulladékból készült – jelenleg mélyhűtött élelmiszerek csomagolására használt – szigetelőanyagának hővezetési tényezőjére vonatkozóan. Ezt összevettem házilag készült próbatestek hőszigetelő képességével (kétféle irányban rétegezett használt textilek, ill. apró darabokra vágott anyag ömlesztett formában). A Fandaro termékének a visszhangosság csökkentő hatását is volt lehetőségem megvizsgálni akusztikai laboratóriumban.

Végeredményként a témában elérhető információk, lehetőségek összegyűjtése és összehasonlítása, valamint saját kutatásokban elért eredményekkel történő kiegészítése összeáll egy könnyen használható kézikönyvvé a környezettudatos szigetelés iránt érdeklődő fejlesztő cégek és tervező építészek számára.

Reciklált PET-habok előállítása és égésgátlása

Lukács Nóra, II. évf. (MSc)

Témavezető: **Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Dr. Ronkay Ferenc** Laboratóriumvezető
Imsys Kft.

A mindennapi életünk szinte már elképzelhetetlen műanyagipari termékek használata nélkül. Az egyszer használatos műanyag eszközöknek, valamint a csomagolóanyagoknak köszönhetően nem csak a felhasznált anyag mennyisége, de a keletkezett hulladék volumene is elképesztő méreteket ölt. A rövid életciklusú, csomagolásból származó hulladékok, mint például a poli(etilén-tereftalát) (PET) palackok kezelése és újrahasznosítása kiemelten fontos tématerület, hozzátartozik a fenntartható fejlődés alapjához. Megoldást jelenthet az alapanyag gazdaságos újrahasznosítása hosszabb életciklusú termékek gyártása során, ehhez azonban olyan összetett alapanyag rendszerre van szükség, amely kielégíti a céltermék elvárt követelményeit.

Egy másik lehetőség lehet a fenntartható fejlődés eléréséhez a termékek tömegének csökkentése, ezáltal az alapanyag-felhasználás redukálása, amelyre megoldást jelenthet polimerek esetében az alapanyag habosítása. Ahhoz azonban, hogy reciklált PET-ből (rPET) habtermékeket tudjunk előállítani megfelelő ömledékszilárdságra van szükség, ami az újrahasznosított, vélhetően kisebb molekulatömeggel rendelkező PET alapanyag esetében külön kihívást jelent.

Munkám célja kis sűrűségű, égésgátolt rPET alapú habtermékek előállítása szén-dioxiddal segített szakaszos eljárás során, majd a különböző összetételű termékek átfogó vizsgálata és jellemzése volt. Az ömledékszilárdság javítására lánchossznövelőszert alkalmaztam, emellett a kristályos részarány növelésére, egyúttal cellagócképzőként montmorillonit agyagásványt használtam. Az éghetőség csökkentésére korszerű, szilárd- és gázfázisban is ható foszfortartalmú égésgátlószert választottam. A különböző összetételű fröccsöntött rPET próbatesteket egy autoklávba helyezve, nagy nyomáson, szén-dioxiddal telítettem, ezt követően forró szerszámba helyezve, légköri nyomáson történt a habosítás illetve alakadás. A kész rPET alapú habtermékeket morfológiai, termoanalitikai, éghetőségi és mechanikai vizsgálatoknak vetettem alá.

0,7 m% lánchossznövelőszert, 1 m% teflonport és mindössze 6 m% égésgátlószert alkalmazása mellett sikerült kis sűrűségű (220 kg/m³), homogén cellaszerkezetű, mikrocellás habokat előállítanom reciklált PET felhasználásával. Az égésgátolt rPET habtermék oxigénindexe 5%-kal magasabb, égése során pedig 55%-kal kevesebb hőt bocsát ki, mint az égésgátlószert nem tartalmazó referencia minták. A nagymértékben kristályos, égésgátolt rPET haboktermékeket továbbá megnövelt hőállóság jellemzi.

Alginátalapú adalék fejlesztése politejsav égésgátlásához

Cserni Viktória, IV. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Bordácsné Dr. Bocz Katalin** tudományos munkatárs
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Konzulens: **Decsov Kata Enikő** PhD-hallgató
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A fenntartható fejlődési célok eléréséhez a kőolaj alapú műanyagok minél nagyobb mértékű és minél szélesebb körű kiváltása megújuló előforrásokból előállítható, egyúttal biodegradálható, ú.n. biopolimerekkel mindannyiunk közös érdeke.

Napjainkban a politejsav (PLA) az egyik legelterjedtebben alkalmazott biopolimer. Műszaki polimerekkel összevethető szakítószilárdsága (60-65 MPa) és húzó rugalmassági modulusza (2-3 GPa) ellenére többnyire csak kisebb igénybevételű alkalmazásokban kap szerepet, mint például különféle csomagolóipari termékeként, a nagyobb igénybevételű alkalmazások területén továbbra is a hagyományos műanyagok dominálnak. A PLA nagyobb volumenű elterjedését műszaki területeken elsősorban alacsony hőállósága, ridegsége, illetve fokozott gyúlékonysága korlátozza.

Kutatómunkám során a PLA égésgátlási lehetőségeivel foglalkoztam. Külön hangsúlyt fektettem arra, hogy az új égésgátló megoldás és az alkalmazott eljárások minél inkább a zöld kémia, illetve a körforgásos gazdaság irányelveit kövessék. Ennek érdekében az új égésgátló adalék kifejlesztéséhez megújuló alapanyagból - a természetben megtalálható algákból származó alginsav nátriummal alkotott sójából (Na-Alg) - indultam ki, melléktermékmentes addíciós kémiai reakciókat részesítettem előnyben, továbbá szerves oldószerek helyett vizet alkalmaztam.

Az égésgátlási hatékonyság növelése érdekében a vízben feloldott Na-Alg-ot foszfortartalmú poliol és 3-(trietoxiszilil)propil izocianát addíciós reakciójával előállított foszforos szilán (PSil) vegyülettel reaktívan módosítottam, majd kalcium-klorid vizes oldatába csepegtetve koaguláltam. Az így nyert hidrogélből szárítás és őrlés után kaptam a Ca-PSil-Alg adalékot, amelyet spektroszkópai és termoanalitikai módszerekkel jellemeztem, égésgátló hatását pedig (1-3-5%-ban) PLA mátrixba ágyazva, 15% ammónium-polifoszfát (APP) alapégésgátló mellett szabványos éghetőségi tesztekkel vizsgáltam.

Az újonnan előállított alginát alapú adalékot mindössze 5%-ban alkalmazva az APP tartalmú PLA kompozit oxigénindexét 26%-ról 34%-ra növeli, égési hőkibocsátását pedig közel 50%-kal csökkenti, jelentős – mintegy 40% – szenes maradék képzése mellett. A kiemelkedő égésgátló hatást a módosított alginát foszfor által katalizált hatékony szenesedésével, valamint a szilícium okozta keramizáló hatással magyaráztam, amelyek együtt tömör, termikusan és mechanikailag ellenálló tűzgátló réteg kialakulásához járulnak hozzá.

Folyami-mikroműanyag-szennyezés mérési módszertan fejlesztése

Szöllősi Anna, II. évf. (BSc)

Konzulensek: **Dr. Baranya Sándor** egyetemi docens, tanszékvezető

BME Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Ermilov Alexander Anatol PhD-hallgató

BME Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Pomázi Flóra PhD-hallgató

BME Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék

Dr. Toldy Andra egyetemi tanár

BME Polimertechnika Tanszék

Gere Dániel PhD-hallgató

BME Polimertechnika Tanszék

Műanyag nélkül az élet szinte elképzelhetetlen a XXI. századi ember számára. Használata nagyon széleskörű: ipar, orvostudomány, épületek, csomagolások stb. Túlzott gyártása viszont hulladékkezelési problémákhoz vezet. Sokszor látunk a tengerpartokon eldobva, vagy a folyók vízfelszínén úszva egy-egy palackot, nejlonzacskót, illetve egyéb műanyag hulladékot. Ezek az idő elteltével fokozatosan elaprózódnak (főként fizikai folyamatokon keresztül), kisebb műanyag darabokra hullanak szét. A szakirodalom szerint az 5 mm-nél kisebb szemcseméretű műanyagokat együttesen mikroműanyagoknak nevezzük. Problémájuk, hogy méretüknek köszönhetően könnyedén terjednek tovább mind tengeri, mind édesvízi környezetben, ahol aztán interakcióba lépnek az ottani élővilággal (pl. táplálékhoz tapadva). A mikroműanyag a vízi élővilágon keresztül az emberekhez is eljut, viszont ennek a káros hatásnak a mértéke még ismeretlen. A 2000-es évek elejétől került a középpontba a mikroműanyagok mennyiségének, összetételének, előfordulásának és hatásainak vizsgálata. Jelentős méréseket végeztek tengeri környezetben, míg a folyók és egyéb édesvizek vizsgálata csak az utóbbi pár évben kezdődött meg. Külföldön már többek között Ausztriában, Németországban és az USA-ban is végeztek méréseket folyami és tavi környezetben. Idehaza is történtek már mérések, melynek során a Duna és a Tisza vizében szállított, valamint egyéb folyóink és tavaink fenekén kiülepedett mikroműanyagokat vizsgáltak. A téma újkeletűségéből adódóan azonban heves vita övezi a vizsgálatokat, ugyanis számos mintavételezési és elemzési eljárás született, melyeknek megvannak a maguk előnyei és hátrányai, viszont egyiknek sem sikerült még teljeskörű elfogadottságot szerezni. A helyzetet az is nehezíti, hogy a mikroműanyagok vizes környezetben történő terjedése egy igen komplex jelenség (fizikai és biokémiai folyamatok egyaránt befolyásolhatják), idő- és térbeli változékonysággal fűszerezve. Ahhoz tehát, hogy a mikroműanyag-szennyezés édesvizeinkben történő terjedését fel lehessen tárni, további mérésekre és vizsgálatokra van szükség. Jelen dolgozatban saját, a Dunán végzett terepi méréseimet, s az ott gyűjtött minták laborelemzéssel feltárt mikroműanyag-tartalmát mutatom be és értékelem ki. Az alkalmazott mikroműanyag-mintavevőt osztrák példa alapján magunk terveztük és állítottuk össze. A mintavevő kialakítása lehetővé tette, hogy a vízoszlop különböző mélységeiben egyidejűleg gyűjthessünk mintákat, ezáltal részletesebb képet alkotva a mikroműanyagok térbeli eloszlásáról. Az eszköz három, keretre szerelt, 500 µm pórusméretű planktonháló segítségével szűr ki szilárd anyagokat a folyó vizéből. A nemzetközi szakirodalomban azonosított egyik elsődleges mikroműanyag-terhelési gócpont a tisztított szennyvizek bevezetése. Minatterületünket ennek megfelelően választottuk meg: méréseinket a Budapesti Központi Szennyvíztisztító Telep sodorvonalai bevezetése feletti és alatti folyószelvényekben végeztük, hogy a szennyvíztelep esetleges hatását kimutathassuk. A begyűjtött minták mikroműanyag-tartalmát laboratóriumi elemzés útján határoztuk meg. Célunk kettős volt: i) a mikroműanyag-mintavétel és –elemzés tesztelése után ii) becslést tettünk a Duna mikroműanyag-tartalmára adott vízjárási állapot mellett, egy, a mikroműanyag-terhelés szempontjából kiemelt jelentőségű, budapesti mintaterületen.

Hidropóniás mikrozöld termesztése

Golyán András Péter, II. évf. (BSc)

Témavezető: **Dr. Balázs Bence** head of biotechnology
bedrock.farm Mezőgazdasági Kft.

A jövőben a tudományos pályám legmeghatározóbb részét a környezetbarát ipari megoldásoknak szeretném szentelni.

Erre remek lehetőségem adódott amikor saját kutatás gyanánt betekintést nyerhettem a hidropóniás rendszerek működésébe.

Kutatásom fő célja az volt, hogy a *Pisum sativum* (zöldborsó), mikrozöld állapotában felvett tápanyagokat tanulmányozzam, oldatozását optimalizáljam.